

**Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
«Витебский государственный технологический университет»**

**Дягилев А.С.
Коган А.Г.**

Методы и средства исследований технологических процессов

*Допущено Министерством образования Республики Беларусь
в качестве учебного пособия для студентов учреждений высшего
образования по специальности «Технология пряжи, тканей,
трикотажа и нетканых материалов»*

**Витебск
2012**

УДК 004.9:677.02.001.5 (075.8)

ББК 37.23

Д99

Рецензенты:

Профессор кафедры информационных систем и технологий Белорусского государственного технологического университета, д.т.н. В. Л. Колесников.

Заведующий кафедрой теоретической физики Витебского государственного университета им. П.М. Машерова, д.ф.-м. наук Ю.В. Трубников

Рекомендовано к изданию редакционно-издательским советом УО «ВГТУ», протокол № 1 от 7. 02. 2012

Д99 Дягилев, А. С. Методы и средства исследований технологических процессов : учебное пособие / А. С. Дягилев, А. Г. Коган ; УО «ВГТУ». – Витебск, 2007. – 208 с.

ISBN 978-985-481-259-5

В учебном пособии рассмотрены методы, образующие классический аппарат обработки экспериментальных данных, которым должен владеть современный инженер-технолог. Освещены вопросы статистической обработки экспериментальных данных, регрессионного анализа, планирования эксперимента, определения оптимальных значений параметров технологических процессов.

Пособие может быть использовано студентами, аспирантами и научными сотрудниками при планировании и обработке результатов экспериментов, исследовании и поиске оптимальных значений параметров технологических процессов текстильной промышленности.

УДК 004.9:677.02.001.5 (075.8)

ББК 37.23

ISBN 978-985-481-259-5

© Дягилев А.С., 2012

© Коган А.Г., 2012

© УО «ВГТУ», 2012

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	5
1 Статистическая обработка экспериментальных данных	8
1.1 Оценки параметров выборки	8
1.2 Расчет параметров выборки	12
1.3 Проверка статистических гипотез	13
1.3.1 Законы распределения случайных величин, используемые при проверке статистических гипотез	15
1.3.2 Вычисление квантилей распределения случайной величины	18
1.3.3 Однородность дисперсий	21
1.3.4 Сравнение средних	25
1.3.5 Определение закона распределения случайной величины	28
1.4 Доверительные интервалы и ошибки определения параметров выборки	37
1.4.1 Определение размера выборки при оценке среднего значения	39
1.4.2 Обнаружение выбросов в выборочных данных и отсеивание измерений с грубой погрешностью	41
1.4.3 Графическое представление выборочных данных	43
2 Регрессионный анализ	45
2.1 Линейная модель	46
2.1.1 Оценка параметров модели	46
2.1.2 Оценка качества модели	56
2.1.3 Оценка адекватности модели	59
2.1.4 Оценка значимости коэффициентов модели	63
2.2 Нелинейные модели	67
2.3 Регрессионный анализ с использованием пакетов прикладных программ	74
2.3.1 Регрессионный анализ в Excel	74
2.3.2 Регрессионный анализ в Statistica	78
2.4 Корреляционный анализ	80
3 Планирование эксперимента	90
3.1 Основные понятия	90
3.2 Полный факторный эксперимент	95
3.3 Дробный факторный эксперимент	100
3.4 Разбиение плана эксперимента на блоки	102
3.5 Построение и анализ планов ПФЭ и ДФЭ	103
3.5.1 Пример построения плана ПФЭ	104
3.5.2 Пример построения плана ДФЭ	105
3.5.3 Пример анализа плана ПФЭ	108
3.6 Полный факторный эксперимент 3^k	115
3.6.1 Пример анализа плана ПФЭ 3^k	118

3.7	Свойства ортогональности и ротатабельности плана эксперимента.....	127
3.8	Центральные композиционные планы.....	134
3.8.1	Ортогональное центральное композиционное планирование (ОЦКП).....	135
3.8.2	Ротатабельное центральное композиционное планирование (РЦКП).....	139
3.9	Построение и анализ центрального композиционного плана.....	143
3.9.1	Пример построения центрального композиционного плана.....	143
3.9.2	Пример анализа центрального композиционного плана.....	146
3.10	Оптимальное планирование.....	154
3.11	Построение D-оптимальных планов.....	158
4	Оптимизация.....	162
4.1	Методы оптимизации.....	164
4.2	О задаче многокритериальной оптимизации.....	169
4.2.1	Методы решения многокритериальных оптимизационных задач.....	172
4.2.2	Пример решения многокритериальной оптимизационной задачи.....	175
4.2.3	Решение многокритериальной оптимизационной задачи с использованием функции желательности.....	179
4.3	Экспертные оценки.....	191
	Список рекомендуемой литературы.....	197
	Приложение 1. Таблица значений критерия Стьюдента.....	199
	Приложение 2. Таблица значений критерия Фишера.....	200
	Приложение 3. Таблица значений критерия Пирсона χ^2	202
	Приложение 4. Таблица значений критерия Граббса.....	203
	Приложение 5. Нормальное распределение.....	204
	Приложение 6. Критерий W Шапиро-Уилка.....	205
	Приложение 7. Таблица значений критерия Кохрена.....	206

Введение

Разработка нетрадиционных и совершенствование существующих технологических процессов текстильной промышленности позволяет расширить ассортимент высококачественных тканей и трикотажных изделий и нетканых материалов, снизить их материалоемкость. Внедрение новых технологий позволяет снизить энергоемкость и значительно повысить производительность труда.

В последнее время разрабатываются и внедряются в производство прогрессивные технологии, позволяющие получать многокомпонентные комбинированные нити и пряжу, обладающие новой структурой и уникальными сочетаниями потребительских и физико-механических свойств. Разрабатывается новый ассортимент армированных, фасонных, высокорастяжимых, электропроводных и др. нитей, требующий использования различных прядильных машин (кольцевых, прядильно-крутильных, аэродинамических, пневмомеханических и т. д.) и новых технологических процессов.

Расширение ассортимента многокомпонентных нитей и пряжи (высокоусадочные, меланжевые и т. д.) различного сырьевого состава (хлопкохимические, хлопкольняные, льонитроновые и т. д.) требует совершенствования существующих технологических процессов.

На предприятиях текстильной отрасли образуется большое количество отходов, значительная часть которых удаляется в места хранения и захоронения. С целью переработки текстильных отходов разрабатываются новые технологические процессы производства: органосинтетических волокнистых плит, текстильных обоев, многослойных рулонных материалов и т. д.

В связи с этим перед инженерными и научными работниками, занятыми в текстильном производстве, встает ряд прикладных задач, решение которых требует не только глубокого владения технологией текстильного производства, но и применения специальных математических методов и специализированного программного обеспечения.

В случаях, когда новый технологический процесс характеризуется большим количеством взаимосвязанных параметров, а механизм его функционирования сложен или неизвестен, его удобно рассматривать в виде так называемого **черного ящика** (рисунок).

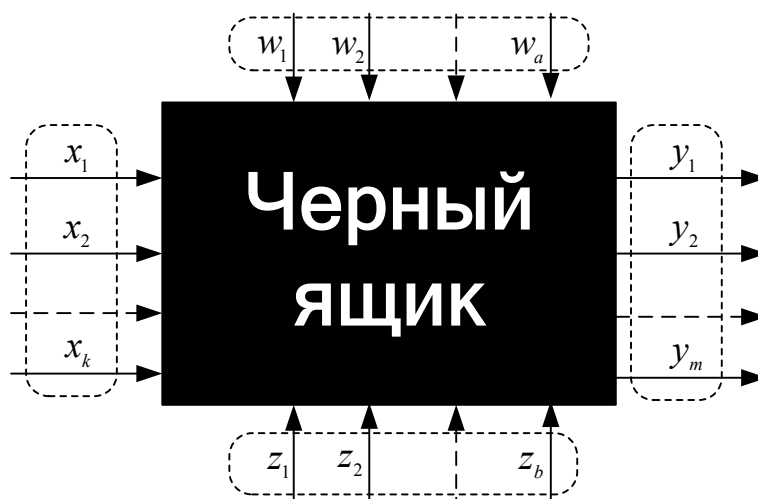


Рисунок – Модель черного ящика

При этом параметры исследуемого процесса подразделяются на: x – управляемые *входные параметры (факторы)*; w – контролируемые *неуправляемые параметры*; z – неконтролируемые *параметры*; y – *выходные параметры (критерии оптимизации, отклик)*.

При описании нового технологического процесса пользуются терминами *параметры, факторы, критерии*. **Параметр** (от греч. parametrón – отмеривающий, соразмеряющий) – величина, характеризующая свойство технологического процесса или производимого продукта. Например: относительная влажность в производственном помещении, частота вращения дискретизирующего барабанчика и т. д. **Фактор** (от лат. factor – делающий, производящий) – параметр, оказывающий влияние на технологический процесс, определяющий его характер или отдельные его черты. Например: заправочная крутка пряжи, тип используемой гарнитуры дискретизирующего барабанчика и т. д. **Критерий** (от греч. kritērion – средство для суждения) – параметр, на основании которого делается оценка или производится классификация технологического процесса или производимого продукта. Например: относительная разрывная нагрузка пряжи, обрывность и т. д.

Исследование технологического процесса может представлять собой пассивный или активный эксперимент. При **пассивном эксперименте** исследователь фиксирует состояние исследуемого процесса путем пассивного наблюдения. При **активном эксперименте** информация накапливается при активном управлении факторами.

Под **объектом оптимизации** понимают исследуемый процесс, объект или систему, для которой необходимо осуществить поиск оптимальных значений входных параметров с учетом ограничений, накладываемых на контролируемые входные параметры. Мероприятия по оптимизации исследуемого процесса или объекта включают этапы: планирование эксперимента, статистическая обработка результатов экспери-

мента, построение математической модели и на ее основе поиск оптимальных значений параметров.

План эксперимента (глава 3) строится на основе теоретических сведений об объекте оптимизации и информации, полученной по итогам предварительных опытов. План эксперимента составляется таким образом, чтобы получить максимум полезной информации при минимальном количестве опытов, которые могут требовать существенных финансовых затрат и длительного времени проведения.

Проведение эксперимента и **статистическая обработка данных**: (глава 1) проверка нормальности распределения значений выходного параметра (критерия), полученных при одинаковых значениях входных параметров (факторов); исключение из экспериментальных данных резко выделяющихся значений (выбросов); проверка однородности дисперсий опытов, проведенных при различных значениях входных параметров.

Построение **математической модели** $y = f(x_1, x_2, \dots, x_k)$, описывающей реакцию объекта оптимизации на изменение входных воздействий. Для построения математической модели используется математический аппарат регрессионного анализа (глава 2): определяется вид модели, задается значимость коэффициентов модели и проверяется адекватность модели. Если на этом этапе не представляется возможным получить адекватную модель, то вновь возвращаются к этапу построения плана эксперимента, используя дополнительно накопленную информацию.

На основе математической модели объекта оптимизации осуществляют **поиск оптимальных значений факторов** (глава 4), обеспечивающих заданные показатели критерия оптимизации. Если критериев оптимизации несколько, то на их основе может формироваться новый, комплексный критерий.

Программные продукты для статистического анализа данных поражают своим разнообразием. Однако без понимания теоретических предпосылок применяемых методов использование самого современного программного обеспечения может оказаться не только неэффективным, но и привести к неправильным выводам. В связи с этим упор сделан на теоретическом аппарате, реализованном в различных программных продуктах.

В пособии описаны методы решения наиболее распространенных задач, встающих в процессе исследования и оптимизации технологических процессов текстильной промышленности.

1 Статистическая обработка экспериментальных данных

Цель расчетов – не числа, а понимание.

Ричард Хэмминг

Данные, получаемые в результате проведения эксперимента, как правило, подвержены влиянию факторов различной природы. Практически невозможно получить абсолютно одинаковые результаты измерений при повторном проведении опытов, так как невозможно воспроизвести значения неконтролируемых параметров. Ошибки, или «шумы», содержащиеся в экспериментальных данных, можно разделить на три вида: *систематические*, *случайные* и *грубые (промахи, выбросы)*. **Систематические ошибки** – ошибки, сохраняющие величину и знак или закономерно изменяющиеся во время эксперимента. Потенциально наиболее опасный вид ошибок. Могут быть вызваны ограниченной точностью приборов измерения, неправильной настройкой и т. д. Такие погрешности могут быть выявлены путём детального анализа возможных источников. **Случайные ошибки** – вызванные случайными неконтролируемыми помехами. Они могут быть вызваны колебаниями воздуха, изменением влажности, изменением напряжения электрической сети, реакцией наблюдателя и т. д. Случайные погрешности не поддаются исключению, можно лишь оценить их величину. **Промахи** (англ. *outliers*) – грубые ошибки, существенно превышающие ожидаемую при данных условиях погрешность. Они могут быть вызваны невнимательностью экспериментатора, использованием неисправных приборов и т. д. Как правило, промахи – это резко отличающиеся значения, которые необходимо исключать как не заслуживающие доверия.

В этой главе приведены краткие сведения об аппарате математической статистики, используемом для обработки экспериментальных данных и выделения из них полезной информации.

1.1 Оценки параметров выборки

Результатом проведения опыта всякий раз является некая случайная величина, значение которой подчиняется вероятностному закону распределения. Одним из наиболее часто встречающихся в природе законов распределения вероятностей является *нормальный закон*. Для него характерно то, что отклонения от среднего значения равной величины, но разные по знаку встречаются одинаково часто, а большие отклонения (по абсолютной величине) встречаются реже, чем малые.

Нормальный закон распределения (закон Гаусса) имеет *функцию плотности вероятности* (англ. *probability density function, PDF*):

$$f(x; \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\left(\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)}, \quad (1.1)$$

где x – случайная величина; μ – математическое ожидание; σ^2 – дисперсия.

Для выборки бесконечно большого объема (при симметричном законе распределения случайной величины) **математическое ожидание** μ представляет собой среднее значение случайной величины x :

$$\mu = M(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i. \quad (1.2)$$

Дисперсия σ^2 – математическое ожидание квадрата отклонения случайной величины от математического ожидания случайной величины:

$$\sigma^2 = D(x) = M(x - \mu)^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2. \quad (1.3)$$

Величина $\sigma = \sqrt{\sigma^2}$ называется **стандартным отклонением** случайной величины. Нормальное распределение с $\mu = 0$ и $\sigma = 1$ называется **стандартным нормальным распределением**. На рисунке 1.1 представлено семейство кривых для функции плотности вероятности нормального распределения при различных значениях σ .

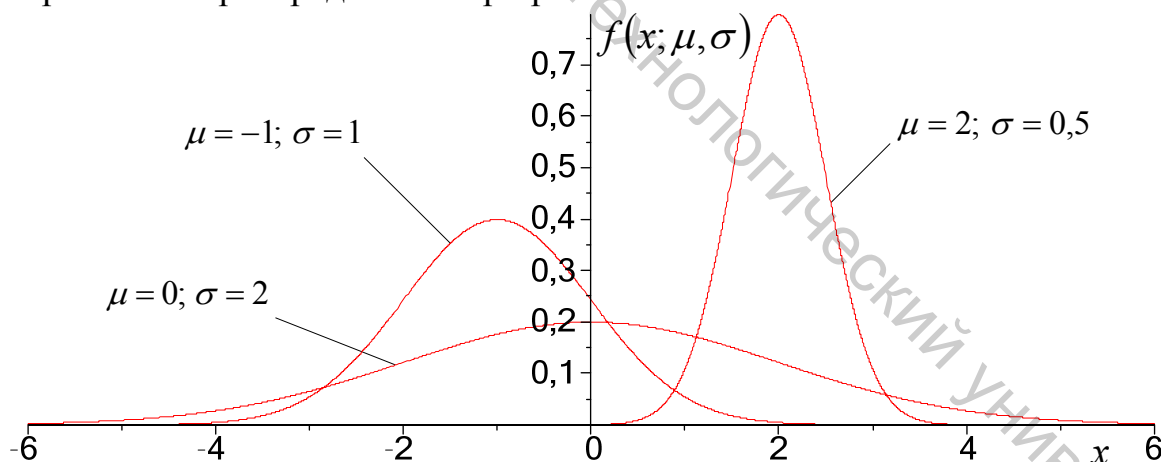


Рисунок 1.1 – Графики функции плотности вероятности нормального распределения

Площадь фигур (рисунок 1.1), ограниченных графиками и осью x , равна 1. В теории вероятности **центральная предельная теорема** утверждает, что сумма большого числа случайных величин с произвольными функциями распределения имеет распределение, близкое к нормальному, т. е. объясняет, почему нормальный закон распределения является наиболее распространенным.

Интегральная функция распределения вероятности (англ. cumulative distribution function, CDF) нормального закона:

$$F(x; \mu, \sigma) = \int_{-\infty}^x f(x; \mu, \sigma) dx = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\left(\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)} dx. \quad (1.4)$$

Интегральная функция распределения вероятности определяет вероятность того, что случайная величина примет значение, меньшее случайной величины x .

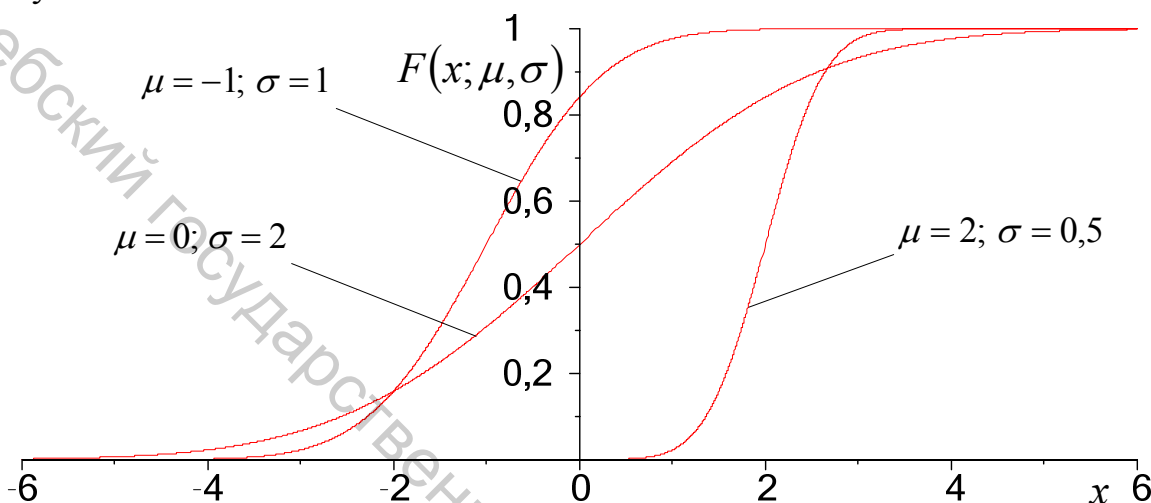


Рисунок 1.2 – Графики интегральной функции плотности вероятности нормального распределения

Для исследования общих свойств объектов и процессов на основе изучения свойств лишь части информации о них используется **выборочный метод**. Данные, обрабатываемые после проведения эксперимента, представляют собой ограниченный набор из n значений, т. е. **выборку** из генеральной совокупности. Под **генеральной совокупностью** понимают полный набор всех возможных значений случайной величины, который можно получить при бесконечном числе опытов ($n \rightarrow \infty$). Так, например, при проведении эксперимента исследуются не все волокна из всех кип, а группа волокон, представляющих собой выборку. Поэтому на практике вместо неизвестных параметров распределения генеральной совокупности, таких как математическое ожидание μ и стандартное отклонение σ , используют *точечные оценки* этих характеристик, определенные по выборке.

Точечные оценки параметров распределения генеральной совокупности, определенные на основе выборки, характеризуют по их *состоятельности, несмещенности и эффективности*:

- если при увеличении объема выборки оценка характеристики стремится к значению характеристики генеральной совокупности, такая оценка является *состоятельной*;

– если оценка характеристики не дает систематической ошибки, завышающей или занижающей числовую характеристику, то такая оценка является **несмещенной**;

– если оценка по сравнению с другими оценками обладает наименьшей дисперсией, то она называется **эффективной**.

Точечные оценки параметров распределения. В теории вероятности **закон больших чисел** (П.Л. Чебышев) утверждает, что **среднее арифметическое** большой выборки близко к **математическому ожиданию** распределения генеральной совокупности. Оценкой математического ожидания μ для нормального распределения служит среднее арифметическое $\bar{x}$:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}. \quad (1.5)$$

Эта оценка является состоятельной, несмещенной и эффективной.

Также используются такие точечные оценки параметров выборки, как среднее геометрическое, медиана, мода и т. д.

Среднее геометрическое:

$$\bar{x}_{\text{геом}} = \sqrt[n]{\prod_{i=1}^n x_i}. \quad (1.6)$$

Медиана – значение, которое делит совокупность данных на две равные части, то есть является серединой множества чисел (половина чисел имеет значения большие, чем медиана, а половина чисел имеет значения меньшие, чем медиана).

Квантиль – число, которое случайная величина не превышает с заданной вероятностью. Часто используют обозначения: квантиль 0,25 – первая **квартиль**; квантиль 0,5 – вторая **квартиль** (**медиана**); квантиль 0,75 – третья **квартиль**. Квантиль, выраженную в процентах, называют **процентиль**, например, медиана – это 50-я процентиль.

Модальное значение (мода) для дискретно изменяющихся величин – это наиболее часто встречающееся значение, для непрерывно изменяющихся – наиболее вероятное значение.

Размах вариации:

$$R = x_{\max} - x_{\min}. \quad (1.7)$$

Оценка дисперсии генеральной совокупности:

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \right)^2 = \overline{x^2} - \bar{x}^2. \quad (1.8)$$

Эта оценка является **смещенной**. Как правило, этой оценкой пользуются при больших объемах выборки ($n > 30$). Для оценки дисперсии генеральной совокупности σ^2 также используют **несмещенную** оценку дисперсии по выборке:

$$s^2 = \frac{n}{n-1} \cdot \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}. \quad (1.9)$$

Знаменатель $(n-1)$ называется числом степеней свободы. Одна степень свободы связана с оценкой $\bar{x}$. Оценки (1.8) и (1.9) являются состоятельными и эффективными.

Среднее квадратическое (стандартное) отклонение выборки определяется как:

$$s = \sqrt{s^2} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}}. \quad (1.10)$$

Для оценки рассеяния случайной величины также используют **коэффициент вариации (квадратическая неровнота)**:

$$C = \frac{s}{\bar{x}} \cdot 100. \quad (1.11)$$

1.2 Расчет параметров выборки

В табличном процессоре Excel можно рассчитать оценки параметров выборки, расположенной в диапазоне **A1:A10**, с помощью функций, приведенных в таблице 1.1.

Таблица 1.1

Среднее	=СРЗНАЧ(A1:A10)
Медиана	=МЕДИАНА(A1:A10)
Стандартное отклонение	=СТАНДОТКЛОН(A1:A10)
Дисперсия	=ДИСП(A1:A10)
Экссесс (см. с. 30)	=ЭКССЕСС(A1:A10)
Асимметрия (см. с. 29)	=СКОС(A1:A10)
Минимум	=МИН(A1:A10)
Максимум	=МАКС(A1:A10)
Сумма	=СУММ(A1:A10)
Количество значений	=СЧЁТ(A1:A10)
Размах	=МАКС(A1:A10)-МИН(A1:A10)

Рассчитать оценки параметров выборки можно в пакете прикладных программ Statistica, запустив модуль **Анализ – Основные статистики и таблицы – Описательные статистики** и выбрав необходимые параметры (рисунок 1.3).

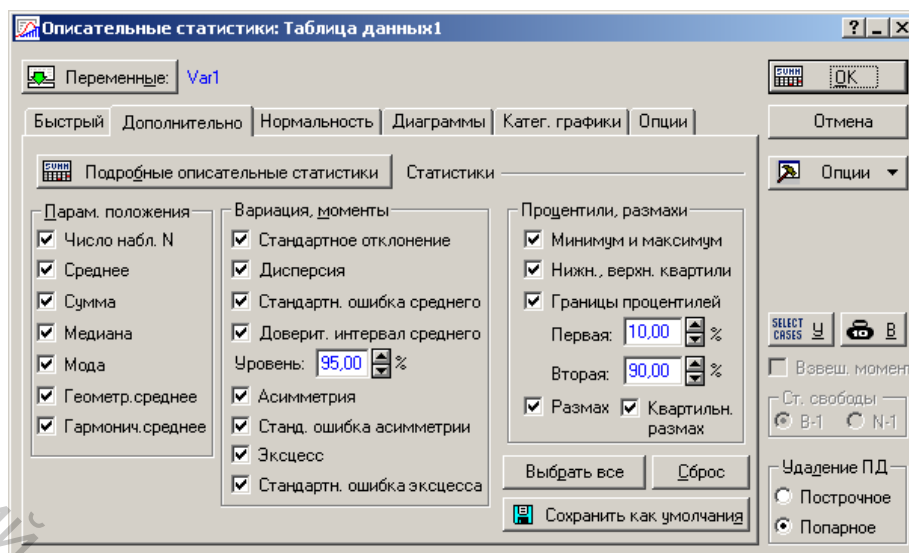


Рисунок 1.3

1.3 Проверка статистических гипотез

При обработке экспериментальных данных часто возникает задача определения значимости различия между числовыми характеристиками. Для решения таких задач служат статистические гипотезы. Под **статистической гипотезой** понимается предположение о вероятностных свойствах случайной величины.

