

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ ПРОМЫШЛЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
И ДИЗАЙНА

ВЫСШАЯ ШКОЛА ТЕХНОЛОГИИ И ЭНЕРГЕТИКИ

А. Н. Евдокимов, А. В. Курзин

Моделирование
химико-технологических процессов
(экспериментально-статистические
модели)

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ

Санкт-Петербург
2018

УДК 66.011.001.57(075)

ББК 35.11я7

Е 155

Евдокимов А. Н., Курзин А. В. Моделирование химико-технологических процессов (экспериментально-статистические модели): учебное пособие / ВШТЭ СПбГУПТД. — СПб. 2018. — 106 с.

В пособии рассмотрена методология планирования эксперимента для создания статистических моделей химико-технологических процессов, рассмотрены некоторые распространенные методы поиска экстремумов. Пособие содержит варианты заданий для расчетно-графической работы и вопросы для самопроверки.

Предназначено для студентов, обучающихся по направлению 18.03.01 «Химическая технология».

Рецензенты:

д-р тех. наук, зав. кафедрой физической и коллоидной химии ВШТЭ СПбГУПТД В. А. Липин;

канд. тех. наук, доц. кафедры процессов и аппаратов химической технологии ВШТЭ СПбГУПТД Н. П. Мидуков.

Рекомендовано к изданию Редакционно-издательским советом университета в качестве учебного пособия.

© Высшая школа технологии и энергетики
СПбГУПТД, 2018

© Евдокимов А. Н., Курзин А. В., 2018

ВВЕДЕНИЕ

В теории между теорией и практикой нет разницы, а на практике есть.

Гуру Мадхаван. «Думай как инженер»

Решение задач оптимизации и управления современных химико-технологических процессов основано на создании моделей. Не всегда имеется возможность детального изучения механизма и физико-химической сущности процессов, необходимых для создания детерминированных моделей. В этих случаях разрабатывают так называемые эмпирические модели с применением статистических методов: при неизвестном механизме протекающих в объекте процессов изучают зависимость отклика системы на изменение входных параметров, их построение базируется на формализованном описании экспериментальных данных [1, 2, 4]. В таком случае, эксперимент — важнейшая составная часть исследования. Для того, чтобы на его основе можно было построить математическую модель, он сам должен быть продуман до деталей и безупречно выполнен.

Математическое описание объекта в этом случае будет представлять собой систему эмпирических зависимостей, полученных в результате статистического обследования объекта. Эти модели называются статистическими и имеют вид корреляционных или регрессионных соотношений между входными и выходными параметрами объекта.

В предлагаемом пособии рассматриваются, главным образом, вопросы корреляционного и регрессионного анализа многофакторных пассивных и активных экспериментов, построения планов экспериментов, методы поиска экстремума (метод крутого восхождения и метод Нелдера-Мида).

В основу пособия положены материалы лекций и практических занятий по дисциплине «Моделирование химико-технологических процессов», преподаваемой на кафедре органической химии Высшей школы технологии и энергетики Санкт-Петербургского государственного университета промышленных технологий и дизайна.

1. Построение статистической модели

Основной и необходимый источник информации для построения статистической модели — эксперимент, а обработка экспериментальных данных осуществляется методами теории вероятностей и математической статистики. Объект в этом случае представляется в виде «черного ящика», на который воздействуют случайные и управляющие воздействия (рис. 1.1). Модель строится для описания связи отдельного свойства изучаемого объекта или процесса с воздействующим фактором. Влияющий **фактор** (аргумент) принимается независимой переменной, или предиктором, а результат — зависимой переменной, или функцией отклика (переменной отклика). Факторы подразделяются на управляемые, неуправляемые и неконтролируемые. Под управляемыми факторами понимаются такие факторы, которые влияют на процесс и могут быть измерены и воспроизведены с заданной точностью. Под неуправляемыми факторами понимаются такие, которые также влияют на процесс и могут быть достаточно точно измерены, но не могут быть воспроизведены по желанию экспериментатора, например, условия окружающей среды. Неконтролируемые факторы в процессе исследования не измеряются и не воспроизводятся на заданном уровне, например, степень износа деталей экспериментальной установки.

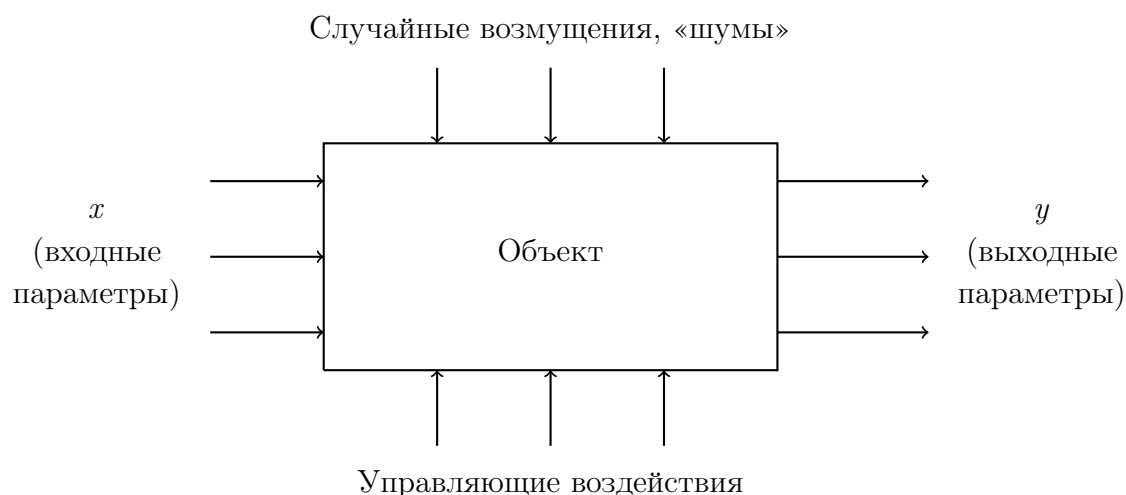


Рис. 1.1. Схематическое изображение объекта

Математической моделью объекта будет функция отклика

$$Y = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_n, b_1, b_2, \dots, b_n), \quad (1.1)$$

где Y — выходной параметр процесса; $x_1, \dots, x_n$ — независимые переменные (факторы), которые варьируются при постановке эксперимента; $b_1, \dots, b_n$ — коэффициенты эмпирической модели.

Заменой символа для обозначения зависимого признака с y на Y , мы подчеркиваем, что на базе признака x уравнение позволяет рассчитать теоретическое значение признака Y , в общем случае не равное ни одному наблюдаемому значению y .

В общем случае решение задачи моделирования состоит из ряда этапов:

- 1) проведение эксперимента;
- 2) выбор вида эмпирической зависимости;
- 3) нахождение параметров выбранной зависимости;
- 4) исследование модели и выводы.

1.1. Однофакторные модели

Рассмотрим простейший случай, когда на вход действует только одна переменная

$$y = \varphi(x). \quad (1.2)$$

На первом этапе задают значения входной переменной x из возможного диапазона и измеряют соответствующие значения выходной переменной y , исключая грубые промахи [18]. При сборе экспериментальных данных и расчетах на их основе следует учитывать правила округления и работы со значащими цифрами (Приложение 5). Результат представляют в табличном и графическом виде (рис. 1.2).

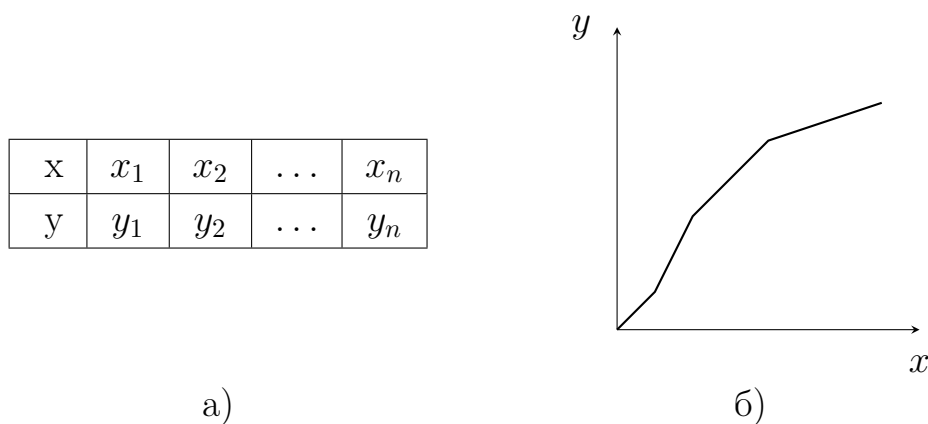


Рис. 1.2. Табличное (а) и графическое (б) представление экспериментальных данных

На втором этапе необходимо подобрать зависимость, которая могла бы описать экспериментальные данные. Если зависимость значительно отличается от прямолинейной, в некоторых случаях её удаётся линеаризовать. Линеаризация модели заключается в том, что с помощью подходящих преобразований исходных переменных исследуемую зависимость представляют в виде линейного соотношения между преобразованными переменными. В рамках этого подхода различают два класса нелинейных регрессионных моделей, допускающих линеаризацию: а) модели, нелинейные относительно включенных в модель переменных, но линейные по оцениваемым параметрам; б) модели, нелинейные по оцениваемым параметрам.

Примером нелинейной регрессии, линейной по оцениваемым параметрам, могут служить следующие функции (здесь и далее, ε — случайное отклонение):

полиномы, например, $Y = \beta_0 + \beta_1 X + \beta_2 X^2 + \beta_3 X^3 + \varepsilon$;

равносторонняя гипербола $Y = \alpha + \frac{\beta}{X} + \varepsilon$.

К нелинейным регрессионным моделям, нелинейным по оцениваемым параметрам, относятся:

степенная функция $Y = \alpha \cdot X^\beta \cdot \varepsilon$;

показательная функция: $Y = \alpha \cdot \beta^X \cdot \varepsilon$.

Введение новых переменных в нелинейную регрессионную модель с линейно включенными в нее параметрами позволяет свести её к линейной модели, для оценки параметров которой можно использовать обычный метод наименьших квадратов. Так, например, если нужно оценить параметры регрессионной модели $Y = \beta_0 + \beta_1 X^2 + \beta_2 \sqrt{X} + \varepsilon$, то вводят новые переменные $Z_1 = X^2$, $Z_2 = \sqrt{X}$, получают линейную модель $Y = \beta_0 + \beta_1 Z_1 + \beta_2 Z_2 + \varepsilon$, параметры которой находятся обычным методом наименьших квадратов.

Недостаток такой замены переменных связан с тем, что оценки параметров получаются не из условия минимизации суммы квадратов отклонений для исходной переменной, а из условия минимизации суммы квадратов отклонений для новых переменных, что искажает исходные предпосылки метода наименьших квадратов, поскольку новые переменные будут зависимыми. В связи с этим необходимо определенное уточнение полученных оценок.

В случае нелинейности модели по параметрам линеаризация достигается при помощи более сложных преобразований. Приведенную

выше степенную модель при помощи логарифмического преобразования можно привести к линейному виду $\ln Y = \ln \alpha + \beta \cdot \ln X + \ln \varepsilon$. К этой модели уже можно применить обычный метод наименьших квадратов. Однако следует подчеркнуть, что критерии значимости и интервальные оценки параметров, применяемые для нормальной линейной регрессии, требуют, чтобы случайное отклонение ε (а в данном случае случайное отклонение выражено в виде $\ln \varepsilon$) имело логарифмически нормальное распределение.

Следует отметить, что к модели $Y = \alpha \cdot X^\beta + \varepsilon$, рассматриваемой в качестве альтернативной к уже рассмотренной, изложенный метод исследования уже непригоден, и ее нельзя привести к линейному виду. В этом случае можно использовать только численные методы нелинейной оптимизации. В то же время, модель $Y = \alpha \cdot X^\beta \cdot \varepsilon + \gamma$ сводится к $\ln(Y - \gamma) = \ln \alpha + \beta \cdot \ln X + \ln \varepsilon$.

Следует учитывать, что при построении нелинейных уравнений более остро, чем в линейном случае, стоит проблема правильной оценки формы зависимости между переменными. Неточности при выборе формы оцениваемой функции существенно сказываются на качестве отдельных параметров уравнений регрессии и, соответственно, на адекватности всей модели в целом (проблема спецификации).

Выбрать, какой из видов описания лучше подходит к эмпирическим данным, можно ориентируясь на величину коэффициента детерминации или корреляции (п. 1.3). Чем ближе линия проходит к эмпирическим точкам, тем меньше остаточная сумма квадратов, тем больше коэффициент детерминации. Существуют и другие уравнения для описания криволинейных зависимостей (например, очень интересна логистическая кривая) [19]. Пакет *StatGraphics* предлагает обширный список криволинейных функций, в котором для выбора лучшего уравнения организуется таблица, сравнивающая результаты разных способов аппроксимации. Аналогичную возможность предлагает программа *TableCurve*.

Если отсутствует возможность проведения корреляционного анализа, для выбора вида зависимости можно воспользоваться методом средних точек. В табл. 1.1 приведены типовые формулы для случаев, наиболее часто встречающиеся в задачах химии и химической технологии. Для каждой зависимости рассчитывают координаты средних точек X_k и Y_k по формулам, приведенным в табл. 1.1. Средние точки

наносят на график (рис. 1.26) и выбирают ту зависимость, средняя точка которой лежит ближе всего к экспериментальной кривой [14].

Таблица 1.1

Основные зависимости и параметры для их выбора

№	Формула	x_k	y_k	Линеаризация $U = A + BZ$
1	$Y = a \cdot x^b$	$\sqrt{x_1 \cdot x_n}$	$\sqrt{Y_1 \cdot Y_n}$	$U = \lg Y; Z = \lg x;$ $A = \lg a; B = b$
2	$Y = a \cdot b^x$	$\frac{x_1 + x_n}{2}$	$\sqrt{Y_1 \cdot Y_n}$	$U = \lg Y; Z = x;$ $A = \lg a; B = \lg b$
3	$Y = \frac{1}{a + b \cdot x}$	$\frac{x_1 + x_n}{2}$	$\frac{2 \cdot Y_1 \cdot Y_n}{Y_1 + Y_n}$	$U = \frac{1}{Y}; Z = x;$ $A = a; B = b$
4	$Y = a + b \lg x$	$\sqrt{x_1 \cdot x_n}$	$\frac{Y_1 + Y_n}{2}$	$U = Y; Z = \lg x;$ $A = a; B = b$
5	$Y = a + \frac{b}{x}$	$\frac{2 \cdot x_1 \cdot x_n}{x_1 + x_n}$	$\frac{Y_1 + Y_n}{2}$	$U = Y; Z = \frac{1}{x};$ $A = a; B = b$
6	$Y = \frac{a \cdot x}{b + x}$	$\frac{2 \cdot x_1 \cdot x_n}{x_1 + x_n}$	$\frac{2 \cdot Y_1 \cdot Y_n}{Y_1 + Y_n}$	$U = \frac{1}{Y}; Z = \frac{1}{x};$ $A = \frac{1}{a}; B = \frac{b}{a}$

На третьем этапе определяют параметры A и B линеаризованной зависимости так, чтобы расчетная кривая лежала как можно ближе к экспериментальной. Критерием близости служит минимум суммы квадратов отклонений между экспериментальными и расчетными значениями, условием минимума является равенство нулю производных по параметрам A и B . После преобразований получают систему нормальных уравнений (подробнее см. п. 1.3), решив которую, находят искомые значения параметров A и B :

$$\begin{cases} A \cdot n + B \cdot [Z] = [U] \\ A \cdot [Z] + B \cdot [Z^2] = [U \cdot Z], \end{cases}$$

где $[Z] = \sum Z_i$; $[U] = \sum U_i$; $[Z^2] = \sum Z_i \cdot Z_i$; $[U \cdot Z] = \sum U_i \cdot Z_i$; U, Z — факторы, пересчитанные по табл. 1.1; n — количество экспериментов.

На четвертом этапе найденные параметры A и B пересчитывают в параметры a и b подобранной функции, подставляют в найденную

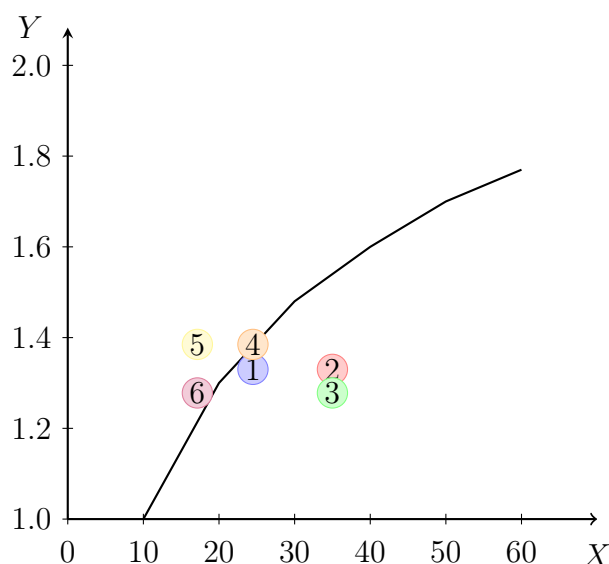


Рис. 1.3. График экспериментальной кривой и координаты средних точек

формулу экспериментальные значения входной величины. Полученные расчетные значения наносят на график с экспериментальными данными и делают вывод об адекватности. Для оценки значимости отдельных коэффициентов регрессии и адекватности уравнения в целом можно воспользоваться методами, описанными ниже (п. 1.3).

Пример 1. Ниже приведены экспериментальные данные:

x	10	20	30	40	50	60
y	1.00	1.30	1.48	1.60	1.70	1.77

Требуется построить график экспериментальной кривой и найти функцию, наиболее точно описывающую поведение системы в изученных условиях.

Решение. График кривой представлен на рис. 1.3. Находим координаты средних точек:

$$x_{k_1} = \sqrt{x_1 \cdot x_6} = 24.49;$$

$$x_{k_2} = \frac{x_1 + x_6}{2} = 35.00;$$

$$x_{k_3} = \frac{x_1 + x_6}{2} = 35.00;$$

$$x_{k_4} = \sqrt{x_1 \cdot x_6} = 24.49;$$

$$y_{k_1} = \sqrt{y_1 \cdot y_6} = 1.33;$$

$$y_{k_2} = \sqrt{y_1 \cdot y_6} = 1.33;$$

$$y_{k_3} = \frac{2 \cdot y_1 \cdot y_6}{y_1 + y_6} = 1.278;$$

$$y_{k_4} = \frac{y_1 + y_6}{2} = 1.385;$$

$$\begin{aligned}x_{k_5} &= \frac{2 \cdot x_1 \cdot x_6}{x_1 + x_6} = 17.14; & y_{k_5} &= \frac{y_1 + y_6}{2} = 1.385; \\x_{k_6} &= \frac{2 \cdot x_1 \cdot x_6}{x_1 + x_6} = 17.14; & y_{k_6} &= \frac{2 \cdot y_1 \cdot y_6}{y_1 + y_6} = 1.278.\end{aligned}$$

Значения x_{k_i} и y_{k_i} для всех формул наносим на график (рис. 1.3). Среднее значение для формулы 4 лежит ближе всего к экспериментальной кривой, следовательно, выбираем формулу $Y = a + b \cdot \lg(x)$.

В линейном виде $U = A + B \cdot Z$, где $U = Y$, $A = a$, $B = b$, $Z = \lg x$. Выбираем в качестве критерия адекватности выражение

$$Q(A, B) = \sum_{i=1}^6 (U_i - A - B \cdot \lg Z_i)^2. \quad (1.3)$$

Условие минимума выражения (1.3)

$$\frac{\partial Q(A, B)}{\partial A} = 0; \quad \frac{\partial Q(A, B)}{\partial B} = 0.$$

Система нормальных уравнений имеет вид

$$\begin{cases} A \cdot 6 + B \cdot [Z] = [U] \\ A \cdot [Z] + B \cdot [Z^2] = [U \cdot Z], \end{cases}$$

где $U = Y$; $Z = \lg x$.

Решив эту систему, получим искомые значения параметров A и B . Используем для решения системы уравнений метод Крамера, матрицу коэффициентов при неизвестных обозначим через a_1 , вектор правых частей системы нормальных уравнений — через b_1 .

$$\begin{aligned}a_1 &= \begin{pmatrix} 6 & \sum Z_i \\ \sum Z_i & \sum Z_i^2 \end{pmatrix}; & b_1 &= \begin{pmatrix} \sum U_i \\ \sum U_i \cdot Z_i \end{pmatrix}; \\ a_1 &= \begin{pmatrix} 6 & 8.857 \\ 8.857 & 13.489 \end{pmatrix}; & b_1 &= \begin{pmatrix} 8.85 \\ 13.476 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

$$D = a_{10,0} \cdot a_{11,1} - a_{11,0} \cdot a_{10,1} = 6 \cdot 13.489 - 8.857 \cdot 8.857 = 2.487;$$

$$D_1 = b_{10} \cdot a_{11,1} - a_{10} \cdot b_{11,1} = 8.85 \cdot 13.489 - 8.857 \cdot 13.476 = 0.021;$$

$$D_2 = a_{10,0} \cdot b_{11} - b_{11,0} \cdot a_{01} = 6 \cdot 13.476 - 8.85 \cdot 8.857 = 2.471;$$

$$A = \frac{D_1}{D} = \frac{0.021}{2.487} = 0.008; \quad B = \frac{D_2}{D} = \frac{2.471}{2.487} = 0.994;$$

$$a = 0.008; \quad b = 0.994.$$

Округление параметров (Приложение 5) проводят на основе количества значащих цифр в U и Z , параметры можно округлить до $a = 0$ и $b = 1$.

Проверка адекватности выбранной формулы $Y(x) = 0 + 1 \cdot \lg x$

x	10	20	30	40	50	60
y	1.00	1.30	1.48	1.60	1.70	1.77
Y	1.00	1.30	1.48	1.60	1.70	1.78

Сравнение значений экспериментальных данных y и расчетных Y показывает достаточно хорошее совпадение, следовательно, исследуемый объект адекватно описывается уравнением

$$y = \lg x,$$

значит, параметры найдены правильно.

Проведение подобных расчетов облегчается с применением современной вычислительной техники (Приложение 5).

Определение вида и параметров немонотонной зависимости

Метод средних точек, рассмотренный выше, применяется для монотонных зависимостей (только возрастающих или только убывающих). Если же исходная кривая переходит через экстремум (максимум или минимум), простые формулы не подходят, и приходится применять более сложные. Как правило, вид зависимости в таких ситуациях уже задан исходя из каких-то дополнительных условий.

Однако в этом случае метод наименьших квадратов не всегда дает однозначные соотношения для вычисления параметров, и приходится применять методы поиска экстремума. Непосредственная реализация этих методов составлением алгоритма и соответствующей программы — достаточно сложная задача, обычно ее решают с применением специализированных математических пакетов.

Пример 2. Для системы мономолекулярных химических реакций



зависимость концентраций веществ от времени можно представить следующими уравнениями:

$$A(t) = b_0 \cdot e^{b_1 \cdot t};$$

$$B(t) = b_0 \cdot e^{b_1 \cdot t} + b_2 \cdot e^{b_3 \cdot t};$$

$$C(t) = (b_0 \cdot e^{b_1 \cdot t} + b_2 \cdot e^{b_3 \cdot t}) \cdot e^{b_4 \cdot t},$$

где b_0, b_1, b_2, b_3, b_4 — постоянные коэффициенты (не совпадающие для разных веществ).

В результате проведенного эксперимента получены кинетические кривые (зависимости концентраций от времени):

t	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
A	100	54.78	30.01	16.44	9.01	4.93	2.70	1.48	0.81	0.44	0.24
B	0	38.53	46.64	48.32	42.12	34.66	27.56	21.45	16.46	12.50	9.43
C	0	6.69	20.35	35.24	48.88	60.41	69.73	77.07	82.73	87.06	90.33

По этим данным требуется определить параметры b_0, b_1, b_2, b_3, b_4 для всех концентраций независимо друг от друга.

Решение. Для определения параметров концентрации $A(t)$ можно применить как метод, рассмотренный выше, так и некоторые другие. Самый простой и наглядный метод — использование возможностей электронных таблиц. Например, построим точечный график в табличном процессоре *MS Excel* и проведем линию тренда (рис. 1.4).

В результате получаем уравнение $y = 100.28e^{-0.603x}$, т.е. $A(t) = 100.28e^{-0.603t}$ и соответственно $b_0 = 100.28; b_1 = -0.603$. Для определения параметров других концентраций применить *Excel* уже нельзя. Следует использовать специализированные пакеты.

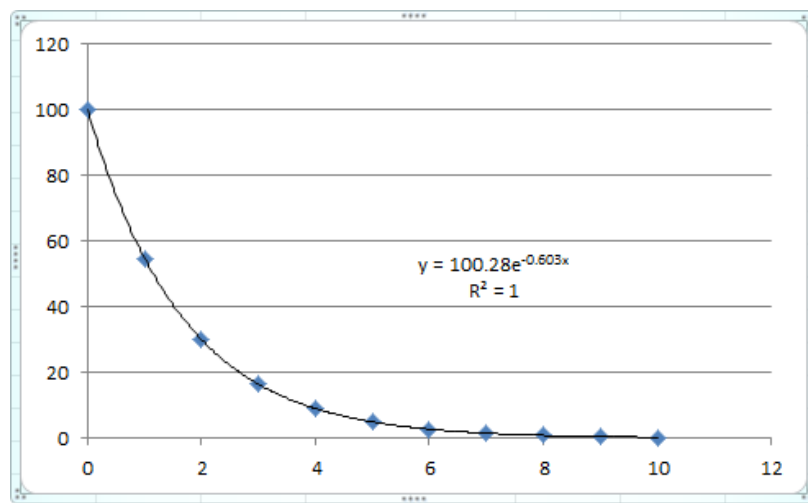


Рис. 1.4. Результаты расчета в *Excel*

1.2. Многофакторные модели

Общее назначение множественной регрессии (этот термин был введен Пирсоном в 1908 г.) состоит в анализе связи между несколькими независимыми переменными и зависимой переменной. Конкретный вид функциональной зависимости (1.1) и значения коэффициентов определяются из опытных данных.

В дальнейшем будем использовать следующие термины: **факторное пространство** — пространство с координатами $(x_1, \dots, x_n)$; **поверхность отклика** — геометрическое изображение функции отклика в факторном пространстве.

В том случае, когда исследование поверхности отклика ведется при неполном знании механизма изучаемых явлений, аналитическое выражение многофакторной функции отклика неизвестно, поэтому математическая модель, как правило, по своему виду не имеет ничего общего с природой процессов, происходящих в системе, поэтому в качестве функции $f(x_i, b_i)$ целесообразно выбирать простые аналитические зависимости (полиномы различных классов, тригонометрические функции и др.). Чаще всего функция представляется в виде полинома некоторой степени (в зависимости от требуемой точности) — **уравнения регрессии**:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^N \beta_i x_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^N \beta_{ii} x_i^2 + \dots, \quad (1.4)$$

где N — число факторов, β_i , β_{ij} , β_{ii} — теоретические коэффициенты (**коэффициенты регрессии**), характеризующие соответственно линейные эффекты, эффекты взаимодействия и квадратичные эффекты.

Коэффициенты регрессии определяются следующим образом:

$$\beta_i = \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}; \quad \beta_{ij} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j}; \quad \beta_{ii} = \frac{\partial^2 \varphi}{2 \partial x_i^2}.$$

Невозможно точно определить значения коэффициентов уравнения (1.4), ведь результат эксперимента на сложном объекте — обычно величина случайная. Это может быть обусловлено погрешностью измерений, иногда случайными воздействиями («шумами»). Значения выходных измерений, как правило, отличаются друг от друга. Поэтому при обработке экспериментальных данных можно определить

только так называемые выборочные коэффициенты регрессии: b_0 , b_i , b_{ij} , b_{ii} , которые являются лишь оценками для теоретических коэффициентов регрессии β , определяемых для некоторой генеральной совокупности, состоящей из всех возможных опытов.

В результате пользуются приближенным уравнением регрессии, полученным по ограниченной выборке экспериментальных данных:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^N b_i x_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^N b_{ii} x_i^2 + \dots, \quad (1.5)$$

где $\hat{y}$ — выборочная оценка для y (предсказанное значение выходного параметра); b_0 — свободный член уравнения регрессии; b_i , b_{ij} , b_{ii} — коэффициенты регрессии, характеризующие соответственно линейные эффекты, эффекты взаимодействия и квадратичные эффекты.

Первый этап решения этой задачи — выбор вида модели. В данном случае он заключается в выборе степени уравнения регрессии в зависимости от сложности решаемой задачи и требуемой точности. При первоначальном исследовании объекта обычно применяют линейное уравнение регрессии

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_n x_n. \quad (1.6)$$

На следующем этапе выбирают уравнение второго порядка

$$y = b_0 + b_1 x_1 + \dots + b_n x_n + b_{11} x_1^2 + \dots + b_{nn} x_n^2 + b_{12} x_1 x_2 + \dots + b_{n-1n} x_{n-1} x_n. \quad (1.7)$$

Для определения коэффициентов регрессии можно применить метод наименьших квадратов, который в случае линейного вида уравнения регрессии сводится к решению системы $k + 1$ линейных алгебраических уравнений для k факторов (с предварительным накоплением соответствующих сумм). При вычислении коэффициентов нелинейных уравнений проводят их линеаризацию, так чтобы новые переменные были линейно независимы.

Уравнение регрессии (1.5) используется для построения статистических моделей объектов химической технологии. Эта модель не несет никакой информации о физико-химических свойствах процессов и справедлива только для объекта, на котором проводили эксперимент.

Однако такие модели широко используются при решении задач оптимизации. Конкретный вид эмпирических моделей (1.1) определяется по результатам экспериментов — активных или пассивных.

Эксперимент — это совокупность опытов, проводимых в определенном порядке с целью получения информации об объекте исследования. **Опыт** — это воспроизведение исследуемого явления при определенных заданных условиях. **План эксперимента** — это совокупность данных, определяющих число, условия и порядок проведения опытов. **Планирование эксперимента** — это совокупность приемов, позволяющих исследователю выбрать план эксперимента так, чтобы получить максимум информации при минимуме затрат.

При проведении **пассивного эксперимента** сбор экспериментальной информации (значений факторов x_i и выходного параметра y_i) происходит в режиме нормальной эксплуатации объекта. Данные (выборка) берутся с промышленной или с лабораторной установок. Обработка результатов проводится методами корреляционного и регрессионного анализов. Основная проблема состоит в том, что вид эмпирической модели (уравнения регрессии) необходимо определить по характеру изменения переменных на графике эмпирической линии регрессии, полученной по выборке экспериментальных данных. Стремление избавиться от недостатков моделей на базе пассивного эксперимента привело к математической теории активного эксперимента. **Активный эксперимент** ставится по заранее составленному плану и обрабатывается по некоторому оптимальному алгоритму с целью составления математической модели. Одним из основных методов теории активного эксперимента является *статистическое планирование* эксперимента [2, 4, 10, 14].

1.3. Методы корреляционного и регрессионного анализов

Методы корреляционного и регрессионного анализов широко применяются для выявления и описания зависимостей между случайными величинами по экспериментальным данным и базируются на теории вероятностей и математической статистике.

Корреляционный анализ — количественная оценка зависимости случайных величин по выборочному коэффициенту корреляции, он основывается на предпосылке о том, что переменные величины y

(выходной параметр) и x_i (факторы) являются случайными величинами и между ними может существовать связь, при которой с изменением одной величины изменяется распределение другой.

Можно выделить три типа коэффициента корреляции.

Простой коэффициент корреляции, или **коэффициент парной корреляции**, определяет величину (тесноту) зависимости между двумя переменными (x и y) и определяется по формуле

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{(N-1) \cdot S_x \cdot S_y}, \quad (1.8)$$

где $\bar{x}$, $\bar{y}$ — среднеарифметические значения переменных x и y ; N — число опытов; S_x , S_y — среднеквадратические отклонения случайных величин:

$$S_x = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}{N-1}}; \quad S_y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}{N-1}}. \quad (1.9)$$

Коэффициент корреляции характеризует степень тесноты линейной зависимости. Если случайные величины x и y связаны точной линейной функциональной зависимостью $\hat{y} = b_0 + b_1x$, то $r_{xy} = \pm 1$, знак коэффициента корреляции соответствует знаку коэффициента b_1 . Когда величины x и y связаны произвольной стохастической зависимостью, коэффициент корреляции может принимать значение в интервале $-1 \leq r_{xy} \leq 1$. Если $r_{xy} = 0$, то x и y — независимы, корреляции нет. При $r_{xy} > 0$ существует положительная корреляционная связь между x и y (с ростом x увеличивается y), если $r_{xy} < 0$ — отрицательная (с ростом x уменьшается y). Коэффициент корреляции, существенно отличающийся от ± 1 , характеризует слишком большую долю случайности и слишком большую долю криволинейности связи между случайными величинами. При вычислении коэффициента корреляции удобно использовать следующие формулы:

$$\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \sum x_i y_i - \frac{\sum x_i \sum y_i}{N};$$

$$S_x^2 = \frac{\sum x_i^2 - \frac{(\sum x_i)^2}{N}}{N-1}; \quad S_y^2 = \frac{\sum y_i^2 - \frac{(\sum y_i)^2}{N}}{N-1},$$

где S_x^2 , S_y^2 — выборочные дисперсии величин x и y .

Коэффициент частной корреляции измеряет линейную зависимость между двумя переменными после устранения части зависимости, обусловленной зависимостью этих переменных от других переменных. При исследовании зависимости y от x_1 и x_2 наличие корреляции между x_1 и x_2 и между y и x_2 будет влиять на корреляцию между y и x_1 .

Частный коэффициент $r_{yx_1 \cdot x_2}$ оценивает степень влияния фактора x_1 на y при условии, что влияние x_2 на y исключено ($x_2 = const$):

$$r_{yx_1 \cdot x_2} = \frac{r_{yx_1} - r_{yx_2} \cdot r_{x_2x_1}}{\sqrt{(1 - r_{yx_2}^2)(1 - r_{x_2x_1}^2)}}; \quad (1.10)$$

$$r_{yx_2 \cdot x_1} = \frac{r_{yx_2} - r_{yx_1} \cdot r_{x_2x_1}}{\sqrt{(1 - r_{yx_1}^2)(1 - r_{x_2x_1}^2)}}. \quad (1.11)$$

Множественный коэффициент корреляции определяет величину зависимости одной переменной от нескольких.

Коэффициент корреляции показывает, существует ли связь между x и y , но самого вида функции не дает. Для характеристики формы связи при изучении корреляционной зависимости пользуются уравнением приближенной регрессии (1.5). Таким образом, корреляционный и регрессионный анализы тесно связаны между собой.

Регрессионный анализ предполагает (рассматривает) связь между зависимой величиной y и независимыми переменными $x_1, \dots, x_n$. Эта связь выражена в виде математической модели, т. е. уравнения, которое связывает зависимую и независимые переменные [2, 4].

Регрессионный анализ базируется на следующих предположениях:

- 1) результаты наблюдений $y_1, \dots, y_n$ представляют собой независимые, нормально распределенные случайные величины;
- 2) входные факторы x_i измеряются с пренебрежимо малой ошибкой по сравнению с ошибкой измерения y ;
- 3) выборочные дисперсии $S_{y_1}^2, \dots, S_{y_n}^2$ значения выходного параметра y , полученные при одинаковом количестве параллельных опытов, должны быть однородны.

Пусть имеется выборка объема n , требуется найти уравнение приближенной регрессии $\hat{y}_i = f(x)$ и оценить допускаемую при этом ошибку. По сгущениям точек можно предположить определенную зависимость, и получить вид уравнения регрессии. Если разброс точек значительный, т. е. корреляция незначительна, то регрессии не будет.

Вид уравнения регрессии зависит от выбираемого метода приближения.

Обычно пользуются **методом наименьших квадратов**. Процедура нахождения коэффициентов регрессии сводится к задаче определения минимума функции. Необходимым условием экстремума функции является равенство нулю частных производных функции по искомым величинам (коэффициентам):

$$F = \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i))^2 = \min, \quad (1.12)$$

или

$$F = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 = \min, \quad (1.13)$$

где $y_i, \hat{y}_i$ — экспериментальные и расчетные значения выходной величины соответственно.

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial b_0} = -2 \sum_{i=1}^N (y_i - b_0 - b_1 x_i) \cdot 1 = 0; \\ \frac{\partial F}{\partial b_1} = -2 \sum_{i=1}^N (y_i - b_0 - b_1 x_i) \cdot x_1 = 0; \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sum (y_i - b_0 - b_1 x_i) = 0; \\ \sum (y_i - b_0 - b_1 x_i) \cdot x_1 = 0; \end{cases}$$

$$\begin{cases} Nb_0 + b_1 \sum x_i = \sum y_i; \\ b_0 \sum x_i + b_1 \sum x_i^2 = \sum x_1 y_1. \end{cases}$$

Решая последнюю систему уравнений, получаем формулы для расчета коэффициентов уравнения регрессии:

$$b_0 = \frac{\sum y_i \sum x_i^2 - \sum x_i y_i \sum x_i}{N \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}; \quad (1.14)$$

$$b_1 = \frac{N \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{N \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}. \quad (1.15)$$

В качестве статистических моделей объектов химической технологии часто используют уравнения нелинейной формы, например, полиномы второй, третьей и более высоких степеней (уравнение (1.7)). В

этом случае график функции представлен параболой, а для нахождения коэффициентов уравнения регрессии также можно использовать метод наименьших квадратов [5].

Рассмотрим уравнение $\hat{y} = b_0 + b_1x + b_2x^2$.

Введем обозначения

$$S_1 = \sum_{i=1}^N x_i; \quad S_2 = \sum_{i=1}^N x_i^2; \quad S_3 = \sum_{i=1}^N x_i^3; \quad S_4 = \sum_{i=1}^N x_i^4;$$

$$S_5 = \sum_{i=1}^N y_i; \quad S_6 = \sum_{i=1}^N (x_i \cdot y_i); \quad S_7 = \sum_{i=1}^N (x_i^2 \cdot y_i).$$

Коэффициенты b_0, b_1, b_2 можно определить следующим образом:

$$b_0 = \frac{S_5 S_2 S_4 + S_6 S_3 S_2 + S_7 S_1 S_3 - S_7 S_2 S_2 - S_6 S_1 S_4 - S_5 S_3 S_3}{N S_2 S_4 + S_1 S_3 S_2 + S_2 S_1 S_3 - S_2 S_2 S_2 - S_1 S_1 S_4 - N S_3 S_3};$$

$$b_1 = \frac{N S_6 S_4 + S_1 S_7 S_2 + S_2 S_5 S_3 - S_2 S_6 S_2 - S_1 S_5 S_4 - N S_7 S_3}{N S_2 S_4 + S_1 S_3 S_2 + S_2 S_1 S_3 - S_2 S_2 S_2 - S_1 S_1 S_4 - N S_3 S_3};$$

$$b_2 = \frac{N S_2 S_7 + S_1 S_3 S_5 + S_2 S_1 S_6 - S_2 S_2 S_5 - S_1 S_1 S_7 - N S_3 S_6}{N S_2 S_4 + S_1 S_3 S_2 + S_2 S_1 S_3 - S_2 S_2 S_2 - S_1 S_1 S_4 - N S_3 S_3}.$$

Аналогично будут определяться коэффициенты параболы любого порядка. Исследование уравнения проводится по статистическим критериям, так же как и в случае линейной регрессии.

Современные программные средства персональных компьютеров значительно облегчают корреляционный и регрессионный анализ (Приложение 5).

Чаще всего в качестве критериев точности модели используют коэффициенты корреляции R и детерминации R^2 . Это может привести к существенным ошибкам, ведь коэффициент корреляции указывает не на близость рассчитанной и экспериментальной величин, а на их выстраивание в линейный вид. Этот критерий не указывает на наличие систематических ошибок, их значимость и диапазон. Необходимо рассчитывать и другие показатели (критерии) совпадения расчетных и экспериментальных величин.

При обработке результатов пассивных экспериментов получают линейные и нелинейные эмпирические модели, которые должны достаточно точно описывать всю совокупность опытных данных. Сложность в этом случае заключается в правильном выборе вида модели и определении параметров модели (коэффициентов уравнения).

Пассивные методы сбора экспериментальной информации имеют определенные преимущества, которые заключаются в том, что информация собирается в режиме нормальной эксплуатации объекта. Это способствовало широкому внедрению регрессионного анализа для изучения объектов химической технологии. Однако полученные на базе пассивного эксперимента модели во многих случаях оказываются неэффективными [8]. Причиной является не сам метод, а то, что не выполняются основные предпосылки регрессионного анализа: факторы измеряются с большими ошибками [9]. В пассивном эксперименте, как правило, ошибка измерения x соизмерима, а то и больше ошибки при измерении y . Иногда ошибка измерения входных параметров превышает даже интервал изменения самих факторов. Кроме того, факторы (x_i) или коэффициенты b_i имеют между собой корреляционную связь. Это затрудняет статистический анализ и интерпретацию результатов [11].

Вопросы для самоконтроля

- 1) В каких случаях строят статистических моделей?
- 2) На чем базируется построение статистических моделей?
- 3) Каков общий вид статистических моделей?
- 4) Приведите два вида эксперимента, используемых для построения статистических моделей.
- 5) В чем разница между пассивным и активным экспериментами?
- 6) Для чего проводят корреляционный анализ?
- 7) Какова основная характеристика корреляционного анализа?
- 8) Какова суть регрессионного анализа?
- 9) Перечислите виды регрессии, приведите примеры.
- 10) Назовите метод, применяемый для оценки коэффициентов уравнения регрессии.
- 11) Какова последовательность регрессионного анализа?

2. Статистические модели на основе активного эксперимента

В последнее время для моделирования и оптимизации различных процессов широко применяются методы активного планирования эксперимента [2,10]. История этих методов описана в Приложении 5. С их помощью исследователь проводит эксперимент по заранее составленному плану при минимальных затратах на получение необходимых данных об изучаемом объекте и его оптимизацию. К активному эксперименту относят также исследования, которые состоят из нескольких взаимосвязанных этапов, результаты обработки эксперимента, выполненного на предыдущем этапе, используются для разработки стратегии опытов последующего этапа [13].

Планирование эксперимента позволяет решить несколько задач. Применение методов математической статистики и концепции рандомизации позволяет изучить степень и направление влияния только интересующих факторов, приравняв воздействие остальных к шумам. Несмотря на отсутствие сведений о механизмах процессов, протекающих внутри объекта, по значениям входных и выходных переменных составляется математическая модель, которая имеет вероятностный характер. Построение модели подчиняется иерархическому принципу: от простой модели к более сложной, от полного факторного эксперимента к композиционному плану. Такой подход позволяет провести поиск оптимальных условий протекания процесса. Эта задача решается как при наличии, так и при отсутствии экстремума математической модели. Следует подчеркнуть, что математическая модель описывает лишь ту область, в которой проводился эксперимент.

К традиционным четырем этапам моделирования (проведение эксперимента, выбор вида модели, определение параметров модели, проверка адекватности) может быть добавляен еще этап оптимизации. В активном эксперименте первые два этапа моделирования взаимосвязаны, т. е. план проведения эксперимента зависит от того, какая

выбрана модель. При этом выбор факторных точек зависит от требований оптимизации. Обычно математическая модель объекта в многофакторных задачах записывается в виде полинома некоторой степени (в зависимости от требуемой точности). На первый взгляд, количество уравнений, необходимых для определения коэффициентов регрессии, должно быть равно количеству этих коэффициентов. Однако, необходимо проверить, соответствует ли полученная модель другим значениям факторов $x_1, x_2, \dots, x_k$. Поэтому количество опытов всегда больше, чем количество коэффициентов, подлежащих определению. Дополнительные опыты обеспечивают определенное число степеней свободы для проверки гипотезы об адекватности, т.е. о соответствии полученного уравнения реальным закономерностям.

При выборе плана эксперимента придерживаются принципа оптимальности планирования: план эксперимента должен обладать некоторыми оптимальными свойствами, быть в каком-то смысле наилучшим из возможных планов эксперимента. Критерии оптимальности планов эксперимента могут выбираться по-разному, не существует одного, наилучшего во всех смыслах плана. Известные критерии оптимальности планов фактически формализуют, переводят на математический язык те или иные интуитивные представления специалистов-экспериментаторов о хорошем эксперименте.

Выбор критерия оптимальности плана эксперимента зависит прежде всего от решаемой задачи. Критерии оптимальности планов регрессионных экспериментов принято подразделять на две группы: критерии, связанные с точностью оценивания коэффициентов регрессии; критерии, связанные с предсказательными свойствами эмпирической модели (насколько точно можно предсказать значения отклика по уравнению регрессии). В настоящее время известно несколько десятков различных критериев оптимальности планов регрессионного анализа. Назовем некоторые наиболее употребительные из них.

План регрессионного эксперимента называется **ортогональным**, если матрица базисных функций диагональна. Название объясняется тем, что в этом случае столбцы матрицы ортогональны, т.е. для любых двух столбцов сумма попарных произведений их элементов равна нулю. Ортогональные планы часто стремятся использовать, поскольку при таком плане эксперимента оценки коэффициентов регрессии получаются независимыми, что существенно облегчает их анализ и

интерпретацию. Кроме того, значительно упрощается расчет коэффициентов регрессии (не требуется составлять и решать систему нормальных уравнений). К таким планам относят полный факторный эксперимент 2^n , дробный факторный эксперимент 2^{n-p} , центральный композиционный ортогональный план.

Одним из наиболее важных и часто используемых является критерий **D-оптимальности**, согласно которому минимизируется обобщенная дисперсия оценок коэффициентов регрессии (план обладает свойством D-оптимальности, если он имеет минимальный определитель матрицы базисных функций). D-оптимальными являются полный факторный эксперимент 2^n , дробный факторный эксперимент 2^{n-p} , D-план 2-го порядка близок к D-оптимальному.

План эксперимента называется **ротатабельным**, если точность предсказания значений отклика по уравнению регрессии одинакова во всех равноудаленных от центра плана точках. Планы полного факторного эксперимента 2^n и дробного факторного эксперимента 2^{n-p} обладают свойством ротатабельности в случае линейных регрессионных моделей, из планов 2-го порядка ротатабельным является центральный композиционный ротатабельный план.

Ещё одно свойство планов является весьма желательным с точки зрения минимизации затрат на проведение эксперимента. Это степень насыщенности плана. План называется **насыщенным**, если число опытов равно числу определяемых коэффициентов уравнения регрессии. Желательно, чтобы любой реальный план был близок к насыщенному. Это особенно важно на этапе предварительного исследования, когда требуется получить приближенное представление об объекте при минимальных затратах на проведение эксперимента.

Для отбора основных, наиболее значимых факторов, определяющих математическую модель процесса без установления количественных соотношений между ними, проводят отсеивающий эксперимент (методы ранговой корреляции, случайного баланса, насыщенного планирования).

2.1. Планы первого порядка

К планам первого порядка относятся симплекс-планы, полный и дробный факторные эксперименты и некоторые другие.

Симплекс-планирование использует для определения координат экспериментальных точек симплексы, фигуры, имеющие в n -мерном пространстве $n + 1$ вершину. Симплекс, все стороны которого равны, называется регулярным. Если поставить опыты в вершинах симплекса, то число вершин будет равно числу коэффициентов модели первого порядка, полученный план называют насыщенным и используют при проведении отсеивающего эксперимента. Такой план позволяет проводить опыты в условиях ограничений. Ориентируя симплекс можно добиться удобного его расположения в исследуемой области факторного эксперимента. О применении симплексов в планировании эксперимента см. п. 3.3.

Рассмотрим более подробно полный и дробный факторный эксперименты.

2.2. Полный факторный эксперимент

Для определения коэффициентов регрессии независимо друг от друга и по более простым формулам эксперимент должен удовлетворять следующим требованиям: **ортогональность** (скалярное произведение двух любых столбцов матрицы равно нулю) (2.1), **симметричность** (сумма элементов каждого столбца матрицы равна нулю) (2.2), **нормировка** (сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу опытов) (2.3).

$$\sum_{i=1}^N x_{ji}x_{mi} = 0; \quad (j, m = 1, \dots, n, \quad j \neq m), \quad (2.1)$$

$$\sum_{i=1}^N x_{ji} = 0; \quad (j = 1, \dots, n), \quad (2.2)$$

$$\sum_{i=1}^N x_{ji}^2 = N; \quad (j = 1, \dots, n). \quad (2.3)$$

Всем требованиям удовлетворяет так называемый полный факторный эксперимент (ПФЭ), в ходе которого реализуются все возможные комбинации факторов на всех выбранных для исследования уровнях. Для линейного планирования достаточно того, чтобы каждый фактор варьировался на двух уровнях, т. е. принимал в ходе эксперимента два различных значения.

Суть факторного эксперимента:

- одновременное варьирование всех факторов при проведении эксперимента по определенному плану;
- представление математической модели (функции отклика) в виде линейного полинома;
- исследование полученного полинома методами математической статистики.

Необходимое количество опытов N при ПФЭ:

$$N = l^n, \quad (2.4)$$

где n — число факторов; l — число уровней, на которых варьируются факторы.

Уровни факторов — это границы исследуемой области по данному технологическому параметру. Выбор экспериментальной области по каждому фактору связан с тщательным анализом предварительной информации, так чтобы верхний и нижний факторы могли быть реализованы в эксперименте.

Обычно применяется планирование на двух уровнях, т. е. $l = 2$, тогда при $n = 2$ число опытов будет равно $N = 2^2 = 4$.

Основной (нулевой) уровень (**центр плана эксперимента**) — это некоторое начальное значение фактора при составлении математической модели (исходные параметры технологического процесса), это точка с координатами $(x_1^0, \dots, x_n^0)$.

Интервал варьирования — часть области определения фактора симметричная относительно его основного уровня (Δx) и превышающая ошибку измерения факторов.

Пример 3. На процесс влияют два фактора: температура (x_1) и концентрация вещества (x_2). Известно априори, что температура изменяется в интервале $150 \div 200$ °С; концентрация $6 \div 10$ %.

Решение. Для двух факторов, без учета их взаимодействия, соответствующая модель может быть записана как

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2.$$

Приведем условия эксперимента:

	x_1 , °С	x_2 , %
Верхний уровень, x_i^{max} :	200	10

Нижний уровень, x_i^{min} :	150	6
Основной уровень, x_i^0 :	175	8
Интервал варьирования, Δ_{x_1} :	25	2

Основной уровень рассчитывается как

$$x_1^0 = \frac{x_1^{max} + x_1^{min}}{2} = \frac{200 + 150}{2} = 175;$$

$$x_2^0 = \frac{x_2^{max} + x_2^{min}}{2} = \frac{10 + 6}{2} = 8.$$

Интервалы варьирования:

$$\Delta_{x_1} = \frac{x_1^{max} - x_1^{min}}{2} = \frac{200 - 150}{2} = 25;$$

$$\Delta_{x_2} = \frac{x_2^{max} - x_2^{min}}{2} = \frac{10 - 6}{2} = 2.$$

В координатах на плоскости это можно представить так (рис. 2.1):

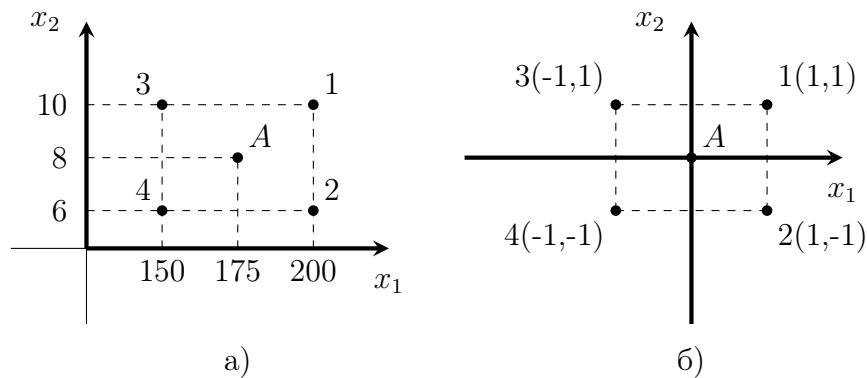


Рис. 2.1. Схема расположения опытных точек полного факторного эксперимента 2^2 в натуральных (а) и безразмерных координатах (б)

План эксперимента указывает расположение в n -мерном пространстве опытных точек независимых переменных, т. е. условия всех опытов, которые необходимо провести. При ПФЭ эксперимент ставится только на границе области, (рис. 2.1а, точки 1, 2, 3, 4; точка - центр области планирования).

В большинстве случаев эксперимент задается в виде **матрицы планирования** — это план (таблица), каждая строчка которого представляет собой условия опыта, а каждый столбец матрицы соответствует значениям переменных в различных опытах.