Основная проверяемая гипотеза называется **нулевой гипотезой** H_0 , одновременно рассматривается конкурирующая с ней **альтернативная гипотеза** H_a . Как правило, H_0 (нулевая гипотеза) – гипотеза о равенстве числовых характеристик ($\theta_1 = \theta_2$), в качестве альтернативной гипотезы H_a могут приниматься: H_1 – гипотеза о неравенстве числовых характеристик ($\theta_1 \neq \theta_2$); H_2 – первая характеристика больше ($\theta_1 > \theta_2$); H_3 – вторая характеристика больше ($\theta_1 < \theta_2$).

Статистическим критерием называется случайная величина ξ , на основании которой принимается решение «отклонить нулевую гипотезу» или «нет оснований для отклонения нулевой гипотезы». Статистические критерии делятся на **односторонние** и **двусторонние** в зависимости от типа проверяемых гипотез. Так, например, если рассматривается нулевая гипотеза о равенстве числовых характеристик $H_0: \theta_1 = \theta_2$ и альтернативная ей гипотеза об их различии $H_1: \theta_1 \neq \theta_2$ (т. е. различие может быть как в большую, так и в меньшую сторону), то говорят о двустороннем статистическом критерии (рисунок 1.4 в). Если в качестве альтернативы к нулевой гипотезе $H_0: \theta_1 = \theta_2$ рассматривается только $H_2: \theta_1 > \theta_2$ либо $H_3: \theta_1 < \theta_2$, то говорят об одностороннем статистическом критерии (рисунок 1.4 а, б).

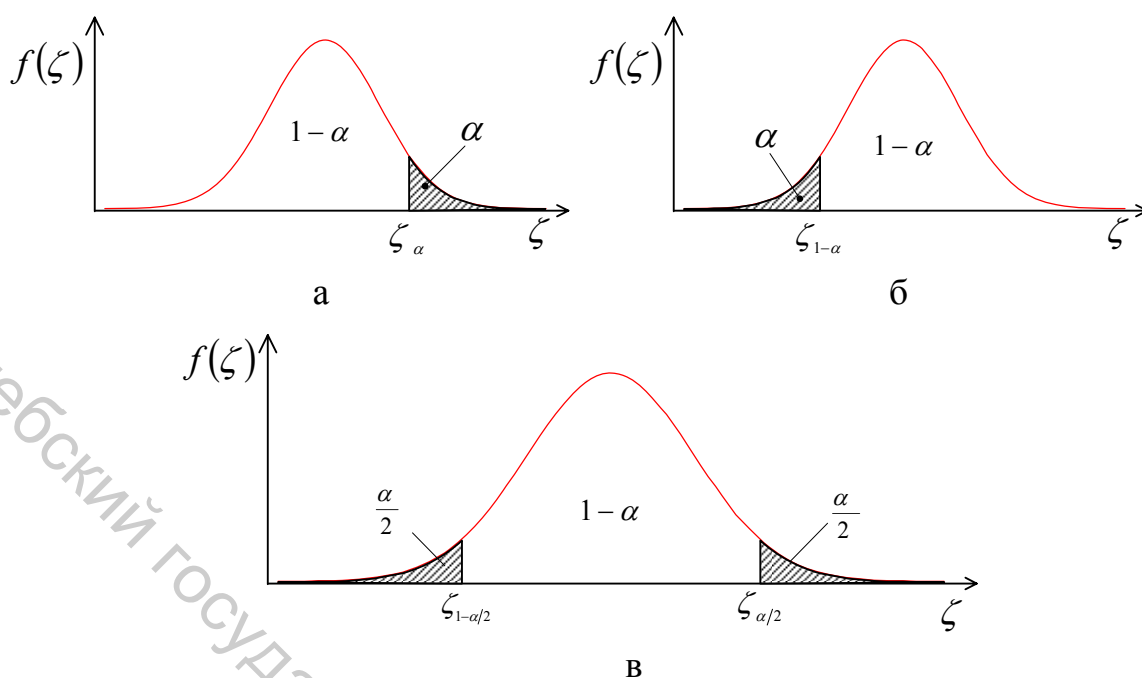


Рисунок 1.4 – Критические области односторонних (а, б) и двусторонних (в) статистических критериев принятия гипотезы

Вероятность попадания случайной величины ζ в заштрихованную область (рисунок 1.4 а) равна:

$$\alpha = \int_{\zeta_{кр}}^{\infty} f(\zeta) d\zeta. \quad (1.12)$$

При принятии или отклонении гипотезы можно допустить ошибку первого или второго рода (таблица 1.2). **Ошибка первого рода (α)** – отвергнуть правильную нулевую гипотезу. **Ошибка второго рода (β)** – принять неправильную нулевую гипотезу.

Таблица 1.2 – Ошибки первого и второго рода

	Верна нулевая гипотеза H_0	Верна альтернативная гипотеза H_a
Принята нулевая гипотеза H_0	Верное решение (вероятность $1 - \alpha$)	Ошибка второго рода (вероятность β)
Принята альтернативная гипотеза H_a	Ошибка первого рода (вероятность α)	Верное решение (вероятность $1 - \beta$)

Под **уровнем значимости статистического теста** понимают допустимую для данной задачи вероятность *ошибки первого рода* α . Для большинства исследовательских работ уровень значимости принимают $\alpha = 0,05$. В текстильных исследованиях [11, с. 38] уровень значимости

α для поисковых работ принимают в диапазоне: 0,05 – 0,01; для исследования процессов и машин: 0,05 – 0,02; для контроля качества продукции: 0,05 – 0,01.

При широком использовании компьютерной техники и специализированного программного обеспечения вместо использования табличных значений статистических критериев $\zeta_{кр}$, вычисленных при фиксированных значениях *уровня значимости* (1.12), широкое применение получил **достигаемый уровень значимости** (англ. *p-value*), т. е. вероятность, при которой критическое (табличное) значение критерия будет равно наблюдаемому. Если достигаемый уровень значимости (*p-value*) меньше α (принятого уровня значимости), то нулевая гипотеза отвергается на уровне значимости α , в противном случае – принимается.

Величина $1 - \beta$, вероятность *несовершения* ошибки второго рода, называется **мощностью критерия**. Величина $p = 1 - \alpha$ называется **доверительной вероятностью**.

С уменьшением вероятности ошибки первого рода α увеличивается вероятность ошибки второго рода β (рисунок 1.5) и наоборот.

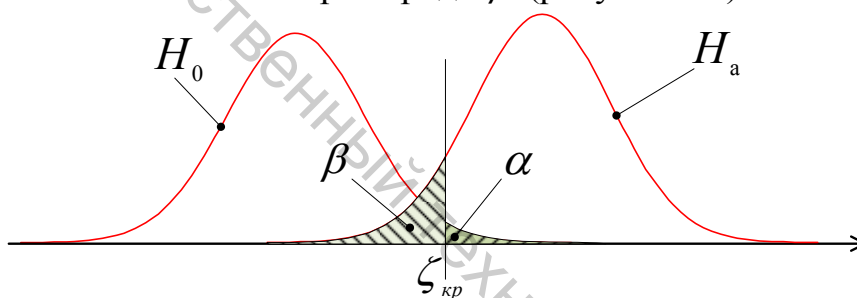


Рисунок 1.5 – Связь между вероятностями ошибок первого и второго рода

Статистическая гипотеза называется **параметрической**, если в ней сформулировано предположение относительно значений параметров известного (например, нормального) распределения генеральной совокупности. Гипотезу, не требующую знания параметров распределения, называют **непараметрической**.

Критерии, используемые для проверки соответствия закона распределения экспериментальных данных предполагаемому теоретическому закону, называют **критериями согласия**.

1.3.1 Законы распределения случайных величин, используемые при проверке статистических гипотез

При проверке статистических гипотез используются специальные законы распределения случайной величины.

Распределение Пирсона χ^2 (хи-квадрат) – однопараметрическое непрерывное распределение с функцией плотности вероятности:

$$f(\chi^2) = \frac{(\chi^2)^{\left(\frac{\nu}{2}-1\right)} e^{-\frac{\chi^2}{2}}}{2^{\left(\frac{\nu}{2}\right)} \Gamma(\nu/2)}, \quad (1.13)$$

где ν – положительное целое число (число степеней свободы); Γ – гамма-функция (1.15). Функция плотности вероятности распределения Пирсона определена на промежутке $x \in [0, +\infty)$.

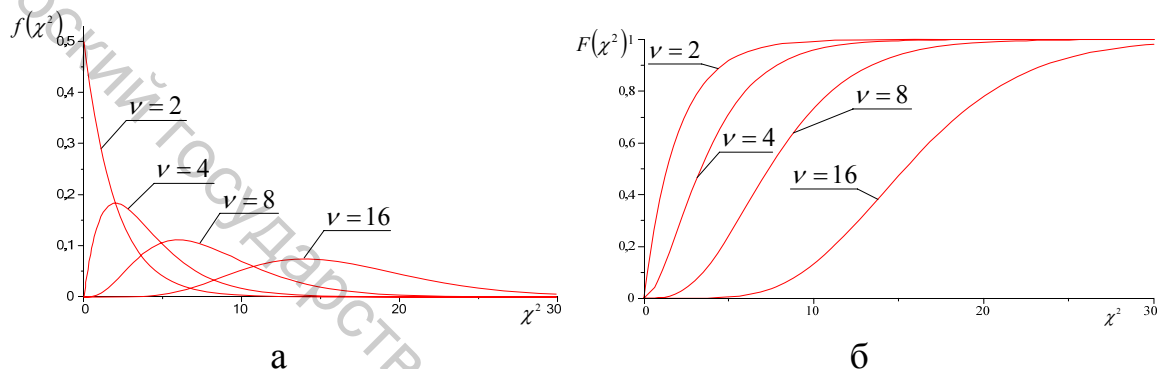


Рисунок 1.6 – Графики функции плотности вероятности (а) и интегральной функции (б) распределения Пирсона

Распределение Фишера (Фишера – Снедекора, **F-распределение**) – двухпараметрическое непрерывное распределение с функцией плотности вероятности:

$$f(F) = \frac{\Gamma\left(\frac{\nu_1 + \nu_2}{2}\right) \left(\frac{\nu_1}{\nu_2}\right)^{\frac{\nu_1}{2}} F^{\left(\frac{\nu_1}{2}-1\right)} \Gamma\left(\frac{\nu_1-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\nu_1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\nu_2}{2}\right) \left(1 + \frac{\nu_1 F}{\nu_2}\right)^{\left(\frac{\nu_1 + \nu_2}{2}\right)}}, \quad (1.14)$$

где ν_1 и ν_2 – положительные целые числа (число степеней свободы); Γ – гамма-функция:

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt. \quad (1.15)$$

Функция плотности вероятности распределения Фишера определена на промежутке $x \in [0, +\infty)$.

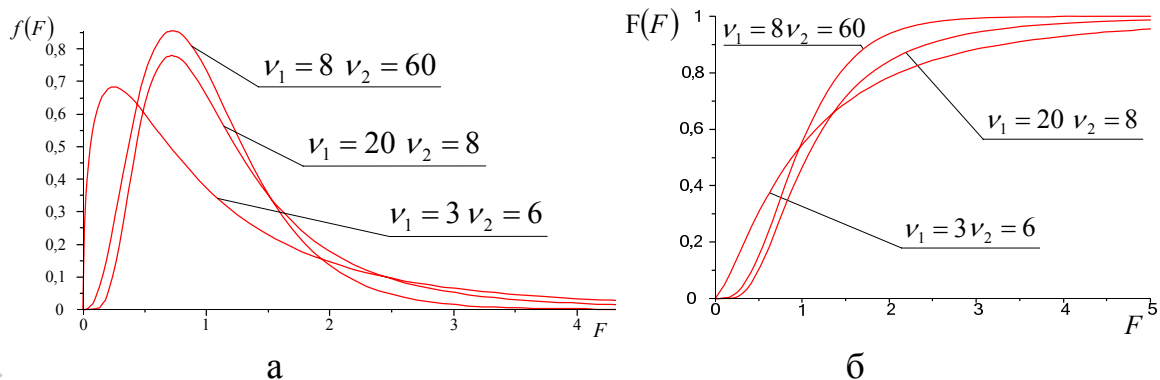


Рисунок 1.7 – Графики функции плотности вероятности (а) и интегральной функции (б) распределения Фишера

Распределение Стьюдента (Уильяма Госсета) – однопараметрическое непрерывное распределение с функцией плотности вероятности:

$$f(t) = \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{2}\right)}{\sqrt{\nu\pi}\Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)} \left(1 + \frac{t^2}{\nu}\right)^{-\left(\frac{\nu+1}{2}\right)}, \quad (1.16)$$

где ν – положительное целое число (число степеней свободы); Γ – гамма функция (1.15). Функция плотности вероятности распределения Стьюдента определена на промежутке $x \in (-\infty, +\infty)$. При $\nu \rightarrow \infty$ кривая функции плотности вероятности распределения Стьюдента совпадает с функцией плотности вероятности стандартного нормального распределения.

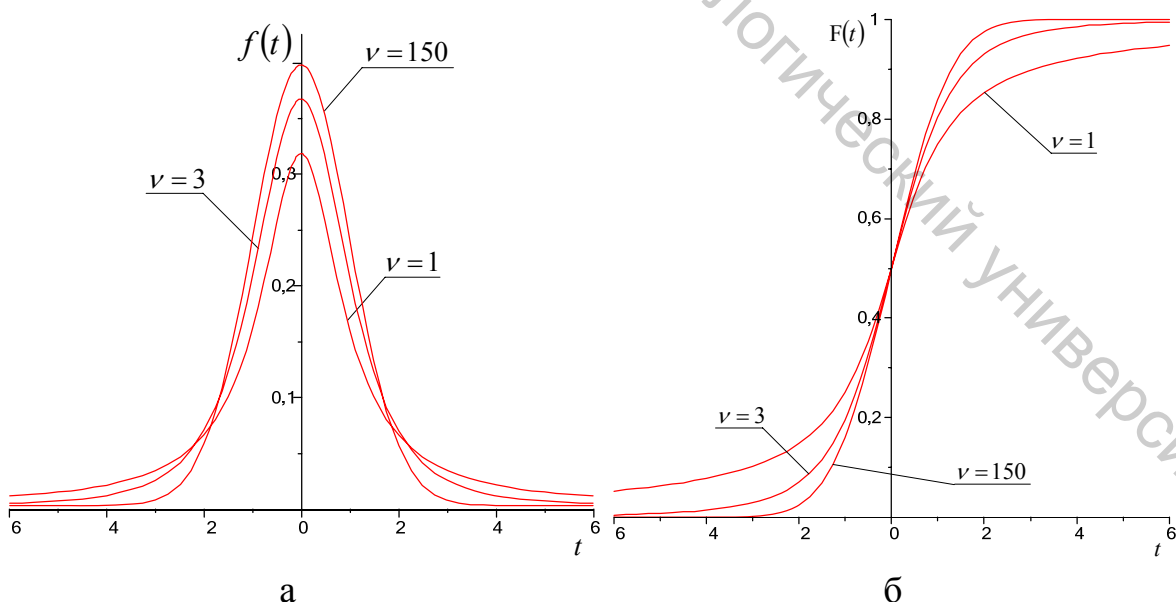


Рисунок 1.8 – Графики функции плотности вероятности (а) и интегральной функции (б) распределения Стьюдента

Распределение Стьюдента является симметричным относительно точки $x = 0$, поэтому $t_{1-\alpha} = -t_{\alpha}$. Значение двухстороннего критерия для уровня значимости α равно значению одностороннего критерия при $\alpha/2$. Таблицы квантилей приведенных распределений приведены в приложениях.

1.3.2 Вычисление квантилей распределения случайной величины

Квантили распределения случайной величины можно найти в специальных таблицах или рассчитать в прикладных программах, например, Excel или Statistica. В Excel для вычисления квантилей распределений нужно использовать специальные функции, в Statistica необходимо запустить модуль *Анализ – Вероятностный калькулятор – Распределения*, который позволяет увидеть графики функции плотности вероятности, интегральной функции распределения вероятности, а также критические области.

Вычисление табличного значения критерия Фишера $F_{\kappa[\alpha; f_1; f_2]}$ для уровня значимости $\alpha = 0.05$ и степеней свободы $f_1 = 9$ и $f_2 = 11$.

Excel:

=FРАСПОБР(0,05;9;11).

Statistica (рисунок 1.9):

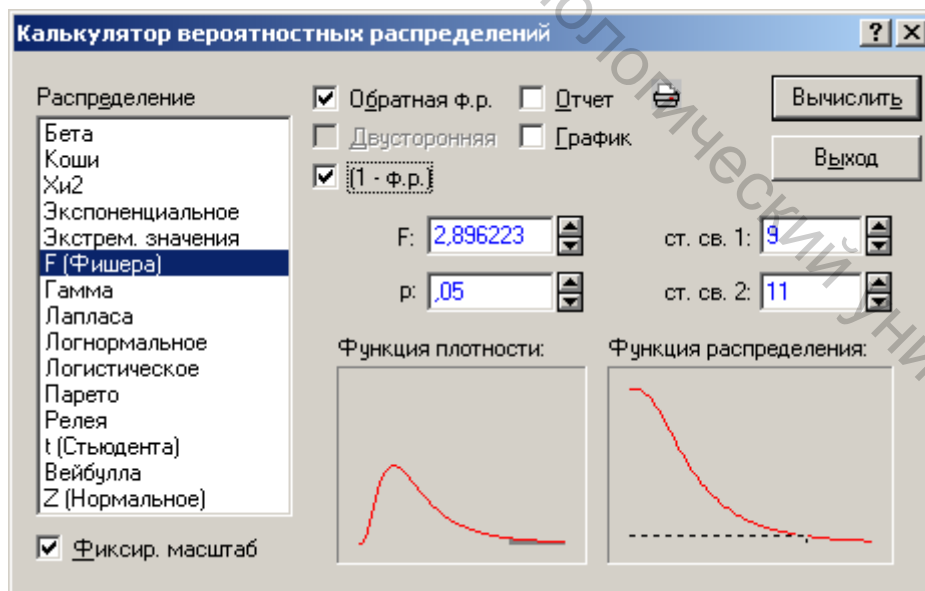


Рисунок 1.9

Вычисление табличного двухстороннего значения критерия Стьюдента $t_{\kappa[\alpha; f]}$ для уровня значимости $\alpha = 0.05$ и степени свободы $f = 10$.

Excel:

=СТЮДРАСПОБР(0,05;10)

Statistica (рисунок 1.10):

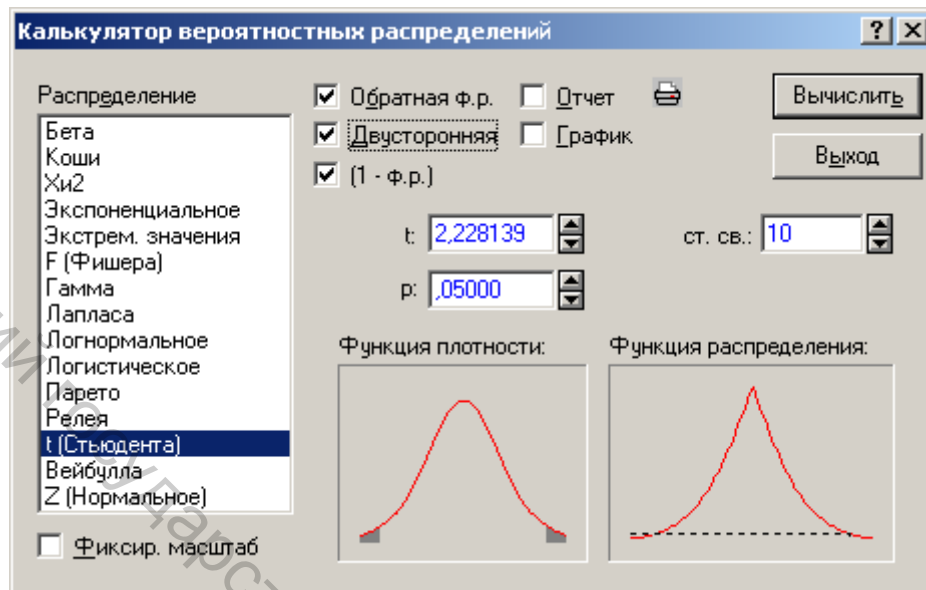


Рисунок 1.10

Вычисление табличного одностороннего значения критерия Стюдента $t_{k[\alpha;f]}$ для уровня значимости $\alpha = 0,05$ и степени свободы $f = 15$.

Excel:

=СТЮДРАСПОБР(0,05*2;15)

Statistica (рисунок 1.11):

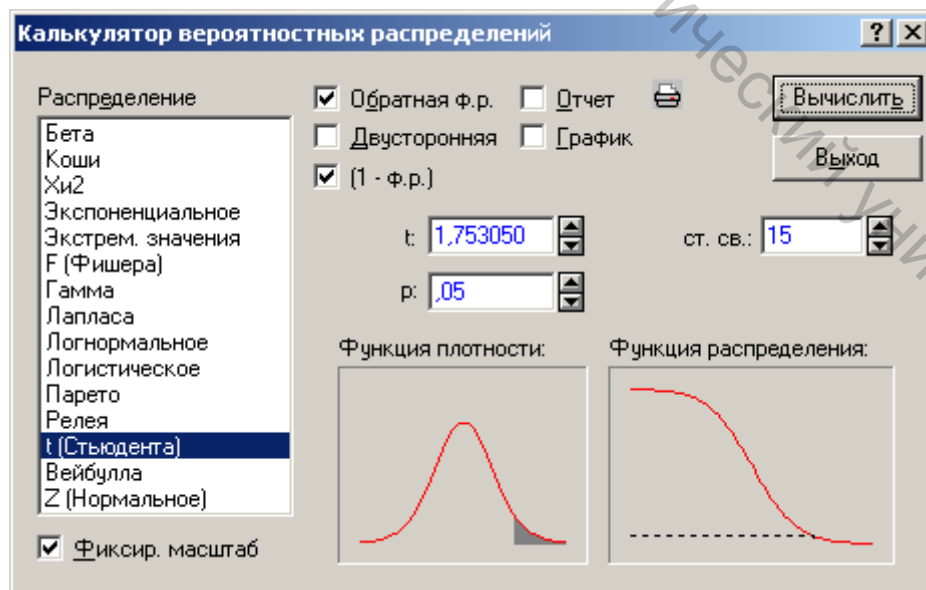


Рисунок 1.11

Вычисление табличного значения критерия Пирсона $\chi^2_{\alpha;f}$ для уровня значимости $\alpha = 0,05$ и степени свободы $f = 10$.

Excel:

=ХИ2ОБР(0,05;10)

Statistica (рисунок 1.12):

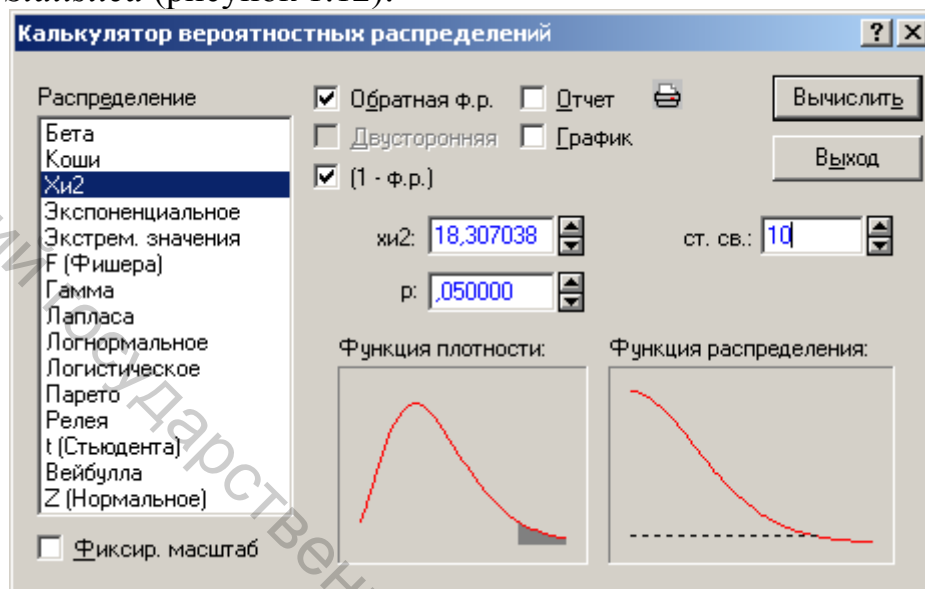


Рисунок 1.12

Вычисление квантили нормального распределения (Гаусса) для доверительной вероятности $p = 0.95$ математического ожидания $\mu = 0$ и стандартного отклонения $\sigma = 1$.