После того, как установлено число повторностей, необходимо обеспечить такой порядок проведения опытов, чтобы от него не зависели результаты эксперимента. В процессе эксперимента объект исследований изменяется, в нем происходят необратимые изменения, поэтому результат эксперимента зависит от порядкового номера опыта. Для внесения элемента случайности в порядок выполнения опытов (рандомизации) применяют таблицы случайных чисел. При невозможности полной рандомизации из-за больших потерь времени на перестройку с одного режима на другой весь эксперимент разбивают на блоки и проводят внутривнутриблочную рандомизацию.

Составим матрицу в натуральном масштабе для предыдущего примера, количество опытов в котором согласно (2.4) $N = 2^2 = 4$:

N	x_1	x_2	Y
1	200	10	Y_1
2	200	6	Y_2
3	150	10	Y_3
4	150	6	Y_4

Матрица планирования составляется для того, чтобы провести эксперимент по определенному плану, определить значения выходного параметра в каждом опыте и на основании полученных данных построить статистическую модель. При планировании первого порядка получают математическую модель вида (1.6).

Для удобства расчетов перейдем от натуральных координат (натуральных единиц измерения) к безразмерным. Формула перехода (или кодирования) имеет вид

$$X_i = \frac{x_i - x_i^0}{\Delta x_i}, \quad (2.5)$$

где x_i — значения (верхний или нижний уровень) натуральной переменной; x_i^0 — основной уровень натуральной переменной; Δx_i — интервал варьирования натуральной переменной; X_i — кодированное значение i -го фактора (на верхнем или на нижнем уровне).

Перейдем от натуральных переменных к кодированным:
для температуры:

$$X_1^{max} = \frac{200 - 175}{25} = 1, \quad X_1^{min} = \frac{150 - 175}{25} = -1;$$

для давления:

$$X_2^{max} = \frac{10 - 8}{2} = 1, \quad X_2^{min} = \frac{6 - 8}{2} = -1.$$

Таким образом, факторы на верхнем уровне (200, 10) обозначают +1, а на нижнем (150, 6) –1.

Для составления матрицы планирования используют следующий прием. В первом столбце значения «–1» и «+1» чередуются (цифра 1 обычно опускается и остаются только знаки), а в каждом следующем — чередование знаков в два раза реже, чем в предыдущем. В некоторых случаях добавляется дополнительный столбец для виртуальной переменной (X_0), всегда равной «+1», необходимой для вычисления свободного члена полинома. В результате проведения эксперимента по матрице планирования получаем соответствующие значения целевой функции y_i , ($i = 1, \dots, N$). Представим матрицу планирования в кодированных единицах (в безразмерном масштабе).

N	X_0	X_1	X_2	y
1	+	+	+	y_1
2	+	–	+	y_2
3	+	+	–	y_3
4	+	–	–	y_4

Расположение опытных точек в факторном пространстве показано на рис 2.16.

Матрица планирования в безразмерных единицах обладает требуемыми оптимальными свойствами (при исключении столбцов виртуального параметра и результатов экспериментов): ортогональностью (2.1), симметричностью (2.2), нормировкой (2.3). Характерной чертой такой матрицы является **ротатабельность** (все точки в матрице планирования подобраны так, что точность предсказания значений выходного параметра одинакова на равных расстояниях от центра эксперимента и не зависит от направления).

На основании этих свойств значительно упрощается расчет коэффициентов регрессии.

После того как составлен план (матрица планирования), проводят эксперименты (с достаточным количеством параллельных измерений) и на основании результатов рассчитывают коэффициенты в уравнении регрессии по формулам:

$$b_0 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \cdot \overline{X_{0_i}}, \quad b_1 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \cdot \overline{X_{1_i}}, \quad b_2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \cdot \overline{X_{2_i}}.$$

Или в общем виде:

$$b_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i \cdot \overline{X_{k_i}} \quad (2.6)$$

Приведенные формулы получены на основании метода наименьших квадратов (см. (1.14),(1.15)) с учетом свойств матрицы планирования ((2.1) – (2.3)).

В ПФЭ типа 2^n число различных опытов значительно превосходит число коэффициентов линейной модели, поэтому по результатам этого эксперимента можно получить более сложную модель, учитывающую взаимодействие между факторами (парные, тройные и др.). Число коэффициентов в этих моделях равно количеству опытов соответствующего ПФЭ, т.е. имеет место насыщенное планирование. Во многих случаях стремятся получить именно модели с парными взаимодействиями [6], считая эффекты тройного взаимодействия и взаимодействий более высоких порядков менее значимыми. Столбцы матрицы, учитывающей парные взаимодействия, будут линейно независимы. Более того, матрица сохраняет все свойства матрицы плана ПФЭ: симметричность, нормировку, ортогональность, но, в отличие от случая линейной модели, не обладает свойством ротатабельности. В случае ПФЭ типа 2^n все коэффициенты уравнения со взаимодействиями в кодированных переменных также рассчитываются независимо друг от друга по простым формулам (2.6).

Пример 4. Вычислить коэффициенты регрессии с учетом линейных эффектов и эффектов взаимодействия на основании экспериментальных данных, полученных по плану, приведенному ниже.

N	X_0	X_1	X_2	X_1X_2	y
1	+	+	+	+	58.2
2	+	–	+	–	46.8
3	+	+	–	–	52.5
4	+	–	–	+	40.7

Решение. Рассчитаем коэффициенты по формуле (2.6). Поскольку сумма членов во втором и третьем столбце матрицы равны нулю, свободный член модели можно найти, сложив все четыре уравнения:

$$b_0 = \frac{58.2 + 46.8 + 52.5 + 40.7}{4} = 49.6.$$

Чтобы найти какой-либо другой коэффициент модели, нужно изменить знаки в уравнениях таким образом, чтобы в соответствующем столбце оказались одни единицы, после чего сложить все четыре уравнения:

$$b_1 = \frac{58.2 - 46.8 + 52.5 - 40.7}{4} = 5.8;$$

$$b_2 = \frac{58.2 + 46.8 - 52.5 - 40.7}{4} = 2.95;$$

$$b_{12} = \frac{58.2 - 46.8 - 52.5 + 40.7}{4} = -0.1.$$

С учетом полученных коэффициентов запишем уравнение регрессии для безразмерных величин

$$\hat{y} = 49.6 + 5.8X_1 + 2.95X_2 - 0.1X_1X_2$$

и для величин в натуральном выражении

$$y = 49.6 + 5.8 \cdot (X_1 \cdot \Delta x_1 + x_1^0) + 2.95 \cdot (X_2 \cdot \Delta x_2 + x_2^0) - 0.1 \cdot (X_1 \cdot \Delta x_1 + x_1^0) \cdot (X_2 \cdot \Delta x_2 + x_2^0).$$

Коэффициент уравнения регрессии показывает, на сколько единиц изменится результат при изменении фактора на одну единицу при постоянном значении других факторов. Коэффициенты регрессии нежелательно использовать для непосредственной оценки влияния факторов на выходной параметр, если различаются единицы измерения входного и выходного параметров. Коэффициент b_0 формально показывает прогнозируемый уровень y , но только в том случае, если $x_i = 0$ находится близко с выборочными значениями. В ином случае, буквальная интерпретация может привести к неверным результатам, и даже если линия регрессии довольно точно описывает значения наблюдаемой выборки, нет гарантий, что так же будет при экстраполяции влево или вправо. Подставив в уравнение регрессии соответствующие значения x , можно определить выровненные (предсказанные) значения результативного показателя $y(x)$ для каждого

наблюдения. Связь между y и x определяет знак коэффициентов регрессии b_i (если коэффициент больше нуля, то связь прямая, иначе — обратная).

Для оценки влияния факторов x_i на результативный признак вычисляются коэффициенты эластичности и бета-коэффициенты. Коэффициент эластичности находится по формуле:

$$E = b_i \cdot \frac{\bar{x}}{\bar{y}}.$$

Он показывает, на сколько процентов в среднем изменяется результативный признак при изменении факторного признака x_i на 1 %. Он не учитывает степень колеблемости факторов. Бета-коэффициент показывает, на какую часть величины своего среднего квадратического отклонения изменится в среднем значение результативного признака при изменении факторного признака на величину его среднеквадратического отклонения при фиксированном на постоянном уровне значении остальных независимых переменных:

$$\beta = b_i \cdot \frac{S_x}{S_y}.$$

После вычисления коэффициентов регрессии приступают к статистическому анализу уравнения регрессии.

Предварительно можно оценить качество уравнения регрессии с помощью ошибки абсолютной аппроксимации

$$\bar{A} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{Y_i - y_i}{y_i} \right| \cdot 100 \ %.$$

Если модель подогнана с высокой точностью — $\bar{A} < 10 \ %$, хорошей — $10 \ \% < \bar{A} < 20 \ \%$, удовлетворительной — $20 \ \% < \bar{A} < 50 \ \%$, неудовлетворительной — $\bar{A} > 50 \ \%$. Целесообразно пропускать значения ряда, для которых $y_i = 0$.

Полученные коэффициенты регрессии проверяют на значимость, оценивая величину влияния каждого фактора на значение функции цели. Если эта величина соизмерима с ошибкой эксперимента, то соответствующий коэффициент не несет дополнительной информации об объекте и его можно приравнять нулю, что упрощает полученную модель. Значимость коэффициентов проверяют с помощью t -критерия

Стьюдента. С целью нахождения ошибки эксперимента — дисперсии воспроизводимости S_y^2 — проводят серию параллельных опытов в какой-либо точке, чаще всего, в центре планирования.

Затем оценивают однородность нескольких дисперсий при равном числе повторов в каждом эксперименте, в частности, при проверке воспроизводимости эксперимента, состоящего из нескольких опытов. Для этого рассчитывают дисперсии экспериментальных значений функции отклика в каждом эксперименте. Очевидно, что недоверие будут вызывать наибольшие значения. Поэтому критерий Кохрена G подсчитывают как отношение максимального значения изменчивости среди N опытов к сумме изменчивостей во всех опытах. Найденное значение сравнивают с критическим $G_{кр}$, представляющим собою максимально возможное значение критерия G , при котором гипотеза об однородности дисперсий может считаться справедливой. Критическое значение определяют исходя из числа сравниваемых дисперсий N , числа параллельных опытов m и заданного уровня значимости. Если $G \leq G_{кр}$, то «подозрительное» максимальное значение изменчивости не является «инородным». В противном случае эксперимент не является воспроизводимым.

Рассмотрим проведение регрессионного анализа при условии проведения параллельных опытов в каждом эксперименте.

1. Оценка дисперсии воспроизводимости.

Определяют средние построчные значения выходного параметра по результатам параллельных опытов:

$$\bar{y}_i = \frac{\sum_{u=1}^{m_i} y_{iu}}{m_i}; \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.7)$$

где N — число экспериментов по уравнению (2.4); m_i — число параллельных опытов при проведении i -го эксперимента.

Рассчитывают выборочные (построчные) дисперсии:

$$S_i^2 = \frac{\sum_{u=1}^{m_i} (y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{m_i - 1}. \quad (2.8)$$

Истинное значение дисперсии в этом случае не зависит от округления среднего арифметического.

Суммируют построчные дисперсии $\sum_{i=1}^N S_i^2$, находят максимальное значение дисперсии S_{max}^2 .

В случае равномерного дублирования опытов ($m_1 = m_2 = \dots = m$) находят критерий Кохрена

$$G = \frac{S_{max}^2}{\sum_{i=1}^N S_i^2}. \quad (2.9)$$

Проверяют дисперсию на однородность по критерию Кохрена, если $G < G_{\text{табл}}(q, f_1, f_2)$ (q — уровень значимости, f — число степеней свободы, в данном случае $f_1 = m - 1$, $f_2 = N$, $G_{\text{табл}}$ см. табл. П2.1 в Приложении 5), то дисперсия однородна. Если дисперсия неоднородна, увеличивают число параллельных опытов и вновь проверяют дисперсию на однородность.

При неравномерном дублировании используют критерий Бартлетта (объем выборки должен быть больше 4) [4]. Можно в обоих случаях использовать критерий Фишера, сравнивая однородность наибольшей и наименьшей дисперсий.

Рассчитывают оценку дисперсии воспроизводимости

$$S_{\text{воспр}}^2 = \frac{\sum S_i^2}{N} \quad (2.10)$$

с числом степеней свободы $f_{\text{воспр}} = N(m - 1)$.

2. Оценку значимости коэффициентов регрессии проводят по критерию Стьюдента

$$t_{b_i} = \left| \frac{b_i}{S_{b_i}} \right|, \quad (2.11)$$

где b_i — значение коэффициента регрессии; S_{b_i} — среднее квадратическое отклонение i -го коэффициента;

$$S_{b_i}^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2}{\sum m_i}. \quad (2.12)$$

Все коэффициенты уравнения определяются с одинаковой точностью, поэтому значения S_{b_i} одинаковы для всех коэффициентов. Если $t_{b_i} > t_{\text{табл}}(q, f)$ (напоминаем, что $f_{\text{воспр}} = \sum m_i$ или $N(m - 1)$), то коэффициент значим. Если условие не выполняется, то коэффициент незначим и может быть приравнен к нулю. Следовательно, фактор, при котором стоит этот коэффициент, на данный процесс влияет незначительно.

3. Выполняют проверку модели на адекватность по критерию Фишера (F):

$$F = \frac{S_{\text{ост}}^2}{S_{\text{воспр}}^2}; \quad S_{\text{ост}}^2 = \frac{m \cdot \sum_{i=1}^N (\bar{y}_i^{\text{exp}} - \hat{y}_i^{\text{calc}})^2}{N - k}, \quad (2.13)$$

где k — число значимых коэффициентов уравнения регрессии.

Если $F < F_{\text{табл}}(q, f_1, f_2)$ (число степеней свободы: числителя $f_1 = N - k$; знаменателя $f_2 = N(m - 1)$), то линейное уравнение регрессии адекватно описывает процесс.

Суть этой проверки сводится к сравнению двух дисперсий: дисперсии адекватности $S_{\text{ост}}^2$ или $S_{\text{ад}}^2$ и дисперсии воспроизводимости $S_{\text{воспр}}^2$. Если первая величина соизмерима со второй, то можно считать, что уравнение (1.6) адекватно описывает экспериментальные данные; если уравнение неадекватно — необходимо либо уменьшить интервал варьирования x_j , либо увеличить порядок уравнения регрессии. Проверка адекватности возможна только для ненасыщенного плана ($N > k$).

2.3. Дробный факторный эксперимент

ПФЭ является эффективным средством построения математической модели с учетом линейных эффектов и эффектов взаимодействия, но одним из его недостатков является избыточность, поскольку с увеличением числа факторов резко возрастает количество опытов. Например, ПФЭ $2^7 = 128$ опытов; ПФЭ $2^{15} = 32768$ опытов.

Для сокращения числа опытов пользуются дробной репликой от ПФЭ (определенная часть ПФЭ: $\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}, \dots, \frac{1}{2^p}$), называемой дробным факторным экспериментом (ДФЭ). Идея ДФЭ заключается в том, чтобы сократить число опытов ПФЭ, но при этом матрица планирования должна сохранить свои оптимальные свойства (2.1) – (2.3), что позволяет рассчитать коэффициенты уравнения регрессии.

Для того чтобы дробная реплика представляла собой ортогональный план, в качестве реплики берут ближайший ПФЭ. При этом число опытов должно быть больше или равно числу неизвестных коэффициентов в уравнении регрессии.

Предположим, необходимо исследовать влияние на результат трех факторов и получить его математическое описание в виде линейного

уравнения

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3.$$

Матрица планирования ПФЭ для трех факторов ($N = 2^3 = 8$) приведена ниже.

N	X_0	X_1	X_2	X_3
1	+	+	+	+
2	+	−	+	+
3	+	+	−	+
4	+	−	−	+
5	+	+	+	−
6	+	−	+	−
7	+	+	−	−
8	+	−	−	−

Допустим, по каким-то причинам необходимо сократить число опытов. При этом свойства матрицы планирования должны быть сохранены, а число опытов N не должно быть меньше 4 (число коэффициентов линейной модели для трех факторов).

Для решения этой задачи возьмем ближайший ПФЭ 2^2 и предположим, что взаимодействие между факторами x_1 и x_2 в ПФЭ отсутствует. Поэтому в качестве плана для x_3 новой матрицы используем взаимодействие x_1x_2 . Получим дробную реплику (точнее, полуреплику $\frac{1}{2}$) от ПФЭ 2^3 , которая сохраняет все свойства матрицы планирования (2.1)-(2.3). Коэффициенты уравнения регрессии рассчитывают согласно (2.6).

N	X_0	X_1	X_2	X_3
1	+	+	+	+
2	+	−	+	−
3	+	+	−	−
4	+	−	−	+

Число опытов в ДФЭ определяется по формуле

$$N = 2^{n-p}, \quad (2.14)$$

где n — общее число факторов; p — число факторов, приравненных к произведению.

Если $n = 3$, фактор x_3 приравнен произведению x_1x_2 , т. е. $x_3 = x_1x_2$, то $N = 2^{n-1} = 2^{3-1} = 2^2 = 4$.

Если приравнять $x_3 = -x_1x_2$, то получим вторую половину матрицы 2^3 .

Применение ДФЭ всегда связано со смешиванием, т. е. совместным оцениванием нескольких теоретических коэффициентов модели (в рассмотренном примере влияние фактора x_3 невозможно отделить от влияния взаимодействия x_1x_2). Если коэффициенты регрессии при парных произведениях не равны 0, то найденные коэффициенты будут смешанными оценками для генеральных коэффициентов:

$$b_0 = \beta_0 + \beta_{1,2,3}; \quad b_1 = \beta_1 + \beta_{23}; \quad b_2 = \beta_2 + \beta_{13}; \quad b_3 = \beta_3 + \beta_{12},$$

где β_i — истинные коэффициенты; b_i — оценки коэффициентов, вычисленных по данным выборки.

Этот недостаток плана ДФЭ — своеобразная плата за сокращение числа опытов.

ДФЭ применяется с целью сокращения числа опытов при решении следующих задач: построение линейного уравнения регрессии в локальной области изменения факторов; описание процессов, в которых заведомо не могут иметь место хотя бы некоторые из парных взаимодействий. План ДФЭ типа 2^{n-p} , как и ПФЭ типа 2^n , обладает свойствами ортогональности, D-оптимальности, а в случае линейной модели — и свойством ротатабельности. Коэффициенты уравнения регрессии в кодированных переменных вычисляются по результатам ДФЭ типа 2^{n-p} с помощью тех же простых формул, что и в случае ПФЭ типа 2^n . Эффективность применения дробной реплики зависит от удачного выбора системы смешивания оценок. При построении ДФЭ следует использовать всю априорную информацию о процессе и выбирать дробную реплику так, чтобы линейные эффекты и существенные (значимые) эффекты взаимодействия оценивались отдельно (не смешивались между собой). Выбор дробной реплики осложняется тем, что нельзя заранее сказать, возможно ли построить план ДФЭ при заданной степени дробности реплики и указанном наборе существенных переменных. Задача выбора дробной реплики решается путем рассмотрения всех возможностей.

2.4. Комбинаторные планы

В технологических исследованиях часто приходится иметь дело с влиянием неоднородностей. Такими неоднородностями являются, например, различия в производителях однотипного оборудования, качестве исходного сырья и вспомогательных материалов, квалификации персонала. Эти неоднородности влияют и на результат эксперимента, точность оптимизации, выбор режимов работы оборудования. Поэтому выявление и оценка этих неоднородностей, их влияния на технологические процессы является одной из важнейших задач эксперимента [7, 10]. Для решения этих задач потребовалась разработка специальных планов эксперимента, которые получили название комбинаторных. К числу комбинаторных планов относят латинские и греко-латинские квадраты, латинские кубы, параллелепипеды, частотные квадраты и различные блок-схемы [12].

Латинским квадратом называют таблицу из $n \times n$ элементов (букв или чисел), в которой каждый элемент встречается в каждой строке и каждом столбце один раз. Известны латинские квадраты:

3×3			4×4				5×5				
A	B	C	A	B	C	D	A	B	C	D	E
B	C	A	B	C	D	A	B	C	D	E	A
C	A	B	C	D	A	B	C	D	E	A	B
			D	A	B	C	D	E	A	B	C
							E	A	B	C	D
а)			б)				в)				

Латинский квадрат, как вариант трехфакторного дисперсионного анализа, позволяет уменьшить ошибку эксперимента введением еще одного исследуемого фактора, который выделит из общей дисперсии свою часть. Суть этого плана сводится к тому, что все три исследуемых фактора разбиваются на одинаковое число уровней n (как правило, $n \geq 4$), при этом уровни 1-го фактора располагаются по столбцам плана, уровни 2-го — по строкам, а уровни 3-го, обозначенные в виде латинских букв, — в поле плана. Построение плана эксперимента по типу латинского квадрата позволяет осуществить экономный перебор вариантов испытаний.

Так, на базе латинского квадрата 3×3 создается план для изучения влияния трех факторов, каждый из которых изменяется на трех

уровнях. На базе латинского квадрата 4×4 изучается влияние трех факторов, но уже на четырех уровнях. В общем случае, латинский квадрат $n \times n$ можно рассматривать как $\frac{1}{n}$ реплику от ПФЭ n^3 .

Латинские квадраты применяются предпочтительно для оценки линейных эффектов изучаемых факторов на начальных этапах исследования.

Пример 5. Пусть необходимо сравнить эффект от работы четырех различных машин в четырех режимах обработки на четырех различных составах сырья. Пусть план эксперимента представлен в табл. 2.1. Составы сырья варьируются по плану латинского квадрата 4×4 , представленному выше.

Таблица 2.1

Результаты эксперимента по методу латинских квадратов

Режим	Машина				Итоги по строкам	Среднее по строкам
	I	II	III	IV		
I	0.18	0.17	0.39	0.94	1.68	0.420
II	0.21	0.16	0.23	0.99	1.59	0.398
III	0.27	0.18	0.17	0.75	1.37	0.343
IV	0.68	0.74	0.81	0.98	3.21	0.802
Итоги	1.34	1.25	1.60	3.66	7.85	
Среднее	0.335	0.312	0.40	0.915		

Решение. Результаты эксперимента обрабатываются в следующем порядке.

1. Подсчитывают итоги и средние значения по строкам и столбцам (табл. 2.1). Подсчитывают итоги и средние значения по буквам.

$$\sum A_i = 0.18 + 0.99 + 0.17 + 0.74 = 2.08 \quad A_{cp} = 0.52;$$

$$\sum B_i = 0.21 + 0.17 + 0.81 + 0.75 = 1.94 \quad B_{cp} = 0.48;$$

$$\sum C_i = 0.27 + 0.16 + 0.39 + 0.98 = 1.80 \quad C_{cp} = 0.45;$$

$$\sum D_i = 0.68 + 0.18 + 0.23 + 0.94 = 2.03 \quad D_{cp} = 0.51.$$

2. Вычисляют суммы квадратов результатов всех наблюдений:

$$SS_1 = 0.18^2 + 0.17^2 + 0.39^2 + 0.94^2 + 0.21^2 + 0.16^2 + 0.23^2 + 0.99^2 + 0.27^2 +$$

$$+0.18^2 + 0.17^2 + 0.75^2 + 0.68^2 + 0.74^2 + 0.81^2 + 0.98^2 = 0.0324 + \\ +0.0289 + 0.1521 + 0.8836 + 0.0441 + 0.0256 + 0.0529 + 0.9801 + 0.0729 + \\ +0.0324 + 0.0289 + 0.5625 + 0.4624 + 0.5476 + 0.6561 + 0.9604 = 5.5229.$$

3. Определяют сумму квадратов итогов по строкам, деленную на число наблюдений в строке

$$SS_2 = \frac{1}{4}(1.68^2 + 1.59^2 + 1.37^2 + 3.21^2) = 4.383.$$

4. Определяют сумму квадратов итогов по столбцам, деленную на число наблюдений в столбце

$$SS_3 = \frac{1}{4}(1.34^2 + 1.25^2 + 1.60^2 + 3.66^2) = 4.828.$$

5. Определяют сумму квадратов итогов по латинским буквам, деленную на число наблюдений для каждой буквы

$$SS_4 = \frac{1}{4}(2.08^2 + 1.94^2 + 1.80^2 + 2.03^2) = 3.863.$$

6. Определяют корректирующий член (квадрат общего итога, деленный на число всех наблюдений)

$$SS_5 = \frac{1}{4 \cdot 4}(1.68 + 1.59 + 1.37 + 3.21)^2 = \frac{1}{4 \cdot 4}(1.34 + 1.25 + 1.60 + 3.66)^2 = \\ = \frac{1}{16} \cdot 7.85^2 = 3.851.$$

7. Определяют сумму квадратов для строки

$$SS_a = SS_2 - SS_5 = 4.383 - 3.851 = 0.532.$$

8. Определяют сумму квадратов для столбца

$$SS_b = SS_3 - SS_5 = 4.828 - 3.851 = 0.977.$$

9. Определяют сумму квадратов для буквы

$$SS_c = SS_4 - SS_5 = 3.863 - 3.851 = 0.012.$$

10. Определяют общую сумму квадратов ($SS_1 \approx 5.523$)

$$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_5 = 5.523 - 3.851 = 1.672.$$

11. Определяют оценку ошибки эксперимента (остаточную сумму квадратов)

$$SS_{\text{ост}} = SS_{\text{общ}} - (SS_a + SS_b + SS_c) = 1.672 - (0.532 + 0.977 + 0.012) = 0.151.$$

12. Определяют значимость линейных эффектов по критерию Фишера (напоминаем, режим оценивается в строках, машины — в столбцах, состав сырья — буквами)

$$F_{\text{реж}} = \frac{\frac{SS_a}{n-1}}{\frac{SS_{\text{общ}}}{(n-1)(n-2)}} = \frac{2 \cdot 0.532}{0.151} = 7.04;$$

$$F_{\text{маш}} = \frac{\frac{SS_b}{n-1}}{\frac{SS_{\text{общ}}}{(n-1)(n-2)}} = \frac{2 \cdot 0.977}{0.151} = 12.94;$$

$$F_{\text{сыр}} = \frac{\frac{SS_c}{n-1}}{\frac{SS_{\text{общ}}}{(n-1)(n-2)}} = \frac{2 \cdot 0.012}{0.151} = 0.16.$$

Для 5%-го уровня значимости, чисел степеней свободы $f_1 = 3$ и $f_2 = 6$ $F_{\text{табл}} = 4.76$, соответственно, два фактора (режим и машина) оказались значимыми, а третий фактор (состав сырья) — незначимым.

Вопросы для самоконтроля

- 1) В чем суть планирования эксперимента?
- 2) Какие основные задачи решает планирование эксперимента?
- 3) Для чего строится матрица планирования?
- 4) С какой целью производится кодирование переменных?
- 5) Благодаря чему упрощается расчет коэффициентов регрессии?
- 6) В чем суть дробного факторного эксперимента и его недостатки?
- 7) Перечислите основные этапы регрессионного анализа в полном и дробном факторном эксперименте.
- 8) Для решения каких задач используют комбинаторные планы, приведите примеры.
- 9) Каковы действия в случае получения неадекватного или адекватного уравнения регрессии?

3. Методы отыскания экстремума

Как правило, цель любого прикладного исследования — выявление оптимальных условий протекания процесса, повышения продуктивности, снижения материальных и энергетических затрат, достижения наивысшего качества продукции. При этом задача сводится к тому, чтобы найти значения факторов, обеспечивающих оптимальные значения выбранного критерия (экстремум целевой функции). Возможно два подхода к решению этой задачи. Один из них сводится к определению оптимума непосредственно на объекте. На этом подходе основан целый ряд методов статической оптимизации. В дальнейшем будем рассматривать только поиск максимума (минимума), учитывая, что при поиске минимума (максимума) необходимо сменить направление на противоположное.

Сущность «методов спуска» для решения задачи поиска минимума состоит в построении последовательности точек $X_1, X_2, \dots, X_k, \dots, X^{\text{opt}}$, принадлежащих множеству управляемых параметров, монотонно уменьшающих значения функции $f(X)$.

На первом этапе задают начальную точку X_1 , параметр окончания счета $\varepsilon < 0$, полагая $k = 1$. На основном этапе в точке X_k проверяют условие окончания счета; если оно выполняется, то полагают $X^{\text{opt}} = X_k$ и расчет заканчивают. Если условие не выполняется, в точке X_k выбирают направление спуска $\bar{S}_k$. Полагают $X_{k+1} = X_k + \lambda_k \bar{S}_k$, где λ_k — длина шага вдоль направления $\bar{S}_k$, полагают $k = k + 1$ и повторяют расчет.

Различные методы спуска отличаются друг от друга способом выбора направления спуска $\bar{S}_k$ и шага вдоль этого направления λ_k . Естественно, что трудоемкость вычисления величины λ_k следует согласовывать с трудоемкостью определения направления спуска $\bar{S}_k$.

Методы решения задач безусловной оптимизации можно разделить на группы в зависимости от уровня используемой в методе информации о целевой функции, например:

- 1) методы нулевого порядка, или прямого поиска, основанные на нахождении (вычислении) только значений функции;
- 2) градиентные методы, в которых используются значения функции $f(X)$ и ее градиента, т.е. вектора, компонентами которого являются частные производные первого порядка;

- 3) методы второго порядка, в которых используются первые и вторые производные функции $f(X)$;
- 4) методы оптимизации квадратичных функций.

Первые три группы методов различаются требованиями к степени гладкости целевой функции (разрывная, непрерывная, непрерывно-дифференцируемая, дважды непрерывно-дифференцируемая), но не к виду функции, четвертая группа ориентирована на оптимизацию функции определенного вида.

Методы нулевого порядка используют только значения целевой функции $f(X)$. Необходимость методов прямого поиска несомненна, особенно при решении практических задач, когда неизвестен вид целевой функции как детерминированной модели. Для снижения затрат времени на поиск оптимума необходимо рассмотрение методов, основанных на использовании первых и вторых производных функции.

3.1. Методы нулевого порядка

Рассмотрим некоторые методы, использующие поиск оптимума на объекте непосредственно.

Метод Зайделя – Гаусса

Рассмотрим сущность метода на примере двухфакторного эксперимента $y = f(X_1, X_2)$. Пусть эксперимент начинается в некоторой точке А, с варьированием фактора X_1 . Вначале выбирается направление изменения X_1 (при неизменном X_2), при котором будет увеличиваться целевая функция, например, увеличение X_1 приводит к уменьшению y (т.е. $b_1 < 0$). Движение в выбранном направлении происходит до тех пор, пока не достигнет максимума в некоторой точке В. После этого направление движения меняется и оно происходит вдоль оси X_2 таким образом, чтобы значение продолжало возрастать до некой точки С. После этого направление движения снова изменяется, оно продолжается до локального максимума в точке D и т.д. Таким образом, суть метода состоит в поочередном варьировании каждого фактора до достижения частного экстремума. Преимущество метода — его простота, а недостаток — низкое быстроедействие.

Метод сканирования

Метод сканирования предусматривает полный перебор всех возможных вариантов. Чтобы их число было конечным, метод должен быть дискретным. Применительно к двухфакторному эксперименту $y = f(1, 2)$ это означает, что факторы могут приобретать лишь определенные (лучше целочисленные) значения, которые могут характеризоваться просто номером. Иными словами, опыт может ставиться лишь в узлах решетки, создаваемой дискретными значениями факторов. Для полного перебора всех точек движение можно начать из начала координат и двигаться вдоль одного из факторов, например, X_1 . При достижении граничной точки следующий опыт проводится в точке с той же координатой X_1 , значение X_2 увеличивается на один шаг, дальше перемещаемся вдоль X_1 в обратную сторону. Такого рода движение продолжается до полного перебора всех точек. Значения y во всех точках сравниваются между собой, и выбирается наибольшее (наименьшее). Преимущество метода заключается в том, что он позволяет найти глобальный оптимум. Недостаток метода — малое быстродействие.

Метод случайного поиска

Известно несколько методик случайного поиска. В соответствии с одной из них, движение начинается из произвольной точки А. Задаются пробным r (3...4 ошибкам опыта) и рабочим a (10 ошибок опыта) шагом. Пробный шаг делают в случайном направлении до точки В, где проводят второй опыт. Если в этой точке критерий оптимизации y больше, чем в точке А (при условии, что имеется максимум), то направление выбрано удачно и в том же направлении делается рабочий шаг. В противном случае рабочий шаг делается в противоположном направлении. Движение в выбранном направлении (с рабочим шагом) продолжается до тех пор пока y растет. Если дальнейшие шаги после точки С дают уменьшение y , то в этой точке определяется новое направление движения. Такая процедура повторяется до тех пор, пока не начнется вращение вокруг какой-либо точки, что означает достижение оптимума.

3.2. Градиентные методы

Градиентные методы основаны на линейной аппроксимации целевой функции $f(X)$ в окрестности точки X_i , в которой требуется определить направление наискорейшего локального спуска или подъёма, т. е. наибольшего локального изменения значения функции. Известно, что наилучшим направлением движения к экстремуму целевой функции является направление градиента. Градиентом функции называется вектор, показывающий направление максимального возрастания функции в данной точке. Вектор направления максимального убывания называется антиградиентом.

$$\overline{grad} y = \sum_{j=1}^k \frac{\partial y}{\partial x_j} \cdot \bar{i}_j, \quad j = 1, \dots, k, \quad (3.1)$$

где $\frac{\partial y}{\partial x_j}$ — проекции вектора-градиента на координатные оси; $\bar{i}_j$ — единичные векторы, совпадающие по направлению с координатными осями.

Найдем проекции вектора-градиента для линейного уравнения регрессии (1.6), взяв частные производные от целевой функции по факторам

$$\frac{\partial y}{\partial x_j} = b_j, \quad j = 1, \dots, k.$$

Эти проекции равны коэффициентам регрессии. Следовательно, чтобы осуществить движение по градиенту, необходимо изменять значения факторов пропорционально полученным коэффициентам регрессии. Факторный эксперимент можно заменить шаговой процедурой, которая состоит в следующем. От исходной точки А делают шаг вдоль оси X_1 в сторону уменьшения и шаг в сторону увеличения, измеряя при этом величину y . Тогда:

$$b_1 = \frac{\partial y}{\partial X_1} = \frac{\Delta y}{2\Delta X_1},$$

где Δy — разность значений для двух шагов, ΔX_1 — шаг вдоль оси X_1 . Аналогично

$$b_2 = \frac{\partial y}{\partial X_2} = \frac{\Delta y}{2\Delta X_2}.$$

Движение в выбранном направлении продолжается до тех пор, пока y растёт. Как только этот рост прекращается, процедуру можно

повторить. Если при очередной процедуре y уже не растет, значит оптимум найден.

Метод крутого восхождения (метод Бокса-Уилсона)

После выбора исходной точки, которая принимается за центр эксперимента, проводится полный или дробный факторный эксперимент. Интервал варьирования выбирается таким образом, чтобы в выбранном диапазоне функция была линейной. Шаги движения по градиенту не должны превышать соответствующие интервалы варьирования факторов. Для выполнения этого требования находим максимальный по абсолютному значению коэффициент регрессии b_j^{max} , а шаг движения по градиенту для **базового** фактора j^{max} выбираем равным интервалу варьирования $\Delta x_{j^{max}}^{grad} = \Delta x_{j^{max}}$. Тогда остальные шаги определяем по формуле

$$\delta x_j^{grad} = \frac{b_j \cdot \Delta x_j}{b_j^{max}}, \quad j = 1, \dots, k; \quad j \neq j^{max}.$$

Знаки шагов движения по градиенту совпадают со знаками соответствующих коэффициентов регрессии. Движение по градиенту, или крутое восхождение, начинаем из центра планирования. Для наглядности составляем таблицу движения по градиенту, в которой каждое последующее значение фактора отличается от предыдущего на шаг движения по градиенту.

N	X_1	X_2	...	X_k	Y
1	x_1^0	x_2^0	...	x_k^0	y_1
2	$x_1^0 + \Delta x_1^{grad}$	$x_2^0 + \Delta x_2^{grad}$	...	$x_k^0 + \Delta x_k^{grad}$	y_2
3	$x_1^0 + 2\Delta x_1^{grad}$	$x_2^0 + 2\Delta x_2^{grad}$	...	$x_k^0 + 2\Delta x_k^{grad}$	y_3
4	$x_1^0 + 3\Delta x_1^{grad}$	$x_2^0 + 3\Delta x_2^{grad}$	...	$x_k^0 + 3\Delta x_k^{grad}$	y_4

Движение по градиенту продолжают до достижения частного экстремума целевой функции в данном направлении (рис. 3.1, точки 1 – 4). Обычно это значение не сразу совпадает с искомым экстремумом, поэтому точку экстремума принимают за новый центр планирования и все этапы моделирования и оптимизации повторяют, т. е. проводят новый ПФЭ и снова организуют движение по градиенту (рис. 3.1, точка 5). Метод, включающий моделирование объекта исследований с помощью ПФЭ и движения по градиенту с использованием линейной

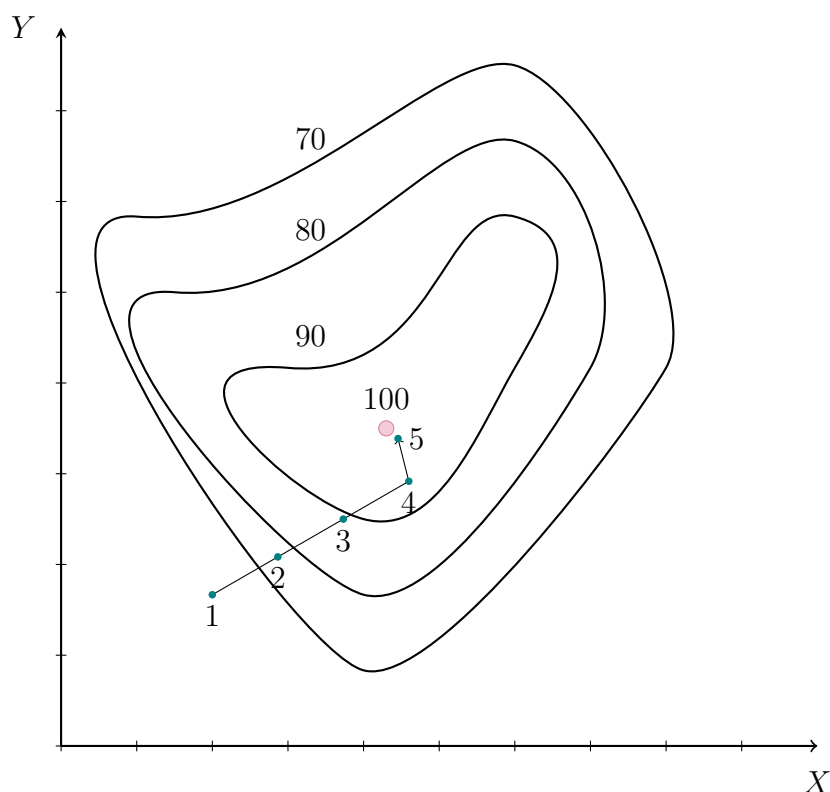


Рис. 3.1. Нахождение оптимума методом движения по градиенту (методом Бокса-Уилсона)

модели, называется методом Бокса-Уилсона, которые предложили его в 1951 г., положив тем самым начало широкому применению статистических методов для подготовки и обработки результатов экспериментов. Критерием окончания поиска является либо незначимость всех коэффициентов регрессии при линейных членах, либо неадекватность уравнения регрессии. Если желаемые результаты регрессии при этом еще не достигнуты, переходят к уравнению регрессии более высокого порядка.

3.3. Применение симплексов

Для реализации методов прямого поиска требуются только значения целевой функции и не требуются значения ее производных (т. е. степень гладкости нулевая). Очевидно, что методы прямого поиска можно применять для решения задач поиска минимума в тех случаях, когда вычисление производных затруднительно. Методы прямого поиска можно разделить на эвристические и теоретические.

Эвристические методы реализуют процедуры поиска с помощью интуитивных представлений, тогда как теоретические методы основаны на соответствующей математической теории. К эвристическим методам относятся, например, метод поиска по симплексу (S^2 -метод), метод Нелдера-Мида (метод деформируемого многогранника), метод Хука-Дживса.

К теоретическим методам нулевого порядка можно отнести, например, метод покоординатного спуска и его различные модификации, метод сопряженных направлений Пауэлла и др.

К числу положительных свойств методов прямого поиска следует отнести относительную простоту вычислительных процедур, легкую машинную реализацию. С другой стороны, реализация методов нулевого порядка требует более значительных временных затрат по сравнению с методами высших порядков.

Хотя в некоторых литературных источниках рассматриваемый ниже метод называют симплекс-методом, более правильно симплекс-методом называть алгоритм решения оптимизационной задачи линейного программирования путём перебора вершин выпуклого многогранника в многомерном пространстве. Вариантом рассматриваемого метода является метод деформируемого многогранника, или метод Нелдера-Мида.

Метод оптимизации с использованием симплексов, первоначально разработанный Спендли, Хекстом и Химсвортом, используется на стадии восхождения по поверхности отклика [4].

Симплексом называется правильный многогранник, имеющий $k+1$ вершину, где k — число факторов, влияющих на процесс. Так, если $k = 1$, то симплексом является отрезок прямой, при $k = 2$ — правильный треугольник, при $k = 3$ — тетраэдр и т. д.

Метод последовательного симплекс-планирования состоит в следующем: начиная восхождение, планируют исходную серию опытов так, чтобы точки, соответствующие условиям проведения этих опытов, образовывали правильный симплекс в многомерном факторном пространстве.

Условия первых опытов выбираются из тех значений факторов, которые соответствуют наиболее благоприятным из известных технологических режимов процесса. Проводят первую серию опытов (рис. 3.2,

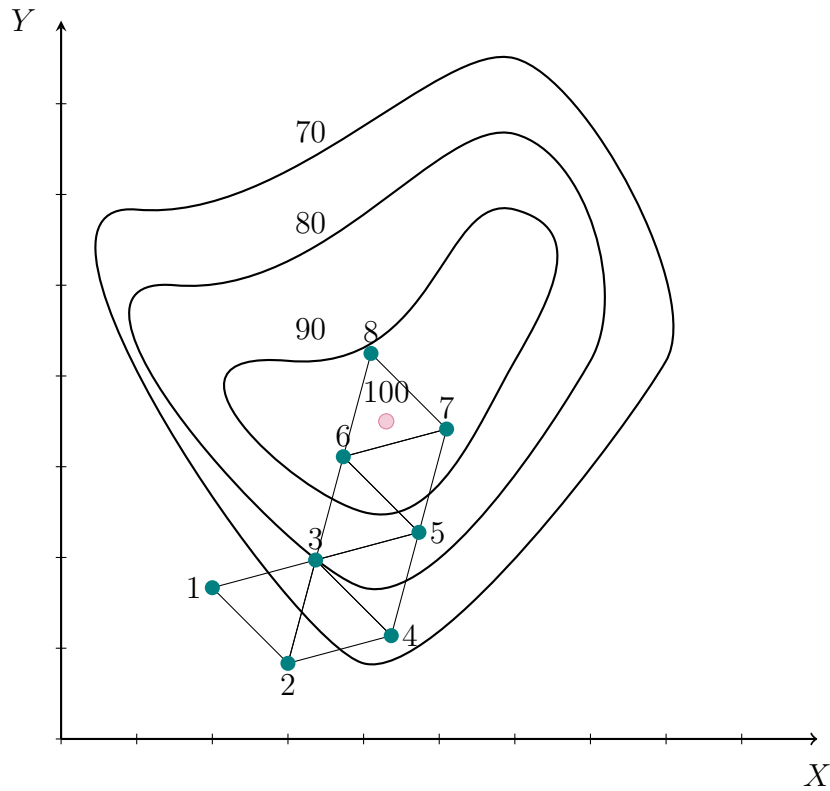


Рис. 3.2. Нахождение оптимума с применением симплексов

точки 1, 2, 3), выявляют точку (опыт), которая дала наихудший результат (сравнивая точки 1, 2 и 3 значения выходного параметра), в данном случае это точка 1. Эту «плохую» точку заменяют новой точкой 4, представляющей собой зеркальное отображение относительно противоположной грани симплекса, соединяющей точки 2 и 3.

В новой точке (опыт 4) проводят эксперимент. Далее сравнивают между собой результаты опытов в вершинах нового симплекса (2, 3, 4), отбрасывают самый «неудачный» (точка 2) и переносят эту вершину симплекса в точку 5. Получают новый симплекс (3, 4, 5) и т. д. Эта процедура повторяется до тех пор, пока не будет достигнут оптимум.

Вершины (условия опытов) исходного симплекса задаются при помощи специальной таблицы (табл. 3.1).

Условия каждого нового опыта в отраженной точке рассчитываются по формуле

$$x_i^{k+2} = 2x_i^m - x_i^{bad}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.2)$$

где x_i^{bad} — значение i -го фактора в наихудшей точке (опыте) предыдущего симплекса; x_i^m — координаты середины противоположной грани,

которые находятся как

$$x_i^m = \frac{\sum_{j=1}^{k+1} x_{ij}}{k}. \quad (3.3)$$

В общем виде, координата новой точки многомерного симплекса

$$x_i^{k+2} = \frac{2}{k} \sum_{j=1}^k x_{j-1} - x_i^{bad},$$

где под знаком суммы стоит сумма координат остающихся точек.

Прежде чем начать движение по поверхности отклика, необходимо определить условия опытов в исходном симплексе. Для вычисления этих значений пользуются матрицей опытов исходного симплекса в кодированных переменных (см. табл. 3.1).

Таблица 3.1

Коэффициенты матрицы исходного симплекса

N	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
1	0.5	0.289	0.204	0.158	0.129	0.109
2	-0.5	0.289	0.204	0.158	0.129	0.109
3	0	-0.578	0.204	0.158	0.129	0.109
4	0	0	-0.612	0.158	0.129	0.109
5	0	0	0	-0.632	0.129	0.109
6	0	0	0	0	-0.645	0.109
7	0	0	0	0	0	-0.654

Приступая к оптимизации, необходимо при помощи таблицы рассчитать матрицу исходной серии опытов в натуральных единицах по следующим формулам:

$$X_i = \frac{x_i - x_i^0}{\Delta x_i}; \quad x_i = x_i^0 + \Delta x_i X_i, \quad (3.4)$$

где X_i — кодированные значения из таблицы.

При шаговом восхождении по поверхности возможны следующие случаи:

1. В результате отображения некоторой наихудшей точки симплекса в новом симплексе отраженная точка тоже оказалась наихудшей. В этом случае следует вернуться в предыдущий симплекс и двигаться из него, отбросив точку, показавшую второе наихудшее значение y .

2. Симплекс вращается вокруг некоторой точки, отвечающей наибольшему значению y . После проведения $n + 1$ опыта необходимо прекратить движение и повторить точку (опыт), вокруг которой вращались. Если значение в этой точке подтверждается, то, следовательно, достигнута область оптимума.

Пример 6. При исследовании процесса механического обезвоживания осадка, выгруженного из реактора, была поставлена задача: получить осадок влажностью $W = 60 \%$, т. е. достичь минимума экспериментальной функции y .

Факторами, влияющими на удаление влаги, являются:

x_1 — удельная нагрузка фильтра (г), кг/м²;

x_2 — продолжительность отжатия (τ), с;

x_3 — давление прессования (р), МПа;

x_4 — температура (Т), °С.

Решение. Сформируем (для $n = 4$) условия опытов и шаги варьирования.

	x_1	x_2	x_3	x_4
x_i^0	0.3	60	1.2	60
Δx_i	0.2	30	0.8	30
Верхний уровень	0.5	90	2.0	90
Нижний уровень	0.1	30	0.4	30

Количество факторов $n = 4$, следовательно, количество опытов в исходном симплексе $n + 1 = 5$.

Для расчета условий опытов в исходном симплексе используем формулу кодирования (2.5) и матрицу исходного симплекса в кодах.

I. Значение первого фактора в пяти опытах:

$$x_1^1 = 0.3 + 0.2 \cdot 0.5 = 0.4;$$

$$x_1^2 = 0.3 + 0.2 \cdot (-0.5) = 0.2;$$

$$x_1^3 = 0.3 + 0.2 \cdot 0 = 0.3;$$

$$x_1^4 = 0.3 + 0.2 \cdot 0 = 0.3;$$

$$x_1^5 = 0.3 + 0.2 \cdot 0 = 0.3.$$

II. Значение второго фактора в пяти опытах:

$$x_2^1 = 60 + 30 \cdot 0.289 = 68.7;$$

$$x_2^2 = 60 + 30 \cdot 0.289 = 68.7;$$

$$x_2^3 = 60 - 30 \cdot 0.578 = 42.7;$$

$$x_2^4 = 60 + 30 \cdot 0 = 60;$$

$$x_2^5 = 60 + 30 \cdot 0 = 60.$$

III. Значение третьего фактора в пяти опытах:

$$x_3^1 = 1.2 + 0.8 \cdot 0.204 = 1.36;$$

$$x_3^2 = 1.2 + 0.8 \cdot 0.204 = 1.36;$$

$$x_3^3 = 1.2 + 0.8 \cdot 0.204 = 1.36;$$

$$x_3^4 = 1.2 - 0.8 \cdot 0.612 = 0.71;$$

$$x_3^5 = 1.2 + 0.8 \cdot 0 = 1.2.$$

IV. Значение четвертого фактора в 5 опытах:

$$x_4^1 = 60 + 30 \cdot 0.158 = 64.7;$$

$$x_4^2 = 60 + 30 \cdot 0.158 = 64.7;$$

$$x_4^3 = 60 + 30 \cdot 0.158 = 64.7;$$

$$x_4^4 = 60 + 30 \cdot 0.158 = 64.7;$$

$$x_4^5 = 60 - 30 \cdot 0.632 = 41.0.$$

Начнем заполнять матрицу, вписывая значения факторов и результата (y_i , W, %), точки симплекса, в том числе худшую точку.

№	x_1	x_2	x_3	x_4	y_i	Точки симплекса	Худшая точка
1	0.4	68.7	1.36	64.7	64.85		
2	0.2	68.7	1.36	64.7	61.00		
3	0.3	42.7	1.36	64.7	67.15		
4	0.3	60.0	0.71	64.7	67.13		
5	0.3	60.0	1.2	41.0	66.35	1, 2, 3, 4, 5	3
6	0.3	86.2	0.96	52.9	63.23	1, 2, 4, 5, 6	4
7	0.3	81.8	1.72	46.9	66.50	1, 2, 5, 6, 7	7
8	0.3	92.7	1.5	73.6	61.35	1, 2, 5, 6, 8	5
9	0.3	76.3	0.87	81.1	64.00	1, 2, 6, 8, 9	1
10	0.15	93.3	0.98	61.4	62.50	2, 6, 8, 9, 10	9
11	0.176	94.1	1.53	50.2	61.90	2, 6, 8, 10, 11	6
12	0.12	88.2	1.73	77.1	59.70	2, 8, 10, 11, 12	

После расчета условий опытов в исходном симплексе реализуют пять опытов (4 + 1). Определяют наихудшую точку (3), и находят ее зеркальное отображение. Рассчитывают координаты отображенной точки по формулам (3.2), (3.3). Для этого суммируют значения x_i , кроме значений в наихудшей точке:

$$\begin{aligned}x_1^c &= \frac{0.4 + 0.2 + 0.3 + 0.3}{4} = 0.3; \\x_2^c &= \frac{68.7 + 68.7 + 60 + 60}{4} = 64.39; \\x_3^c &= \frac{1.36 + 1.36 + 0.72 + 1.2}{4} = 1.16; \\x_4^c &= \frac{64.7 + 64.7 + 64.7 + 41.0}{4} = 58.8.\end{aligned}$$

Координаты (условия) 6-й точки симплекса:

$$\begin{aligned}x_1^6 &= 2 \cdot 0.3 - 0.3 = 0.3; \\x_2^6 &= 2 \cdot 64.39 - 42.6 = 86.2; \\x_3^6 &= 2 \cdot 1.16 - 1.36 = 0.96; \\x_4^6 &= 2 \cdot 58.8 - 64.7 = 52.9.\end{aligned}$$

Записывают условия шестого опыта в матрицу эксперимента. Проводят опыт в точке 6. В симплексе (1, 2, 4, 5, 6) выбирают наихудшую точку, это точка 4. Ее также зеркально отображают. Подобную процедуру повторяют до достижения оптимального результата (точка 12).

Методы симплекс-планирования особенно эффективны в производственных условиях. Их применение дает следующие преимущества:

- В процессе исследования на любом этапе можно подключить еще одну переменную, влияние которой ранее не было обнаружено.
- Если существуют какие-то ограничения на величину факторов, то движение может осуществляться вдоль границ.
- Не требуется никаких статистических вычислений.
- При использовании симплекс-метода дублировать опыты не обязательно, поскольку ошибка в отдельном опыте может только несколько замедлить оптимизацию и будет исправлена на следующих этапах.
- Метод можно применить при проведении не только факторного, но и численного эксперимента.