Excel:

=НОРМОБР(1-(1-0,95)/2;0;1)

Statistica (рисунок 1.13):

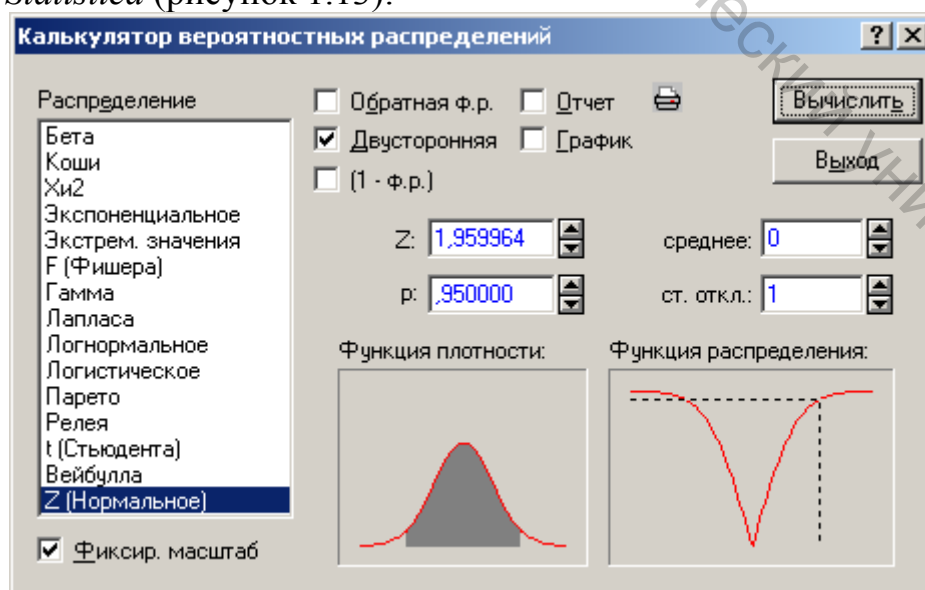


Рисунок 1.13

1.3.3 Однородность дисперсий

Для проверки однородности двух выборок из нормально распределенных генеральных совокупностей, то есть проверки значимости различия дисперсий, используют критерий Фишера.

Процедура проверки гипотезы. Наблюдаемое значение критерия вычисляется по формуле:

$$F_{\text{н}} = \frac{s_1^2}{s_2^2}, \quad (1.17)$$

где s_1^2 – большая из двух оценок дисперсии, s_2^2 – меньшая из двух оценок дисперсии (чтобы $F_{\text{н}}$ было больше единицы). Для каждой из выборок определяется степень свободы $f_1 = n_1 - 1$ и $f_2 = n_2 - 1$, где n_1 и n_2 – количество наблюдений в выборках. Значение критерия $F_{\text{н}}$ является случайной величиной, распределенной по закону Фишера (1.14).

При проверке гипотезы задаются уровнем значимости α или доверительной вероятностью p (например $p = 0,95$ или $\alpha = 1 - p = 0,05$).

В качестве нулевой гипотезы рассматривается:

$$H_0: \sigma_1^2 = \sigma_2^2, \quad (1.18)$$

в качестве альтернативной H_a могут рассматриваться:

- о $H_1: \sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$ – двусторонний критерий, при этом условие **отклонения** нулевой гипотезы H_0 :

$$F_{\text{н}} > F_{\text{к}[\alpha/2; f_1; f_2]} \text{ или } F_{\text{н}} < F_{\text{к}[1-\alpha/2; f_1; f_2]}; \quad (1.19)$$

- о $H_2: \sigma_1^2 > \sigma_2^2$ – односторонний критерий с правосторонней критической областью, условие **отклонения** нулевой гипотезы H_0 :

$$F_{\text{н}} > F_{\text{к}[\alpha; f_1; f_2]}; \quad (1.20)$$

- о $H_3: \sigma_1^2 < \sigma_2^2$ – односторонний критерий с левосторонней критической областью, условие **отклонения** нулевой гипотезы H_0 :

$$F_{\text{н}} < F_{\text{к}[1-\alpha; f_1; f_2]}. \quad (1.21)$$

При использовании пакетов прикладных программ удобно пользоваться специальной вычислительной процедурой **F-test**, которая возвращает *достигаемый уровень значимости*, с которым может быть принята одно- или двухсторонняя нулевая гипотеза.

Если необходимо проверить однородность нескольких ($k > 2$) выборок одинакового размера, можно с помощью критерия Фишера проверить однородность выборок с наибольшей и наименьшей выборочной дисперсией. Если они оказываются однородными, то однородными будут все выборки.

Пример 1.1

На одной и той же прядильной машине выпускается пряжа различного сырьевого состава. Необходимо проверить гипотезу, что дисперсия (разброс относительно среднего) относительной разрывной нагрузки не зависит от сырьевого состава. Таким образом, необходимо проверить однородность дисперсий двух выборок, приведенных в таблице 1.3, представляющих собой результаты испытания разрывной нагрузки пряжи различного сырьевого состава. Нулевая гипотеза $H_0: \sigma_1^2 = \sigma_2^2$, альтернативная $H_1: \sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$

Таблица 1.3 – Экспериментальные данные

X_1	8,99	8,92	9,02	8,98	8,87
X_2	9,54	9,6	9,51	9,44	9,58

Среднее значение первой выборки:

$$\bar{x}_1 = \frac{8,99 + 8,92 + 9,02 + 8,98 + 8,87}{5} = 8,956.$$

Оценка дисперсии первой выборки:

$$S_1^2 = \frac{(8,99 - 8,956) + (8,92 - 8,956) + (9,02 - 8,956) + (8,98 - 8,956) + (8,87 - 8,956)}{5 - 1} = 0,00363.$$

Среднее значение второй выборки:

$$\bar{x}_2 = \frac{9,54 + 9,6 + 9,51 + 9,44 + 9,58}{5} = 9,534.$$

Оценка дисперсии второй выборки:

$$S_2^2 = \frac{(9,54 - 9,534) + (9,6 - 9,534) + (9,51 - 9,534) + (9,44 - 9,534) + (9,58 - 9,534)}{5 - 1} = 0,00398.$$

Так как $S_1^2 < S_2^2$, то $F_H = \frac{0,00398}{0,00363} = 1,096$. Критическое значение

статистики Фишера $F_{\kappa[\alpha/2; f_1; f_2]} = F_{\kappa[0,025; 4; 4]} = 9,605$. Так как $F_H < F_{\kappa[0,025; 4; 4]}$, то нет оснований для отклонения нулевой гипотезы, то есть дисперсии относительной разрывной нагрузки пряжи различного сырьевого состава можно считать однородными.

Проведем проверку однородности дисперсий двух выборок в Excel (рисунок 1.14). Исходные данные располагаются в диапазоне A1:E2.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	8,99	8,92	9,02	8,98	8,87		S_1^2	0,00363	F_H	F_{κ}		α	α
2	9,54	9,6	9,51	9,44	9,58		S_2^2	0,00398	1,096	9,605		0,931	0,931

Рисунок 1.14

В ячейке Н1 рассчитано значение дисперсии первой выборки S_1^2 , формула =ДИСП(A1:E1). В ячейке Н2 рассчитано значение дисперсии второй выборки S_2^2 , формула =ДИСП(A2:E2). В ячейке I2 рассчитано наблюдаемое значение статистики Фишера F_n , формула =Н2/Н1. В ячейке J2 рассчитано критическое значение статистики Фишера $F_{\alpha/2; f_1; f_2}$, формула =ФРАСПОБР(0,05/2;5-1;5-1). Вычисленные значения и выводы идентичны изложенным выше.

В ячейке L2 рассчитан достигаемый уровень значимости двустороннего критерия Фишера =ФРАСП(I2;5-1;5-1)*2. Так как достигаемый уровень значимости 0.931 больше 0.05, то дисперсии можно считать однородными. В ячейке M2 рассчитан достигаемый уровень значимости двустороннего критерия Фишера без промежуточных расчетов с помощью функции =ФТЕСТ(A1:E1;A2:E2).

При проверке однородности дисперсий нескольких выборок одинакового размера наибольшей мощностью обладает **критерий Кохрена** (*William Cochran*). Вычисляется критическое значение статистики Кохрена:

$$G_n = \frac{\max_{i=1}^k S_i^2}{\sum_{i=1}^k S_i^2}. \quad (1.22)$$

Условие отклонения нулевой гипотезы (об однородности дисперсий):

$$G_n > G_{(\alpha; k; n)},$$

где $G_{(\alpha; k; n)}$ – критическое значение критерия Кохрена (приложение 7); k – количество выборок; n – число наблюдений в выборках ($n = n_1 = n_2 = \dots = n_k$); α – уровень значимости. Формула функции плотности вероятности Кохрена имеет сложную структуру, зависящую от числа сравниваемых дисперсий и размера выборки. В большинстве литературных источников приводятся таблицы с критическими значениями и формулы для их *приближенного* вычисления.

Пример 1.2

В 5 партиях пряжи взвешено по 10 паковок (таблица 1.4). Проверить гипотезу, что дисперсии массы паковок пряжи во всех партиях однородны.

Таблица 1.4 – Экспериментальные данные

i	$x_{i,j}$										S_i^2	$\bar{x}_i$
	j											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10		
1	2,98	2,92	3,12	3,02	3,09	2,89	3,24	3,21	3,08	2,95	0,0142	3,05
2	2,98	3,03	2,97	2,95	3,07	2,96	3,5	2,73	2,94	2,8	0,0419	2,99
3	3,13	3,06	3,15	2,95	3,05	2,83	3,11	2,98	3,02	3,16	0,0107	3,04
4	2,73	3,07	2,93	3,08	2,87	3,12	2,83	2,98	3,07	2,83	0,0177	2,95
5	2,97	2,87	3,02	3,16	3,12	3,17	2,78	2,98	3,11	2,89	0,0177	3,01

Наблюдаемое значение критерия Кохрена:

$$G_H = \max_{i=1}^k S_i^2 / \sum_{i=1}^k S_i^2 = 0,0419 / (0,0142 + 0,0419 + 0,0107 + 0,0177 + 0,0177) = 0,41,$$

критическое значение критерия Кохрена $G_{(\alpha;k;n)} = G_{(0,05;5;10)} = 0,4241$. Так как $G_H < G_{(0,05;5;10)}$, то нет оснований для отклонения нулевой гипотезы, то есть дисперсии можно считать однородными.

Для проверки однородности более двух выборок неодинакового размера используется **критерий Бартлетта** (*Maurice Bartlett*), критическое значение статистики:

$$\chi_H^2 = \frac{(N - k) \cdot \ln(S_o^2) - \sum_{i=1}^k ((n_i - 1) \cdot \ln(S_i^2))}{1 + \frac{1}{3(k-1)} \cdot \left(\left(\sum_{i=1}^k \left(\frac{1}{n_i - 1} \right) \right) - \frac{1}{N - k} \right)}, \quad (1.23)$$

где N – общее число наблюдений во всех выборках $N = \sum_{i=1}^k n_i$; n_i – число наблюдений в i -й выборке; k – количество выборок; S_i^2 – оценка дисперсии i -й выборки; S_o^2 – взвешенная по числу степеней свободы средняя арифметическая несмещенных оценок дисперсий:

$$S_o^2 = \frac{1}{N - k} \sum_{i=1}^k (n_i - 1) \cdot S_i^2.$$

Условие отклонения нулевой гипотезы (об однородности дисперсий):

$$\chi_H^2 > \chi_{(\alpha,k-1)}^2.$$

Критерий Бартлетта очень чувствителен к нормальности распределения выборок.

Пример 1.3

В 4 партиях пряжи взвешено различное количество паковок (таблица 1.5). Проверить гипотезу, что дисперсии массы паковок пряжи во всех партиях однородны.

Таблица 1.5 – Экспериментальные данные

i	$x_{i,j}$						n_i	S_i^2	$\bar{x}_i$
	1	2	3	4	5	6			
1	2,98	3,02	3,08	3,09	3,11	-	5	0,00293	3,0560
2	2,96	2,97	3,03	3,07	-	-	4	0,00269	3,0075
3	3,02	3,05	3,06	3,13	3,13	3,14	6	0,00262	3,0883
4	2,87	2,93	2,98	3,07	3,12	-	5	0,01033	2,9940

Общее число наблюдений во всех выборках $N = 20$, количество выборок $k = 4$, взвешенная оценка дисперсий:

$$S_o^2 = \frac{1}{N-k} \sum_{i=1}^k (n_i - 1) \cdot S_i^2 = \frac{1}{20-4} \cdot 0,07419 = 0,004637;$$

наблюдаемое значение критерия Бартлетта:

$$\begin{aligned} \chi_{\text{н}}^2 &= \frac{(N-k) \cdot \ln(S_o^2) - \sum_{i=1}^k ((n_i - 1) \cdot \ln(S_i^2))}{1 + \frac{1}{3(k-1)} \cdot \left(\sum_{i=1}^k \left(\frac{1}{n_i - 1} \right) - \frac{1}{N-k} \right)} = \\ &= \frac{(20-4) \cdot \ln(0,004637) - (-89,10387768)}{1 + \frac{1}{3(4-1)} \cdot \left(1,03 - \frac{1}{20-4} \right)} = 2,822; \end{aligned}$$

критическое значение критерия Бартлетта $\chi_{(\alpha, k-1)}^2 = \chi_{(0,05,3)}^2 = 7,815$. Так как $\chi_{\text{н}}^2 < \chi_{(0,05,3)}^2$, то нет оснований для отклонения нулевой гипотезы, то есть дисперсии можно считать однородными.

1.3.4 Сравнение средних

Для сравнения средних $\bar{x}_1$ и $\bar{x}_2$ двух выборок из нормально распределенных генеральных совокупностей используют критерий Стьюдента (Уильяма Госсета).

Процедура проверки гипотезы. Рассчитывается наблюдаемое значение критерия Стьюдента:

$$t_{\text{н}} = \frac{(\bar{x}_1 - \bar{x}_2)}{s_o} \sqrt{\frac{n_1 \cdot n_2}{n_1 + n_2}}, \quad (1.24)$$

где $\bar{x}_1, \bar{x}_2$ – оценки средних двух выборок; s_o – объединенная оценка дисперсий генеральных совокупностей:

$$s_o^2 = \frac{(n_1 - 1)s_1^2 + (n_2 - 1)s_2^2}{n_1 + n_2 - 2}, \quad (1.25)$$

n_1 – количество измерений в первой серии; n_2 – количество измерений во второй серии; s_1^2 – оценка дисперсии измерений в первой серии; s_2^2 – оценка дисперсии измерений во второй серии.

Рассчитывается степень свободы объединения двух выборок:

- для двух однородных выборок ($\sigma_1^2 = \sigma_2^2$, определяется с помощью критерия Фишера):

$$f = n_1 + n_2 - 2; \quad (1.26)$$

- для двух неоднородных выборок ($\sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$):

$$f = \frac{(s_1^2/n_1 + s_2^2/n_1)^2}{(s_1^2/n_1)^2/(n_1 - 1) + (s_2^2/n_2)^2/(n_2 - 1)}. \quad (1.27)$$

В качестве нулевой гипотезы рассматривается:

$$H_0: \mu_1 = \mu_2,$$

в качестве альтернативной H_a могут рассматриваться:

- $H_1: \mu_1 \neq \mu_2$ – двусторонний критерий, при этом условие *отклонения* нулевой гипотезы H_0 :

$$t_n > t_{k[\alpha/2; f]} \text{ или } t_n < -t_{k[\alpha/2; f]},$$

где $t_{k[\alpha/2; f]}$ и $t_{k[\alpha/2; f]}$ – значения *одностороннего* критерия Стьюдента;

- $H_2: \mu_1 > \mu_2$ – односторонний критерий с правосторонней критической областью, условие *отклонения* нулевой гипотезы H_0 :

$$t_n > t_{k[\alpha; f]};$$

- $H_3: \mu_1 < \mu_2$ – односторонний критерий с правосторонней критической областью, условие *отклонения* нулевой гипотезы H_0 :

$$t_n < -t_{k[\alpha; f]}.$$

Пример 1.4

Проведено технологическое усовершенствование прядильной машины, до и после которого проведено по 10 измерений (таблица 1.6) относительной разрывной нагрузки вырабатываемой пряжи. Определить, действительно ли технологическое усовершенствование привело к увеличению относительной разрывной нагрузки вырабатываемой пряжи.

Таблица 1.6 – Экспериментальные данные

x_1 , сН/текс	7,55	8,13	7,77	7,8	7,83	7,9	7,85	7,86	8,09	8,27
x_2 , сН/текс	7,83	8,05	8,3	8,11	8,09	8,03	8,18	8,08	8,24	8,48

Средние значения выборок $\bar{x}_1 = 7,905$ и $\bar{x}_2 = 8,139$. Оценки дисперсии выборок $s_1^2 = 0,04267$ и $s_2^2 = 0,03067$. Проверим однородность дисперсий с помощью критерия Фишера (нулевая гипотеза $H_0: \sigma_1^2 = \sigma_2^2$, альтернативная $H_1: \sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$), наблюдаемое значение критерия

$$F_H = \frac{0,04267}{0,03067} = 1,391. \text{ Критическое значение критерия } F_{K[\alpha/2; f_1; f_2]} =$$

$F_{K[0,025; 9; 9]} = 4,026$. Так как $F_H < F_{K[0,05; 4; 4]}$, то нет оснований для отклонения нулевой гипотезы, то есть дисперсии можно считать однородными.

Для вычисления наблюдаемого значения критерия Стьюдента найдем объединенную оценку дисперсий генеральных совокупностей:

$$s_o^2 = \frac{(n_1 - 1)s_1^2 + (n_2 - 1)s_2^2}{n_1 + n_2 - 2} = \frac{(10 - 1) \cdot 0,04267 + (10 - 1) \cdot 0,03067}{10 + 10 - 2} = 0,036674,$$

тогда $s_o = \sqrt{s_o^2} = \sqrt{0,036674} = 0,1915$. Наблюдаемое значение критерия Стьюдента:

$$t_H = \frac{(\bar{x}_1 - \bar{x}_2)}{s_o} \sqrt{\frac{n_1 \cdot n_2}{n_1 + n_2}} = \frac{(7,905 - 8,139)}{0,1915} \sqrt{\frac{10 \cdot 10}{10 + 10}} = -2,73224. \text{ Так как дис-}$$

персии двух выборок однородны, то число степеней свободы: $f = n_1 + n_2 - 2 = 10 + 10 - 2 = 18$. Таким образом, нулевая гипотеза $H_0: \mu_1 = \mu_2$, средние двух выборок равны, альтернативная $H_a: \mu_1 < \mu_2$, среднее во второй выборке больше. Критическое значения критерия Стьюдента $-t_{K[\alpha; f]} = -t_{K[0,05; 18]} = -1,734$. Так как $t_H < -t_{K[\alpha; f]}$, то нужно отклонить нулевую гипотезу, следовательно, технологическое усовершенствование привело к увеличению относительной разрывной нагрузки вырабатываемой пряжи.

Чтобы провести аналогичную проверку в Excel, необходимо в диапазоне **A1:J1** записать выборку x_1 , а в диапазоне **A2:J2** – выборку x_2 (рисунок 1.15).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	7,55	8,13	7,77	7,8	7,83	7,9	7,85	7,86	8,09	8,27		ФТЕСТ	0,630886989
2	7,83	8,05	8,3	8,11	8,09	8,03	8,18	8,08	8,24	8,48		ТТЕСТ	0,006840293

Рисунок 1.15

Воспользуемся функциями, рассчитывающими достигаемый уровень значимости (p-value). Для проверки однородности дисперсий в ячейку **M1** запишем формулу: **=ФТЕСТ(A1:J1;A2:J2)**. Так как значе-

ние больше 0.05, то дисперсии можно считать однородными. Для проверки гипотезы о равенстве средних воспользуемся функцией ТТЕСТ(массив1;массив2;хвосты;тип), где массив1 и массив2 – диапазоны, содержащие первую и вторую выборки, хвосты – параметр, принимающий значения 1 или 2 для проверки одно- и двухсторонней гипотезы соответственно, тип – параметр, принимающий значения 2 или 3 для выборок с однородными и неоднородными дисперсиями соответственно. Для нашего случая введем в ячейку М2 формулу: =ТТЕСТ(А1:J1;А2:J2;1;2). Так как значение меньше 0.05, то нужно отклонить нулевую гипотезу, следовательно, средние значения выборок различны.

1.3.5 Определение закона распределения случайной величины

Один из визуальных способов проверки соответствия закона распределения экспериментальных данных теоретическому распределению – это построение **графиков вероятность-вероятность** (англ. *Probability-Probability plot, P-P plot*).

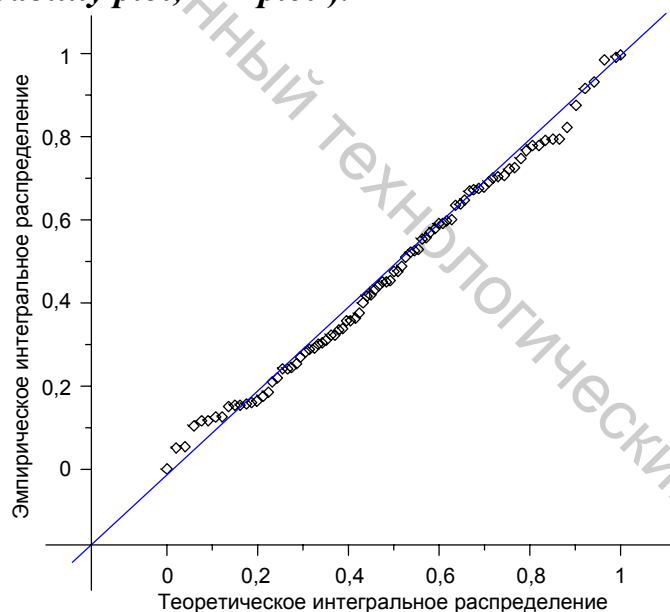


Рисунок 1.16 – График вероятность-вероятность

График вероятность-вероятность показывает связь функций распределения наблюдаемого и теоретического распределений. Для каждого наблюдаемого значения на одной оси откладывается значение интегральной функции наблюдаемого распределения (т. е. относительная частота, с которой значение встречается в выборке), а на другой оси – значение интегральной функции теоретического распределения. Если теоретическое распределение хорошо приближает наблюдаемое, то точки графика выстраиваются в линию.

Построение графика вероятность-вероятность позволяет качественно оценить соответствие теоретического и наблюдаемого распределения, однако не дает количественных оценок.

С помощью *центральных моментов случайной величины* вычисляются такие характеристики закона распределения случайной величины, как *асимметрия* и *эксцесс*. На их основании можно сделать заключение о близости формы кривой функции плотности вероятности к форме кривой функции плотности вероятности выбранного закона распределения случайной величины.

Центральный момент случайной величины k -го порядка:

$$m_k = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^k}{n}, \quad (1.28)$$

при этом центральный момент первого порядка равен нулю ($m_1 = 0$), центральный момент второго порядка представляет собой дисперсию ($m_2 = \sigma^2$) (1.8).

При этом математическое ожидание (1.5) называют **начальным моментом случайной величины**.

Асимметрия (англ. *Skewness*) характеризует отклонение случайной величины от центра распределения:

$$A = \frac{m_3}{m_2^{3/2}} = \frac{m_3}{\sigma_x^3}, \quad (1.29)$$

где m_2 и m_3 – соответственно второй и третий центральные моменты случайной величины. Для нормального закона $A = 0$. Если $A < 0$ (рисунок 1.17), то асимметрия правосторонняя (правая сторона больше левой), если $A > 0$ – асимметрия левосторонняя.

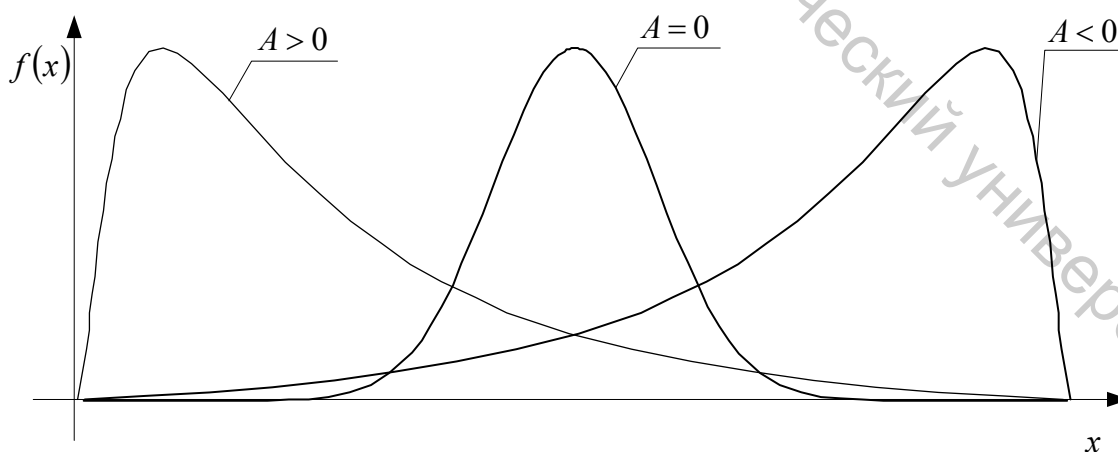


Рисунок 1.17

Наличие асимметрии в выборке, представляющей собой результат проведения эксперимента, может быть обусловлено влиянием постоянно действующего фактора.