- Этот метод используется для оптимизации даже в тех случаях, когда отсутствует критерий оптимизации или этих критериев несколько.
- Метод обеспечивает большее быстроедействие при значительной точности и большую точность при значительном быстроедействии.

Определённые трудности, встречающиеся при использовании этого метода, а именно: отсутствие ускорения поиска в «хорошем направлении» (движение к оптимуму происходит «петлями» или «зигзагами»), возможность «проскочить» оптимум в том случае, если размеры симплекса слишком велики (при поиске на искривлённых «оврагах» и «хребтах»), «ложное срабатывание» (невозможность поиска нескольких оптимумов), привели к необходимости модификаций алгоритма.

В методе ускоренного симплекс-планирования во избежание петель траектории можно отбрасывать не одну, а несколько точек при использовании k -мерного симплекса, но только в том случае, если значения отбрасываемых точек близки между собой и значительно отличаются от значения в лучшей точке. В этом случае координата новой точки

$$X_i^{k+2} = \frac{2}{k - (p - 1)} \sum_{j=1}^{k-(p-1)} X_{ij_{\text{ост}}} - X_{i_{\text{отбр}}},$$

где k — число факторов; p — число отбрасываемых точек; j — номер оставляемой точки; $X_{i_{\text{отбр}}}$ — координаты отбрасываемой точки.

При дискретном (целочисленном) симплекс-планировании все факторное пространство разделяют с помощью плоскостей, параллельных координатным плоскостям, на отдельные кубы или при многомерном пространстве на гиперкубы. Таким образом, факторы приобретают только целые значения, а опыты проводятся только в узлах решетки. Рассмотрим двухфакторный эксперимент. Сначала произвольно выбирают начальную точку А. Затем задают шаг вдоль оси X_1 и проводят опыт в точке В. Аналогично делают один шаг вдоль оси X_2 и проводят опыт в точке С. Тем самым получают результаты эксперимента в трех точках нерегулярного симплекса. В этом случае движение к оптимуму также происходит путем отбрасывания наихудшей точки. Движение будет происходить до тех пор, пока симплекс не будет вращаться вокруг одной точки, координаты которой и

будут приняты за точку оптимума. Кроме того, возможен случай, когда отбрасываются сразу две точки. Аналогично осуществляют поиск оптимума при трехфакторном эксперименте.

Рассмотрим подробнее еще одну модификацию симплекс-метода.

3.4. Метод Нелдера-Мида

Нелдер и Мид (1964 г.) предложили модификацию, в которой симплекс может изменять свою форму, поэтому такой метод называли поиском по деформируемому многограннику. Это простой, надежный и эффективный метод, позволяющий оптимизировать функции без использования градиентов.

Для деформирования используют, в основном, три операции: отражение (reflection); растяжение (expansion); сжатие (contract). Существует еще одна операция — сокращение (shrink).

Рассмотрим поиск максимума на примере функции двух переменных $f(x_1, x_2)$. Симплекс в этом случае будет представлять собой треугольник (не обязательно равносторонний).

Вначале выбираем три случайные точки (1, 2, 3) (рис. 3.3а) в области, которая по предварительным данным близка к оптимальной или представляет собой рабочий диапазон ХТП. В противном случае точка 1 выбирается случайным образом. Остальные точки (V_{i+1}) выбираются исходя из координат V_1 точки 1, на небольшом расстоянии вдоль направления каждого измерения:

$$V_{i+1} = V_i + h(V_1, i) \times U_i,$$

где U_i — единичный вектор; $h(V_1, i) = 0.05$, если коэффициент при U_i для V_1 не равен нулю, в ином случае $h(V_1, i) = 0.00025$.

Определяем значение функции $f(x_1, x_2)$ в точках 1, 2, 3, сортируя полученные значения по возрастанию. Таким образом, предположим, получаем двойное неравенство: $f(V_2) \leq f(V_1) \leq f(V_3)$. Мы ищем максимум функции, а следовательно, на данном шаге лучшей будет та точка, в которой значение функции максимально. Для удобства переобозначим точки следующим образом: **f** (*fine*) = V_2 , **g** (*good*) = V_1 , **b** (*bad*) = V_3 .

На следующем шаге находим середину отрезка, точками которого являются **g** и **f**. Поскольку координаты середины отрезка равны

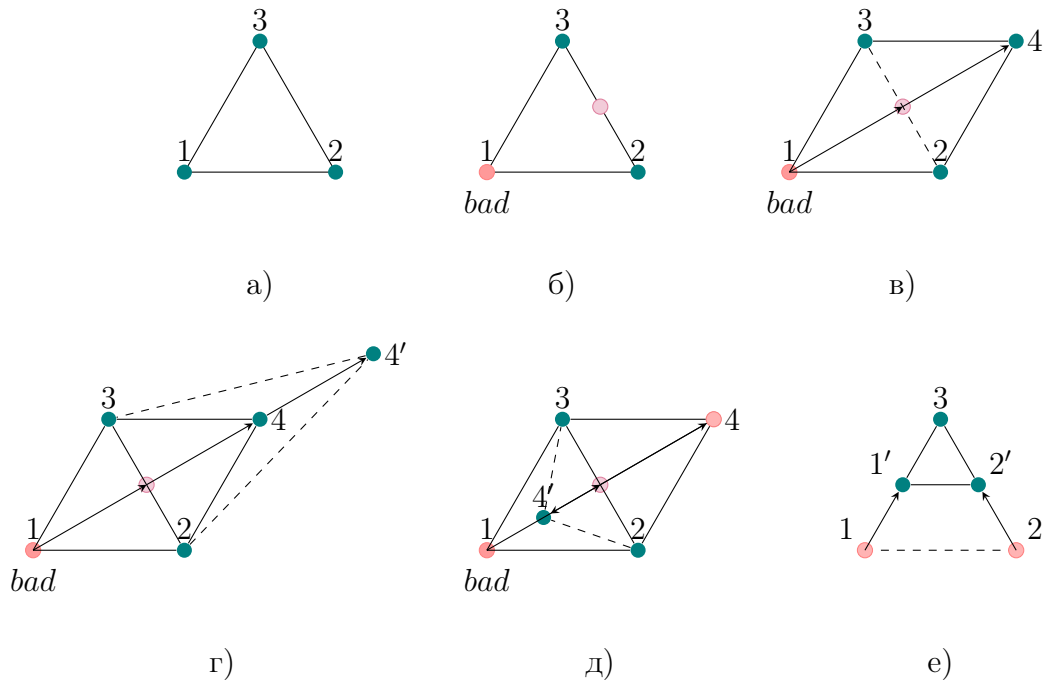


Рис. 3.3. Построение и деформация симплексов по методу Нелдера-Мида (для $n = 2$): а — исходный многогранник; б — середина грани; в — операция отражения; г — операция растяжения; д — операция сжатия; е — операция сокращения

полусумме координат его концов (см. (3.3)), получаем (рис. 3.3б):

$$V^m = \left(\frac{x_1 + x_2}{2}, \frac{y_1 + y_2}{2} \right).$$

Применяем операцию отражения и находим точку 4 следующим образом (рис. 3.3в):

$$V^r = V^m + \alpha(V^m - \mathbf{b}),$$

т.е. фактически отражаем точку $\mathbf{b}$ относительно V^m . Как правило, коэффициент α принимают равным 1. Проверяем полученную точку: если $f(V^r) > f(g)$, то новая точка может заменить собой точку $\mathbf{b}$.

Затем увеличиваем расстояние отражения в 2 раза (рис. 3.3г), проверяя значение функции в точке 4' (операция растяжения):

$$V^e = V^m + \gamma(V^r - V^m).$$

Обычно принимают $\gamma = 2$. Если в точке 4' значение функции $f(V^e)$ больше $f(V^r)$, то вновь найденную точку используют для построения нового симплекса вместо точки $\mathbf{b}$; если $f(V^e) < f(V^r)$, то для нового симплекса используют точку V^r .

Если значения функции для вновь найденных точек $(4, 4')$ не превышают значений для «старых» точек $(1, 2, 3)$, то применяют операцию сжатия (рис. 3.3д) для поиска точек внутри симплекса:

$$V^c = V^m + \beta(\mathbf{b} - V^m).$$

Коэффициент β принимают равным 0.5.

Операция сокращения (shrink) переопределяет весь симплекс (рис. 3.3е). Оставляют только «лучшую» точку $\mathbf{f}$, остальные по существу передвигают к ней:

$$V_j^s = V_j + \delta(\mathbf{f} - V_j)$$

Коэффициент δ принимают равным 0.5. Данная операция требует большего количества вычислений, поскольку необходимо заменять точки в симплексе. Следует отметить, что необходимость в операции сокращения возникает достаточно редко.

Выполнение алгоритма заканчивается, когда выполняется хотя бы одно из условий:

- было выполнено необходимое количество итераций;
- площадь симплекса достигла определенной величины;
- текущее лучшее решение достигло необходимой точности.

Для построения исходного симплекса и деформируемых многогранников можно использовать различные компьютерные программы, в том числе *MATHLAB*.

Преимуществами алгоритма Нелдера-Мида являются эффективность и простота. Этот метод оптимизирует целевую функцию довольно быстро и эффективно, дает заметное увеличение (уменьшение) значения функции уже при первых нескольких итерациях и достаточно быстро достигает необходимой точности (рис. 3.4). Как правило, алгоритм производит одно или два определения целевой функции на каждой итерации, если не учитывать сжатие, которое редко используется на практике. Следует отметить, что симплексный метод — локальный метод поиска экстремума. В силу отсутствия теории сходимости на практике метод может приводить к неверному ответу даже на гладких (непрерывно дифференцируемых) функциях. Также возможна ситуация, когда рабочий симплекс находится далеко от оптимальной точки, а алгоритм производит большое число итераций, при этом мало изменяя значения функции. Эвристический метод решения этой проблемы заключается в запуске алгоритма несколько

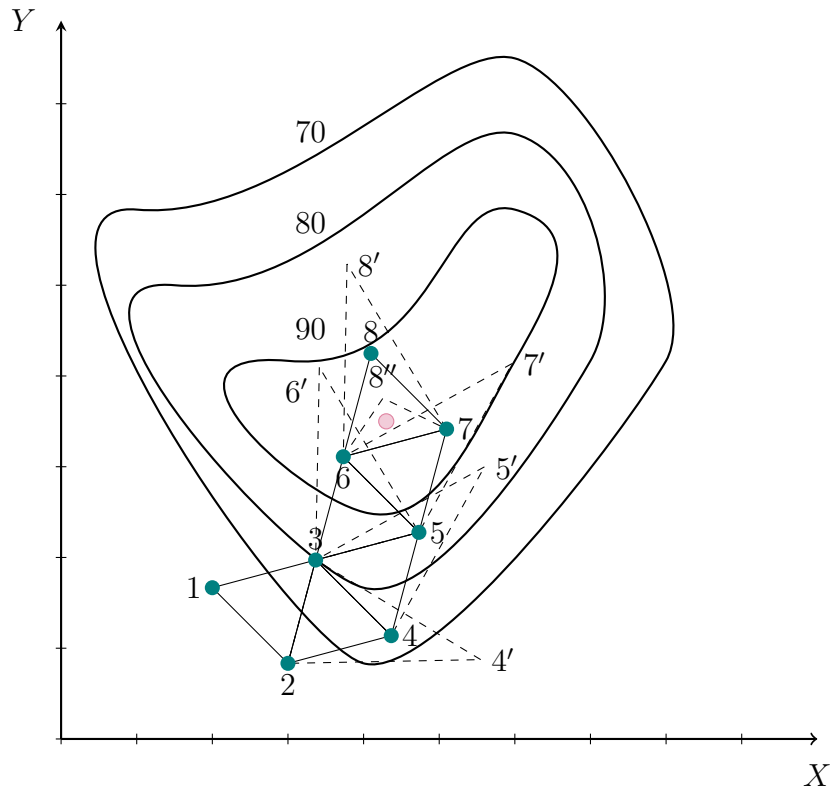


Рис. 3.4. Нахождение оптимума с применением метода Нелдера-Мида
раз (при различных случайных начальных симплексах) и ограниче-
нии числа итераций.

Пример 7. Требуется найти минимум функции

$$y = 1 - 0.5 \sin(x_1(x_1 - 0.6) + x_2(x_2 + 0.7)) - \lg(\cos x_1 + \cos^2 x_2).$$

Точность расчета функции 0.001.

Решение. Целевая функция зависит от двух параметров, следо-
вательно, многогранником будет треугольник. О поведении функции
нет предварительных сведений, поэтому исходные точки выбираем
произвольно: $V_1(0,0)$, $V_2(1,0)$, $V_3(0,1)$.

Вычислим значение функции в точках и обозначим как **f**, **g**, **b**:

$$f(V_1) = f(0,0) = 1.000 \quad (\mathbf{f}),$$

$$f(V_2) = f(1,0) = 1.073 \quad (\mathbf{b}),$$

$$f(V_3) = f(0,1) = 1.039 \quad (\mathbf{g}).$$

Находим середину отрезка **fg**:

$$V^m = \left(\frac{0+0}{2}, \frac{0+1}{2} \right) = (0, 0.5).$$

Находим точку V^r (операция отражения), принимая $\alpha = 1$:

$$V^r = V^m + \alpha(V^m - \mathbf{b}) = 2 \cdot V^m - \mathbf{b} = 2 \cdot (0, 0.5) - (1, 0) = (-1, 1).$$

Проверяем точку V^r : $f(V^r) = 1.881 > f(\mathbf{b})$, поэтому пробуем уменьшить отрезок (операция сжатия, коэффициент $\beta = 0.5$):

$$\begin{aligned} V^c &= V^m + \beta(\mathbf{b} - V^m) = (0, 0.5) + 0.5 \cdot ((1, 0) - (0, 0.5)) = \\ &= (0, 0.5) + (0.5, -0.25) = (0.5, 0.25). \end{aligned}$$

Проверяем значение функции: $f(V^c) = f(0.5, 0.25) = 0.991$.

Оказалось, что точка V^c «лучше» точки $\mathbf{b}$. Таким образом, получены новые вершины: $V_1(0,0)$, $V_2(0.5,0.25)$, $V_3(0,1)$.

Расчет продолжаем, пока не будет получена удовлетворительная сходимость результатов (Приложение 5). На 18-м шаге итерации получены следующие результаты:

$$f(V_1) = f(-0.726, 0.243) = 0.688 \quad (\mathbf{f}),$$

$$f(V_2) = f(-0.715, 0.274) = 0.688 \quad (\mathbf{b}),$$

$$f(V_3) = f(-0.707, 0.253) = 0.688 \quad (\mathbf{g}).$$

При других начальных параметрах (например, $V_1(0,0)$, $V_2(0.3,0)$, $V_3(0,0.3)$), значения параметров, соответствующих минимуму функции, могут быть другими (см. Приложение 5):

$$f(V_1) = f(-0.711, 0.277) = 0.688 \quad (\mathbf{f}),$$

$$f(V_2) = f(-0.697, 0.247) = 0.688 \quad (\mathbf{b}),$$

$$f(V_3) = f(-0.733, 0.224) = 0.688 \quad (\mathbf{g}).$$

Для нахождения параметров аналитической функции поиск может быть продолжен, для практических целей нахождения параметров области экстремума ХТП полученной точности может быть достаточно.

Вопросы для самоконтроля

- 1) В чем заключается суть симплексного метода планирования и оптимизации?
- 2) В чем преимущества симплекс-планирования?
- 3) Каким образом можно определить, что пришли в оптимальную область?
- 4) Опишите алгоритм поиска оптимума по методу «крутого восхождения».
- 5) Опишите алгоритм поиска оптимума по методу Нелдера-Мида.

4. Статистические модели оптимальной области

Полученная на основе ПФЭ или ДФЭ адекватная статистическая модель может быть использована для целей оптимизации ХТП.

Применяя один из методов оптимизации (например, метод крутого восхождения или метод Нелдера-Мида), можно достигнуть области оптимума исследуемого процесса (почти стационарной области). После того как достигнута область оптимума, возникает задача исследования поверхности отклика. Описать поверхность отклика оптимальной области линейным уравнением в большинстве случаев невозможно из-за большой кривизны поверхности. Для адекватного математического описания области, близкой к экстремуму, требуется многочлен более высокой степени, чаще всего применяют полиномы второго порядка.

Естественно, что при возрастании членов уравнения регрессии увеличивается количество необходимых опытов.

Согласно основным правилам обработки результатов эксперимента, чтобы получить второй порядок по фактору, он должен принимать в ходе эксперимента как минимум три различных значения. Следовательно, можно было бы предложить полный факторный эксперимент на трех уровнях, т.е. ПФЭ типа 3^n . Однако количество опытов в таком эксперименте при $n > 3$ явно не удовлетворяют требованиям о минимизации затрат, поэтому ПФЭ типа 3^n применяется сравнительно редко.

Число факторов	2	3	4	5	6
Число опытов	9	27	81	243	729
Число коэффициентов в уравнении	6	10	15	21	28

Дробный факторный эксперимент и симплекс-планирование также не нашли широкого применения.

Чаще всего используют центральное композиционное планирование эксперимента (ЦКП).

Центральными планы называют потому, что они симметричны относительно центра плана. Слово «композиционное» говорит о том, что план получается добавлением (композицией) определенных точек к плану полного или дробного факторного эксперимента первого порядка. Ядром таких планов являются: ПФЭ 2^n при $n < 5$ (n — число факторов), ДФЭ 2^{n-1} при $5 \leq n \leq 7$, ДФЭ 2^{n-2} при $n > 7$.

При планировании второго порядка нет такого плана, который удовлетворял бы всем условиям (2.1)-(2.3) и минимизации числа опытов. Поэтому существует несколько различных планов, в которых за основу принято какое-то одно свойство. Наиболее распространены центральные композиционные ротатабельные (ЦКРП) и ортогональные (ОЦКП) планы [2]. Наиболее простыми являются ортогональные планы (рис. 4.1а), они применяются тогда, когда достаточно точно известна область оптимума. Наиболее универсальны ротатабельные планы (рис. 4.1б). Их применение с наибольшей вероятностью обеспечивает получение адекватных моделей, хотя формулы для определения коэффициентов при использовании этих планов более сложны. Планы Хартли, представляющие собой разновидность ортогональных планов, хотя и с меньшей вероятностью обеспечивают получение адекватных моделей, используются в тех случаях, когда стремятся получить модель процесса при наименьших затратах времени и средств на проведение эксперимента.

4.1. Ортогональное планирование

Если линейное уравнение регрессии в результате статистического анализа оказалось неадекватным, то поступают следующим образом:

- добавляют к ядру плана (ПФЭ или ДФЭ) $2n$ «звездных» точек, расположенных на осях координат факторного пространства на расстоянии $\pm\alpha$ от центра плана (координаты «звездных» точек $(\pm\alpha, 0, \dots, 0)$, $(0, \pm\alpha, \dots, 0)$, ..., $(0, 0, \dots, \pm\alpha)$; величина α называется «звездное плечо»);
- увеличивают число экспериментов в центре плана n_0 : точки с координатами $(0, \dots, 0)$.

На рис. 4.1а приведена схема ОЦКП для $n = 2$. Точки 1, 2, 3, 4 — ПФЭ 2^2 ; точки 5, 6, 7, 8 — «звездные» точки с координатами $(\pm\alpha, 0)$ и $(0, \pm\alpha)$.

Количество опытов в матрице ОЦКП определяется как

$$\begin{aligned} N &= 2^n + 2 \cdot n + n_0, & \text{для } n \leq 5; \\ N &= 2^{n-1} + 2 \cdot n + n_0, & \text{для } n > 5. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Построим композиционный план для $n = 2$: количество опытов $N = 2^2 + 2 \cdot 2 + 1 = 9$.

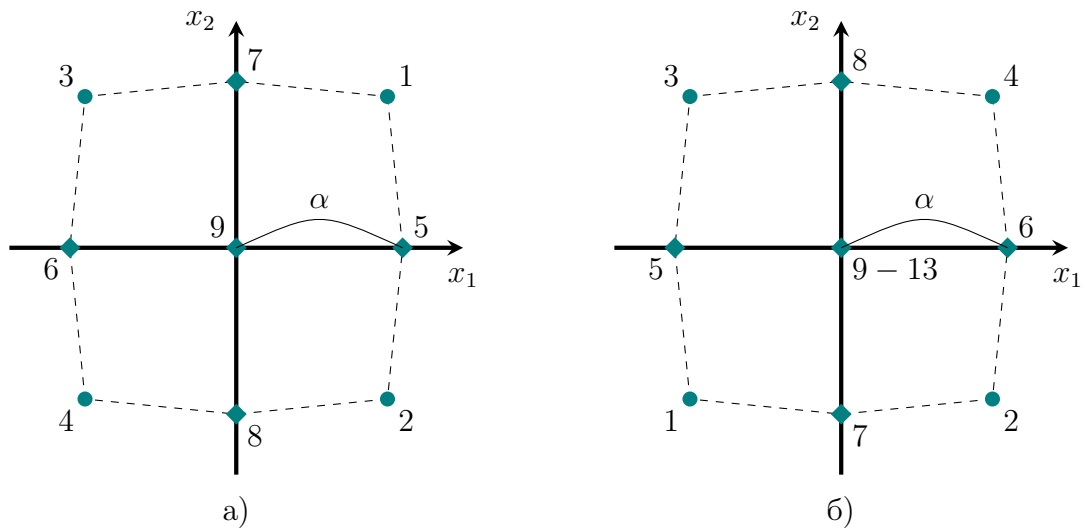


Рис. 4.1. Схема расположения опытных точек ОЦКП (а) и ЦКРП (б)

N	x_0	x_1	x_2	x_1^2	x_2^2
1	+	+	+	+	+
2	+	−	+	+	+
3	+	+	−	+	+
4	+	−	−	+	+
5	+	$+\alpha$	0	α^2	0
6	+	$-\alpha$	0	α^2	0
7	+	0	$+\alpha$	0	α^2
8	+	0	$-\alpha$	0	α^2
9	+	0	0	0	0

Эта матрица не ортогональная, ведь

$$\sum x_{0j}x_{ij}^2 \neq 0; \quad \sum x_{ij}^2x_{uj} \neq 0.$$

Ортогональность композиционных планов можно достичь выбором значения «звездного плеча» α .

Приведем значения α для ортогональных планов 2^n ($n_0 = 1$).

Таблица 4.1

Коэффициенты матрицы для ортогональных планов

n	2^2	2^3	2^4	2^5	2^6	2^7
α	1.0	1.215	1.414	1.547	1.724	1.885

Уравнение регрессии при ортогональном ЦКП в общем виде будет следующим (например, для двух факторов):

$$\hat{y} = b_0^* + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^* + b_{22}x_2^*. \quad (4.2)$$

Величины x_1^* и x_2^* введены для того, чтобы привести матрицу планирования к ортогональному виду, а коэффициенты b_i определялись независимо друг от друга:

$$x_{ji}^* = x_{ji}^2 - \frac{\sum_{j=1}^N x_{ji}^2}{N},$$

где j — номер опыта; i — номер фактора.

Для того чтобы получить уравнение регрессии в обычной форме

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2,$$

находят величину

$$b_0 = b_0^* - \frac{b_{11}}{N} \sum_{j=1}^N x_{j1}^2 - \frac{b_{22}}{N} \sum_{j=1}^N x_{j2}^2.$$

Приведем матрицу ортогонального ЦКП для $n = 2$, $\alpha = 1$.

N	x_1	x_2	x_1x_2	x_1^*	x_2^*	y
1	+1	+1	+1	0.33	0.33	
2	−1	+1	−1	0.33	0.33	
3	+1	−1	−1	0.33	0.33	
4	−1	−1	+1	0.33	0.33	
5	+1	0	0	0.33	−0.67	
6	−1	0	0	0.33	−0.67	
7	0	+1	0	−0.67	0.33	
8	0	−1	0	−0.67	0.33	
9	0	0	0	−0.67	−0.67	

Значения x_1^* и x_2^* рассчитываются по формуле (4.2). Например:

$$\begin{aligned} x_{11}^* &= 1 - \frac{6}{9} = 1 - 0.67 = 0.33; \\ x_{51}^* &= (-1)^2 - \frac{6}{9} = 1 - 0.67 = 0.33; \\ x_{52}^* &= 0 - \frac{6}{9} = 0 - 0.67 = -0.67. \end{aligned}$$

Для пересчета значений факторов в натуральные единицы пользуемся формулой пересчета

$$X_i = \frac{x_i - x_i^0}{\Delta x_i}; \quad x_i = X_i \cdot \Delta x_i + x_i^0.$$

Матрица, приведенная выше, ортогональная, но не ротатабельная, т. е.

$$\sum x_{0j}x_{ij}^2 = 0; \quad \sum x_{ij}^2x_{uj}^2 = 0,$$

где j — номер опыта.

Коэффициенты регрессии при ортогональном ЦКП рассчитывают по следующим формулам:

$$b_0^* = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j; \quad b_i = \frac{\sum_{j=1}^N x_{ij}y_j}{\sum_{j=1}^N (x_{ij})^2};$$

$$b_{iu} = \frac{\sum_{j=1}^N x_{ij}x_{uj}y_j}{\sum_{j=1}^N (x_{ij}x_{uj})^2}; \quad b_{ij} = \frac{\sum_{j=1}^N x_{ij}^*y_j}{\sum_{j=1}^N (x_{ij}^*)^2}.$$

Регрессионный анализ уравнения проводится по схеме, приведенной ранее. Для расчета дисперсий при определении коэффициентов регрессии используют выражения:

$$S_{b_0^*}^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2}{N}; \quad S_{b_0}^2 = S_{b_0^*}^2 + \frac{nS_{b_{ij}}}{N} \sum_{j=1}^N x_{ij}^2;$$

$$S_{b_i}^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2}{\sum_{j=1}^N (x_{ji})^2}; \quad S_{b_{iu}}^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2}{\sum_{j=1}^N (x_{ji}x_{ju})^2};$$

$$S_{b_{ii}}^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2}{\sum_{j=1}^N (x_{ji}^*)^2}; \quad t_i = \frac{|b_j|}{S_{b_j}},$$

где $i \neq u, i \neq 0$.

Коэффициент значим, если $t_j > t_T(q, f_2)$; f_2 — число степеней свободы $S_{\text{воспр}}^2$. Заключительный этап — проверка уравнения на адекватность по критерию Фишера.

Планы Хартли являются разновидностью ортогональных планов. Ядром плана здесь служит не полный, а дробный факторный эксперимент, в котором некоторые линейные эффекты коррелируют с линейными взаимодействиями. Кроме того, в дополнительных точках опыты ставятся в m повторностях, каждая из которых имеет права опыта.

4.2. Ротатабельное планирование

Бокс и Хантер предложили ротатабельные планы в 1957 г. [3]. Этот метод планирования эксперимента позволяет получить более точное математическое описание поверхности отклика по сравнению с ортогональным ЦКП. Это достигается за счет увеличения числа опытов в центре плана и специального выбора величины звездного плеча α . Слово «ротатабельное» говорит о том, что получающееся в результате уравнение регрессии имеет свойство ротатабельности — одинаковые ошибки предсказания результатов во всех направлениях. Данное свойство позволяет интерпретировать значения целевой функции при исследовании поверхности отклика и при оптимизации одинаково, независимо от направления (в ортогональных планах при проведении оптимизации необходимо учитывать неравномерность распределения ошибок в разных направлениях от центра плана). Таким образом, ЦКРП является наиболее удобным при практических применениях получающегося уравнения регрессии. От ортогональных планов оно отличается количеством точек в центре эксперимента и «звездных» точек (т. е. числом повторностей, имеющих права опыта), а также координатами последних. Структура плана (т. е. ядро планирования, центр эксперимента и «звездные» точки) остается без изменения.

План ЦКРП состоит из трех составных частей:

- 1) n_1 — ПФЭ или ДФЭ (при $k \leq 4$), т. е. $n_1 = 2^k$ или $n_1 = 2^{k-1}$;
- 2) $n_2 = 2 \cdot k$ — «звездные» точки;
- 3) n_0 — параллельные опыты в центре плана.

«Звездные точки» получаются следующим образом: все координаты, кроме одной, равны 0 (соответствуют центру плана), а одна координата равна $\pm\alpha$, где α — «плечо», вычисляемое на основании числа опытов ПФЭ или ДФЭ:

$$\alpha = n_1^{\frac{1}{4}}.$$

Все «звездные точки» лежат на поверхности сферы диаметром 2α (рис. 4.1б).

Количество опытов в центре плана определяется таким образом, чтобы план был как можно ближе к ортогональному (в ЦКРП условие ортогональности не выполняется). Все значения параметров плана ЦКРП приведены в табл. 4.2.

Таблица 4.2

Параметры планов ЦКРП

k	Ядро плана	n_1	n_2	n_0	$n_{\text{ЦКРП}}$	α
2	2^2	4	4	5	13	1.414
3	2^3	8	6	6	20	1.682
4	2^4	16	8	7	31	2.0
5	2^5	32	10	10	52	2.378
5	2^{5-1}	16	10	6	32	2.0
6	2^6	64	12	15	91	2.828
6	2^{6-1}	32	12	9	53	2.378
7	2^7	128	14	21	163	3.360
7	2^{7-1}	64	14	14	92	2.828

В качестве примера приведем матрицу центрального композиционного ротатабельного планирования в безразмерных переменных для $k = 3$ (Приложение 5). Значения, равные 0, соответствуют координатам центра планирования. Условные значения переменных переводятся в натуральные значения при заданных координатах центра планирования и интервалах варьирования аналогично рассмотренному ранее примеру (уравнение (2.5)).

После реализации плана на реальном объекте проводится обработка результатов в аналогичной последовательности, а именно, сначала рассчитываются коэффициенты регрессии, затем проверяются их значимость и адекватность полученного уравнения. Формулы для расчетов достаточно сложны (так как план ЦКРП отличается от ортогонального) и приводятся ниже (существуют специальные стандартные программы для выполнения всех расчетов).

Полученное в результате ЦКРП уравнение второго порядка в дальнейшем может использоваться как для предсказания результатов эксперимента при различных значениях факторов, так и для оптимизации процесса по специальным алгоритмам.

Матрица ротатбельного планирования второго порядка неортогональна:

$$\sum_{j=1}^N x_{0j} x_{ij}^2 \neq 0;$$

$$\sum_{j=1}^N x_{ij}^2 x_{uj}^2 \neq 0.$$

Оценка коэффициентов полинома второго порядка, проводимая по результатам эксперимента в соответствии с матрицей ЦКРП, не будет являться независимой. Но этот недостаток ЦКРП компенсируется более высокой точностью определения Y во всех направлениях на одинаковом расстоянии R от центра плана. При этом следует учитывать тот факт, что ЦКРП использует независимую оценку коэффициентов полинома при линейных его членах, проведенную по результатам предыдущего полного или дробного факторного эксперимента.

Формулы для расчета коэффициентов имеют вид:

$$b_0 = \frac{2A \cdot B}{N} \left[S_0 B(k+2) - C \sum_{i=1}^k S_{ii} \right];$$

$$b_i = \frac{C \cdot S_i}{N};$$

$$b_{ji} = \frac{C^2 S_{ij}}{B \cdot N}; \quad i \neq j;$$

$$b_{ii} = \frac{A \cdot C}{N} \left\{ S_{ii} C [B(k+2) - k] + C(1-B) \sum_{i=1}^k S_{ii} - 2B \cdot S_0 \right\},$$

где A , B , C — константы, которые определяются как

$$A = \frac{1}{2B [B(k+2) - k]};$$

$$B = \frac{N \cdot k}{(k+2)(N - n_0)};$$

$$C = \frac{N}{N - n_0},$$

где k — число факторов; N — общее число опытов ротатбельного ЦКП; n_0 — число опытов в центре плана.

По результатам эксперимента вычисляют суммы:

$$\begin{aligned}
 S_0 &= \sum_{j=1}^N y_j; \\
 S_i &= \sum_{j=1}^N x_{ji} y_j; \quad i = 1, \dots, n; \\
 S_{iu} &= \sum_{j=1}^N x_{ij} x_{ju} y_j; \quad i \neq u; \\
 S_{ii} &= \sum_{j=1}^N x_{ji}^2 y_j.
 \end{aligned}$$

Оценки дисперсий в определении коэффициентов вычисляются по следующим формулам:

$$\begin{aligned}
 S_{b_0}^2 &= \frac{2A \cdot B(k+2)}{N} S_{\text{воспр}}^2; \\
 S_{iu}^2 &= \frac{S_{\text{воспр}}^2}{N - n_0}; \quad i = 1, \dots, k; \\
 S_{b_{iu}}^2 &= \frac{C^2 S_{\text{воспр}}^2}{N}; \\
 S_{b_{ii}}^2 &= \frac{A \cdot C^2 \cdot S_{\text{воспр}}^2}{N} [B(k+1) - (k-1)].
 \end{aligned}$$

Коэффициенты значимы, если $|b_i| > S_{b_i} t$:

$$\begin{aligned}
 S_{\text{ост}}^2 &= \frac{\sum_{j=1}^N (y_j^{\text{exp}} - y_j^{\text{calc}})^2 - S_{\text{воспр}}^2 (n_0 - 1)}{N - \frac{(k+2)(k+1)}{2} - (n_0 - 1)}; \\
 f_{\text{ост}} &= N - \frac{(k+2)(k+1)}{2} - (n_0 - 1).
 \end{aligned}$$

Так же, как и при обработке результатов пассивного эксперимента, статистический анализ начинают с проверки адекватности уравнения приближенной регрессии результатам эксперимента. Адекватность уравнения проверяется по критерию Фишера:

$$F_{\text{расч}} = \frac{S_{\text{ад}}^2}{S_{\text{воспр}}^2}. \quad (4.3)$$

При этом сравниваются между собой дисперсия адекватности $S_{\text{ад}}^2$ и дисперсия воспроизводимости $S_{\text{воспр}}^2$. Так как адекватность модели нам заранее не известна, то остаточная дисперсия будет служить

одновременно оценкой влияния шумов и рассеяния, обусловленного неадекватностью модели. Оценку дисперсии аддитивной помехи на практике определяют по результатам параллельных опытов (повторных наблюдений при одинаковых значениях входных факторов). Эту оценку принято называть дисперсией воспроизводимости $S_{\text{воспр}}^2$. Дисперсия адекватности в зависимости (4.3) может быть определена следующим образом:

$$S_{\text{ад}}^2 = \frac{\sum S_{\text{ад}}^2}{f_{\text{ад}}} = \frac{\sum S_{\text{ост}} - \sum S_{\text{воспр}}}{f_{\text{ост}} - f_{\text{воспр}}} = \frac{\sum S_{\text{ост}} - \sum S_{\text{воспр}}}{N - k}, \quad (4.4)$$

где $\sum S_{\text{ад}}^2$ — сумма квадратов адекватности; $f_{\text{ад}}$ — число степеней свободы дисперсии адекватности; $\sum S_{\text{ост}}$ — остаточная сумма квадратов; $\sum S_{\text{воспр}}$ — сумма квадратов, связанная с дисперсией воспроизводимости; $f_{\text{ост}}$ — число степеней свободы остаточной дисперсии; $f_{\text{воспр}}$ — число степеней свободы дисперсии воспроизводимости; N — число опытов; k — число значимых коэффициентов в уравнении регрессии.

Вид расчётных зависимостей для оценок дисперсий, входящих в (4.3), существенно зависит от порядка проведения активного эксперимента [17]. Следует выделить следующие четыре случая.

Случай первый соответствует условиям эксперимента, когда в каждой ячейке матрицы планирования проведено неравное число параллельных опытов, то есть:

$$m_1 \neq m_2 \neq \dots \neq m_i \neq \dots \neq m_{n_0}.$$

Для данного, наиболее общего случая дисперсия адекватности может быть определена по зависимостям:

$$S_{\text{ад}}^2 = \frac{\sum S_{\text{ад}}^2}{f_{\text{ад}}}; \quad S_{\text{воспр}}^2 = \frac{\sum S_{\text{воспр}}^2}{f_{\text{воспр}}},$$

где

$$\begin{aligned} \sum S_{\text{ад}}^2 &= \sum S_{\text{ост}} - \sum S_{\text{воспр}}; \\ \sum S_{\text{ост}} &= \sum_{i=1}^N \sum_{u=1}^{m_i} (y_{i_u}^{\text{exp}} - \bar{y}_i)^2; \\ \sum S_{\text{воспр}} &= \sum_{i=1}^N \sum_{u=1}^{m_i} (y_{i_u}^{\text{exp}} - \bar{y}_i^{\text{exp}})^2; \\ \bar{y}_i^{\text{exp}} &= \frac{1}{m_i} \sum_{u=1}^{m_i} y_{i_u}^{\text{exp}}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f_{\text{ад}} &= f_{\text{ост}} - f_{\text{воспр}}; \\
f_{\text{ост}} &= \sum_{i=1}^N m_i - k; \\
f_{\text{воспр}} &= \sum_{i=1}^N (m_i - 1).
\end{aligned}$$

Второй случай соответствует условиям эксперимента, когда в каждой ячейке матрицы планирования проведено равное число параллельных опытов, то есть:

$$m_1 = m_2 = \dots = m_i = \dots = m_{n_0} = m.$$

Данное условие существенно упрощает расчёты, поэтому, проводя активный эксперимент, исследователь, как правило, стремится к его выполнению. В рассматриваемых условиях оценки дисперсий имеют вид:

$$\begin{aligned}
S_{\text{ад}}^2 &= \frac{m \cdot \sum_{i=1}^N (\bar{y}_i^{\text{exp}} - \hat{y}_i)^2}{N - k}; \\
S_{\text{воспр}}^2 &= \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{u=1}^m (y_{i_u}^{\text{exp}} - \bar{y}_i^{\text{exp}})^2}{N \cdot (m - 1)}.
\end{aligned}$$

Третий случай соответствует условиям, когда по какой-либо причине параллельные опыты в каждой ячейке матрицы планирования не были проведены. В данных условиях для определения оценок дисперсий целесообразно поставить дополнительную серию из m опытов в центре плана эксперимента (когда исследуемые входные факторы находятся на базовых уровнях). В этом случае:

$$\begin{aligned}
S_{\text{ад}}^2 &= S_{\text{ост}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i^{\text{exp}} - \hat{y}_j)^2}{N - k}; \\
S_{\text{воспр}}^2 &= \frac{\sum_{u=1}^m (y_u^0 - \bar{y}^0)^2}{m - 1},
\end{aligned}$$

$$\text{где } \bar{y}^0 = \frac{1}{m} \sum_{u=1}^m y_u^0.$$

Четвертый случай соответствует условиям, когда параллельные опыты не проводились и дополнительный эксперимент в центре планов по какой-либо причине поставить не удалось. В этом случае качество аппроксимации опытных данных, полученной уравнением приближенной регрессии, можно оценить, сравнив по критерию Фишера остаточную дисперсию $S_{\text{ост}}^2$ и дисперсию относительно среднего S_y^2 , то есть:

$$F_{\text{расч}} = \frac{S_y^2}{S_{\text{ост}}^2}; \quad S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i^{\text{exp}} - \bar{y}^{\text{exp}})^2}{N - 1};$$

$$(\bar{y}^{\text{exp}})^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i^{\text{exp}}; \quad S_{\text{ост}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i^{\text{exp}} - \bar{y}_i)^2}{N - k},$$

где $f_1 = N - 1$ — число степеней свободы дисперсии относительно среднего S_y^2 , $f_2 = N - k$ — число степеней свободы остаточной дисперсии $S_{\text{ост}}^2$.

Таким образом, рассчитав оценки дисперсий воспроизводимости $S_{\text{воспр}}^2$ и адекватности $S_{\text{ад}}^2$, вычисляют по формуле (4.3) расчетное значение критерия $F_{\text{расч}}$ и сравнивают его с табличным $F_{\text{табл}}(\alpha, f_1, f_2)$, определенным для уровня значимости α и чисел степеней свободы f_1 числителя и f_2 знаменателя в формуле (4.3).

Если выполняется условие $F_{\text{расч}} > F_{\text{табл}}(\alpha, f_1, f_2)$, то следует сделать вывод о неадекватности полученной модели и принять меры по ее совершенствованию (например, выбрать полином более высокого порядка или осуществить нелинейное преобразование факторов) с тем, чтобы в конечном итоге получить модель, адекватно отражающую свойства исследуемой системы. В ином случае нет оснований сомневаться в адекватности полученного уравнения приближенной регрессии результатам эксперимента.

При проверке адекватности уравнения приближенной регрессии по зависимости (4.2) следует помнить, что критериальное отношение показывает, во сколько раз уменьшается рассеяние относительно полученного уравнения регрессии по сравнению с рассеянием относительно среднего. Поэтому, чем больше значение $F_{\text{расч}}$, полученное по формуле (4.2), будет превышать табличное $F_{\text{табл}}(\alpha, f_1, f_2)$, тем эффективнее будет уравнение приближенной регрессии.

Получив адекватное уравнение приближенной регрессии, так же как и при обработке результатов пассивного эксперимента, проверяют значимость оценок коэффициентов регрессии по t -критерию Стьюдента. Следует помнить, что для активного эксперимента все коэффициенты уравнения регрессии определяются с одинаковой точностью. Для различных условий проведения эксперимента оценку дисперсии воспроизводимости рассчитывают по уравнениям (4.2) – (4.5). При обработке результатов активного эксперимента удаление незначимых коэффициентов никак не отражается на оставшихся, поэтому никаких дополнительных пересчетов делать не обязательно.

После исключения всех незначимых коэффициентов вновь проверяют адекватность уравнения регрессии и, при положительном результате, приступают к его интерпретации.

Если проверить адекватность полученного уравнения невозможно (например, число вариантов варьирования ПФЭ равно числу оценок коэффициентов в уравнении регрессии), следует проверить значимость коэффициентов уравнения регрессии. Отбросив незначимые коэффициенты, можно получить дополнительные степени свободы для проверки адекватности. Если все оценки коэффициентов регрессии окажутся значимыми, то стоит либо провести эксперимент с уменьшенными интервалами варьирования входных факторов, либо выбрать для построения модели полином более высокой степени.

Проводя статистический анализ и получив адекватное уравнение приближенной регрессии, приступают к его интерпретации. Под интерпретацией обычно понимают перевод полученной математической модели (уравнения регрессии) на язык экспериментатора.

Сначала устанавливают, в какой мере каждый из входных исследуемых факторов системы влияет на выходной параметр (параметр оптимизации). Модуль коэффициента регрессии – это количественная мера данного влияния. О характере влияния входных факторов говорят знаки коэффициентов регрессии. Знак «+» свидетельствует о том, что с увеличением значения данного входного фактора будет расти и величина выходного параметра системы; при знаке «–» увеличение значения данного фактора приведет к уменьшению выходного параметра.

Проведя анализ коэффициентов при всех линейных эффектах, переходят к интерпретации коэффициентов при парных взаимодействиях факторов. Физически взаимодействие между факторами означает, что изменение выходного параметра Y на различных уровнях одного входного фактора не одинаково для всех уровней другого входного фактора. Характер влияния парных взаимодействий на выходной параметр системы также определяется знаком соответствующего коэффициента регрессии.

При этом, если знак «+», то одновременное увеличение или уменьшение данных факторов вызывает увеличение выходного параметра. Для его уменьшения необходимо одновременно изменять величины факторов в различных направлениях. Если эффект взаимодействия имеет знак «-», то одновременное увеличение или уменьшение факторов вызывает уменьшение выходного параметра. Для его увеличения необходимо одновременно изменять величины данных факторов в разных направлениях.

Интерпретацию коэффициентов при взаимодействиях более высокого порядка, как правило, не проводят из-за сложности понимания их физической сущности.

После интерпретации результатов моделирования переходят к принятию решений о дальнейших исследованиях. Если линейная модель адекватна и коэффициенты регрессии значимы, то можно либо закончить исследование, либо продолжить с целью подробного исследования области оптимума. Если линейная модель адекватна, а большая часть коэффициентов уравнения регрессии незначима, то можно либо изменить интервал варьирования факторов, либо отсеять незначимые факторы, либо увеличить число параллельных опытов, а если область оптимума близка, то можно закончить исследования. Необходимо подчеркнуть, что изменение интервалов варьирования приводит к изменению коэффициентов регрессии. Абсолютные величины коэффициентов регрессии увеличиваются с увеличением интервалов. Не изменяются лишь знаки коэффициентов, однако и они могут измениться на противоположные, если при движении мы «перешагнули» экстремальную точку.

Если линейная модель адекватна, а все коэффициенты уравнения регрессии незначимы, кроме b_0 , необходимо либо увеличить точность эксперимента, либо расширить интервалы варьирования. Если

область оптимума близка, то можно закончить исследование. Если линейная модель неадекватна, это значит, что не удастся аппроксимировать поверхность отклика плоскостью. В этом случае изменяют (уменьшают) интервалы варьирования, выбирают другую точку в качестве базового уровня либо используют нелинейную модель. Если область оптимума близка, то можно закончить исследование.

Особый случай имеет место при использовании насыщенных планов (число степеней свободы равно нулю). При значимости всех коэффициентов (линейных и нелинейных) ничего нельзя сказать об адекватности или неадекватности модели, так как в этом случае невозможно рассчитать дисперсию адекватности. В этом случае при близости области оптимума можно закончить исследование, а в противном случае — продолжить.

Закончив интерпретацию уравнения регрессии и приняв решение об окончании исследований, целесообразно осуществить обратный переход от кодированных факторов к натуральным переменным. Следует отметить, что после осуществления обратного перехода изменятся величины и знаки коэффициентов уравнения приближенной регрессии и пропадет возможность интерпретации влияния факторов по величине и знакам данных коэффициентов. Однако появляется возможность исследования поведения выходного параметра в зависимости от натуральных величин входных факторов без проведения экспериментов с изучаемой системой.

При этом следует остановиться ещё на одной важной проблеме, которая связана с обработкой результатов активного компьютерного эксперимента, проведённого с помощью математической или имитационной модели исследуемой системы. Эта проблема состоит в определении пространства выводов о реальной системе, сделанных на основе данных модели, или насколько смело можно использовать полученные выводы и результаты.

Так как математическая или имитационная модель никогда не бывает тождественна реальной системе и не передаёт всех её свойств и особенностей, то и результаты, полученные при анализе модели, всегда носят для объекта приближенный характер. Их точность определяется степенью соответствия, адекватности модели и объекта. Поэтому, делая определённые выводы и давая практические рекомендации, мы должны постоянно помнить, что они с достаточной степенью

достоверны лишь в тех ограничениях, в которых была разработана наша математическая (имитационная) модель, и в тех интервалах варьирования входных факторов системы, в которых проводился вычислительный (имитационный) эксперимент.

После того, как получено уравнение регрессии второго порядка, адекватно описывающее почти стационарную область, его исследуют для выбора оптимальных условий технологического процесса. Полученное уравнение дает информацию о форме поверхности отклика.

Для изучения конфигурации поверхности отклика уравнение приводят к канонической форме (эллиптический параболоид, седло и т. д.) и исследуют на локальный экстремум.

Вопросы для самоконтроля

- 1) В каких случаях приступают к планированию второго порядка?
- 2) Назовите виды планов второго порядка.
- 3) В чем суть ортогонального планирования второго порядка?
- 4) Суть ротатабельных планов второго порядка.
- 5) Опишите действия после получения полинома второго порядка.

5. Задания для расчетно-графической работы

В результате исследования зависимости выхода канифоли (в процентном отношении от теоретического) от температуры дистилляции T (от 100 до 300 °С) и соотношения смоляных и жирных кислот в сыром талловом масле R (от 1.0 до 3.0) был получен набор экспериментальных данных (табл. 5.1). Требуется выполнить следующие задачи.

1. Определить вид зависимости целевой функции от одного из факторов при условии постоянства второго фактора (для каждого варианта указан соответствующий постоянный фактор, данные для изменяющегося фактора необходимо взять из табл. 5.1). При необходимости разбить на несколько монотонных функций. При использовании специализированных программ необходимо указать обоснование выбора той или иной зависимости. Рассчитать коэффициент корреляции.

2. Определить значения коэффициентов полинома, описывающего результаты полного факторного эксперимента 2^2 в условиях, описывающих актуальный технологический режим, с учетом того, что в каждой точке проведено шесть параллельных измерений. При проведении регрессионного анализа обратите внимание на насыщенность плана.

3. Найти условия технологического режима, обеспечивающие максимальный выход товарных продуктов (табл. 5.1), методами дискретного симплекс-планирования или Нелдера-Мида и методом крутого восхождения, используя в качестве исходных точек данные, соответствующие условию п.2. Пути построения деформируемых симплексов и крутого восхождения проиллюстрировать соответствующими таблицами. При необходимости недостающие данные вычислить интерполяцией.

Задача 1. 1) $R = const = 1.0$

2)		110	120
	1.0	0.301; 0.300; 0.303; 0.304; 0.302; 0.302	0.306; 0.303; 0.304; 0.305; 0.310; 0.308
	1.1	0.300; 0.299; 0.299; 0.302; 0.300; 0.300	0.316; 0.320; 0.317; 0.319; 0.318; 0.318

Задача 2. 1) $R = const = 1.2$

		120	130
2)	1.1	0.305; 0.306; 0.307; 0.306; 0.307; 0.305	0.332; 0.331; 0.332; 0.305; 0.310; 0.308
	1.2	0.319; 0.318; 0.318; 0.318; 0.318; 0.317	0.356; 0.356; 0.358; 0.357; 0.356; 0.357

Задача 3. 1) $R = const = 1.4$

		110	120
2)	1.2	0.306; 0.304; 0.306; 0.304; 0.304; 0.304	0.335; 0.335; 0.335; 0.335; 0.333; 0.333
	1.3	0.312; 0.312; 0.312; 0.310; 0.313; 0.311	0.352; 0.349; 0.349; 0.351; 0.348; 0.350

Задача 4. 1) $R = const = 1.6$

		120	130
2)	1.2	0.333; 0.335; 0.336; 0.332; 0.333; 0.335	0.383; 0.381; 0.381; 0.381; 0.382; 0.381
	1.3	0.351; 0.350; 0.351; 0.349; 0.351; 0.348	0.406; 0.406; 0.406; 0.404; 0.405; 0.404

Задача 5. 1) $R = const = 1.8$

		110	120
2)	1.4	0.317; 0.318; 0.318; 0.322; 0.322; 0.322	0.364; 0.366; 0.364; 0.366; 0.362; 0.362
	1.5	0.325; 0.326; 0.327; 0.328; 0.328; 0.324	0.374; 0.374; 0.372; 0.372; 0.376; 0.375

Задача 6. 1) $R = const = 2.0$

		120	130
2)	1.4	0.366; 0.366; 0.362; 0.363; 0.363; 0.365	0.424; 0.423; 0.423; 0.425; 0.424; 0.427
	1.5	0.372; 0.374; 0.375; 0.373; 0.376; 0.373	0.436; 0.441; 0.436; 0.440; 0.439; 0.438

Задача 7. 1) $R = const = 2.2$

		110	120
2)	1.5	0.325; 0.326; 0.326; 0.324; 0.327; 0.326	0.376; 0.373; 0.374; 0.375; 0.372; 0.373
	1.6	0.326; 0.327; 0.328; 0.331; 0.332; 0.328	0.382; 0.381; 0.378; 0.378; 0.381; 0.376

Задача 8. 1) $R = const = 2.6$

		120	130
2)	1.6	0.376; 0.374; 0.376; 0.375; 0.371; 0.373	0.437; 0.441; 0.436; 0.439; 0.439; 0.436
	1.7	0.380; 0.379; 0.376; 0.380; 0.381; 0.376	0.442; 0.444; 0.445; 0.445; 0.446; 0.448

Задача 9. 1) $R = const = 2.8$

		110	120
2)	1.6	0.330; 0.327; 0.331; 0.329; 0.327; 0.332	0.380; 0.377; 0.381; 0.380; 0.380; 0.378
	1.7	0.328; 0.331; 0.329; 0.327; 0.330; 0.328	0.379; 0.376; 0.377; 0.378; 0.379; 0.382

Задача 10. 1) $R = const = 3.0$

		120	130
2)	1.7	0.381; 0.377; 0.380; 0.376; 0.380; 0.381	0.443; 0.447; 0.443; 0.445; 0.446; 0.448
	1.8	0.376; 0.374; 0.374; 0.371; 0.376; 0.374	0.437; 0.440; 0.436; 0.439; 0.440; 0.438

Задача 11. 1) $R = const = 1.1$

		110	120
2)	1.8	0.326; 0.324; 0.329; 0.326; 0.324; 0.324	0.376; 0.376; 0.373; 0.375; 0.373; 0.372
	1.9	0.318; 0.322; 0.322; 0.319; 0.321; 0.320	0.366; 0.363; 0.361; 0.366; 0.362; 0.363