Эксцесс (островершинность) (англ. *Kurtosis*) характеризует остроту пика распределения:

$$E = \frac{m_4}{m_2^2} - 3 = \frac{m_4}{\sigma_x^4} - 3, \quad (1.30)$$

где m_2 и m_4 – соответственно второй и четвертый центральные моменты случайной величины. Для нормального закона $E = 0$. Если $E > 0$, то распределение более островершинное, чем нормальное, $E < 0$, если пик более гладкий, чем у нормального распределения (рисунок 1.18).

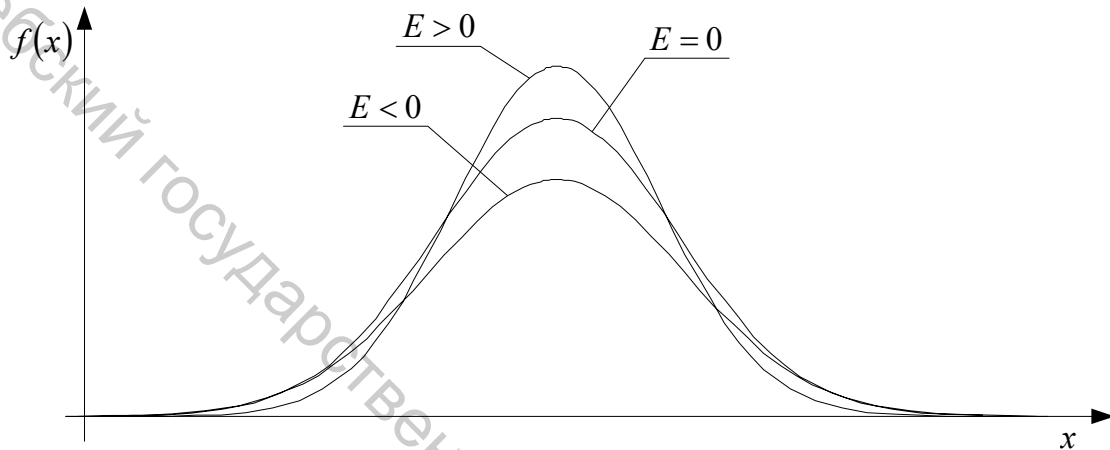


Рисунок 1.18

Чем больше эксцесс в выборочных данных, тем меньше разброс относительно среднего значения. Так, например, если для двух партий пряжи имеются выборки, представляющие собой экспериментально измеренные значения относительной разрывной нагрузки, то при равенстве выборочных средних целесообразно выбрать партию, выборка из которой имеет большее значение эксцесса.

Несмещенная оценка асимметрии по выборке может быть найдена по формуле

$$\hat{A} = \frac{n}{(n-1) \cdot (n-2)} \cdot \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^3}{m_2^{3/2}}, \quad (1.31)$$

где n – объем выборки. **Стандартная ошибка оценки асимметрии:**

$$S_{\hat{A}} = \sqrt{\frac{6 \cdot n \cdot (n-1)}{(n-2) \cdot (n+1) \cdot (n+3)}}. \quad (1.32)$$

Несмещенная оценка эксцесса по выборке может быть найдена по формуле

$$\hat{E} = \frac{n \cdot (n+1)}{(n-1)(n-2)(n-3)} \cdot \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^4}{m_2^2} - 3 \frac{(n-1)^2}{(n-2)(n-3)}. \quad (1.33)$$

Стандартная ошибка оценки эксцесса:

$$S_{\hat{E}} = 2 \cdot S_{\hat{A}} \sqrt{\frac{n^2 - 1}{(n - 3) \cdot (n + 5)}}. \quad (1.34)$$

Зависимость стандартных ошибок оценок асимметрии и эксцесса от объема выборки приведена в таблице 1.7.

Таблица 1.7 – Стандартные ошибки оценок асимметрии и эксцесса

<i>n</i>	4	5	6	7	8	9
$S_{\hat{A}}$	1,014	0,913	0,845	0,794	0,752	0,717
$S_{\hat{E}}$	2,619	2	1,741	1,587	1,481	1,4
<i>n</i>	10	15	20	25	50	100
$S_{\hat{A}}$	0,687	0,58	0,512	0,464	0,337	0,241
$S_{\hat{E}}$	1,334	1,121	0,992	0,902	0,662	0,478

С помощью асимметрии и эксцесса можно произвести приблизительную оценку вида закона распределения.

Доверительные интервалы для асимметрии и эксцесса:

$$\hat{A} \pm z_{\alpha} \cdot S_{\hat{A}} \quad \text{и} \quad \hat{E} \pm z_{\alpha} \cdot S_{\hat{E}},$$

где z_{α} - вероятность попадания в двусторонний доверительный интервал нормального распределения. Для уровня значимости $\alpha = 0,05$ $z_{\alpha} = 1,96 \approx 2$. Таким образом, если выполняются условия:

$$|\hat{A}/S_{\hat{A}}| < 2 \quad \text{и} \quad |\hat{E}/S_{\hat{E}}| < 2,$$

то есть основание для предположения гипотезы о нормальном законе распределения. Такая оценка является приблизительной и используется, как правило, для выборок небольшого объема ($n < 100$).

Пример 1.5

Проведем проверку гипотезы о нормальности распределения результатов испытаний относительной разрывной нагрузки хлопчатобумажной пряжи с помощью пакета прикладных программ STATISTICA. Исходные данные представлены на рисунке 1.19.

	1 Var1	2 Var2	3 Var3	4 Var4
1	7,22	8,09	8,99	9,54
2	7,07	8,08	8,92	9,6
3	7,07	8,23	9,02	9,51
4	7,13	8,06	8,98	9,44
5	7,14	8,18	8,87	9,58

Рисунок 1.19

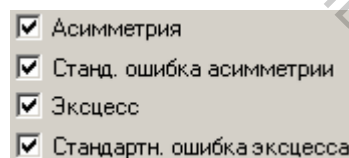


Рисунок 1.20

Запустив модуль *Анализ – Основные статистики и таблицы – Описательные статистики* и выбрав в параметрах расчет асимметрии, эксцесса и их стандартных ошибок (рисунок 1.20), получим таблицу значений (рисунок 1.21).

Переменная	Асимметрия	Стд. ош. Асимметрия	Эксцесс	Стд. ош. Эксцесс
Var1	0,847582	0,912871	0,33247	2,000000
Var2	0,764392	0,912871	-1,74370	2,000000
Var3	-0,700028	0,912871	-0,90181	2,000000
Var4	-0,762285	0,912871	0,03800	2,000000

Рисунок 1.21

Стандартная ошибка асимметрии, как и стандартная ошибка эксцесса, зависит только от объема выборки, поэтому соответствующие столбцы заполнены одинаковыми значениями. Как видно из рисунка 1.21, ни одна из оценок асимметрии не превосходит удвоенного значения стандартной ошибки асимметрии, аналогично ни одна из оценок эксцесса не превосходит удвоенного значения стандартной ошибки эксцесса. Таким образом, нет оснований для отклонения гипотезы о нормальности экспериментальных данных.

Для оценки асимметрии и эксцесса в Excel используются функции СКОС и ЭКСЦЕСС соответственно. Для вычисления в Excel их стандартных ошибок необходимо воспользоваться формулами (1.32) и (1.34).

Для проверки гипотезы о законе распределения случайной величины по выборке большого объема ($n > 100$) используют **критерий согласия Пирсона** χ^2 .

Для проверки нулевой гипотезы H_0 о том, что генеральная совокупность распределена по предполагаемому закону, экспериментальные значения разбиваются на k интервалов, в каждом из которых не менее 10 значений (интервалы с меньшим количеством значений объединяются с соседними), и вычисляют меру расхождения между наблюдаемым и предполагаемым законом распределения:

$$\chi^2_{\text{н}} = \sum_{i=1}^k \frac{(O_i - E_i)^2}{E_i} = \sum_{i=1}^k \frac{(m_i - n \cdot p_i)^2}{n \cdot p_i}, \quad (1.35)$$

где O_i – частота попадания экспериментальных значений в i -й интервал; E_i – теоретическая частота попадания значений в i -й интервал (для предполагаемого закона); m_i – количество попаданий экспериментальных значений в i -й интервал; n – общее количество наблюдений; p_i – вероятность попадания в i -й интервал для предполагаемого распределения.

$$p_i = \int_{a_i}^{b_i} f(x) dx,$$

где a_i и b_i – границы i -го интервала; $f(x)$ – функция плотности вероятности предполагаемого закона распределения.

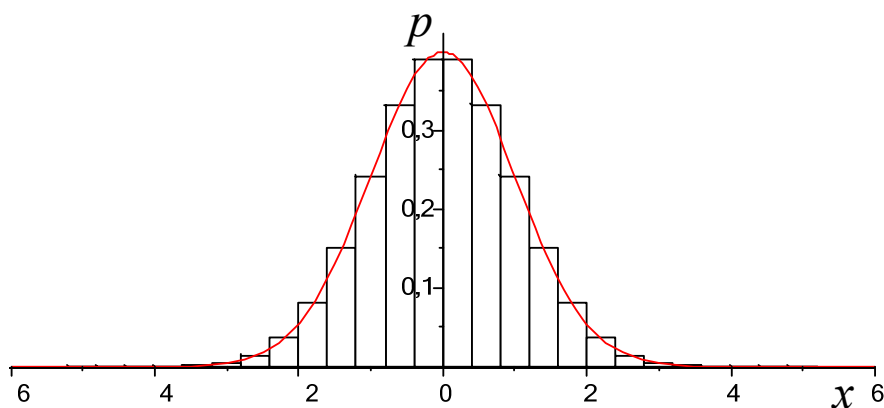


Рисунок 1.22 – Приближение эмпирического и теоретического распределений

Чем меньше величина $\chi^2_{\text{н}}$, тем меньше расхождение между наблюдаемым и предполагаемым законом распределения. Значение критерия $\chi^2_{\text{н}}$ является случайной величиной, распределенной по закону Пирсона χ^2 (1.13), с количеством степеней свободы:

$$f = k - r - 1,$$

где k – количество интервалов, на которые разбит диапазон; r – число параметров предполагаемого закона распределения, которые оцениваются по данным выборки. Для нормального распределения $r = 2$ (математическое ожидание μ и стандартное отклонение σ).

Для принятия гипотезы H_0 на заданном уровне значимости α (например, $\alpha = 0,05$) должно выполняться условие:

$$\alpha \leq p\text{-value} = \int_{\chi^2_{\text{н}}}^{\infty} f(\chi^2) d\chi^2_{\text{н}}.$$

Для различных значений α (рисунок 1.23) и различного количества степеней свободы f рассчитаны и сведены в таблицы критические значения критерия Пирсона $\chi^2_{\text{к}}[\alpha]$. Задаваясь уровнем значимости α , находят критическое значение $\chi^2_{\text{кр}}$. Таким образом, **для принятия гипотезы H_0 на заданном уровне значимости α** должно выполняться условие:

$$\chi^2_{\text{н}} \leq \chi^2_{\text{к}}[\alpha; f].$$

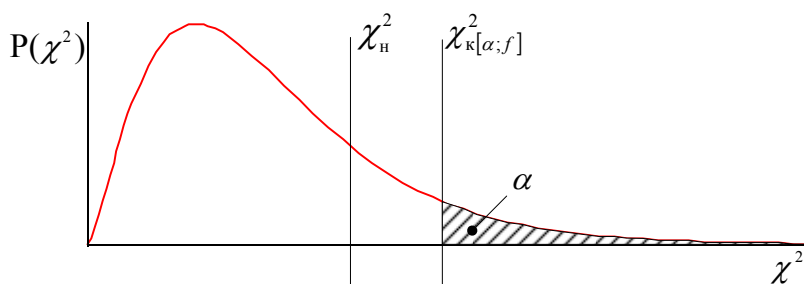


Рисунок 1.23 – Критическая область критерия χ^2

Пример 1.6

Покажем на примере использования пакета прикладных программ STATISTICA проверку гипотезы о нормальном законе распределения экспериментальных данных. При обследовании гребнечесальной ленты из средневолокнистого хлопкового волокна 4-I селекционного сорта Аш-хабад получена таблица, содержащая значения длин 200 волокон (рисунок 1.24).



	1			
	L, мм			
1	8			
2	9,4			
3	11,7			
4	10,4			
5	9,6			
6	10,1			
7	11,8			
8	9,4			
9	14,1			
10	13,4			

Рисунок 1.24

После запуска модуля *Анализ – Подгонка распределений* на экране появится диалоговое окно, позволяющее выбрать вид модельного распределения для проверки гипотезы согласия (рисунок 1.25).

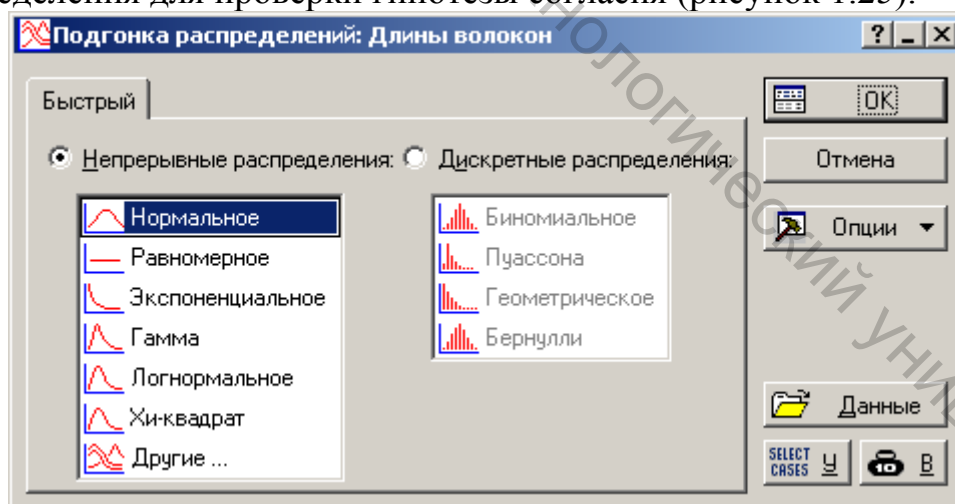


Рисунок 1.25

Для проверки гипотезы о нормальном распределении длин волокон в ленте выберем соответствующую опцию (рисунок 1.25).

В следующем диалоговом окне (рисунок 1.26) необходимо выбрать столбец таблицы, содержащий экспериментальные данные (L , мм).

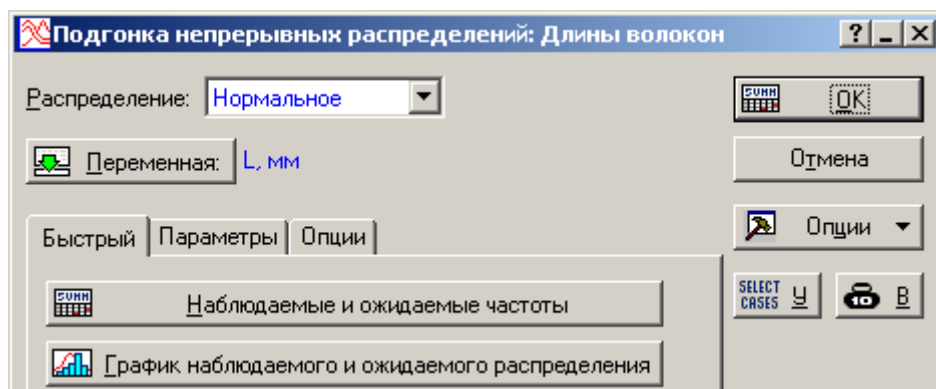


Рисунок 1.26

С помощью опции **график наблюдаемого и ожидаемого распределения** можно отобразить график, представляющий собой совмещенную кривую нормального распределения и гистограмму, построенную по исходным данным (рисунок 1.27).

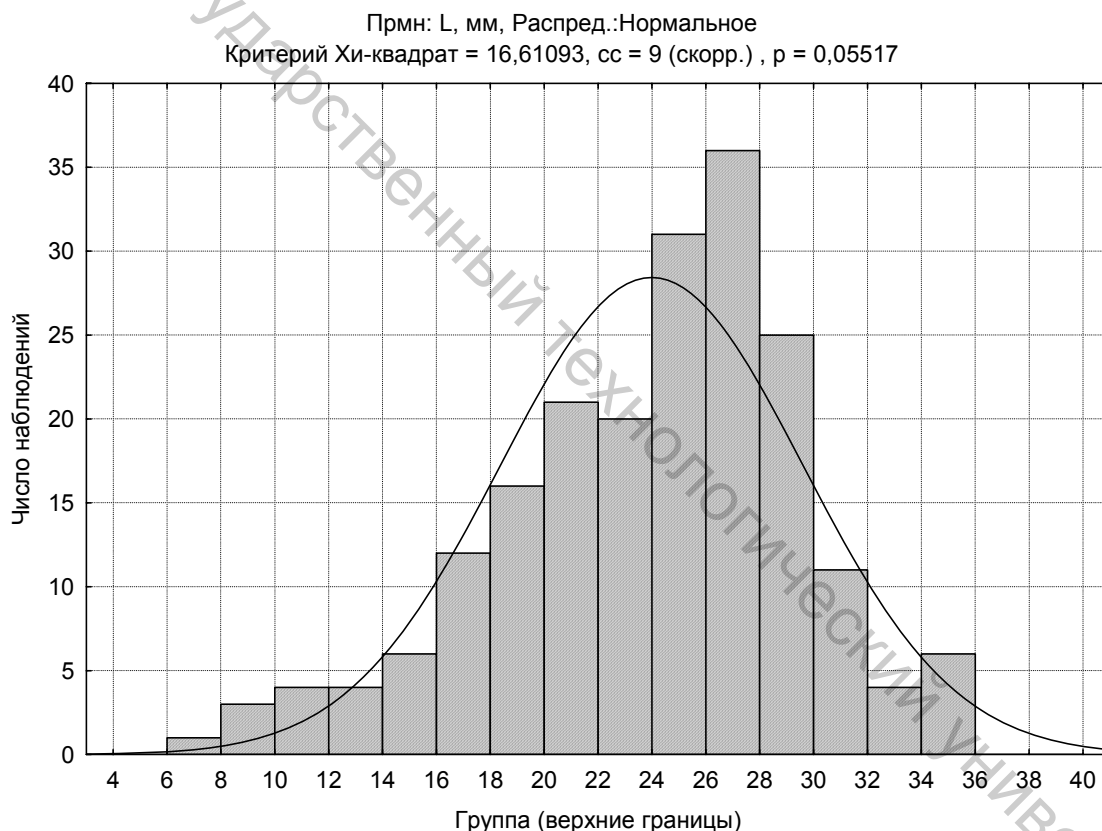


Рисунок 1.27 – Проверка критерия согласия Пирсона χ^2

Так как в приведенном примере (рисунок 1.27) достигаемый уровень значимости больше $\alpha = 0,05$ (p -value = 0,05517 > α), то нет оснований для отклонения гипотезы о нормальном распределении длин волокон.

Для выборок малого объема ($n < 100$) наибольшей мощностью при проверке нормальности распределения обладает **критерий W Шапиро-Уилка** (Samuel Shapiro и Martin Wilk).

Процедура состоит из нескольких этапов. **Первый этап** – построение вариационного ряда, то есть сортировка значений в выборке в порядке возрастания $x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_{n-1} \leq x_n$. **Второй этап** – вычисление статистики:

$$Q = n \cdot m_2 = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = S^2 \cdot (n-1),$$

где n – объем выборки; m_2 – второй центральный момент случайной величины (1.28). **Третий этап** – выбор уровня значимости α и вычисление статистики:

$$b = \sum_{i=1}^k (a_i (x_{(n-i+1)} - x_i)) = a_1 (x_{(n)} - x_1) + a_2 (x_{(n-1)} - x_2) + \dots + a_k (x_{(n-i+1)} - x_k),$$

где k при четном n (объеме выборки) $k = n/2$, при нечетном: $k = (n-1)/2$; коэффициенты a_{n-i+1} выбираются из таблицы (приложение 6).

Четвертый этап – вычисление наблюдаемого значения критерия:

$$W_H = \frac{b^2}{Q}.$$

Условие отклонения нулевой гипотезы о нормальном распределении выборочных данных:

$$W_H < W_{к(\alpha)},$$

где W_H – наблюдаемое значение критерия; $W_{к(\alpha)}$ – критическое значение критерия для выбранного уровня значимости.

Пример 1.7

Выборка (7,29; 7,22; 6,92; 7,12; 7,08). Вариационный ряд (6,92; 7,08; 7,12; 7,22; 7,29). $n=5$; $k = (n-1)/2 = 2$;

$$b = 0,6646 \cdot (7,29 - 6,92) + 0,2413 \cdot (7,22 - 7,08) = -0,27968;$$

$$\bar{x} = (6,92 + 7,08 + 7,12 + 7,22 + 7,29)/5 = 7,126;$$

$$Q = (6,92 - 7,126)^2 + (7,08 - 7,126)^2 + (7,12 - 7,126)^2 + (7,22 - 7,126)^2 + (7,29 - 7,126)^2 = 0,08032;$$

$$W_H = b^2/Q = (-0,27968)^2/0,08032 = 0,974.$$

Для уровня значимости $\alpha = 0,05$ критическое значение статистики $W_{к(\alpha)} = 0,762$ (приложение 6). Так как $W_H > W_{к(\alpha)}$, то нет оснований для отклонения нулевой гипотезы о нормальном распределении выборочных данных.

Для проверки гипотезы о нормальном распределении выборочных данных в пакете прикладных программ Statistica необходимо записать исходные данные в виде таблицы (рисунок 1.28 а) и запустить модуль *Анализ – Основные статистики и таблицы – Описательные статистики*. На вкладке *Нормальность* выбрать соответствующие пункты (рисунок 1.28 б, в), после чего в верхней части построенной гистограммы (рисунок 1.29) будет отображено наблюдаемое значение критерия Шапиро-Уилка ($W = 0,97405$) и достигаемый уровень значимости ($p = 0,90057$). Так как достигаемый уровень значимости больше 0,05, то нет оснований для отклонения нулевой гипотезы о нормальном распределении выборочных данных.



Рисунок 1.28

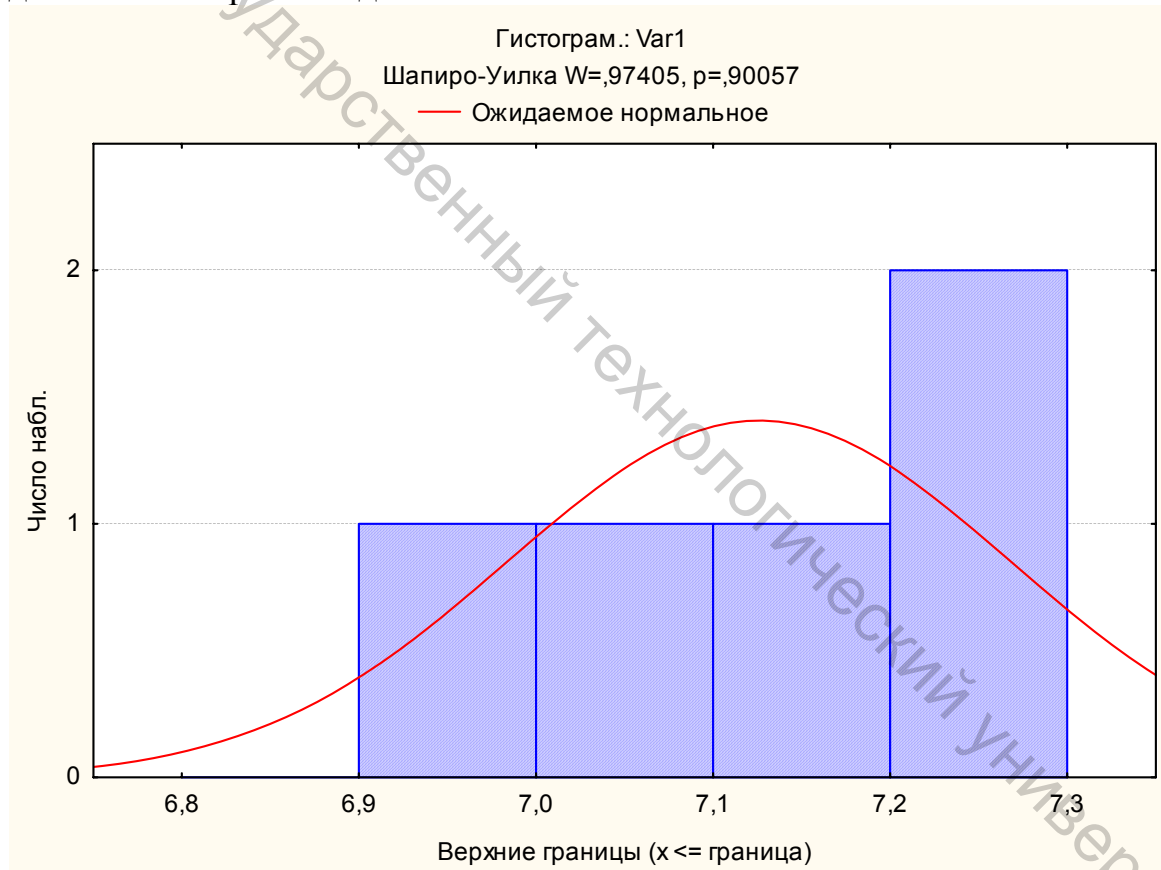


Рисунок 1.29

1.4 Доверительные интервалы и ошибки определения параметров выборки

Каждый раз при повторном проведении опытов при одинаковых условиях получают новые значения оценок параметров выборки: выбо-

точного среднего $\bar{x}$ и стандартного отклонения s . Чем больше измерений n в повторных сериях опытов, тем меньше разброс оценок параметров выборки, и для выборок бесконечно больших объемов:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \bar{x} = \mu \quad \text{и} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} s = \sigma.$$

Так как при проведении экспериментальных исследований, как правило, имеют дело с выборками небольшого объема ($n < 100$), то встает вопрос о надежности полученных оценок параметров выборки. Для определения интервала, в который с заданной вероятностью попадает истинное значение оцениваемого параметра выборки, используют **интервальное оценивание**. Оценка параметра выборки θ называется интервальной, если она определяется двумя значениями: θ_1 и θ_2 – границами интервала.

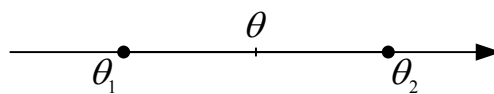


Рисунок 1.30

Границы **доверительного интервала** с заданной **доверительной вероятностью** p накрывают истинное значение θ случайной величины. Чем выше доверительная вероятность p , тем шире границы доверительного интервала и тем ниже уровень значимости $\alpha = (1 - p)$.

В теории вероятности центральная предельная теорема утверждает, что дисперсия s^2 выборочного среднего $\bar{x}$ в n раз меньше дисперсии генеральной совокупности σ^2 . Доверительный интервал для математического ожидания определяется как:

$$\bar{x} - \delta \leq \mu \leq \bar{x} + \delta, \quad (1.36)$$

где $\bar{x}$ – оценка математического ожидания (выборочное среднее); μ – математическое ожидание; δ – **уровень надежности**. Уровень надежности для математического ожидания при **неизвестной** дисперсии:

$$\delta = t_{\alpha, f} \frac{s}{\sqrt{n}},$$

где s – выборочная оценка среднеквадратического отклонения; n – объем выборки, величину $s/\sqrt{n}$ называют **стандартной ошибкой**; $t_{\alpha, f}$ – квантиль распределения Стьюдента (1.16), определяемая для заданного уровня значимости α и числа степеней свободы $f = n - 1$.

Уровень надежности для математического ожидания при **известной** дисперсии σ^2 :

$$\delta = z_{\alpha} \frac{\sigma}{\sqrt{n}},$$

где σ – известное значение среднеквадратического отклонения; z_{α} – квантиль стандартного нормального распределения.

При неизвестной дисперсии и **большой выборке** ($n > 100$) уровень надежности можно рассчитать как:

$$\delta = z_{\alpha} \frac{s}{\sqrt{n}}.$$

Таким образом, можно говорить об ошибке определения среднего значения и доверительной вероятности:

$$\mu = \bar{x} \pm \delta \quad \text{и} \quad P(\bar{x} - \delta \leq \mu \leq \bar{x} + \delta) = p.$$

Доверительный интервал для дисперсии при неизвестном μ :

$$\frac{(n-1)s^2}{\chi_{\frac{\alpha}{2};f}^2} \leq \sigma^2 \leq \frac{(n-1)s^2}{\chi_{1-\frac{\alpha}{2};f}^2}, \quad (1.37)$$

где n – величина выборки; f – число степеней свободы ($f = n - 1$); $\chi_{\frac{\alpha}{2};f}^2$ и $\chi_{1-\frac{\alpha}{2};f}^2$ – квантили распределения Пирсона χ^2 (1.13).

Пример 1.8

Из партии пряжи была взята выборка из $n = 10$ паковок, в результате взвешивания получены значения (кг): 3,01; 3,07; 2,97; 3,03; 3,01; 2,98; 3,02; 2,93; 2,99; 2,99. Необходимо построить доверительный интервал для среднего значения массы паковки при уровне значимости $\alpha = 0,05$. Выборочное среднее значение массы паковки $\bar{x} = 3$ кг. Выборочная оценка среднеквадратического отклонения $s = 0,0377$. Так как выборка малого объема, то для определения уровня надежности используем статистику Стьюдента $t_{\alpha;n-1} = t_{0,05;9} = 2,262$. Уровень надежности:

$$\delta = t_{\alpha,f} \frac{s}{\sqrt{n}} = 2,262 \cdot \frac{0,0377}{\sqrt{10}} = 0,0265 \text{ кг.}$$

Таким образом, доверительный интервал для среднего значения массы паковки ($\mu = \bar{x} \pm \delta$) от 2,9735 кг до 3,0265 кг.

1.4.1 Определение размера выборки при оценке среднего значения

На основе интервального оценивания параметров выборки можно оценить размер выборки, необходимый для достижения заданного уровня значимости. Для того, чтобы увеличить надежность получаемой оценки средней величины, необходимо сузить доверительный интервал. Этого можно добиться увеличением числа измерений n . Если известна величина стандартного отклонения σ , то уровень надежности для нормально распределенной выборки:

$$\delta = z_p \frac{\sigma}{\sqrt{n}},$$

где z_p – квантиль стандартного нормального распределения ($z_{0,9} = 1,64$; $z_{0,95} = 1,96$; $z_{0,99} = 2,58$) (таблица 1.8). Таким образом, задаваясь доверительной вероятностью p ($p = 0,9$; $p = 0,95$; $p = 0,99$) и величиной уровня надежности δ , число необходимых измерений можно найти:

$$n = \left(\frac{z_p}{\delta} \right)^2 \sigma^2.$$

Так как величина стандартного отклонения σ , как правило, неизвестна, то при больших объемах выборки вместо нее может использоваться ее оценка s :

$$n = \left(\frac{z_p}{\delta} \right)^2 s^2.$$

Такая оценка объема выборки является приблизительной, так как оценка стандартного отклонения s также зависит от объема выборки.

При малых объемах выборки используется статистика Стьюдента $t_{\alpha, n-1}$, которая также зависит от объема выборки:

$$n = \left(\frac{t_{\alpha, f}}{\delta} \right)^2 s^2,$$

поэтому такая оценка является грубой. Для грубой оценки может быть использовано табличное значение статистики Стьюдента $t_{\alpha, n-1}$ для объема выборки, по которой была рассчитана оценка стандартного отклонения s .

Пример 1.9

Продолжая пример 1.8, провести оценку необходимого числа взвешиваний паковок пряжи для определения массы паковки с доверительной ошибкой $\delta = 0,02$. Оценка среднеквадратического отклонения $s = 0,0377$; статистика Стьюдента $t_{\alpha; n-1} = t_{0,05; 9} = 2,262$; необходимое число взвешиваний паковок пряжи:

$$n = \left(\frac{t_{\alpha, f}}{\delta} \right)^2 s^2 = \left(\frac{2,262}{0,02} \right)^2 0,0377^2 \approx 18.$$

Так как с уменьшением числа степеней свободы статистика Стьюдента уменьшается: $t_{\alpha; n-1} = t_{0,05; 18-1} = 2,110$, то можем скорректировать полученную оценку числа взвешиваний паковок пряжи $n = (2,11/0,02)^2 \cdot (0,0377)^2 \approx 16$.

1.4.2 Обнаружение выбросов в выборочных данных и отсеивание измерений с грубой погрешностью

Вероятность того, что случайная величина ξ окажется внутри интервала $x_0 \pm \Delta x$, определяется как:

$$P(x_0 - \Delta x \leq \xi \leq x_0 + \Delta x) = \int_{x_0 - \Delta x}^{x_0 + \Delta x} f(\xi) d\xi, \quad (1.38)$$

где $f(\xi)$ – функция плотности вероятности случайной величины.

С помощью (1.38) можно показать, что для нормального закона распределения вероятность появления значения, отклоняющегося от математического ожидания μ на расстояние более 3σ , составляет менее 0,03 % (рисунок 1.31). Это свойство получило широкую известность как эмпирическое **правило 3σ** .

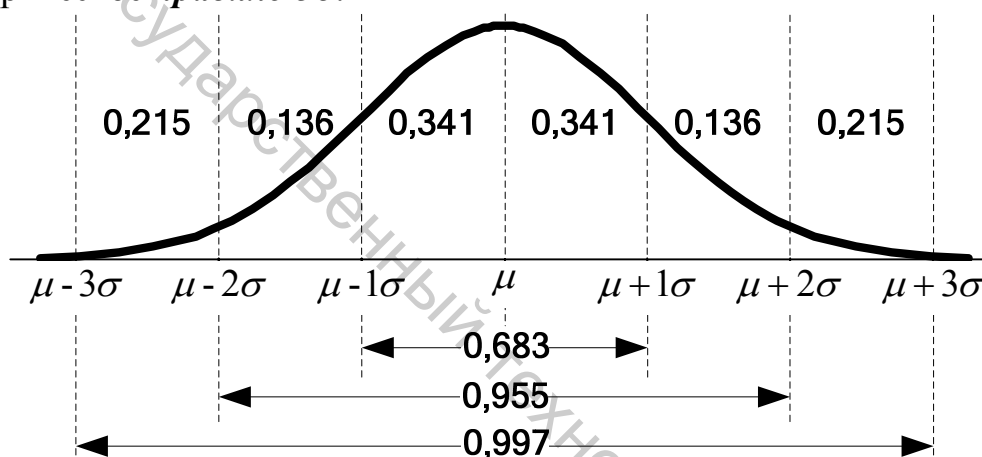


Рисунок 1.31 – Вероятности попадания случайной величины ξ в отрезки $\mu \pm \sigma$, $\mu \pm 2\sigma$, $\mu \pm 3\sigma$

Согласно правилу 3σ , если отклонение одного измерения превышает в три раза стандартное отклонение σ всех измерений, то с вероятностью 0,997 оно может быть признано **выбросом**.

Таблица 1.8 – Вероятность попадания значений в интервал

Интервал	Вероятность попадания	Вероятность непадения
$\mu \pm 0,674\sigma$	0,5	0,5
$\mu \pm 1,645\sigma$	0,9	0,1
$\mu \pm 1,960\sigma$	0,95	0,05
$\mu \pm 2,576\sigma$	0,99	0,01
$\mu \pm 3,2906\sigma$	0,999	0,001

Поскольку величина σ , как правило, неизвестна, то правило трех σ преобразуется в правило трех s (**правило трех стандартных отклонений**):

$$|x - \bar{x}| \geq 3s.$$

Из (1.38) также вытекает **парадокс нулевой вероятности**: при $\Delta x = 0$ вероятность события $P(\xi = x_0)$ равна нулю. Это означает, что вероятность того, что случайная величина будет в точности равна заранее определенному значению, равна нулю. Но для любого $\Delta x > 0$ вероятность не равна нулю.

Если в экспериментальных данных находятся значения, резко отличающиеся от других, а ошибки при их регистрации или проведении опыта не установлены, то необходимо провести проверку, не содержат ли они грубых погрешностей (выбросов, англ. **outliers**). Эмпирическое правило трех сигм не является статистическим критерием и не может служить основанием для исключения резко выделяющихся значений из выборки. Для принятия решения, является ли результат измерения выбросом, применяется **критерий Граббса** (*Frank Grubbs*).

Процедура проверки. Рассматриваются нулевая гипотеза H_0 : выборка не содержит выбросов; и альтернативная H_a : в выборке по крайней мере один выброс, это наибольшее (или наименьшее) значение в выборке.

Для измерения с наибольшим отклонением от среднего значения выборки вычисляется наблюдаемое значение критерия Граббса:

$$G_n = \frac{|\bar{x} - x|}{S},$$

где $\bar{x}$ – среднее значение выборки; S – стандартное отклонение выборки; x – проверяемое значение.

Условие **отклонения** нулевой гипотезы, т. е. признания проверяемого значения выбросом:

$$G_n > G_k.$$

Критическое значение критерия Граббса (приложение 4) рассчитывается по формуле

$$G_k = \frac{(n-1)}{\sqrt{n}} \sqrt{\frac{t_{(\alpha/n, n-2)}^2}{n-2 + t_{(\alpha/n, n-2)}^2}},$$

где $t_{(\alpha/n, n-2)}$ – квантиль двустороннего распределения Стьюдента, вместо нее может использоваться $t_{(\alpha/(2 \cdot n), n-2)}$ – квантиль одностороннего распределения Стьюдента; n – количество значений; α – уровень значимости.

Пример 1.10

Проверить на наличие выбросов результаты измерения крутки (кр/м) хлопчатобумажной пряжи пневмомеханического способа пряже-ния, экспериментальные значения приведены в таблице 1.9.

Таблица 1.9 – Экспериментальные данные

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
x_i	439,69	452,12	451,27	449,81	456,23	450,95	460,91	442,22	414,29	449,37

Проверим, является ли минимальное значение $x_9 = 414.29$ выбросом (рисунок 1.32).

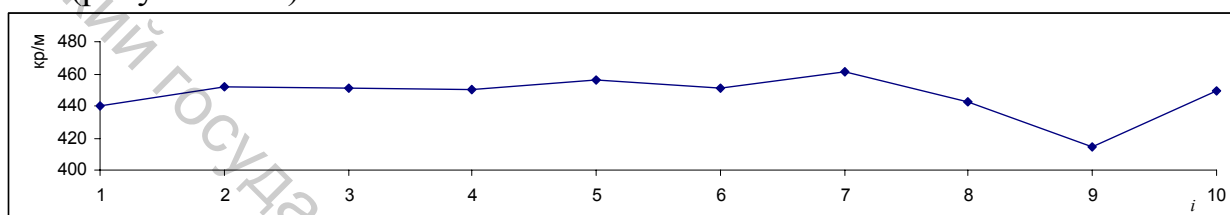


Рисунок 1.32

Проведем расчет $\bar{x} = 446,686$; $S = 12,899$; $G_H = |\bar{x} - x|/S = 2,511$. Для уровня значимости $\alpha = 0,05$ критическое значение критерия Граббса $G_K = 2,29$ (приложение 4). Так как $G_H > G_K$, то нужно отклонить нулевую гипотезу, т. е. значение 414,29 с доверительной вероятностью 0,95 можно признать выбросом.

Критическое значение критерия Граббса можно рассчитать в Excel (рисунок 1.33).

	A	B	C
1	n	α	G
2	10	0,05	2,289954084

Рисунок 1.33

В ячейку C2 введена формула:

`=((A2-1)/КОРЕНЬ(A2))*КОРЕНЬ(СТЮДРАСПОБР(B2/(A2);A2-2)^2/(A2-2+СТЮДРАСПОБР(B2/(A2);A2-2)^2))`

где в ячейке A2 количество значений в выборке n , а в ячейке B2 – уровень значимости α .

1.4.3 Графическое представление выборочных данных

Для графического представления выборочных данных используют **диаграммы размаха** (рисунок 1.34), которые также называют **ящик с усами** (англ. *Box & Whisker Plot*, *Box Plot*).

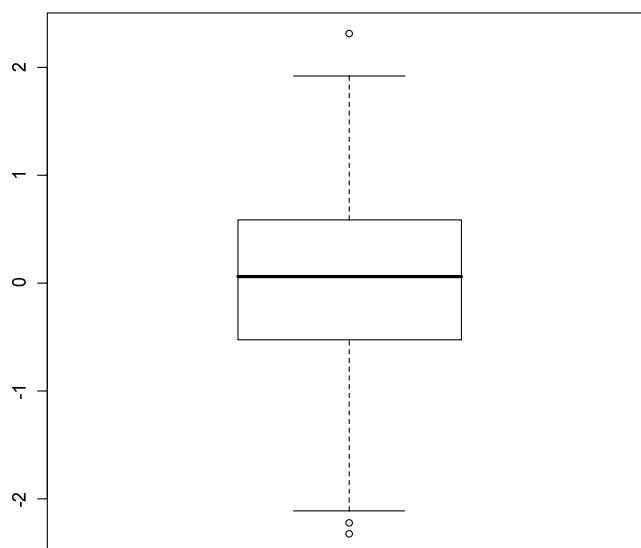


Рисунок 1.34 – Диаграмма размаха

Высота «ящика» обозначает диапазон, в который попадает 50% значений, отметка на ящике обозначает медиану, «усы» показывают величину максимального и минимального значения. Рядом с «ящиком» отображаются значения, определенные как *выбросы*, т.е. отклоняющиеся от среднего значения более чем на 3σ . Эти значения не используются при построении самой диаграммы.

Иногда, при построении диаграммы размаха высота «ящика» может обозначать границы доверительного интервала, а отметка на ящике – выборочное среднее.

2 Регрессионный анализ

Все модели плохи, но некоторыми можно пользоваться.
Джордж Бокс

Часто в прикладных исследованиях необходимо построить математическую модель процесса или объекта, устанавливающую связь между входными параметрами (**факторами**) и выходной переменной (**откликом**). Как правило, информация о функционировании процесса или объекта представляет собой так называемую таблично заданную функцию, устанавливающую связь между зависимой переменной и входными параметрами. Процесс замены таблично заданной функции аналитической называется **аппроксимацией** (лат. *approximo* – приближаюсь), а сама функция – аппроксимирующей. Для нахождения вида и параметров математической модели, описывающей связь между входными и выходными параметрами исследуемого объекта или процесса, используется математический аппарат регрессионного анализа. В регрессионном анализе модель, описывающая зависимость среднего значения выходной переменной от фиксированных значений входных параметров, называют **регрессионной моделью**.

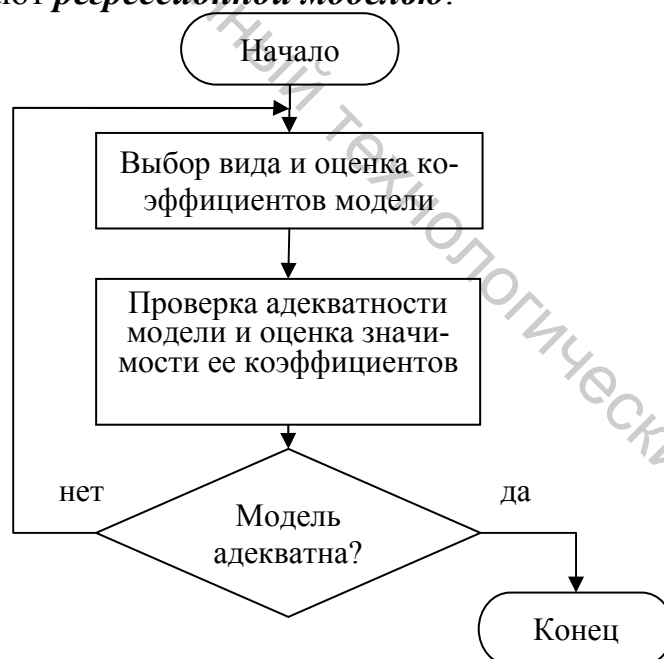


Рисунок 2.1 – Процесс поиска модели технологического процесса

Процесс поиска модели технологического процесса (рисунок 2.1) начинается с выбора вида предполагаемой математической модели:

$$y = f(x, b_1, b_2, \dots, b_n),$$

оценки параметров которой $(b_1, b_2, \dots, b_n)$ необходимо определить. Предположение о виде математической модели может быть сделано на основе исследования экспериментальных данных или на основании априор-

ной информации, например, на основе знаний о физической природе исследуемого процесса. Для оценки коэффициентов регрессионной модели используется метод наименьших квадратов. Затем проводят проверку адекватности модели и оценку значимости ее коэффициентов. Если выбранная модель не согласуется с экспериментальными данными, выбирают новый вид модели и процедура повторяется.

Для использования математического аппарата регрессионного анализа должны выполняться условия:

- 1) ошибка измерения входного параметра x пренебрежительно мала, т. е. x является не случайной величиной;
- 2) ошибка выходного параметра ε имеет нормальный закон распределения с математическим ожиданием, равным нулю $M(\varepsilon) = 0$, т. е. выходной параметр y является случайной величиной, имеющей нормальный закон распределения, при этом ошибки ε в разных наблюдениях не зависят друг от друга, т. е. не коррелированы между собой;
- 3) дисперсия выходного параметра σ_y^2 одинакова для всех наблюдений (не зависит от уровня входного параметра).

Из перечисленных условий вытекают требования нормальности закона распределения экспериментальных данных и однородности дисперсий выходного параметра y на разных уровнях входного параметра x .

2.1 Линейная модель

2.1.1 Оценка параметров модели

Линейная однофакторная регрессионная модель имеет вид:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon, \quad (2.1)$$

где β_0 , β_1 – коэффициенты уравнения регрессии; ε – случайная величина (ошибка). На рисунке 2.2 приведена диаграмма рассеяния, показывающая связь среднего значения выходного параметра y от уровней входного параметра x . Величина ошибки ε неизвестна и меняется от наблюдения к наблюдению, известна только выборочная оценка дисперсии выходного параметра. При этом коэффициенты β_0 и β_1 остаются постоянными. Точные значения коэффициентов регрессии можно получить при бесконечно большом объеме измерений.

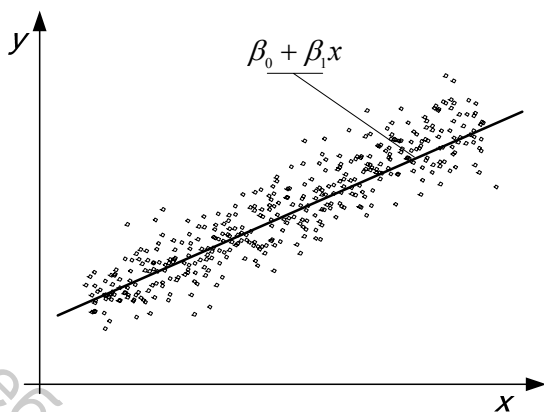


Рисунок 2.2

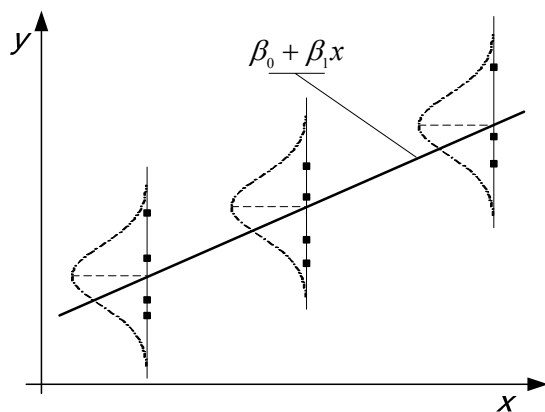


Рисунок 2.3

На основе ограниченного объема экспериментальных данных (рисунок 2.3) можно определить *оценки* b_0 и b_1 коэффициентов β_0 и β_1 , при этом уравнение регрессии имеет вид:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x, \quad (2.2)$$

где $\hat{y}$ – обозначает *оценку* выходной переменной, т. е. предсказанное значение. Оценки коэффициентов β_0 и β_1 также могут обозначаться $b_0 = \hat{\beta}_0$ и $b_1 = \hat{\beta}_1$.

Параметры регрессионной модели оцениваются методом наименьших квадратов. **Метод наименьших квадратов (МНК)** позволяет найти такие оценки коэффициентов уравнения регрессии, что *сумма квадратов* отклонений уравнения регрессии от эмпирических данных *минимальна*:

$$\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^N e_i^2 \rightarrow \min. \quad (2.3)$$

Выражение (2.3) называют **функцией невязки**. Для модели (2.2) она имеет вид:

$$W(b_0, b_1) = \sum_{i=1}^N (y_i - b_0 - b_1 x_i)^2 \rightarrow \min. \quad (2.4)$$

Дифференцируя (2.4) по неизвестным коэффициентам и приравняв к нулю, после тождественных математических преобразований получим систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial W(b_0, b_1)}{\partial b_0} = -2 \sum_{i=1}^N (y_i - b_0 - b_1 x_i) = 0 \\ \frac{\partial W(b_0, b_1)}{\partial b_1} = -2 \sum_{i=1}^N x_i (y_i - b_0 - b_1 x_i) = 0 \end{cases} \Rightarrow \quad (2.5)$$

$$\begin{cases} Nb_0 + b_1 \sum_{i=1}^N x_i = \sum_{i=1}^N y_i \\ b_0 \sum_{i=1}^N x_i + b_1 \sum_{i=1}^N x_i^2 = \sum_{i=1}^N x_i y_i \\ b_0 + b_1 \bar{x} = \bar{y} \\ b_0 \bar{x} + b_1 \bar{x}^2 = \overline{xy} \end{cases} \Rightarrow$$

Для линейной однофакторной модели, решая систему уравнений (2.5), можно найти оценку коэффициента регрессии b_1 :

$$b_1 = \frac{\overline{xy} - \bar{x} \cdot \bar{y}}{\overline{x^2} - \bar{x}^2} \quad (2.6)$$

и оценку коэффициента регрессии b_0 :

$$b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x}. \quad (2.7)$$

Исходные и расчетные данные, используемые для нахождения оценок параметров уравнения однофакторной линейной регрессии, представлены в таблице 2.1. На каждом уровне входного параметра x (столбец 2) проводится серия опытов (столбец 3), по результатам которых определяется среднее значение выходного параметра y_i (столбец 4) и дисперсии выходного параметра в каждой серии опытов S_i^2 (столбец 5). Исходный набор данных состоит из N точек данных (x_i, y_i) , где $i = 1..N$.