Задача 12. 1) $R = \text{const} = 1.3$

		120	130
2)	1.8	0.375; 0.374; 0.374; 0.372; 0.373; 0.374	0.436; 0.438; 0.438; 0.435; 0.441; 0.437
	1.9	0.364; 0.362; 0.363; 0.366; 0.366; 0.362	0.426; 0.423; 0.426; 0.422; 0.424; 0.423

Задача 13. 1) $R = \text{const} = 1.5$

		110	120
2)	1.9	0.319; 0.322; 0.320; 0.322; 0.321; 0.318	0.365; 0.362; 0.361; 0.366; 0.364; 0.367
	2.0	0.314; 0.312; 0.310; 0.311; 0.310; 0.313	0.348; 0.348; 0.349; 0.350; 0.353; 0.351

Задача 14. 1) $R = \text{const} = 1.7$

		120	130
2)	1.9	0.365; 0.364; 0.361; 0.366; 0.367; 0.362	0.425; 0.424; 0.427; 0.425; 0.423; 0.422
	2.0	0.351; 0.347; 0.347; 0.352; 0.353; 0.350	0.403; 0.403; 0.406; 0.408; 0.404; 0.403

Задача 15. 1) $R = \text{const} = 1.9$

		110	120
2)	2.0	0.312; 0.313; 0.312; 0.315; 0.311; 0.310	0.349; 0.349; 0.348; 0.351; 0.352; 0.350
	2.1	0.303; 0.302; 0.307; 0.307; 0.306; 0.306	0.332; 0.333; 0.335; 0.337; 0.333; 0.334

Задача 16. 1) $R = \text{const} = 2.1$

		120	130
2)	2.0	0.352; 0.351; 0.350; 0.347; 0.350; 0.348	0.403; 0.407; 0.408; 0.406; 0.402; 0.403
	2.1	0.335; 0.331; 0.334; 0.333; 0.335; 0.333	0.379; 0.385; 0.382; 0.381; 0.385; 0.382

Задача 17. 1) $R = \text{const} = 2.3$

		140	150
2)	2.5	0.314; 0.319; 0.316; 0.315; 0.318; 0.316	0.343; 0.345; 0.344; 0.343; 0.342; 0.345
	2.6	0.301; 0.298; 0.303; 0.301; 0.300; 0.304	0.316; 0.313; 0.315; 0.315; 0.313; 0.314

Задача 18. 1) $R = \text{const} = 2.5$

		150	160
2)	2.5	0.344; 0.344; 0.343; 0.342; 0.342; 0.346	0.379; 0.377; 0.382; 0.380; 0.380; 0.376
	2.6	0.316; 0.313; 0.315; 0.311; 0.313; 0.314	0.335; 0.338; 0.336; 0.337; 0.341; 0.341

Задача 19. 1) $R = \text{const} = 2.7$

		160	170
2)	2.5	0.382; 0.380; 0.377; 0.380; 0.377; 0.377	0.417; 0.416; 0.417; 0.419; 0.417; 0.419
	2.6	0.335; 0.340; 0.338; 0.339; 0.338; 0.340	0.367; 0.368; 0.364; 0.368; 0.366; 0.364

Задача 20. 1) $R = \text{const} = 2.9$

		160	170
2)	2.7	0.308; 0.309; 0.312; 0.310; 0.307; 0.307	0.327; 0.329; 0.323; 0.323; 0.328; 0.325
	2.8	0.299; 0.303; 0.298; 0.297; 0.302; 0.301	0.304; 0.301; 0.304; 0.300; 0.302; 0.305

Задача 21. 1) $T = \text{const} = 120$

		170	180
2)	2.7	0.329; 0.324; 0.323; 0.326; 0.325; 0.326	0.348; 0.344; 0.343; 0.345; 0.348; 0.349
	2.8	0.302; 0.305; 0.302; 0.303; 0.303; 0.302	0.311; 0.311; 0.313; 0.310; 0.308; 0.310

Задача 22. 1) $T = \text{const} = 130$

		180	190
2)	2.7	0.347; 0.347; 0.344; 0.346; 0.345; 0.345	0.367; 0.366; 0.366; 0.369; 0.363; 0.367
	2.8	0.313; 0.308; 0.310; 0.309; 0.313; 0.314	0.323; 0.323; 0.320; 0.321; 0.320; 0.322

Задача 23. 1) $T = \text{const} = 140$

		200	210
2)	2.7	0.383; 0.383; 0.385; 0.385; 0.385; 0.386	0.401; 0.396; 0.397; 0.399; 0.397; 0.401
	2.8	0.332; 0.336; 0.333; 0.336; 0.335; 0.334	0.346; 0.344; 0.344; 0.341; 0.346; 0.344

Задача 24. 1) $T = \text{const} = 150$

		220	230
2)	2.7	0.410; 0.408; 0.408; 0.407; 0.406; 0.410	0.412; 0.412; 0.412; 0.410; 0.413; 0.409
	2.8	0.348; 0.348; 0.352; 0.350; 0.350; 0.352	0.354; 0.353; 0.351; 0.350; 0.350; 0.353

Задача 25. 1) $T = \text{const} = 160$

		240	250
2)	2.7	0.406; 0.409; 0.408; 0.407; 0.409; 0.406	0.402; 0.398; 0.398; 0.397; 0.397; 0.401
	2.8	0.350; 0.352; 0.352; 0.352; 0.347; 0.348	0.345; 0.344; 0.346; 0.343; 0.345; 0.342

Задача 26. 1) $T = \text{const} = 170$

		180	190
2)	2.8	0.310; 0.309; 0.313; 0.309; 0.311; 0.313	0.325; 0.321; 0.322; 0.321; 0.323; 0.320
	2.9	0.301; 0.299; 0.300; 0.302; 0.301; 0.297	0.299; 0.303; 0.300; 0.301; 0.301; 0.299

Задача 27. 1) $T = \text{const} = 180$

		210	220
2)	2.8	0.333; 0.333; 0.333; 0.334; 0.337; 0.335	0.342; 0.344; 0.346; 0.343; 0.345; 0.345
	2.9	0.304; 0.302; 0.302; 0.304; 0.306; 0.304	0.306; 0.307; 0.306; 0.310; 0.308; 0.310

Задача 28. 1) $T = \text{const} = 190$

		220	230
2)	2.8	0.351; 0.348; 0.349; 0.350; 0.352; 0.348	0.351; 0.353; 0.349; 0.353; 0.354; 0.351
	2.9	0.312; 0.313; 0.309; 0.312; 0.308; 0.309	0.312; 0.313; 0.314; 0.313; 0.312; 0.310

Задача 29. 1) $T = \text{const} = 200$

		250	260
2)	2.8	0.342; 0.344; 0.345; 0.345; 0.345; 0.344	0.336; 0.336; 0.333; 0.333; 0.336; 0.332
	2.9	0.307; 0.309; 0.310; 0.306; 0.308; 0.310	0.305; 0.305; 0.302; 0.305; 0.301; 0.305

Задача 30. 1) $T = \text{const} = 210$

		270	280
2)	2.8	0.325; 0.324; 0.321; 0.321; 0.323; 0.320	0.314; 0.309; 0.311; 0.310; 0.308; 0.313
	2.9	0.302; 0.302; 0.299; 0.299; 0.300; 0.302	0.301; 0.300; 0.299; 0.298; 0.301; 0.301

Таблица 5.1

Зависимость выхода канифоли от температуры дистилляции T и соотношения смоляных и жирных кислот в сыром талловом масле R

R	T																			
	100	110	120	130	140	150	160	170	180	190	200	210	220	230	240	250	260	270	280	300
1.0	0.327	0.302	0.306	0.332	0.374	0.424	0.478	0.530	0.578	0.619	0.652	0.676	0.691	0.696	0.691	0.676	0.652	0.619	0.578	0.530
1.1	0.311	0.300	0.318	0.357	0.408	0.467	0.526	0.583	0.633	0.676	0.710	0.735	0.750	0.755	0.750	0.735	0.710	0.676	0.633	0.583
1.2	0.303	0.305	0.334	0.382	0.441	0.505	0.569	0.629	0.681	0.725	0.760	0.785	0.800	0.805	0.800	0.785	0.760	0.725	0.681	0.629
1.3	0.300	0.312	0.350	0.405	0.470	0.539	0.605	0.667	0.720	0.765	0.800	0.825	0.840	0.845	0.840	0.825	0.800	0.765	0.720	0.667
1.4	0.300	0.320	0.364	0.424	0.493	0.565	0.633	0.696	0.750	0.795	0.830	0.855	0.870	0.875	0.870	0.855	0.830	0.795	0.750	0.696
1.5	0.301	0.326	0.374	0.438	0.509	0.583	0.652	0.715	0.770	0.815	0.850	0.875	0.890	0.894	0.890	0.875	0.850	0.815	0.770	0.715
1.6	0.302	0.329	0.379	0.445	0.518	0.592	0.662	0.725	0.780	0.825	0.860	0.885	0.899	0.904	0.899	0.885	0.860	0.825	0.780	0.725
1.7	0.302	0.329	0.379	0.445	0.518	0.592	0.662	0.725	0.780	0.825	0.860	0.885	0.899	0.904	0.899	0.885	0.860	0.825	0.780	0.725
1.8	0.301	0.326	0.374	0.438	0.509	0.583	0.652	0.715	0.770	0.815	0.850	0.875	0.890	0.894	0.890	0.875	0.850	0.815	0.770	0.715
1.9	0.300	0.320	0.364	0.424	0.493	0.565	0.633	0.696	0.750	0.795	0.830	0.855	0.870	0.875	0.870	0.855	0.830	0.795	0.750	0.696
2.0	0.300	0.312	0.350	0.405	0.470	0.539	0.605	0.667	0.720	0.765	0.800	0.825	0.840	0.845	0.840	0.825	0.800	0.765	0.720	0.667
2.1	0.303	0.305	0.334	0.382	0.441	0.505	0.569	0.629	0.681	0.725	0.760	0.785	0.800	0.805	0.800	0.785	0.760	0.725	0.681	0.629
2.2	0.311	0.300	0.318	0.357	0.408	0.467	0.526	0.583	0.633	0.676	0.710	0.735	0.750	0.755	0.750	0.735	0.710	0.676	0.633	0.583
2.3	0.327	0.302	0.306	0.332	0.374	0.424	0.478	0.530	0.578	0.619	0.652	0.676	0.691	0.696	0.691	0.676	0.652	0.619	0.578	0.530
2.4	0.354	0.312	0.300	0.312	0.342	0.382	0.428	0.474	0.518	0.556	0.587	0.610	0.624	0.629	0.624	0.610	0.587	0.556	0.518	0.474
2.5	0.396	0.336	0.306	0.301	0.316	0.344	0.379	0.418	0.456	0.490	0.518	0.539	0.552	0.556	0.552	0.539	0.518	0.490	0.456	0.418
2.6	0.455	0.376	0.327	0.304	0.301	0.310	0.338	0.366	0.396	0.424	0.448	0.467	0.478	0.482	0.478	0.467	0.448	0.424	0.396	0.366
2.7	0.534	0.437	0.368	0.325	0.304	0.300	0.309	0.326	0.346	0.366	0.385	0.399	0.408	0.411	0.408	0.399	0.385	0.366	0.346	0.326
2.8	0.633	0.521	0.434	0.371	0.330	0.308	0.300	0.303	0.311	0.322	0.334	0.344	0.350	0.352	0.350	0.344	0.334	0.322	0.311	0.303
2.9	0.749	0.628	0.525	0.444	0.384	0.343	0.318	0.305	0.300	0.301	0.304	0.308	0.311	0.312	0.311	0.308	0.304	0.301	0.300	0.318
3.0	0.879	0.754	0.642	0.547	0.470	0.411	0.368	0.339	0.321	0.310	0.304	0.302	0.301	0.300	0.301	0.302	0.304	0.310	0.321	0.339

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение 1. Округление расчетных величин

Во всех промежуточных вычислениях, включая расчет среднего арифметического, следует приводить на одну значащую цифру больше, чем число знаков в исходных данных. Это сделано для того, чтобы не вносить погрешности за счет округления при проведении последующих расчетов с использованием среднего значения. Однако не следует приводить и слишком много «лишних» цифр (3 – 4 и более), так как это вызывает дополнительные затраты времени на вычисления, не улучшая реальной точности результата. Нередко студенты автоматически записывают полностью все число, которое «выдает» компьютер или микрокалькулятор в результате расчета, что, конечно, не характеризует достигнутую точность.

Округляется только окончательный результат. Округление производится по специальным правилам и с учетом погрешности.

Если за последней округляемой стоит цифра меньше 5, округляемую цифру оставляют без изменений (округление с уменьшением), а если больше 5, округляемую цифру увеличивают на единицу (округление с увеличением). Например, 5.8354 округляют до 5.835, но 5.8356 округляют до 5.836.

Несколько сложнее правила округления, когда за последней округляемой цифрой стоит 5. Если за этой цифрой 5 нет более никаких цифр, то округляют до четной цифры, например, 5.8355 до 5.836, но 5.8345 до 5.834. Если за цифрой 5 имеется еще какая-либо отличная от нуля цифра, то округляют с увеличением, однако если цифра 5 получена в результате округления, то округляют с уменьшением, т.е. 5 просто отбрасывают. Например, округление 5.72551 до трех десятичных знаков даёт 5.726, но в случае 5.72548 — 5.7255 — 5.725.

При записи значений искомых величин и их доверительных интервалов (или стандартных отклонений) необходимо провести правильное округление результатов вычислений. Важно при этом, с одной стороны, не внести погрешность округления, сравнимую или превышающую другие погрешности, а с другой — оставить только достоверные значащие цифры. Округление значения физической величины

проводится с учетом найденного значения стандартного отклонения. Необходимо руководствоваться при этом следующими правилами:

- число значащих цифр у стандартных отклонений (доверительных интервалов) не должно превышать двух (значащей является первая и все последующие ненулевые цифры);
- последняя значащая цифра значения искомой физической величины должна соответствовать последней значащей цифре стандартного отклонения (доверительного интервала). Результат измерения и его погрешность должны содержать одинаковое число знаков после запятой.

Первое утверждение определяется тем, что стандартные отклонения (доверительные интервалы) вычисляются неточно по причине приближенности самих формул для оценки стандартных отклонений. Для экспериментов, выполняемых при определении параметров технологического процесса, можно считать, что относительная погрешность вычисления стандартного отклонения составляет не менее 10 – 15 %.

На основании вышеизложенного, можно сформулировать следующий порядок действий для правильной записи результата измерений.

В ходе промежуточных вычислений значений искомых величин и стандартных отклонений необходимо оставлять достаточное (4 – 5 и более) число значащих цифр.

После окончания вычислений сначала следует округлить значение стандартного отклонения (или доверительного интервала). Если первая значащая цифра – единица или двойка, то после округления следует оставить две значащие цифры, если тройка или более – то одну. Это правило связано с тем, что вносимая при этом относительная погрешность округления не превышает 15 %.

Далее округляется значение искомой величины так, чтобы ее последняя значащая цифра находилась на той же позиции, что и последняя значащая цифра стандартного отклонения (доверительного интервала).

Поэтому в общем случае можно считать необходимым, чтобы при задании исходных данных с двумя десятичными знаками все вычисления производились с точностью не меньшей, чем четыре десятичные цифры, что соответствует правилам вычислений с приближенными числами.

Количество значащих цифр в числе, полученном в результате вычислений, определяется из сравнения недостоверности цифр.

При сложении и вычитании нескольких чисел в результате вычисления оставляют столько цифр после запятой, сколько их содержится в слагаемом с наименьшим числом десятичных знаков. При умножении и делении количество значащих цифр конечного результата определяется числом, имеющим наибольшую относительную недостоверность и наименьшее количество значащих цифр. При возведении числа в степень относительная недостоверность результата увеличивается в число раз, равное степени. Логарифмические величины должны содержать в мантиссе такое же количество значащих цифр, как и использованные при расчете нестепенные числа. Цифры, полученные при логарифмировании степенного члена, не являются значащими.

Число значащих цифр параметров модели определяется точностью экспериментальных измерений с добавлением одного знака для расчетов [15].

Для округления абсолютного численного значения (оценки) параметра регрессионной модели $\hat{b}$ необходимо в числе $\hat{b}$ отбросить цифры младшего разряда, начиная с цифры, соответствующей второй цифре наибольшего разряда среднеквадратического отклонения оценки $S_{\hat{b}}$. Последнюю из оставшейся в округленной оценке $\hat{b}_0$ цифру увеличивают на единицу, если первая из отбрасываемых цифр больше или равна 5. Если среднеквадратическое отклонение $S_{\hat{b}}$ 0.024, оценку 1.068553 округляют до 1.06, а оценку 1.995047 — до 2.00 [16].

Приложение 2. Статистические критерии

Таблица П2.1

Значение критерия Кохрена при уровне значимости $p = 0.05$
для объема выборки N и числа степеней свободы f

N	f													
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	16	36	144	∞
2	0.99	0.98	0.94	0.91	0.88	0.85	0.83	0.82	0.80	0.79	0.73	0.66	0.58	0.50
3	0.97	0.87	0.80	0.75	0.71	0.68	0.65	0.63	0.62	0.60	0.55	0.47	0.40	0.33
4	0.91	0.77	0.68	0.63	0.59	0.56	0.54	0.52	0.50	0.49	0.44	0.37	0.31	0.25
5	0.84	0.68	0.60	0.54	0.51	0.48	0.46	0.44	0.42	0.41	0.36	0.31	0.25	0.20
6	0.78	0.62	0.53	0.48	0.44	0.42	0.40	0.38	0.37	0.36	0.31	0.26	0.21	0.17
7	0.73	0.56	0.48	0.43	0.40	0.37	0.35	0.34	0.33	0.32	0.28	0.23	0.18	0.14
8	0.68	0.52	0.44	0.39	0.36	0.34	0.32	0.30	0.29	0.28	0.25	0.20	0.16	0.13
9	0.64	0.48	0.40	0.36	0.33	0.31	0.29	0.28	0.27	0.26	0.22	0.18	0.14	0.11
10	0.60	0.45	0.37	0.33	0.30	0.28	0.27	0.25	0.24	0.24	0.20	0.17	0.13	0.10
12	0.54	0.39	0.33	0.29	0.26	0.24	0.23	0.22	0.21	0.20	0.17	0.14	0.11	0.08
15	0.47	0.33	0.28	0.24	0.22	0.20	0.19	0.18	0.17	0.17	0.14	0.11	0.09	0.07
20	0.39	0.27	0.22	0.19	0.17	0.16	0.15	0.14	0.14	0.13	0.11	0.09	0.07	0.05
24	0.34	0.24	0.19	0.17	0.15	0.14	0.13	0.12	0.12	0.11	0.09	0.07	0.06	0.04
30	0.29	0.20	0.16	0.14	0.12	0.11	0.11	0.10	0.10	0.09	0.08	0.06	0.05	0.03
40	0.24	0.16	0.13	0.11	0.10	0.09	0.08	0.08	0.07	0.07	0.06	0.05	0.03	0.03
60	0.17	0.11	0.09	0.09	0.07	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02
120	0.10	0.06	0.05	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01

Критерий Стьюдента для различных уровней значимости p

df	0.05	0.01	0.001	df	0.05	0.01	0.001
1	12.70	63.65	636.61	39	2.023	2.708	3.558
2	4.303	9.925	31.602	40	2.021	2.704	3.551
3	3.182	5.841	12.923	41	2.020	2.701	3.544
4	2.776	4.604	8.610	42	2.018	2.698	3.538
5	2.571	4.032	6.869	43	2.017	2.695	3.532
6	2.447	3.707	5.959	44	2.015	2.692	3.526
7	2.365	3.499	5.408	45	2.014	2.690	3.520
8	2.306	3.355	5.041	46	2.013	2.687	3.515
9	2.262	3.250	4.781	47	2.012	2.685	3.510
10	2.228	3.169	4.587	48	2.011	2.682	3.505
11	2.201	3.106	4.437	49	2.010	2.680	3.500
12	2.179	3.055	4.318	50	2.009	2.678	3.496
13	2.160	3.012	4.221	51	2.008	2.676	3.492
14	2.145	2.977	4.140	52	2.007	2.674	3.488
15	2.131	2.947	4.073	53	2.006	2.672	3.484
16	2.120	2.921	4.015	54	2.005	2.670	3.480
17	2.110	2.898	3.965	55	2.004	2.668	3.476
18	2.101	2.878	3.922	56	2.003	2.667	3.473
19	2.093	2.861	3.883	57	2.002	2.665	3.470
20	2.086	2.845	3.850	58	2.002	2.663	3.466
21	2.080	2.831	3.819	59	2.001	2.662	3.463
22	2.074	2.819	3.792	60	2.000	2.660	3.460
23	2.069	2.807	3.768	61	2.000	2.659	3.457
24	2.064	2.797	3.745	62	1.999	2.657	3.454
25	2.060	2.787	3.725	63	1.998	2.656	3.452
26	2.056	2.779	3.707	64	1.998	2.655	3.449
27	2.052	2.771	3.690	65	1.997	2.654	3.447
28	2.049	2.763	3.674	66	1.997	2.652	3.444
29	2.045	2.756	3.659	67	1.996	2.651	3.442
30	2.042	2.750	3.646	68	1.995	2.650	3.439
31	2.040	2.744	3.633	69	1.995	2.649	3.437
32	2.037	2.738	3.622	70	1.994	2.648	3.435
33	2.035	2.733	3.611	71	1.994	2.647	3.433
34	2.032	2.728	3.601	72	1.993	2.646	3.431
35	2.030	2.724	3.591	73	1.993	2.645	3.429
36	2.028	2.719	3.582	74	1.993	2.644	3.427
37	2.026	2.715	3.574	75	1.992	2.643	3.425
38	2.024	2.712	3.566	76	1.992	2.642	3.423

Окончание табл. П2.2

df	0.05	0.01	0.001	df	0.05	0.01	0.001
77	1.991	2.641	3.422	130	1.978	2.614	3.367
78	1.991	2.640	3.420	140	1.977	2.611	3.361
79	1.990	2.639	3.418	150	1.976	2.609	3.357
80	1.990	2.639	3.416	200	1.972	2.601	3.340
90	1.987	2.632	3.402	250	1.969	2.596	3.330
100	1.984	2.626	3.390	300	1.968	2.592	3.323
110	1.982	2.621	3.381	400	1.966	2.588	3.315
120	1.980	2.617	3.373	500	1.964	2.585	3.310

Значение критерия Фишера при уровне значимости $p = 0.05$ для объема выборки N и числах степеней свободы f_1 (для остаточной дисперсии) и f_2 (для дисперсии воспроизводимости)

f_2	f_1																							
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	15	20	30	∞									
1	161.0	200.0	216.0	225.0	230.0	234.0	237.0	239.0	241.0	242.0	244.0	246.0	248.0	250.0	254.0									
2	18.51	19.00	19.16	19.25	19.30	19.33	19.35	19.37	19.38	19.40	19.41	19.43	19.45	19.46	19.50									
3	14.14	9.55	9.28	9.12	9.01	8.94	8.89	8.85	8.81	8.79	8.74	8.70	8.66	8.62	8.53									
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.09	6.04	6.00	5.94	5.91	5.86	5.80	5.75	5.63									
5	6.61	5.79	5.41	5.19	5.05	4.95	4.88	4.82	4.77	4.74	4.68	4.62	4.56	4.50	4.36									
6	5.99	5.14	4.76	4.53	4.39	4.28	4.21	4.15	4.14	4.06	4.00	3.94	3.87	3.81	3.67									
7	5.59	4.74	4.35	4.12	3.97	3.87	3.79	3.73	3.68	3.64	3.57	3.51	3.44	3.38	3.23									
8	5.32	4.46	4.07	3.84	3.69	3.58	3.50	3.44	3.39	3.35	3.28	3.22	3.15	3.08	2.93									
10	4.96	4.14	3.71	3.48	3.33	3.22	3.14	3.07	3.02	2.98	2.91	2.85	2.77	2.70	2.54									
12	4.75	3.89	3.49	3.26	3.11	3.00	2.91	2.85	2.80	2.75	2.69	2.62	2.54	2.47	2.30									
14	4.60	3.74	3.34	3.11	2.96	2.85	2.76	2.70	2.65	2.60	2.53	2.46	2.39	2.31	2.14									
16	4.49	3.63	3.24	3.01	2.85	2.74	2.66	2.59	2.54	2.49	2.42	2.35	2.28	2.19	2.01									
18	4.41	3.55	3.16	2.93	2.77	2.66	2.58	2.51	2.46	2.41	2.34	2.27	2.19	2.11	1.92									
20	4.35	3.49	3.14	2.87	2.71	2.60	2.51	2.45	2.39	2.35	2.28	2.20	2.12	2.04	1.84									
22	4.30	3.44	3.05	2.82	2.66	2.55	2.46	2.40	2.34	2.30	2.23	2.15	2.07	1.98	1.78									
24	4.26	3.40	3.01	2.78	2.62	2.51	2.42	2.36	2.30	2.25	2.18	2.11	2.03	1.94	1.73									
26	4.23	3.37	2.98	2.74	2.59	2.47	2.39	2.32	2.27	2.22	2.15	2.07	1.99	1.90	1.69									
28	4.20	3.34	2.95	2.71	2.56	2.45	2.36	2.29	2.24	2.19	2.12	2.04	1.96	1.87	1.65									
30	4.17	3.32	2.92	2.69	2.53	2.42	2.33	2.27	2.21	2.16	2.09	2.01	1.93	1.84	1.62									
40	4.08	3.23	2.84	2.61	2.45	2.34	2.25	2.18	2.12	2.08	2.00	1.92	1.84	1.74	1.51									
60	4.00	3.15	2.76	2.53	2.37	2.25	2.17	2.14	2.04	1.99	1.92	1.84	1.75	1.65	1.39									
120	3.92	3.07	2.68	2.45	2.29	2.17	2.09	2.02	1.96	1.91	1.83	1.75	1.66	1.55	1.25									
∞	3.84	3.00	2.60	2.37	2.21	2.14	2.01	1.94	1.88	1.83	1.75	1.67	1.57	1.46	1.00									

Приложение 3. Статистические расчеты в *MS Excel*

Статистические характеристики в программе *MS Excel* можно рассчитать по формулам, с помощью статистических функций, с помощью надстройки *Пакет анализа*. Ниже приведены формулы для вычисления некоторых статистических характеристик.