Таблица 2.1 – Исходные и расчетные данные однофакторного регрессионного анализа

i	x_i	y_{ij}	y_i	S_i^2	$\hat{y}_i$	$e_i = y_i - \hat{y}_i$
1	2	3	4	5	6	7
1	x_1	$y_{1,1}, y_{1,2}, \dots, y_{1,m_1}$	y_1	S_1^2	$\hat{y}_1$	e_1
2	x_2	$y_{2,1}, y_{2,2}, \dots, y_{2,m_2}$	y_2	S_2^2	$\hat{y}_2$	e_2
...	...	...	...	...	...	...
N	x_N	$y_{N,1}, y_{N,2}, \dots, y_{N,m_N}$	y_N	S_N^2	$\hat{y}_N$	e_N
	$\bar{x}$		$\bar{y}$	$S_{\text{восп}}^2$		$S_{\text{ад}}^2$

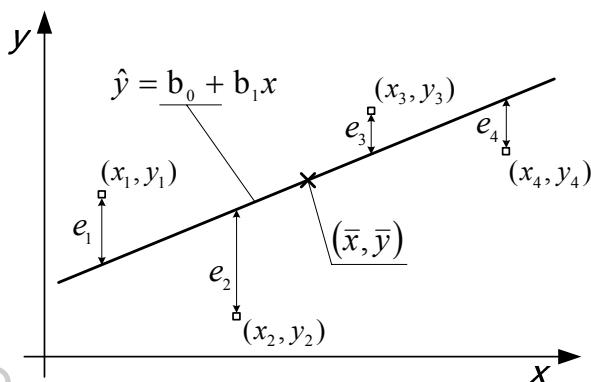


Рисунок 2.4

В таблице 2.1 i – номер серии опытов; $m_1, m_2, \dots, m_N$ – количество опытов в i -й серии; $y_1, y_2, \dots, y_N$ – средние значения выходного параметра в i -й серии:

$$y_i = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{m_i} y_{ij};$$

$\hat{y}_1, \hat{y}_2, \dots, \hat{y}_N$ – оценка среднего значения выходного параметра в i -й серии, рассчитанная по уравнению регрессии (2.2); $e_1, e_2, \dots, e_N$ –

невязки (рисунок 2.4), разность между значениями выходного параметра, определенными экспериментально и оцененными с помощью регрессионной модели $e_i = y_i - \hat{y}_i$.

Уравнение линейной регрессии всегда проходит через точку $(\bar{x}, \bar{y})$, рисунок 2.4. В связи с этим при переходе к центрированному фактору упрощается нахождение оценок коэффициентов уравнения линейной регрессии, само уравнение примет вид:

$$\hat{y} = c_0 + c_1(x - \bar{x}), \quad (2.8)$$

оценки коэффициентов регрессии:

$$c_0 = \bar{y}, \quad c_1 = \overline{uy} / \overline{u^2} \quad \text{где } u = (x - \bar{x}),$$

связь между оценками коэффициентов регрессии c_0, c_1 и b_0, b_1 :

$$b_0 = c_0 - c_1 \bar{x}; \quad b_1 = c_1.$$

Линейная многофакторная регрессионная модель. В общем виде, когда количество входных параметров (факторов) больше одного ($k > 1$), линейная многофакторная регрессионная модель имеет вид:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + \varepsilon \quad \text{или} \quad y = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_j + \varepsilon, \quad (2.9)$$

ее оценка:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_k x_k \quad \text{или} \quad \hat{y} = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j, \quad (2.10)$$

Нахождение оценок коэффициентов линейной многофакторной регрессионной модели методом наименьших квадратов сводится к решению системы уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} Nb_0 + b_1 \sum_{i=1}^N x_{i1} + b_2 \sum_{i=1}^N x_{i2} + \dots + b_k \sum_{i=1}^N x_{ik} = \sum_{i=1}^N y_i \\ b_0 \sum_{i=1}^N x_{i1} + b_1 \sum_{i=1}^N x_{i1}^2 + b_2 \sum_{i=1}^N x_{i2} x_{i1} + \dots + b_k \sum_{i=1}^N x_{ik} x_{i1} = \sum_{i=1}^N y_i x_{i1} \\ b_0 \sum_{i=1}^N x_{i2} + b_1 \sum_{i=1}^N x_{i1} x_{i2} + b_2 \sum_{i=1}^N x_{i2}^2 + \dots + b_k \sum_{i=1}^N x_{ik} x_{i2} = \sum_{i=1}^N y_i x_{i2} \\ \dots \\ b_0 \sum_{i=1}^N x_{ik} + b_1 \sum_{i=1}^N x_{i1} x_{ik} + b_2 \sum_{i=1}^N x_{i2} x_{ik} + \dots + b_k \sum_{i=1}^N x_{ik}^2 = \sum_{i=1}^N y_i x_{ik} \end{array} \right. \quad (2.11)$$

Решение этой системы удобно представить в матричной форме, при этом исходные данные и искомые коэффициенты записываются в следующем виде:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{N1} & x_{N2} & \dots & x_{Nk} \end{bmatrix}, Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_N \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \dots \\ b_k \end{bmatrix}, e = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \dots \\ e_N \end{bmatrix}, \quad (2.12)$$

где X – **матрица планирования**, матрица размерностью $N \times (k+1)$, столбцы соответствуют входным параметрам, единицы в первом столбце обозначают значение фиктивного параметра x_0 перед коэффициентом b_0 , каждая i -я строка ($i=1,2,\dots,N$) представляет собой вектор значений входных параметров при проведении i -й серии опытов; Y – вектор значений выходного параметра; B – вектор оценок коэффициентов регрессии; e – вектор значений отклонений экспериментальных значений выходного параметра от рассчитанных по уравнению регрессии (невязки).

Таким образом, задача нахождения коэффициентов регрессионной модели в матричном виде сводится к решению уравнения:

$$Y = XB + e. \quad (2.13)$$

Оценки коэффициентов регрессии B определяются как

$$B = (X^T X)^{-1} X^T Y. \quad (2.14)$$

Матрица $X^T X$ называется **информационной матрицей**, или матрицей Фишера, обратная к ней матрица $(X^T X)^{-1}$ называется **дисперсионно-ковариационной**. От свойств информационной матрицы непосредственно зависит точность оценок коэффициентов регрессии и оценок выходного параметра. Обязательным условием для нахождения оценок коэффициентов регрессии является условие невырожденности

информационной матрицы: $|X^T X| \neq 0$, т. е. ее определитель не должен быть равен нулю.

Оценки отклонений уравнения регрессии от экспериментальных данных:

$$e = Y - XB. \quad (2.15)$$

Можно показать использование МНК в матричной форме на примере нахождения коэффициентов модели:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x, \quad (2.16)$$

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_N \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_N \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \end{bmatrix}.$$

Найдем информационную матрицу:

$$X^T X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1 & x_2 & \dots & x_N \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N & \sum_{i=1}^N x_i \\ \sum_{i=1}^N x_i & \sum_{i=1}^N x_i^2 \end{bmatrix}.$$

Домножая $X^T X$ справа на B , получаем левую часть системы (2.11):

$$X^T X B = \begin{bmatrix} N & \sum_{i=1}^N x_i \\ \sum_{i=1}^N x_i & \sum_{i=1}^N x_i^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Nb_0 + b_1 \sum_{i=1}^N x_i \\ b_0 \sum_{i=1}^N x_i + b_1 \sum_{i=1}^N x_i^2 \end{bmatrix}.$$

Правая часть системы (2.11):

$$X^T Y = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1 & x_2 & \dots & x_N \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N y_i \\ \sum_{i=1}^N y_i x_i \end{bmatrix}.$$

Получаем:

$$X^T X B = X^T Y \quad \Leftrightarrow \quad \begin{bmatrix} nb_0 + b_1 \sum_{i=1}^N x_i \\ b_0 \sum_{i=1}^N x_i + b_1 \sum_{i=1}^N x_i^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N y_i \\ \sum_{i=1}^N y_i x_i \end{bmatrix}.$$

Домножая слева обе части полученного уравнения на матрицу $(X^T X)^{-1}$, обратную к $X^T X$, получим:

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

Заметим, что обратной матрицей A^{-1} называется матрица, в результате умножения которой на исходную $AA^{-1} = A^{-1}A = E$ получается единичная E :

$$E = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}.$$

Матрица $X^T X$ называется невырожденной, если ее определитель не равен нулю.

Далее, продолжая пример, дисперсионная матрица имеет вид:

$$\begin{aligned} (X^T X)^{-1} &= \begin{bmatrix} N & \sum_{i=1}^N x_i \\ \sum_{i=1}^N x_i & \sum_{i=1}^N x_i^2 \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} \cdot \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N x_i^2 & -\sum_{i=1}^N x_i \\ -\sum_{i=1}^N x_i & N \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\sum_{i=1}^N x_i^2}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} & \frac{-\sum_{i=1}^N x_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} \\ \frac{-\sum_{i=1}^N x_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} & \frac{N}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Таким образом, оценки коэффициентов регрессии:

$$B = (X^T X)^{-1} X^T Y = \begin{bmatrix} \frac{\sum_{i=1}^N x_i^2}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} & \frac{-\sum_{i=1}^N x_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} \\ \frac{-\sum_{i=1}^N x_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} & \frac{N}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N y_i \\ \sum_{i=1}^N y_i x_i \end{bmatrix} =$$

$$= \left[\frac{\sum_{i=1}^N x_i^2 \sum_{i=1}^N y_i - \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N y_i x_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} \right],$$

отсюда оценки коэффициентов b_0 , b_1 :

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^N x_i^2 \sum_{i=1}^N y_i - \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N y_i x_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2},$$

$$b_1 = \frac{N \sum_{i=1}^N y_i x_i - \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N y_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2}.$$

Пример 2.1

Рассмотрим пример расчета оценок коэффициентов однофакторной линейной регрессионной модели: $\hat{y} = b_0 + b_1 x$, описывающей связь между средним значением относительной разрывной нагрузки (y) хлопчатобумажной пряжи пневмомеханического способа прядения и круткой (x) в диапазоне 100-250 кр/м. По результатам проведения эксперимента получены данные, представленные в таблице 2.2. Число строк в таблице $N=4$.

Таблица 2.2 – Исходные и расчетные данные однофакторного регрессионного анализа

i	x_i	y_{i1}	y_{i2}	y_{i3}	y_{i4}	y_{i5}	y_i	S_i^2
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	100	7,29	7,22	6,92	7,12	7,08	7,126	0,02008
2	150	8,08	8,38	8,02	8,18	7,98	8,128	0,02552
3	200	8,84	9,12	8,90	9,13	8,79	8,956	0,02533
4	250	9,77	9,57	9,37	9,47	9,49	9,534	0,02248
	175						8,436	
	$\bar{x}$						$\bar{y}$	

Для применения метода наименьших квадратов значения выходного параметра y во всех сериях опытов должны иметь нормальный закон распределения, а дисперсии выходного параметра y во всех сериях опытов должны быть однородны.

Для проверки гипотезы о нормальном законе распределения значений выходного параметра воспользуемся критерием Шапиро-Уилка

(см. с. 36). В рассматриваемом примере наблюдаемое значение критерия для i -й серии опытов: $W_{H1} = 0,974$; $W_{H2} = 0,908$; $W_{H3} = 0,850$; $W_{H4} = 0,935$. Для уровня значимости $\alpha = 0,05$ и объема выборки $n = 5$ критическое значение статистики $W_{K(\alpha)} = 0,762$ (приложение 6). Так как во всех сериях опытов $W_H > W_{K(\alpha)}$, то нет оснований для отклонения нулевой гипотезы о нормальном распределении выборочных данных.

Столбец 7 (таблица 2.2) содержит средние значения наблюдений (столбцы 3, 4, 5, 6):

$$y_1 = (7,29 + 7,22 + 6,92 + 7,12 + 7,08)/5 = 7,126;$$

$$y_2 = (8,08 + 8,38 + 8,02 + 8,18 + 7,98)/5 = 8,128;$$

$$y_3 = (8,84 + 9,12 + 8,90 + 9,13 + 8,79)/5 = 8,956;$$

$$y_4 = (9,77 + 9,57 + 9,37 + 9,47 + 9,49)/5 = 9,534.$$

Оценки дисперсии каждой серии опытов:

$$S_1^2 = \frac{(7,29 - 7,126)^2 + (7,22 - 7,126)^2 + (6,92 - 7,126)^2 + (7,12 - 7,126)^2 + (7,08 - 7,126)^2}{5 - 1} =$$

$$= 0,02008;$$

$$S_2^2 = \frac{(8,08 - 8,128)^2 + (8,38 - 8,128)^2 + (8,02 - 8,128)^2 + (8,18 - 8,128)^2 + (7,98 - 8,128)^2}{5 - 1} =$$

$$= 0,02552;$$

$$S_3^2 = \frac{(8,84 - 8,956)^2 + (9,12 - 8,956)^2 + (8,90 - 8,956)^2 + (9,13 - 8,956)^2 + (8,79 - 8,956)^2}{5 - 1} =$$

$$= 0,02533;$$

$$S_4^2 = \frac{(9,77 - 9,534)^2 + (9,57 - 9,534)^2 + (9,37 - 9,534)^2 + (9,47 - 9,534)^2 + (9,49 - 9,534)^2}{5 - 1} =$$

$$= 0,02248.$$

Проверим однородность дисперсий с помощью критерия Кохрена, наблюдаемое значение критерия:

$$G = \frac{\max_{i=1}^k S_i^2}{\sum_{i=1}^k S_i^2} = \frac{0,02552}{0,02008 + 0,02552 + 0,02533 + 0,02248} = 0,2732.$$

Критическое значение $G_{(0,05;4;5)} = 0,6287$, так как $G = 0,2732 < G_{(0,05;4;5)} = 0,6287$, то выборки можно считать однородными.

Рассчитаем оценку коэффициента b_0 :

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^N x_i^2 \sum_{i=1}^N y_i - \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N y_i x_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2},$$

где:

$$\sum_{i=1}^N x_i^2 = (100^2 + 150^2 + 200^2 + 250^2) = 135000;$$

$$\sum_{i=1}^N y_i = (7,126 + 8,128 + 8,956 + 9,534) = 33,744;$$

$$\sum_{i=1}^N x_i = (100 + 150 + 200 + 250) = 700;$$

$$\sum_{i=1}^N y_i x_i = (100 \cdot 7,126 + 150 \cdot 8,128 + 200 \cdot 8,956 + 250 \cdot 9,534) = 6106,5;$$

$$N \sum_{i=1}^N x_i^2 = 4 \cdot 135000 = 540000;$$

$$\left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2 = (700)^2 = 490000;$$

таким образом:

$$b_0 = \frac{135000 \cdot 33,744 - 700 \cdot 6106,5}{540000 - 490000} = 5,6178.$$

Рассчитаем оценку коэффициента b_1 :

$$b_1 = \frac{N \sum_{i=1}^N y_i x_i - \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N y_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} = \frac{4 \cdot 6106,5 - 700 \cdot 33,744}{4 \cdot 135000 - 490000} = 0,016104.$$

Пример 2.2

Используя условие примера 2.1, найдем оценки коэффициентов регрессии с помощью матричной формы метода наименьших квадратов. Исходные данные запишем в виде (2.12):

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 100 \\ 1 & 150 \\ 1 & 200 \\ 1 & 250 \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} 7,126 \\ 8,128 \\ 8,956 \\ 9,534 \end{bmatrix}.$$

Найдем оценки коэффициентов регрессии по формуле (2.14):

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

$$X^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 100 & 150 & 200 & 250 \end{bmatrix},$$

$$X^T X = \begin{bmatrix} 4 & 700 \\ 700 & 135000 \end{bmatrix},$$

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \begin{bmatrix} 2,7 & -0,014 \\ -0,014 & 0,00008 \end{bmatrix},$$

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T = \begin{bmatrix} 1,3 & 0,6 & -0,1 & -0,8 \\ -0,006 & -0,002 & 0,002 & 0,006 \end{bmatrix}.$$

Таким образом:

$$\mathbf{B} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 5,6178 \\ 0,016104 \end{bmatrix}.$$

2.1.2 Оценка качества модели

Для оценки качества регрессионной модели рассчитываются: остаточная RSS , объясненная ESS и общая TSS сумма квадратов отклонений.

Остаточная сумма квадратов отклонений относительно регрессии (англ. **Residual Sum of Squares, RSS**) характеризует разность между экспериментальными данными и их оценками, рассчитанными с помощью модели:

$$RSS = SS_{ад} = SS_{ост} = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^N e_i^2 \rightarrow \min. \quad (2.18)$$

В идеальном случае остаточная сумма квадратов отклонений после определения параметров модели должна равняться нулю.

Сумма квадратов отклонений, объясненная регрессионной моделью (англ. **Explained Sum of Squares, ESS**), определяется как:

$$ESS = SS_{пер} = \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y})^2. \quad (2.19)$$

Общая сумма квадратов отклонений (англ. **Total Sum of Squares, TSS**) значений y_i и средних значений $\bar{y}$:

$$TSS = SS_{общ} = \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2. \quad (2.20)$$

Между RSS , ESS , TSS существует связь:

$$TSS = RSS + ESS. \quad (2.21)$$

Коэффициент детерминации R^2 показывает, какая доля дисперсии выходного параметра объясняется регрессионной моделью:

$$R^2 = \frac{ESS}{TSS} = 1 - \frac{RSS}{TSS}, \quad (2.22)$$

при этом $1 - R^2$ доля изменений выходного параметра, обусловленная другими факторами и случайными воздействиями.

Коэффициент детерминации может изменяться от 0 до 1 и может служить мерой при сравнении различных моделей описания экспери-

ментальных данных. В этом случае нужно выбирать модель с большим значением R^2 . Коэффициент детерминации может также быть рассчитан, как квадрат коэффициента корреляции между экспериментальными значениями и рассчитанными с помощью модели:

$$R^2 = r_{y,\hat{y}}^2. \quad (2.23)$$

Особенностью коэффициента детерминации является то, что он никогда не убывает при добавлении в регрессионную модель дополнительного объясняющего фактора (входного параметра). Даже если влияние этого фактора на выходной параметр незначимо отличается от нуля, его добавление приведет к увеличению значения R^2 . Для устранения этого эффекта вычисляют **исправленный (скорректированный) коэффициент детерминации** (с поправкой на число степеней свободы):

$$\bar{R}^2 = 1 - (1 - R^2) \cdot \frac{N - 1}{N - k - 1}. \quad (2.24)$$

Исправленный коэффициент детерминации не возрастает при добавлении в регрессионную модель статистически незначимого фактора.

Дисперсия выходного параметра, объясненная регрессией:

$$S_{\text{рег}}^2 = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y})^2 = \frac{ESS}{k}. \quad (2.25)$$

Число степеней свободы дисперсии, объясненной регрессией:

$$f_{\text{рег}} = k, \quad (2.26)$$

где k – количество факторов регрессионной модели.

Остаточная дисперсия или **дисперсия адекватности**, характеризующая точность аппроксимации, т.е. разброс экспериментальных данных относительно линии регрессии:

$$S_{\text{ост}}^2 = S_{\text{ад}}^2 = \frac{1}{N - k - 1} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 = \frac{RSS}{N - k - 1}, \quad (2.27)$$

где N – число опытов, по результатам которых определялись коэффициенты регрессионной модели; k – количество входных параметров. Величину, характеризующую меру разброса выходного параметра относительно линии регрессии $S_{\text{ад}} = \sqrt{S_{\text{ад}}^2}$, называют **стандартной ошибкой регрессии**. Число степеней свободы дисперсии адекватности:

$$f_{\text{ад}} = N - k - 1. \quad (2.28)$$

где $(k + 1)$ – количество коэффициентов регрессионной модели. Единица обозначает свободный член регрессионной модели b_0 .

Пример 2.3

Продолжая пример 2.1, рассчитаем регрессионную статистику для модели $\hat{y} = b_0 + b_1x$. Оценки коэффициентов модели (см. пример 2.1) $b_0 = 5,6178$ и $b_1 = 0,016104$. Количество входных параметров модели $k=1$, число строк в таблице, содержащей результаты эксперимента (таблица 2.3), $N = 4$, $i = 1..N$.

Таблица 2.3 – Исходные и расчетные данные однофакторного регрессионного анализа

i	x_i	y_i	$\hat{y}_i$	$e^2 = (y_i - \hat{y}_i)^2$	$(\hat{y}_i - \bar{y})^2$	$(y_i - \bar{y})^2$
1	2	3	4	6	8	9
1	100	7,126	7,228	0,0104	1,4588	1,7161
2	150	8,128	8,033	0,0089	0,1621	0,0949
3	200	8,956	8,839	0,0138	0,1621	0,2704
4	250	9,534	9,644	0,0121	1,4588	1,2056
	175	8,436		0,0452	3,2417	3,287
	$\bar{x}$	$\bar{y}$		$RSS (SS_{\text{ост}})$	$ESS (SS_{\text{рег}})$	$TSS (SS_{\text{общ}})$
				0,0226	3,2417	0,9862
				$S_{\text{ад}}^2$	$S_{\text{рег}}^2$	R^2

Столбец 4 содержит предсказанные (расчетные) значения регрессионной модели:

$$\hat{y}_1 = 5,6178 + 0,016104 \cdot 100 = 7,228$$

$$\hat{y}_1 = 5,6178 + 0,016104 \cdot 150 = 8,033$$

$$\hat{y}_1 = 5,6178 + 0,016104 \cdot 200 = 8,839$$

$$\hat{y}_1 = 5,6178 + 0,016104 \cdot 250 = 9,644$$

Остаточная сумма квадратов RSS :

$$RSS = (7,126 - 7,228)^2 + (8,128 - 8,033)^2 + (8,956 - 8,839)^2 + (9,534 - 9,644)^2 = 0,0452.$$

Регрессионная сумма квадратов ESS :

$$ESS = (7,228 - 8,436)^2 + (8,033 - 8,436)^2 + (8,839 - 8,436)^2 + (9,644 - 8,436)^2 = 3,2417.$$

Общая сумма квадратов отклонений TSS :

$$TSS = (7,126 - 8,436)^2 + (8,128 - 8,436)^2 + (8,956 - 8,436)^2 + (9,534 - 8,436)^2 = 3,287.$$

Дисперсия, объясненная регрессией:

$$S_{\text{рег}}^2 = \frac{ESS}{k} = \frac{3,2417}{1} = 3,2417.$$

Дисперсия адекватности:

$$S_{\text{ад}}^2 = \frac{RSS}{N - k - 1} = \frac{0,0452}{4 - 1 - 1} = 0,0226.$$

Коэффициент детерминации:

$$R^2 = \frac{ESS}{TSS} = \frac{3,2417}{3,287} = 0,9862.$$

2.1.3 Оценка адекватности модели

Проверка адекватности полученной модели заключается в проверке согласованности между предсказываемыми с ее помощью значениями и экспериментальными данными, на основе которых производилась оценка ее коэффициентов. При этом рассматриваемая гипотеза может быть по-разному сформулирована и проверена различным образом в зависимости от назначения модели.

Проверка значимости коэффициента детерминации. С помощью критерия Фишера проверяется статистическая нулевая гипотеза $H_0: R^2 = 0$ при альтернативной $H_a: R^2 > 0$. Наблюдаемое значение F-статистики определяется как:

$$F_{\text{н}} = \frac{S_{\text{рег}}^2}{S_{\text{ад}}^2} = \frac{ESS/(k)}{RSS/(N - k - 1)} = \frac{R^2}{1 - R^2} \cdot \frac{(N - k - 1)}{(k)}. \quad (2.29)$$

Условие отклонения нулевой гипотезы H_0 :

$$F_{\text{н}} > F_{\text{к}}[\alpha; f_{\text{рег}}=k; f_{\text{ад}}=N-k-1], \quad (2.30)$$

если условие выполняется, то R^2 значимо отличается от нуля.

Проверка значимости коэффициента детерминации может быть единственно возможным способом оценки адекватности модели, если для каждой комбинации значений входных параметров проводился только один опыт.

Проверка адекватности модели может быть сформулирована с использованием дисперсии воспроизводимости. Для этого необходимо, чтобы как минимум на одном уровне входного параметра проводились повторные опыты. **Дисперсия воспроизводимости** характеризует ошибку опытов при проведении эксперимента, т. е. разброс значений выходного параметра относительно его средних значений:

$$S_{\text{восп}}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^2, \quad (2.31)$$

где S_i^2 – дисперсия i -й серии опытов. Среднее значение i -й серии опытов принято в качестве y_i (см. таблицу 2.1).

Число степеней свободы дисперсии воспроизводимости:

$$f_{\text{восп}} = \sum_{i=1}^N (m_i - 1), \quad (2.32)$$

где m_i – количество опытов i -й серии.

При одинаковом количестве опытов в каждой серии ($m_1 = m_2 = \dots = m_N = m$) дисперсия воспроизводимости и число ее степеней свободы:

$$S_{\text{восп}}^2 = \frac{1}{N(m-1)} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^m (y_{ij}^{\text{оп}} - y_i)^2; \quad f_{\text{восп}} = N(m-1),$$

где $y_{ij}^{\text{оп}}$ – экспериментальное значение выходного параметра в j -м опыте i -й серии (таблица 2.1); y_i – среднее значение выходного параметра в i -й серии. Поскольку одним из требований при проведении регрессионного анализа является однородность дисперсий в каждой серии опытов, то дисперсию воспроизводимости иногда вычисляют по результатам серий опытов для одной из комбинаций уровней входных параметров. Величину $\sqrt{S_{\text{восп}}^2}$ также называют **чистой ошибкой эксперимента** (англ. **pure error**).

Проверка адекватности регрессионной модели заключается в проверке согласованности (англ. **Lack of Fit**) экспериментальных и расчетных данных. Проверяется нулевая гипотеза:

$$H_0: S_{\text{ад}}^2 = S_{\text{восп}}^2 = \sigma_y^2$$

при альтернативной:

$$H_a: S_{\text{ад}}^2 > S_{\text{восп}}^2,$$

Наблюдаемое значение критерия Фишера определяется по формуле:

$$F_{\text{н}} = \frac{S_{\text{ад}}^2}{S_{\text{восп}}^2}, \quad (2.33)$$

где $S_{\text{ад}}^2$ – дисперсия адекватности (2.27); $S_{\text{восп}}^2$ – дисперсия воспроизводимости (2.31).

Для адекватной регрессионной модели $S_{\text{ад}}^2$ и $S_{\text{восп}}^2$ являются оценками дисперсии выходного параметра σ_y^2 относительно его математического ожидания μ_y . Условие отклонения нулевой гипотезы ($S_{\text{ад}}^2 = S_{\text{восп}}^2 = \sigma_y^2$):

$$F_{\text{н}} > F_{\text{к}}[\alpha; f_{\text{ад}}; f_{\text{восп}}], \quad (2.34)$$

где $F_{\text{к}}[\alpha; f_{\text{ад}}; f_{\text{восп}}]$ – критическое значение критерия Фишера при уровне значимости α ; $f_{\text{ад}}$ – число степеней свободы дисперсии адекватности:

$f_{\text{ад}} = N - k - 1$; $f_{\text{восп}}$ – число степеней свободы дисперсии воспроизводимости: $f_{\text{восп}} = N(m - 1)$.

Если условие (2.34) выполняется, то модель неадекватна.

Дисперсия $\sigma_{\hat{y}}^2$ оценки выходного параметра $\hat{y}$:

$$\sigma_{\hat{y}}^2 = \sigma_y^2 f^T(x) (X^T X)^{-1} f(x), \quad (2.35)$$

где $f(x)$ – вектор базисных функций факторов для линейной многофакторной модели:

$$f^T(x) = [1 \quad x_1 \quad x_2 \quad \dots \quad x_k].$$

В качестве дисперсии ошибки σ_y^2 можно использовать дисперсию адекватности $S_{\text{ад}}^2$ (2.27) или дисперсию в

оспроизводимости $S_{\text{восп}}^2$ (2.31). Так как величину $S_{\text{восп}}^2$ можно рассчитать только в том случае, когда хотя бы для одной комбинации уровней входных параметров проводились повторные опыты, то для оценки дисперсии выходного параметра $S_{\hat{y}}^2$ чаще используется $S_{\text{ад}}^2$:

$$S_{\hat{y}}^2 = S_{\text{ад}}^2 f^T(x) (X^T X)^{-1} f(x). \quad (2.36)$$

С помощью $S_{\hat{y}}^2$ для каждой оценки выходного параметра $\hat{y}_0$, полученной по уравнению линейной однофакторной регрессии, можно построить доверительный интервал:

$$P(\hat{y}_0 - t_{1-\alpha/2, N-2} S_{\hat{y}} \leq y_0 \leq \hat{y}_0 + t_{1-\alpha/2, N-2} S_{\hat{y}}) = p. \quad (2.37)$$

На примере однофакторной линейной модели найдем дисперсию точечной оценки выходного параметра. Вектор базисных функций факторов: $f(x) = \begin{bmatrix} 1 \\ x_0 \end{bmatrix}$; дисперсионная матрица: $(X^T X)^{-1}$ имеет вид (2.17); дисперсия оценки выходного параметра:

$$\sigma_{\hat{y}}^2 = \sigma_y^2 [1 \quad x_0] \cdot \begin{bmatrix} \frac{\sum_{i=1}^N x_i^2}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} & \frac{-\sum_{i=1}^N x_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} \\ \frac{-\sum_{i=1}^N x_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} & \frac{N}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ x_0 \end{bmatrix} =$$

$$= \sigma_y^2 \left(\frac{1}{N} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} \right),$$

таким образом, оценка дисперсии выходного параметра однофакторной линейной модели $S_{\hat{y}}^2$:

$$S_{\hat{y}}^2 = S_{\text{ад}}^2 \left(\frac{1}{N} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} \right), \quad (2.38)$$

где x_0 – значение входного параметра, для которого рассчитывается значение дисперсии выходного параметра $\hat{y}$. Подставляя полученное выражение в (2.37), можно построить доверительные пределы для линейного однофакторного уравнения регрессии рисунок 2.5.

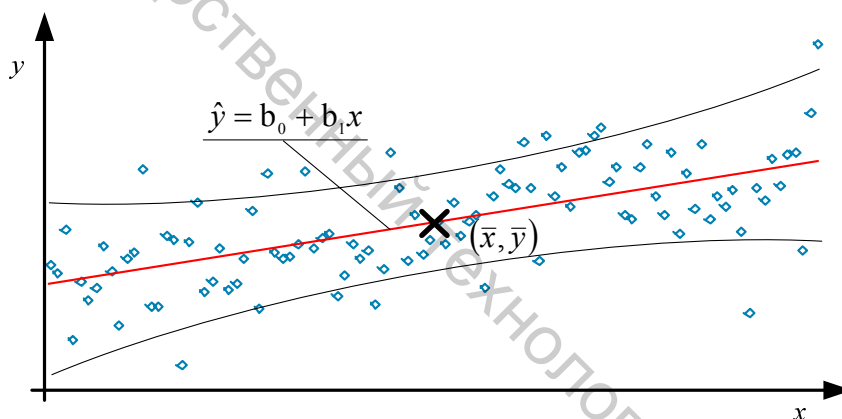


Рисунок 2.5 – Доверительные пределы регрессионной модели

Доверительные пределы уравнения регрессии показывают область, в которую с доверительной вероятностью $p = (1 - \alpha)$ попадают экспериментальные значения выходного параметра. Согласно (2.38), чем дальше x_0 от $\bar{x}$, тем шире доверительный интервал. Доверительные пределы для уравнения регрессии строятся не часто, но само понятие играет важную роль.

Пример 2.4

Продолжая пример 2.3, проверим значимость коэффициента детерминации и адекватность модели. F-статистика связанная с коэффициентом детерминации:

$$F_n = \frac{S_{\text{рег}}^2}{S_{\text{ад}}^2} = \frac{3,2417352}{0,0226164} = 143,3356,$$

критическое значение статистики $F_k[\alpha; f_{\text{рег}}=k; f_{\text{ад}}=N-k-1] = F_k[0,05;1;2] = 18,513$. Так как $F_H = 143,3356 > F_k[0,05;1;2] = 18,513$, то нужно отклонить нулевую гипотезу, т. е. коэффициент детерминации можно считать значимо отличным от нуля.

Дисперсия воспроизводимости (см. таблицу 2.2):

$$S_{\text{восп}}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^2 = \frac{0,02008 + 0,02552 + 0,02533 + 0,02248}{4} = 0,0233525,$$

число степеней свободы дисперсии воспроизводимости $f_{\text{восп}} = N(m-1) = 4(5-1) = 16$. F-статистика для проверки адекватности регрессионной модели:

$$F_H = \frac{0,0233525}{0,0226164} = 1,0325,$$

критическое значение статистики $F_k[0,05;16;2] = 19,4333$, так как $F_H < F_k[\alpha; f_{(1)}; f_{(2)}]$, то нет оснований для отклонения нулевой гипотезы, т. е. гипотеза об адекватности модели не отвергается.

2.1.4 Оценка значимости коэффициентов модели

При умножении матрицы $C = (X^T X)^{-1}$ на дисперсию σ_y^2 :

$$\text{cov}(\hat{\beta}) = \sigma_y^2 (X^T X)^{-1}$$

получают ковариационную матрицу:

$$\text{cov}(\hat{\beta}) = \begin{bmatrix} \sigma_{\beta_0} & \text{cov}(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) & \dots & \text{cov}(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_k) \\ \text{cov}(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_0) & \sigma_{\beta_1} & \dots & \text{cov}(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_k) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \text{cov}(\hat{\beta}_k, \hat{\beta}_0) & \text{cov}(\hat{\beta}_k, \hat{\beta}_1) & \dots & \sigma_{\beta_k} \end{bmatrix}, \quad (2.39)$$

диагональные элементы которой определяют дисперсию оценок коэффициентов регрессии. Элементы, не лежащие на диагонали, представляют собой статистическую зависимость $\text{cov}(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_0)$ между коэффициентами регрессии. Оценки коэффициентов корреляции между коэффициентами регрессии β_i и β_j выражаются через элементы матрицы $C = (X^T X)^{-1}$:

$$r_{ij} = \frac{c_{ij}}{\sqrt{c_{ii} c_{jj}}}. \quad (2.40)$$

Стандартная ошибка коэффициента многофакторной линейной регрессионной модели:

$$S_{b_i} = \sqrt{S_{\text{ад}}^2 \cdot c_{ii}}, \quad (2.41)$$

где $i = 0, 1, \dots, k$; $S_{ад}^2$ – дисперсия адекватности (2.27); c_{ii} – диагональный элемент дисперсионной матрицы $C = (X^T X)^{-1}$.

На примере линейной однофакторной модели (2.16) можно показать определение стандартных ошибок коэффициентов регрессии b_0 и b_1 . Дисперсионная матрица $(X^T X)^{-1}$ для линейной однофакторной модели имеет вид (2.17), при этом стандартная ошибка коэффициента b_0 :

$$S_{b_0} = \sqrt{S_{ад}^2 \cdot c_{00}} = \sqrt{\frac{S_{ад}^2 \sum_{i=1}^N x_i^2}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2}}, \quad (2.42)$$

стандартная ошибка коэффициента регрессии b_1 :

$$S_{b_1} = \sqrt{S_{ад}^2 \cdot c_{11}} = \sqrt{\frac{S_{ад}^2 N}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2}}. \quad (2.43)$$

Оценка значимости коэффициентов регрессии. При проверке значимости коэффициентов регрессии проверяется статистическая гипотеза, нулевая гипотеза $H_0: \beta_i = 0$ (коэффициент регрессии не значим) при альтернативной $H_a: \beta_i \neq 0$ (коэффициент значим). Для каждого коэффициента b_i вычисляется t-статистика (статистика Стьюдента):

$$t_{ni} = \frac{|b_i|}{S_{b_i}}, \quad (2.44)$$

где S_{b_i} – стандартная ошибка i -го коэффициента регрессии.

Условие отклонения нулевой гипотезы:

$$t_{ni} > t_{\kappa}[\alpha/2; N-k-1]. \quad (2.45)$$

Так как t-статистики всех коэффициентов модели сравниваются с одним и тем же критическим значением, то для оценки значимости удобно пользоваться так называемой **диаграммой Парето** (рисунок 2.6). На ней откладываются значения t-статистик коэффициентов и проводится линия, соответствующая значению t-статистики для заданного уровня значимости.

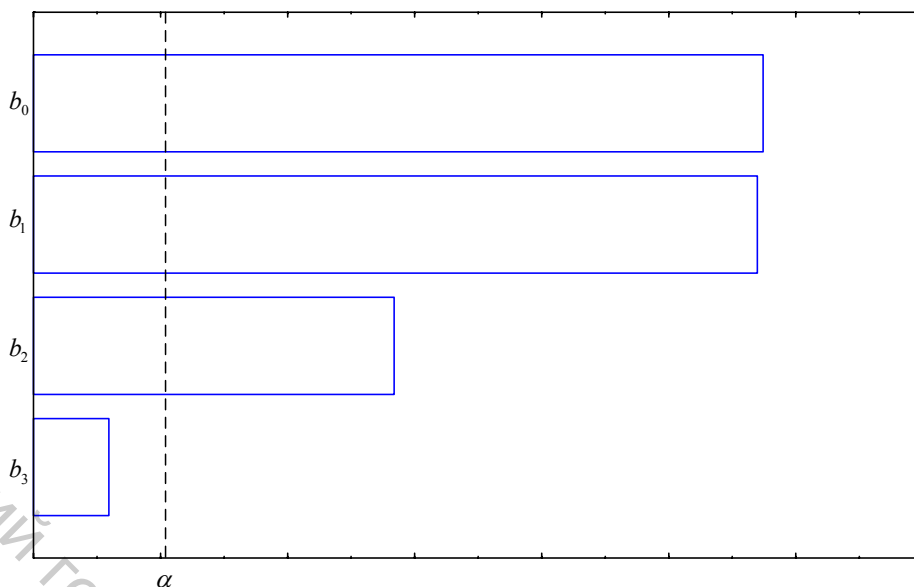


Рисунок 2.6 – Диаграмма Парето для коэффициентов регрессии

Доверительный интервал для i -го коэффициента регрессии b_i с доверительной вероятностью $p = 1 - \alpha$:

$$P\left(b_i - t_{\frac{\alpha}{2}, N-k-1} S_{b_i} \leq \beta_i \leq b_i + t_{\frac{\alpha}{2}, N-k-1} S_{b_i}\right) = p. \quad (2.46)$$

Для оценки значимости вклада фактора в дисперсию выходного параметра может использоваться дисперсионный анализ. При этом для выходного параметра и каждого фактора, входящего в уравнение регрессии, строится однофакторная регрессионная модель, для которой определяется объясняемая регрессией сумма квадратов $SS_{\text{рег}}$ (2.19). Таким образом, регрессионная сумма квадратов, обусловленная факторами, входящими в модель, раскладывается на составляющие:

$$SS_o = SS_{b_1} + SS_{b_2} + \dots + SS_{b_k}.$$

Дисперсия, обусловленная влиянием i -го фактора на выходной параметр:

$$S_{b_i}^2 = \frac{SS_{b_i}}{f_{S_{b_i}^2}},$$

где число степеней свободы $f_{S_{b_i}^2} = 1$.

При этом проверяется статистическая гипотеза о том, что дисперсия, обусловленная влиянием i -го фактора, равна остаточной дисперсии (дисперсии адекватности $S_{\text{ад}}^2$) (2.27):

$$H_0: S_{b_i}^2 = S_{\text{ад}}^2,$$

при альтернативной:

$$H_a: S_{b_i}^2 > S_{ад}^2,$$

наблюдаемое значение критерия Фишера определяется по формуле:

$$F_H = \frac{S_{b_i}^2}{S_{ад}^2}, \quad (2.47)$$

условие отклонения нулевой гипотезы:

$$F_H > F \left[\alpha; f_{S_{b_i}^2} = 1; f_{ад} = N - k - 1 \right].$$

Если нулевая гипотеза отклонена, то дисперсия, обусловленная влиянием i -го фактора, оказывает статистически значимое влияние на дисперсию выходного параметра.

Пример 2.5

Продолжая пример 2.1 и пример 2.3, рассчитаем стандартные ошибки коэффициентов регрессии:

$$\begin{aligned} S_{b_0} &= \sqrt{S_{ад}^2 \cdot c_{00}} = \sqrt{\frac{S_{ад}^2 \sum_{i=1}^N x_i^2}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2}} = \sqrt{\frac{0,0226 \cdot 135000}{540000 - 490000}} = \\ &= \sqrt{0,0226 \cdot 0,00008} = 0,247; \\ S_{b_1} &= \sqrt{S_{ад}^2 \cdot c_{11}} = \sqrt{\frac{S_{ад}^2 N}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2}} = \sqrt{\frac{0,0226 \cdot 4}{540000 - 490000}} = \\ &= \sqrt{0,0226 \cdot 2,7} = 0,00134; \end{aligned}$$

t -статистика, связанная с коэффициентами регрессии:

$$\begin{aligned} t_{H0} &= \frac{|b_0|}{S_{b_0}} = \frac{5,6178}{0,247} = 22,7, \\ t_{H1} &= \frac{|b_1|}{S_{b_1}} = \frac{0,016104}{0,00134} = 12. \end{aligned}$$

Критическое значение критерия Стьюдента $t_{к[\alpha/2; N-k-1]} = t_{к[0,05/2; 2]} = 6,205347$, так как $t_{H0} = 22,7 > t_{к[0,05/2; 2]} = 6,205$ и $t_{H1} = 12 > t_{к[0,05/2; 2]} = 6,205$, то нужно отклонить нулевую гипотезу, т. е. коэффициенты b_0 и b_1 можно считать статистически значимыми.

2.2 Нелинейные модели

Задача определения параметров нелинейной модели может быть сведена к задаче множественной линейной регрессии после линеаризующего преобразования, в процессе которого функция приводится к линейному виду. Нелинейные модели можно разделить на два вида: 1) **линейные относительно параметров** (коэффициентов) модели; 2) **нелинейные относительно параметров** модели.

Линейные по параметрам модели.

Линейную по параметрам нелинейную модель можно записать в виде:

$$\hat{y} = a_0 f_0(x) + a_1 f_1(x) + \dots + a_d f_d(x) = \sum_{j=0}^d a_j f_j(x), \quad (2.48)$$

где a_i – параметры модели; d – количество параметров в модели; $f_j(x)$ – вектор базисных функций факторов:

$$f^T(x) = [f_0(x), f_1(x), \dots, f_d(x)]. \quad (2.49)$$

Для линейной по параметрам модели матрица X (2.12) имеет вид:

$$X = \begin{bmatrix} f_0(x_1) & f_1(x_1) & \dots & f_k(x_1) \\ f_0(x_2) & f_1(x_2) & \dots & f_k(x_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f_0(x_N) & f_1(x_N) & \dots & f_k(x_N) \end{bmatrix}, \quad (2.50)$$

где x_i – вектор состояний входных параметров в i -й серии опытов.

После формирования матрицы X для нахождения коэффициентов модели может быть использована матричная форма метода наименьших квадратов.

Пример 2.6

Однофакторная линейная по параметрам нелинейная модель:

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

может быть линеаризована:

$$\hat{y} = a_0 f_0(x) + a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x),$$

где $f_0(x) = 1$, $f_1(x) = x$ и $f_2(x) = x^2$. Вектор базисных функций имеет вид:

$$f^T(x) = [1, x, x^2].$$

Матрица X имеет вид:

$$X = \begin{bmatrix} f_0(x_1) & f_1(x_1) & f_2(x_1) \\ f_0(x_2) & f_1(x_2) & f_2(x_2) \\ \dots & \dots & \dots \\ f_0(x_N) & f_1(x_N) & f_2(x_N) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_N & x_N^2 \end{bmatrix},$$

где x_1, x_2, x_N – значения входного параметра в первой, второй, и т. д. серии опытов. Далее задача решается с помощью аппарата многофакторной линейной регрессии.

Рассмотрим численный пример нахождения оценок регрессионной модели, описывающей зависимость среднего значения относительной разрывной нагрузки (y) хлопчатобумажной пряжи кольцевого способа прядения от крутки пряжи (x). Исходные данные представлены в таблице 2.4, зависимость $y = f(x)$ имеет нелинейную природу.

Таблица 2.4 – Исходные данные

x_i	100	150	200	250
y_i	7,6	11,8	10,4	2,8

Найдем оценки коэффициентов для регрессионной модели

$$\hat{y} = a_0 + a_1x + a_2x^2:$$

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_N & x_N^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 100 & 10000 \\ 1 & 150 & 22500 \\ 1 & 200 & 40000 \\ 1 & 250 & 62500 \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} 7,6 \\ 11,8 \\ 10,4 \\ 2,8 \end{bmatrix},$$

$$B = (X^T X)^{-1} X^T Y = \begin{bmatrix} -18,77 \\ 0,3814 \\ -0,00118 \end{bmatrix}.$$

Таким образом, для приведенного примера регрессионная модель имеет вид: $\hat{y} = -18,77 + 0,3814x - 0,00118x^2$.

Аналогично для двухфакторной линейной по параметрам модели:

$$\hat{y} = a_0 + a_1x_1 + a_2\sqrt{x_2} + a_3 \ln(x_1) + a_4x_1x_2$$

линеаризующее преобразование:

$$\hat{y} = a_0f_0(x) + a_1f_1(x) + a_2f_2(x) + a_3f_3(x) + a_4f_4(x),$$

где элементы вектора $f(x)$: $f_0(x) = 1$, $f_1(x) = x_1$, $f_2(x) = \sqrt{x_2}$, $f_3(x) = \ln(x_1)$, $f_4(x) = x_1x_2$. Элементы матрицы X рассчитываются следующим образом:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \sqrt{x_{12}} & \ln(x_{11}) & x_{11}x_{12} \\ 1 & x_{21} & \sqrt{x_{22}} & \ln(x_{21}) & x_{21}x_{22} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{N1} & \sqrt{x_{N2}} & \ln(x_{N1}) & x_{N1}x_{N2} \end{bmatrix},$$

после чего используется матричная форма метода наименьших квадратов для многофакторной линейной модели. Аналогично для линейной по параметрам нелинейной функции преобразования к линейному виду:

$$\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x$$

могут быть проведены согласно таблице 2.5.

Таблица 2.5 – Линеаризующее преобразование

№ п/п	Функция	x
1.	$f(x) = \beta_0 + \frac{\beta_1}{x}$	$\frac{1}{x}$
2.	$f(x) = \beta_0 + \beta_1 \ln(x+1)$	$\ln(x+1)$
3.	$f(x) = \beta_0 + \beta_1 \sin(x)$	$\sin(x)$

При моделировании технологических процессов широко используются полиномиальные модели, которые в общем виде можно описать выражением:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^k b_{ii} x_i^2 + \dots, \quad (2.51)$$

где k – количество входных факторов. В таких моделях индексы коэффициентов однозначно характеризуют функцию, перед которой он записан, например $b_{12}x_1x_2$. **Степень полиномиальной модели** определяется максимальной степенью входящих в него слагаемых.

Примеры полиномиальных моделей первой степени:

однофакторная (прямая):

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1,$$

двухфакторная (плоскость):

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2,$$

трехфакторная (гиперплоскость):

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3.$$

где b_0 – свободный член; b_1, b_2, b_3 – коэффициенты, описывающие **линейные** или **главные эффекты** отдельных факторов.

Примеры полиномиальных моделей второй степени:

однофакторная (кривая):

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_{11} x_1^2,$$

двухфакторная (поверхность):

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

трехфакторная (гиперповерхность):

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

где b_{12}, b_{13}, b_{23} – коэффициенты, описывающие **эффекты парного взаимодействия** факторов, взаимодействия второй степени; b_{11}, b_{22}, b_{33} – коэффициенты, описывающие **квадратичные эффекты** отдельных факторов. Эффекты парного взаимодействия и квадратичные эффекты характеризуют кривизну поверхности, описываемой регрессионной моделью.

Такие модели легко могут быть сведены к линейной многофакторной модели приведенным выше способом.

Пример 2.7

Найти оценки коэффициентов полиномиальной модели:

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

используя исходные данные в таблице 2.6.

Таблица 2.6

<i>i</i>	1	2	3	4	5	6	7	8	9
x_1	-1	0	1	-1	0	1	-1	0	1
x_2	-1	-1	-1	0	0	0	1	1	1
y	-4,5	5	17,5	2,5	6	12,5	13,5	11	11,5

Матрица X и вектор Y :

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & x_{11}^2 & x_{12}^2 & x_{11} \cdot x_{12} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & x_{21}^2 & x_{22}^2 & x_{21} \cdot x_{22} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{N1} & x_{N2} & x_{N1}^2 & x_{N2}^2 & x_{N1} \cdot x_{N2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix};$$

$$Y = \begin{bmatrix} -4,5 \\ 5 \\ 17,5 \\ 2,5 \\ 6 \\ 12,5 \\ 13,5 \\ 11 \\ 11,5 \end{bmatrix}, \quad X^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$X^T X = \begin{bmatrix} 9 & 0 & 0 & 6 & 6 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 6 & 4 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 4 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix},$$

$$(X^T X)^{-1} = \begin{bmatrix} 0,56 & 0 & 0 & -0,33 & -0,33 & 0 \\ 0 & 0,17 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,17 & 0 & 0 & 0 \\ -0,33 & 0 & 0 & 0,5 & 0 & 0 \\ -0,33 & 0 & 0 & 0 & 0,5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0,25 \end{bmatrix},$$

$$(X^T X)^{-1} X^T = \begin{bmatrix} -0,11 & 0,22 & -0,11 & 0,22 & 0,56 & 0,22 & -0,11 & 0,22 & -0,11 \\ -0,17 & 0 & 0,17 & -0,17 & 0 & 0,17 & -0,17 & 0 & 0,17 \\ -0,17 & -0,17 & -0,17 & 0 & 0 & 0 & 0,17 & 0,17 & 0,17 \\ 0,17 & -0,33 & 0,17 & 0,17 & -0,33 & 0,17 & 0,17 & -0,33 & 0,17 \\ 0,17 & 0,17 & 0,17 & -0,33 & -0,33 & -0,33 & 0,17 & 0,17 & 0,17 \\ 0,25 & 0 & -0,25 & 0 & 0 & 0 & -0,25 & 0 & 0,25 \end{bmatrix},$$

$$B = (X^T X)^{-1} X^T Y = \begin{bmatrix} 6 \\ 5 \\ 3 \\ 1,5 \\ 2 \\ -6 \end{bmatrix}.$$

Отсюда коэффициенты регрессионной полиномиальной модели:
 $b_0 = 6$; $b_1 = 5$; $b_2 = 3$; $b_{11} = 1,5$; $b_{22} = 2$; $b_{12} = -6$.