Статистическая величина	Формула
Сумма	=СУММ()
Среднее арифметическое	=Срзнач()
Среднее линейное отклонение	=Сроткл()
Дисперсия по генеральной совокупности	=Диспр()
Дисперсия по выборке	=Дисп()
Среднее квадратичное отклонение	=Стандотклонп()
Смещенное среднее отклонение (по выборке)	=Стандотклон()
Количество значений	=СЧЕТ()
Максимум	=Макс()
Минимум	=Мин()
Мода	=Мода()
Медиана	=Медиана()

Целью **корреляционно-регрессионного анализа** является изучение зависимостей между двумя или несколькими показателями.

Для анализа воздействия на отдельную зависимую переменную значений одной или нескольких независимых переменных можно использовать набор специальных процедур (надстройку), вызываемых командами меню (версия до 2003 включительно) *Сервис – Анализ данных – Корреляция* и *Сервис – Анализ данных – Регрессия*. Для того чтобы воспользоваться инструментом регрессионного анализа встроенного в *MS Excel* (версия 2007 и старше), необходимо активировать надстройку *Пакет анализа* (*Файл – Параметры – Надстройки – Пакет анализа – ОК*). Во вкладке *Данные* в группе *Анализ* появится новая кнопка *Анализ данных*, после нажатия на которую появится окно *Анализ данных*.

Для подробного анализа в открывшемся диалоговом окне следует выбрать строку *Описательная статистика*. В поле «Входной интервал» указать диапазон данных, для которых надо получить статистические оценки. Если диапазон данных выделен вместе с заголовком, установить флажок «Метки» в первой строке. Выбрать вариант

размещения выходных данных: текущий рабочий лист, новый рабочий лист или новая рабочая книга. В случае размещения выходных данных на текущем листе включить режим *Выходной интервал* и указать левую верхнюю ячейку диапазона, в который должны быть выведены результаты. Установить флажок «Итоговая статистика». Щелкнуть по кнопке «ОК».

Результаты работы процедуры появляются в указанном «Выходном интервале» и включают в себя статистические характеристики исходных данных и полученного уравнения, коэффициенты уравнения, предсказанные значения функции Y и их разности с исходными (остатки). Наиболее важной статистической характеристикой является коэффициент детерминации R^2 , принимающий значение от 0 до 1. Чем больше его величина, тем лучше полученное уравнение. Другим критерием адекватности полученного уравнения регрессии являются предсказанные значения и их остатки.

Корреляция характеризует тесноту связи между случайными величинами. В табличном процессоре *MS Excel* существует несколько путей поиска корреляций. Отдельный коэффициент корреляции между двумя переменными (коэффициент парной корреляции) проще всего определить с помощью статистической функции *КОРРЕЛ()*, аргументами которой являются массивы значений случайных величин.

Коэффициент корреляции можно определить с помощью надстройки *Пакет анализа*. В диалоговом окне *Анализ данных* выбрать строку *Корреляция*. Далее необходимо указать входной интервал; выбрать способ группировки данных: по строкам или по столбцам; указать левую верхнюю ячейку выходного интервала.

Регрессионный анализ предназначен для выявления аналитической зависимости между показателями, т. е. для нахождения уравнения регрессии. Коэффициенты уравнения регрессии и регрессионную статистику можно получить с помощью надстройки *Пакет анализа*. В окне *Анализ данных* нужно выбрать *Регрессия*, установить необходимые параметры (входной интервал значений y ; входной интервал значений x ; способ вычисления константы b), указать левую верхнюю ячейку выходного интервала. Когда изучаются два признака, «Множественный R» на самом деле является парным коэффициентом корреляции между ними. Для использования этих процедур нужно правильно задать параметры. Инструмент анализа *Регрессия*

применяется для подбора графика для набора наблюдений с помощью метода наименьших квадратов.

Для нахождения уравнения регрессии в *MS Excel* предназначена функция *ЛИНЕЙН()*, которая рассчитывает статистику для ряда с применением метода наименьших квадратов, чтобы вычислить прямую линию, которая наилучшим образом аппроксимирует имеющиеся данные и затем возвращает массив, который описывает полученную прямую. Функция *ЛИНЕЙН()* возвращает массив коэффициентов. Аргументами функции являются массив значений y и массив значений переменных x . Поскольку функция *ЛИНЕЙН()* возвращает массив значений, поэтому перед вводом формулы надо выделить $n + 1$ ячейку, а закончить ввод формулы нажатием клавиш *Ctrl+Shift+Enter*. Можно также объединять функцию *ЛИНЕЙН()* с другими функциями для вычисления других видов моделей, неизвестные параметры которых являются линейными, включая полиноминые, логарифмические, экспоненциальные и степенные ряды. Функцию *ЛИНЕЙН()* можно использовать для анализа данных совместно с инструментом *Регрессия*.

Если y есть функция одной переменной, то массивы значений x и y могут иметь любую форму (один столбец, одна строка, несколько столбцов и строк) при условии, что они имеют одинаковую размерность.

Если y есть функция нескольких переменных, то массив значений y должен быть одномерным, т.е. занимать один столбец (или одну строку), а массив значений x должен занимать несколько столбцов (или строк), при этом каждый столбец (или строка) будут интерпретироваться как отдельная переменная.

Кроме того, функция *ЛИНЕЙН()* имеет логический аргумент *Конст*, который определяет значение свободного члена b : если *Конст=ЛОЖЬ*, то полагается $b = 0$.

Функция *ЛИНЕЙН()* может также возвращать дополнительную регрессионную статистику. Для этого надо присвоить логическому аргументу *Статистика* значение *ИСТИНА*.

Любую прямую можно описать ее наклоном b и пересечением b_0 с осью y :

- чтобы определить наклон нужно взять две точки прямой (x_1, y_1) и (x_2, y_2) ; наклон будет равен частному $(y_2 - y_1)/(x_2 - x_1)$;

- y -пересечением прямой b_0 является значение y для точки $(0, y_0)$, в которой прямая пересекает ось y .

Если известны значения b и b_0 , то можно вычислить любую точку на прямой $y = b_0 + bx$, подставляя значения y или x в уравнение. Можно также воспользоваться функцией *ТЕНДЕНЦИЯ()*.

Для вычисления наклона и y -пересечения, если есть только один входной параметр, можно воспользоваться следующими функциями:

Наклон: *ИНДЕКС (ЛИНЕЙН (); 1)* или *НАКЛОН()*.

Y -пересечение: *ИНДЕКС (ЛИНЕЙН(); 2)* или *ОТРЕЗОК()*.

Для того, чтобы узнать точное критическое значение **коэффициента Стьюдента** t (кумулятивную вероятность), можно воспользоваться справочной литературой, или использовать статистические функции, встроенные в электронные таблицы (*MS Office Excel* или *OpenOffice Calc* и т.д.), или воспользоваться интерактивным веб-калькулятором. Нужные функции электронных таблиц — *TDIST* и *TINV*.

В *MS Excel* есть несколько функций, связанных с t -распределением. Рассмотрим их.

СТЮДЕНТ.РАСП — «классическое» левостороннее t -распределение Стьюдента. Необходимо указать значение t -критерия, количество степеней свободы и опцию (0 или 1), определяющую, что нужно рассчитать: плотность или значение функции. На выходе получают, соответственно, плотность или вероятность того, что случайная величина окажется меньше указанного в аргументе t -критерия.

СТЮДЕНТ.РАСП.2X — двухстороннее распределение. В качестве аргумента указывают абсолютное значение (по модулю) t -критерия и количество степеней свободы. На выходе получаем вероятность получить такое или еще большее значение t -критерия, т. е. фактический уровень значимости (p -level).

СТЮДЕНТ.РАСП.ПХ — правостороннее t -распределение. Если t -критерий положительный, то полученная вероятность — это p -level.

СТЮДЕНТ.ОБР используется для расчета левостороннего обратного значения t -распределения. В качестве аргумента указывают вероятность и количество степеней свободы.

СТЮДЕНТ.ОБР.2X выдает обратное значение для двухстороннего распределения Стьюдента, т. е. значение t -критерия (по модулю). Также на вход подается уровень значимости α . Только на этот

раз отсчет ведется с двух сторон одновременно, поэтому вероятность распределяется на два хвоста.

СТЮДЕНТ.ТЕСТ — функция для проверки гипотезы о равенстве математических ожиданий в двух выборках. Заменяет множество расчетов, достаточно указать лишь два диапазона с данными и еще пару параметров. На выходе получим *p-level*.

ДОВЕРИТ.СТЮДЕНТ — расчет доверительного интервала средней с учетом *t*-распределения.

Экстраполяцию (прогнозирование неизвестных значений путем продолжения функции за границы области известных значений) динамического ряда в *MS Excel* можно выполнить различными способами.

Для экстраполяции при помощи операции автозаполнения следует выделить ряд данных, правой кнопкой мыши протащить маркер заполнения на нужное количество ячеек, в открывшемся контекстном меню выбрать нужный пункт для аппроксимации исходных данных соответствующей функцией: *Линейное приближение* (линейная функция), или *Экспоненциальное приближение* (экспоненциальная функция), или *Прогрессия* (арифметическая или геометрическая прогрессия).

Можно использовать встроенные функции: *ПРЕДСКАЗ()* (линейная экстраполяция для отдельной точки); *ТЕНДЕНЦИЯ()* (линейная экстраполяция для массива точек); *РОСТ()* (экспоненциальная экстраполяция для массива точек).

Еще один способ прогнозирования — построение линии тренда, графического представления направления изменения данных. Для построения на диаграмме линии тренда надо щелкнуть правой кнопкой мыши по любому маркеру диаграммы, в открывшемся контекстном меню выбрать команду *Добавить линию тренда*. В открывшемся диалоговом окне на вкладке *Параметры линии тренда* в группе *Построение линии тренда* выбрать нужный вариант: экспоненциальная, линейная, логарифмическая, полиномиальная, степенная и т. д. В группе *Прогноз* указать, на сколько периодов вперед и (или) назад надо выполнить прогноз. При необходимости установить флажок *Показывать уравнение на диаграмме* и изменить форматы линии на вкладках *Тип линии*, *Цвет линии* и *Тень*. После этого можно закрыть диалоговое окно.

При проведении **частотного анализа** в *MS Excel* распределение частот можно создать несколькими способами.

Функция **ЧАСТОТА()** возвращает количество значений из диапазона данных, попадающих в каждый интервал группировки. Аргументами этой функции являются массив данных и массив интервалов группировки. Формула массива верхних границ и функция **ЧАСТОТА()** возвращают массив ячеек, поэтому перед их вводом надо выделить столбец из n ячеек, а закончить ввод нажатием клавиш *Ctrl+Shift+Enter*.

Чтобы создать распределение частот с помощью надстройки *Пакет анализа*, надо в диалоговом окне *Анализ данных* выбрать строку *Гистограмма*. В открывшемся диалоговом окне: в поле *Входной интервал* указать диапазон данных; в поле *Интервал карманов* указать массив верхних границ интервалов; в поле *Выходной интервал* указать левую верхнюю ячейку выходного интервала; для графического отображения распределения частот (гистограммы) установить флажок *Вывод графика*.

Распределение частот можно получить, создав сводную таблицу с группировкой по полю, содержащему числовые данные. При этом в качестве начального значения задается минимальное значение диапазона, конечного значения — максимальное, шага — интервал группировки.

Приложение 4. История планирования эксперимента

Планирование эксперимента возникло в 1950-х из потребности устранить или хотя бы уменьшить систематические ошибки в сельскохозяйственных исследованиях путём рандомизации условий проведения эксперимента. Процедура планирования оказалась направленной не только на уменьшение дисперсии оцениваемых параметров, но также и на рандомизацию сопутствующих, спонтанно изменяющихся и неконтролируемых переменных.

В 1918 г. Р. Фишер начал свою серию работ на Рочемстедской агробиологической станции в Англии, венцом которой стала его монография «Design of Experiments» (1935 г.), давшая название всему направлению. В 1942 г. А. Кишен рассмотрел планирование эксперимента по латинским кубам, которое явилось дальнейшим развитием теории латинских квадратов. Затем Р. Фишер независимо опубликовал сведения об ортогональных гипер-греко-латинских кубах и гипер-кубах. Вскоре после этого в 1946 г. Р. Рао рассмотрел их комбинаторные свойства. Дальнейшему развитию теории латинских квадратов посвящены работы Х. Манна (1947—1950 гг.).

Первое глубокое математическое исследование блок-схемы выполнено Р. Боузом в 1939 г. Вначале была разработана теория сбалансированных неполноблочных планов (BIB-схемы). Затем Р. Боуз, К. Нер и Р. Рао обобщили эти планы и разработали теорию частично сбалансированных неполноблочных планов (PBIB-схемы). С тех пор изучению блок-схем уделяется большое внимание как со стороны специалистов по планированию эксперимента (Ф. Йетс, Г. Кокс, В. Кокран, В. Федерер, К. Гульден, О. Кемпторн и другие), так и со стороны специалистов по комбинаторному анализу (Р. Боуз, Ф. Шимамото, В. Клатсворси, С. Шрикханде, А. Гофман и др.).

Фишер разработал метод факторного планирования. Йетс предложил для этого метода простую вычислительную схему. Факторное планирование получило широкое распространение. Особенностью факторного эксперимента является необходимость ставить сразу большое число опытов. В 1945 г. Д. Финни ввел дробные реплики от факторного эксперимента. Это позволило сократить число опытов и открыло дорогу техническим приложениям планирования. Другая возможность сокращения необходимого числа опытов была показана в

1946 г. Р. Плакеттом и Д. Берманом, которые ввели насыщенные факторные планы.

Г. Хотеллинг в 1941 г. предложил находить экстремум по экспериментальным данным с использованием степенных разложений и градиента. Следующим важным этапом было введение принципа последовательного шагового экспериментирования. Этот принцип, высказанный в 1947 г. М. Фридманом и Л. Сэвиджем, позволил распространить на экспериментальное определение экстремума — итерацию.

Чтобы построить современную теорию планирования эксперимента, не хватало одного звена — формализации объекта исследования. Это звено появилось в 1947 г. после создания Н. Винером теории кибернетики. Кибернетическое понятие «черный ящик» играет в планировании важную роль.

В 1951 г. работой Дж. Бокса и К. Уилсона (США) начался новый этап развития планирования эксперимента. В ней сформулирована и доведена до практических рекомендаций идея последовательного экспериментального определения оптимальных условий проведения процессов с использованием оценки коэффициентов степенных разложений методом наименьших квадратов, движение по градиенту и отыскание интерполяционного полинома в области экстремума функции отклика (почти стационарной области).

В 1954 – 1955 гг. Дж. Бокс, а затем П. Юл, показали, что планирование эксперимента можно использовать при исследовании физико-химических процессов, если априори высказаны одна или несколько возможных гипотез. Направление получило развитие в работах Н. П. Клепикова, С. Н. Соколова и В. В. Федорова в ядерной физике.

Третий этап развития теории планирования эксперимента начался в 1957 г., когда Бокс применил свой метод в промышленности. Этот метод стал называться «эволюционным планированием». В 1958 г. Г. Шеффе предложил новый метод планирования эксперимента для изучения физико-химических диаграмм «состав – свойство» под названием «симплексная решетка».

Развитие теории планирование эксперимента в СССР отражено в работах В. В. Налимова, Ю. П. Адлера, Ю. В. Грановского, Е. В. Марковой, В. Б. Тихомирова [12].

Приложение 5. Поиск оптимума методом Нелдера-Мида

Ниже приведены результаты итерационных расчетов (п. 3.4) для различных исходных симплексов (приведены округленные значения x_1 и x_2), чтобы показать, что от выбора начальных точек зависит трудоемкость расчетов.

Автоматизированный расчет вершин симплексов проведен с помощью электронных таблиц *MS Excel*.

№	b	g	f
0	$f(1.000,0.000)=1.073$	$f(0.000,1.000)=1.039$	$f(0.000,0.000)=1.000$
1	$f(0.000,1.000)=1.039$	$f(0.000,0.000)=1.000$	$f(0.500,0.250)=0.991$
2	$f(0.000,0.000)=1.000$	$f(0.500,0.250)=0.991$	$f(0.125,0.562)=0.846$
3	$f(0.500,0.250)=0.991$	$f(0.625,0.812)=0.943$	$f(0.125,0.562)=0.846$
4	$f(0.625,0.812)=0.943$	$f(0.438,0.469)=0.913$	$f(0.125,0.562)=0.846$
5	$f(0.438,0.469)=0.913$	$f(-0.406,-0.078)=0.863$	$f(0.125,0.562)=0.846$
6	$f(-0.406,-0.078)=0.863$	$f(0.125,0.562)=0.846$	$f(-0.719,0.016)=0.714$
7	$f(0.125,0.562)=0.846$	$f(-0.188,0.656)=0.779$	$f(-0.719,0.016)=0.714$
8	$f(-0.164,0.449)=0.797$	$f(-0.188,0.656)=0.779$	$f(-0.719,0.016)=0.714$
9	$f(-0.188,0.656)=0.779$	$f(-0.719,0.016)=0.714$	$f(-0.742,0.223)=0.688$
10	$f(-0.459,0.388)=0.720$	$f(-0.719,0.016)=0.714$	$f(-0.742,0.223)=0.688$
11	$f(-0.719,0.016)=0.714$	$f(-0.595,0.253)=0.703$	$f(-0.742,0.223)=0.688$
12	$f(-0.595,0.253)=0.703$	$f(-0.694,0.127)=0.700$	$f(-0.742,0.223)=0.688$
13	$f(-0.694,0.127)=0.700$	$f(-0.656,0.214)=0.695$	$f(-0.742,0.223)=0.688$
14	$f(-0.656,0.214)=0.695$	$f(-0.705,0.310)=0.689$	$f(-0.742,0.223)=0.688$
15	$f(-0.690,0.240)=0.689$	$f(-0.705,0.310)=0.689$	$f(-0.742,0.223)=0.688$
16	$f(-0.705,0.310)=0.689$	$f(-0.742,0.223)=0.688$	$f(-0.707,0.253)=0.688$
17	$f(-0.742,0.223)=0.688$	$f(-0.715,0.274)=0.688$	$f(-0.707,0.253)=0.688$
18	$f(-0.715,0.274)=0.688$	$f(-0.707,0.253)=0.688$	$f(-0.726,0.243)=0.688$

Использование более узкого начального диапазона несколько сокращает число итераций. Полученный итоговый симплекс не совпадает с полученным по предыдущему расчету.

№	b	g	f
0	$f(0.300,0.000)=1.065$	$f(0.000,0.000)=1.000$	$f(0.000,0.300)=0.892$
1	$f(0.000,0.000)=1.000$	$f(-0.600,0.750)=0.869$	$f(0.000,0.300)=0.892$
2	$f(0.000,0.300)=0.892$	$f(-0.600,0.750)=0.869$	$f(-0.600,0.450)=0.702$
3	$f(-0.600,0.750)=0.869$	$f(-0.300,0.450)=0.757$	$f(-0.600,0.450)=0.702$
4	$f(-0.300,0.450)=0.757$	$f(-0.525,0.600)=0.740$	$f(-0.600,0.450)=0.702$
5	$f(-0.525,0.600)=0.740$	$f(-0.431,0.488)=0.722$	$f(-0.600,0.450)=0.702$
6	$f(-0.431,0.488)=0.722$	$f(-0.506,0.338)=0.714$	$f(-0.600,0.450)=0.702$
7	$f(-0.506,0.338)=0.714$	$f(-0.600,0.450)=0.702$	$f(-0.675,0.300)=0.689$
8	$f(-0.600,0.450)=0.702$	$f(-0.572,0.356)=0.699$	$f(-0.675,0.300)=0.689$
9	$f(-0.572,0.356)=0.699$	$f(-0.612,0.389)=0.695$	$f(-0.675,0.300)=0.689$
10	$f(-0.612,0.389)=0.695$	$f(-0.715,0.333)=0.691$	$f(-0.675,0.300)=0.689$
11	$f(-0.715,0.333)=0.691$	$f(-0.653,0.353)=0.691$	$f(-0.675,0.300)=0.689$
12	$f(-0.653,0.353)=0.691$	$f(-0.690,0.330)=0.690$	$f(-0.675,0.300)=0.689$
13	$f(-0.690,0.330)=0.690$	$f(-0.675,0.300)=0.689$	$f(-0.711,0.277)=0.688$
14	$f(-0.675,0.300)=0.689$	$f(-0.697,0.247)=0.688$	$f(-0.711,0.277)=0.688$
15	$f(-0.697,0.247)=0.688$	$f(-0.733,0.224)=0.688$	$f(-0.711,0.277)=0.688$

Приложение 6. Примеры матриц планирования для ЦКРП

Составим матрицу ротатабельного планирования второго порядка для $n = 2$, $\alpha = 1.414$, $n_0 = 5$.

№ опыта	X_0	X_1	X_2	X_1X_2	X_1^2	X_2^2
1	+	+	+	+	+	+
2	+	+	−	−	+	+
3	+	−	+	−	+	+
4	+	−	−	+	+	+
5	+	+1.414	0	0	2	+
6	+	−1.414	0	0	2	+
7	+	0	+1.414	0	0	2
8	+	0	−1.414	0	0	2
9	+	0	0	0	0	0
10	+	0	0	0	0	0
11	+	0	0	0	0	0
12	+	0	0	0	0	0
13	+	0	0	0	0	0

Матрица центрального композиционного ротатабельного планирования в безразмерных переменных для $k = 3$

№ опыта	X_1	X_2	X_3	Y
1	-1	-1	-1	y_1
2	+1	-1	-1	y_2
3	-1	+1	-1	y_3
4	+1	+1	-1	y_4
5	-1	-1	+1	y_5
6	+1	-1	+1	y_6
7	-1	+1	+1	y_7
8	+1	+1	+1	y_8
9	-1.682	0	0	y_9
10	+1.682	0	0	y_{10}
11	0	-1.682	0	y_{11}
12	0	+1.682	0	y_{12}
13	0	0	-1.682	y_{13}
14	0	0	+1.682	y_{14}
15	0	0	0	y_{15}
16	0	0	0	y_{16}
17	0	0	0	y_{17}
18	0	0	0	y_{18}
19	0	0	0	y_{19}

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Арис Р. Анализ процессов в химических реакторах. — Л.: Химия, 1967. — 328 с.
2. Ахназарова С. Л., Кафаров В. В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Высшая школа, 1985. — 327 с.
3. Бондарь А. Г. Математическое моделирование в химической технологии. — Киев: Вища школа, 1973. — 280 с.
4. Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. — М.: Химия, 1985. — 468 с.
5. Кафаров В. В., Мешалкин В. П. Анализ и синтез химико-технологических систем. — М.: Химия, 1991. — 432 с.
6. Кафаров В. В., Мешалкин В. П., Перов В. Л. Математические основы автоматизированного проектирования химических производств: Методология проектирования и теория разработки оптимальных технологических схем. — М.: Химия, 1979. — 320 с.
7. Коган В. Б. Теоретические основы типовых процессов химической технологии. — Л.: Химия, 1977. — 592 с.
8. Левеншпиль О. Инженерное оформление химических процессов. — М.: Химия, 1969. — 624 с.
9. Кузичкин Н. В. и др. Методы и средства автоматизированного расчета химико-технологических систем: учеб. пособие для вузов. — Л.: Химия, 1987. — 150 с.
10. Налимов В. В., Чернова Н. А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. — М.-Л.: Наука, 1965. — 340 с.

11. Островский Г. М., Бережинский Т. А. Оптимизация химико-технологических процессов. Теория и практика. — М.: Химия, 1984. — 239 с.
12. Холоднов В. А. и др. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов: практическое руководство. — СПб.: АНО НПО «Профессионал», 2003. — 480 с.
13. Холоднов В. А. и др. Химико-технологические системы. Синтез, оптимизация и управление / под ред. И. П. Мухленова. — Л.: Химия, 1986. — 424 с.
14. Гумеров А. Н., Валеев А. Н. и др. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учеб. пособие. — М.: КолосС, 2008. — 160 с.
15. Шеин Е. В. и др. Регрессионный анализ в почвоведении: учеб. пособие. — Владимир: Изд-во ВлГУ, 2016. — 88 с.
16. Урбах В. Ю. Биометрические методы. — М.: Наука, 1964. — 415 с.
17. Костин В. Н., Паничев В. В. Теория эксперимента: учеб. пособие. — Оренбург: ОГУ, 2013. — 209 с.
18. Агаянц И. М., Орлов А. Л. Планирование эксперимента и анализ данных: метод. указания к лабораторным работам. — М: ИПЦ МИТХТ, 1998. — 144 с.
19. Вирченко Н. А., Ляшко И. И., Швецов К. И. Графики функций: справочник. — Киев: Наукова думка, 1979. — 320 с.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1. ПОСТРОЕНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ	4
1.1. Однофакторные модели	5
1.2. Многофакторные модели	13
1.3. Методы корреляционного и регрессионного анализов	15
Вопросы для самоконтроля	20
2. СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ НА ОСНОВЕ	
АКТИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА	21
2.1. Планы первого порядка	23
2.2. Полный факторный эксперимент	24
2.3. Дробный факторный эксперимент	34
2.4. Комбинаторные планы.	37
Вопросы для самоконтроля	40
3. МЕТОДЫ ОТЫСКАНИЯ ЭКСТРЕМУМА	41
3.1. Методы нулевого порядка.	42
3.2. Градиентные методы	44
3.3. Применение симплексов	46
3.4. Метод Нелдера-Мида.	54
Вопросы для самоконтроля	58
4. СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ОПТИМАЛЬНОЙ	
ОБЛАСТИ	59
4.1. Ортогональное планирование	60
4.2. Ротатабельное планирование.	64
Вопросы для самоконтроля	74

5. ЗАДАНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТНО-ГРАФИЧЕСКОЙ РАБОТЫ .	75
ПРИЛОЖЕНИЯ.	83
Приложение 1. Округление расчетных величин	83
Приложение 2. Статистические критерии	86
Приложение 3. Статистические расчеты в <i>MS Excel</i>	90
Приложение 4. История планирования эксперимента	96
Приложение 5. Поиск оптимума методом Нелдера-Мида	98
Приложение 6. Примеры матриц планирования для ЦРКП . .	100
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК	102

Учебное издание

Андрей Николаевич Евдокимов
Александр Вячеславович Курзин

Моделирование химико-технологических процессов (экспериментально-статистические модели)

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ

Редактор и корректор Н. П. Новикова

Технический редактор Л. Я. Титова

Темплан 2018 г., поз. 24

Подп. к печати 28.05.18. Формат 60×84/16. Бумага тип. № 1.

Печать офсетная. Объём 6.75 печ. л., 6.75 уч. изд. л. Изд. № 24.

Тираж 100 экз. Цена «С». Заказ

Ризограф Высшей школы технологии и энергетики СПбГУПТД,
198095, Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, д.4.