Таким образом, задача линеаризации линейной по параметрам нелинейной модели сводится к замене в модели нелинейного члена на новый параметр, значения которого вычисляются по нелинейной функции от входного параметра.

Нелинейные по параметрам модели

Полиномиальные модели могут с большой степенью точности описать экспериментальную зависимость, однако с увеличением степени полинома возрастает число оцениваемых коэффициентов и, следовательно, число опытов в эксперименте. В связи с этим могут использоваться показательные, степенные, логарифмические и т. д. функции, которые являются нелинейными относительно оцениваемых коэффициентов. Часто коэффициенты таких функций могут иметь физическую интерпретацию в привязке к исследуемому процессу или объекту, что является весьма желательным свойством.

Пример 2.8

Модель, описывающая зависимость относительного удлинения (y , %) высокоэластичной текстированной пряжи от времени (x , с) под действием статической нагрузки, имеет вид:

$$\hat{y} = e^{b_1 \cdot x}.$$

Приведенная модель является нелинейной по параметрам, однако может быть сведена к линейной модели. После логарифмирования обеих частей получим:

$$\ln \hat{y} = b_1 \cdot x,$$

произведя замену $\hat{y}_1 = \ln \hat{y}$, получим линейную модель:

$$\hat{y}_1 = b_1 \cdot x.$$

Для анализа линеаризованной модели может быть использован аппарат анализа линейной регрессии. Рассмотрим численный пример, экспериментальные данные представлены в таблице 2.7.

Таблица 2.7 – Исходные данные

x_i	1	10	15	20
y_i	1,2	8,1	23,3	66,7
$\ln(y_i)$	0,182322	2,091864	3,148453	4,200205

Найдем оценку коэффициента b_1 :

$$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 10 \\ 15 \\ 20 \end{bmatrix}, Y = \begin{bmatrix} \ln(y_1) \\ \ln(y_2) \\ \ln(y_3) \\ \ln(y_4) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,182322 \\ 2,091864 \\ 3,148453 \\ 4,200205 \end{bmatrix}, B = (X^T X)^{-1} X^T Y = [0,209824].$$

Таким образом, для приведенного примера регрессионная модель имеет вид: $\hat{y} = e^{0,209824 \cdot x}$.

В таблице 2.8 приведены примеры линеаризующих преобразований, приводящих модель к виду:

$$\hat{y}_1 = a_0 + a_1 x_1.$$

Таблица 2.8 – Линеаризующее преобразование

№	Функция	Линеаризующее преобразование			
		$\hat{y}_1$	x_1	a_0	a_1
1	$\hat{y} = \frac{1}{b_0 + b_1 x}$	$\frac{1}{\hat{y}}$	x	b_0	b_1
2	$\hat{y} = \frac{x}{b_0 + b_1 x}$	$\frac{x}{\hat{y}}$	x	b_0	b_1
3	$\hat{y} = \frac{1}{b_0 + b_1 e^{-x}}$	$\frac{1}{\hat{y}}$	e^{-x}	b_0	b_1
4	$\hat{y} = \frac{b_0}{b_1 + x}$	$\frac{1}{\hat{y}}$	x	$\frac{b_1}{b_0}$	$\frac{1}{b_0}$
5	$\hat{y} = b_0 \cdot b_1^x$	$\ln \hat{y}$	x	$\ln b_0$	$\ln b_1$
6	$\hat{y} = b_0 x^{b_1}$	$\ln \hat{y}$	$\ln x$	$\ln b_0$	b_1
7	$\hat{y} = b_0 e^{b_1/x}$	$\ln \hat{y}$	$\frac{1}{x}$	$\ln b_0$	b_1
8	$\hat{y} = b_0 e^{b_1 x}$	$\ln \hat{y}$	x	$\ln b_0$	b_1
9	$\hat{y} = b_0 \ln(b_1 + x)$	$e^{\hat{y}}$	x	$b_1 e^{b_0}$	e^{b_0}

После нахождения коэффициентов линеаризованной функции (4-9 таблица 2.8) для коэффициентов необходимо провести обратное преобразование.

Пример 2.9

Продолжая пример 2.8, найдем оценки коэффициентов модели:

$$\hat{y} = b_0 e^{b_1 x},$$

используя исходные данные, представленные в таблице 2.7. Линеаризованная функция имеет вид: $\hat{y}_1 = a_0 + a_1 x$, (таблица 2.8 строка 8). Тогда оценки коэффициентов a_0 и a_1 можно найти:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 10 \\ 1 & 15 \\ 1 & 20 \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} \ln(y_1) \\ \ln(y_2) \\ \ln(y_3) \\ \ln(y_4) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,182322 \\ 2,091864 \\ 3,148453 \\ 4,200205 \end{bmatrix},$$
$$B = (X^T X)^{-1} X^T Y = \begin{bmatrix} -0,02675 \\ 0,21151 \end{bmatrix},$$

таким образом, $a_0 = -0,02675$ и $a_1 = 0,2115$. Произведя обратное преобразование, получим оценки коэффициентов нелинеаризованной функции $b_0 = \exp(a_0) = 0,9736$ и $b_1 = a_1 = 0,2115$. Регрессионная модель имеет вид:

$$\hat{y} = 0,9736 \cdot e^{0,2115 \cdot x}.$$

Стоит заметить, что не все модели могут быть сведены к линейным, так, например, модель вида:

$$\hat{y} = b_0 + e^{b_1 x}$$

не может быть линеаризована, и для анализа таких моделей используется нелинейный метод наименьших квадратов.

2.3 Регрессионный анализ с использованием пакетов прикладных программ

2.3.1 Регрессионный анализ в Excel

Рассмотрим пример проведения регрессионного анализа в табличном процессоре **Excel**. При исследовании зависимости относительной разрывной нагрузки пряжи y от крутки x был проведен однофакторный эксперимент. Полученные в результате данные можно представить в виде таблицы (рисунок 2.7 а). Столбец **G2:G6** содержит средние значения выходного параметра y при заданных уровнях входного параметра x . Столбец **H2:H6** содержит оценки дисперсии каждой серии опытов S_i^2 . В ячейке **H7** рассчитано значение дисперсии воспроизводимости $S_{\text{восп}}^2 = 0,102$ (2.31), для приведенного примера число степеней

свободы $f_{\text{восп}} = 5(5 - 1) = 20$ (2.32). Дисперсия воспроизводимости используется для проверки адекватности регрессионной модели.

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	x	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	y ₅	y	S _y ²
2	100	7,7	7,2	7,8	7,1	7,7	7,5	0,105
3	200	10,4	9,7	10,4	10	10,5	10,2	0,115
4	300	11,7	11,5	11,8	11,4	12,1	11,7	0,075
5	400	11,3	11,6	11,4	11,9	11,3	11,5	0,065
6	500	10,8	11,6	11	11,4	11,7	11,3	0,15
7							S _e ²	0,102

а

	G	H
1	y	S _y ²
2	=CPЗНАЧ(B2:F2)	=ДИСП(B2:F2)
3	=CPЗНАЧ(B3:F3)	=ДИСП(B3:F3)
4	=CPЗНАЧ(B4:F4)	=ДИСП(B4:F4)
5	=CPЗНАЧ(B5:F5)	=ДИСП(B5:F5)
6	=CPЗНАЧ(B6:F6)	=ДИСП(B6:F6)
7	S _e ²	=CPЗНАЧ(H2:H6)

б

Рисунок 2.7 – Исходные данные на листе Excel

Таким образом, зависимость среднего значения относительной разрывной нагрузки пряжи от заправочной крутки приведена на рисунке 2.8. Эта зависимость является нелинейной и может быть описана моделью:

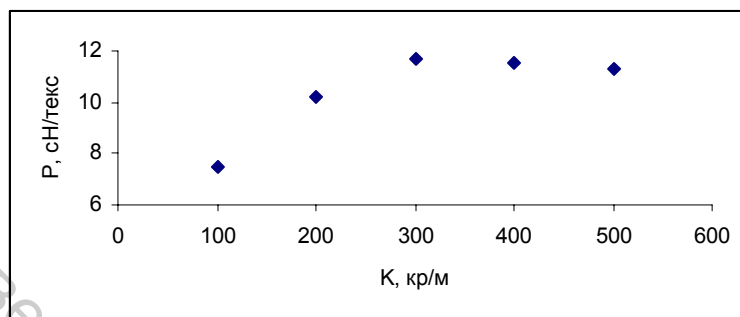


Рисунок 2.8

$$\hat{y} = b_0 + b_1x + b_{11}x^2, \quad (2.52)$$

где x – крутка пряжи; $\hat{y}$ – оценка относительной разрывной нагрузки.

Покажем на примере прямого использования формул матричной формы метода наименьших квадратов расчет оценок коэффициентов регрессии в табличном процессоре Excel.

Для расчета оценок коэффициентов регрессии b_0 , b_1 и b_{11} запишем исходные данные на новом рабочем листе (рисунок 2.9 а). Столбец x_0 необходим для расчета оценки коэффициента b_0 , столбец x_1 используется для расчета коэффициента перед линейным эффектом, столбец x_2 рассчитывается по формуле x^2 (рисунок 2.9 б), он необходим для расчета оценки коэффициента b_{11} .

	A	B	C	D
1	x ₀	x ₁	x ₂	P
2	1	100	10000	7,5
3	1	200	40000	10,2
4	1	300	90000	11,7
5	1	400	160000	11,5
6	1	500	250000	11,3

а

B	C
x ₁	x ₂
100	=B2*B2
200	=B3*B3
300	=B4*B4
400	=B5*B5
500	=B6*B6

б

Рисунок 2.9 – Исходные данные на листе Excel

В диапазоне ячеек **A2:C6** (рисунок 2.9 а) находится матрица X (2.12), в диапазоне **D2:D6** находится вектор Y (2.12). Тогда оценки коэффициентов регрессии можно найти по формуле (2.14): $B = (X^T X)^{-1} X^T Y$. Для этого выделим диапазон ячеек **F2:F4** и введем формулу:

	F
1	$B = (X^T X)^{-1} X^T Y$
2	=МУМНОЖ(МУМНОЖ(МОБР(МУМНОЖ(ТРАНСП(A2:C6);A2:C6));ТРАНСП(A2:C6));D2:D6)
3	=МУМНОЖ(МУМНОЖ(МОБР(МУМНОЖ(ТРАНСП(A2:C6);A2:C6));ТРАНСП(A2:C6));D2:D6)
4	=МУМНОЖ(МУМНОЖ(МОБР(МУМНОЖ(ТРАНСП(A2:C6);A2:C6));ТРАНСП(A2:C6));D2:D6)

Так как эта формула вернет не одно число, а массив B значений коэффициентов регрессии (2.12), то в конце ввода нужно нажать сочетание клавиш **Ctrl-Shift-Enter**. В результате вычисления введенной формулы в диапазоне ячеек **F2:F4** будут рассчитаны оценки коэффициентов регрессии.

	F
1	$B = (X^T X)^{-1} X^T Y$
2	4,02
3	0,041042857
4	-5,35714E-05

Рисунок 2.10 – Оценки коэффициентов регрессии

Аналогичным образом можно найти вектор $e = Y - XB$ (2.15), элементы которого могут быть использованы для расчета стандартной ошибки регрессии $S_{ад}$ (2.27), а также дисперсионную матрицу $C = (X^T X)^{-1}$, диагональные элементы которой используются для нахождения стандартных ошибок коэффициентов регрессии $S_{b_i} = \sqrt{S_{ад}^2 \cdot c_{ii}}$ (2.41).

Однако удобнее воспользоваться функцией **ЛИНЕЙН**, которая рассчитывает коэффициенты линейной регрессионной модели и дополнительную регрессионную статистику (таблица 2.9).

Таблица 2.9 – Результаты расчета функции ЛИНЕЙН

b_k	b_{k-1}	...	b_2	b_1	b_0
S_{b_k}	$S_{b_{k-1}}$	...	S_{b_2}	S_{b_1}	S_{b_0}
R^2	$S_{ад}$				
F_n	$f_{ад}$				
$SS_{рег}$	$SS_{ост}$				

Первая строка (таблица 2.9) содержит оценки коэффициентов регрессии (2.14). Вторая строка – стандартные ошибки коэффициентов регрессии (2.41). Третья строка – коэффициент детерминации R^2 (2.22) и стандартную ошибку регрессии $S_{ад}$ (2.27). Четвертая строка – наблюдаемое значение F-статистики для определения значимости коэффици-

ента детерминации F_H (2.29) и число степеней свободы регрессионной модели $f_{ад}$ (2.28). Пятая строка содержит сумму квадратов отклонений, объясненных регрессионной моделью $SS_{рег}$ (2.19), и остаточную сумму квадратов отклонений $SS_{ост}$ (2.18).

В функции ЛИНЕЙН необходимо указать следующие параметры:

- **известные_значения_y** – диапазон значений Y;
- **известные_значения_x** – диапазон значений X;
- **конст** – параметр, указывающий включать в модель коэффициент b_0 или нет, может принимать значения ИСТИНА или ЛОЖЬ, 1 или 0;
- **статистика** – параметр, указывающий вычислять дополнительную статистику (кроме оценок коэффициентов регрессии) или нет, может принимать значения ИСТИНА или ЛОЖЬ, 1 или 0.

Для расчета регрессионной статистики по исходным данным (рисунок 2.9 а) нужно в диапазон ячеек G2:I6 ввести формулу:

=ЛИНЕЙН(D2:D6;A2:C6;0;1).

Так как эта формула вернет не одно число, а массив значений, то в конце ввода необходимо нажать сочетание клавиш **Ctrl-Shift-Enter**.

Однако по вычисленной регрессионной статистике еще нельзя сделать заключение о статистической значимости регрессионной модели и значимости коэффициентов регрессии.

Для оценки значимости коэффициентов регрессии необходимо вычислить t-статистику (2.44) для каждого коэффициента регрессии,

на основании которой можно вычислить *p-value* (см. пп. 1.3). Для вычисления *p-value* в ячейку G10 введем формулу:

=СТЮДРАСП(ABS(G2)/G3;\$H\$5;2)

и протянем на ячейки H10 и I10 (рисунок 2.13). Так как полученные значения достигаемого уровня значимости меньше 0,05, то нулевую гипотезу о равенстве коэффициентов регрессии нулю нужно отвергнуть, все коэффициенты можно признать значимыми на уровне значимости $\alpha = 0,05$.

В ячейке G4 (рисунок 2.12) находится вычисленное значение коэффициента детерминации ($R^2 = 0,99961742$), показывающего, какую долю изменения выходного параметра объясняет регрессионная модель.

Рисунок 2.11

	G	H	I
2	-5,35714E-05	0,041043	4,02
3	8,72482E-06	0,005336	0,700163
4	0,99961742	0,326453	#Н/Д
5	1741,889187	2	#Н/Д
6	556,9068571	0,213143	#Н/Д

Рисунок 2.12

	G	H	I
10	0,025513711	0,016484138	0,029021

Рисунок 2.13

Для определения значимости коэффициента детерминации рассчитаем *p-value*:

0,000573815

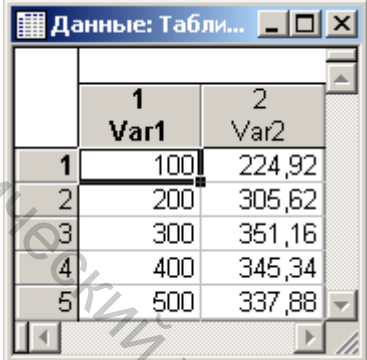
=**FRASП(G5;3;H5)**, где **G5** – ячейка со значением F-статистики (1741,889187); 3 – количество коэффициентов модели ($f_{\text{рег}}$); **H5** – ячейка (рисунок 2.12) со значением количества степеней свободы регрессионной модели ($f_{\text{ад}}$). Так как вычисленное значение (рисунок 2.14) *p-value* меньше 0,05, то коэффициент детерминации можно считать статистически значимым на уровне значимости $\alpha = 0,05$.

Рисунок 2.14

Проверить адекватность модели можно с использованием дисперсии воспроизводимости (в нашем примере $S_{\text{восп}}^2 = 0,102$, $f_{\text{восп}} = 20$, см. рисунок 2.7 а) и дисперсии адекватности ($S_{\text{ад}} = 0,326452$, $f_{\text{ад}} = 2$). Тогда $F_{\text{н}} = S_{\text{ад}} / S_{\text{восп}}^2 = 3,2005$ (2.33), табличное значение критерия Фишера $F_{\text{к}[0,05;2;20]} = 3,4928$, его можно рассчитать с помощью функции **=FRASПОБР(0,05;2;20)**. Так как $F_{\text{н}} < F_{\text{к}[0,05;2;20]}$, то полученная модель адекватна.

2.3.2 Регрессионный анализ в Statistica

Удобный инструмент для проведения регрессионного анализа предоставляет пакет прикладных программ **Statistica**. Исходные данные для регрессионного анализа оформляются в виде таблицы (рисунок 2.15).



	1 Var1	2 Var2
1	100	224,92
2	200	305,62
3	300	351,16
4	400	345,34
5	500	337,88

Рисунок 2.15

Можно воспользоваться модулем регрессионного анализа: Анализ, далее углубленные методы анализа, далее Нелинейное оценивание, далее Регрессия пользователя - метод наим. квадратов МНК.

Далее, выбрав опцию **Оцениваемая функция**, необходимо указать вид регрессионной модели для модели $\hat{y} = b_0 + b_1x + b_{11}x^2$:

$$v2=b0+b1*v1+b11*v1^2,$$

где **v1** и **v2** – кодовые обозначения столбцов в таблице исходных данных; **b0**, **b1** и **b11** – искомые коэффициенты регрессионной модели.

Далее будет показано диалоговое окно, в котором приведены объясненная доля дисперсии R^2 (2.22) и коэффициент корреляции R между наблюдаемыми и прогнозируемыми значениями выходного параметра.

При выборе опции  **Корреляции параметров** на экран выводится таблица, содержащая коэффициенты корреляции между оценками коэффициентов регрессии (2.40). Если матрица коэффициентов корреляции диагональная, т. е. все коэффициенты, кроме стоящих на главной диагонали, равны нулю, то в случае, если один из коэффициентов окажется незначимым, его можно исключить без повторного расчета оценок остальных коэффициентов.

	Модель: $v_2 = b_0 + b_1 \cdot v_1 + b_{11} \cdot v_1^2$ (Таблица данных1)				
	Зав. Пер. : Var2				
	b0	b1	b11		
b0	1,000000	-0,941376	0,872278		
b1	-0,941376	1,000000	-0,981105		
b11	0,872278	-0,981105	1,000000		

Рисунок 2.16

В приведенном примере все коэффициенты корреляции отличны от нуля, таким образом, в случае исключения одного из регрессионных коэффициентов из модели оценки остальных коэффициентов необходимо пересчитать.

При выборе опции  **Оценки параметров модели** на экран выводится таблица, содержащая оценки коэффициентов регрессии, их стандартные ошибки, доверительные пределы и достигаемый уровень значимости.

	Модель: $v_2 = b_0 + b_1 \cdot v_1 + b_{11} \cdot v_1^2$ (Таблица данных1)					
	Зав. Пер. : Var2					
	Уров. значимости: 95.0% (альфа=0.050)					
	Оценка	Стандарт ошиб.	t-знач. сс = 2	p-уров.	Ниж. Дов Предел	Вер. Дов Предел
b0	119,4520	20,03010	5,96363	0,026985	33,26945	205,6345
b1	1,2414	0,15264	8,13280	0,014784	0,58464	1,8982
b11	-0,0016	0,00025	-6,51564	0,022754	-0,00270	-0,0006

Рисунок 2.17

Так как все значения (рисунок 2.17) в столбце **p-уров.** (*p-value*) меньше 0,05, то нулевую гипотезу о равенстве коэффициентов регрессии нулю нужно отвергнуть, все коэффициенты можно признать значимыми на уровне значимости $\alpha = 0,05$. Строки со статистически значимыми коэффициентами выделяются красным цветом.

При выборе опции  **Дисперсионный анализ** на экран выводится таблица, содержащая объясненную, остаточную и общую суммы квадратов отклонений, их степени свободы, F-статистику, связанную с коэффициентом детерминации, и достигаемый уровень значимости для коэффициента детерминации (таблица 2.10).

Таблица 2.10

Эффект	Сум. квадратов	СС	Сред. квадраты	F-знач.	p-знач.
Регрессия	$SS_{\text{рег}}$ (2.19)	$f_{\text{рег}}$ – количество коэффициентов регрессионной модели	$S_{\text{рег}}^2$ (2.25)	$F_{\text{н}} = \frac{S_{\text{рег}}^2}{S_{\text{ад}}^2}$ (2.29)	p-value для $F_{\text{н}}$ (см. пп. 1.3)
Остатки	$SS_{\text{ад}}$ (2.18)	$f_{\text{ад}} = N - f_{\text{рег}}$, где N – количество строк в таблице	$S_{\text{ад}}^2$ (2.27)		
Сумма	$SS_{\text{общ}}$ (2.20)	$f_{\text{общ}} = f_{\text{рег}} + f_{\text{ад}}$			

Если коэффициент детерминации значим, то строка, содержащая его F-статистику, выделяется красным цветом.

Модель: $v_2 = b_0 + b_1 \cdot v_1 + b_{11} \cdot v_1^2$ (Таблица данных1) Зав. Пер.: Var2					
Эффект	1 Сум. квадратов	2 СС	3 Сред. квадраты	4 F-знач.	5 p-знач.
Регрессия	500554,1	3,000000	166851,4	1913,029	0,000523
Остатки	174,4	2,000000	87,2		
Сумма	500728,5	5,000000			

Рисунок 2.18

Так как значение (рисунок 2.18) в столбце **p-знач.** (*p-value*) меньше 0.05, то нулевую гипотезу о равенстве коэффициента детерминации нулю необходимо отвергнуть.

2.4 Корреляционный анализ

Основными характеристиками, описывающими степень линейной связи между двумя случайными величинами, являются **ковариация**, называемая также **корреляционным моментом**:

$$K_{x,y} = M((x - \mu_x)(y - \mu_y)),$$

и **коэффициент парной корреляции** (Пирсона):

$$\rho_{x,y} = \frac{M((x - \mu_x)(y - \mu_y))}{\sigma_x \sigma_y}. \quad (2.53)$$

Оценка коэффициента ковариации по выборке:

$$\text{Cov}(x, y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \overline{xy} - \bar{x} \cdot \bar{y}.$$

Ковариация выражается в различных физических единицах измерения, а именно: (ед. изм. x) × (ед. изм. y). Например, если x и y были измерены

в метрах и $K_{x,y} = 1 \text{ м}^2$, если измерить x и y в миллиметрах, то $K_{x,y} = 1000000 \text{ мм}^2$. Это является недостатком, не позволяющим производить сравнение ковариаций.

Нормированная ковариация случайных величин называется коэффициентом корреляции и является безразмерной величиной, т. е. не зависит от единиц измерения x и y . Оценка коэффициента корреляции по выборке

$$\hat{\rho}_{x,y} = r_{x,y} = \frac{\text{Cov}(x,y)}{\sqrt{\sigma_x^2} \cdot \sqrt{\sigma_y^2}} = \quad (2.54)$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} = \frac{\overline{xy} - \bar{x} \cdot \bar{y}}{\sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2} \sqrt{\overline{y^2} - \bar{y}^2}}, \quad (2.55)$$

где σ_x^2 , σ_y^2 – смещенные оценки дисперсии (1.8); $\text{Cov}(x,y)$ – ковариация; n – объем выборок x и y .

Если две величины функционально независимы, то коэффициент корреляции $\rho_{x,y} = 0$, однако обратное утверждение в общем случае неверно. Так, например если между x и y имеется функциональная связь вида $y = \sin(x)$, то коэффициент корреляции $\rho_{x,y} = 0$.

Коэффициент парной корреляции $\rho_{x,y}$ может принимать значения в диапазоне $-1 \leq \rho_{x,y} \leq 1$. При этом положительный (отрицательный) знак коэффициента говорит о том, что с ростом (убыванием) одного параметра происходит рост (убывание) другого.

Для визуализации зависимости между переменными X и Y используют диаграммы рассеяния (рисунок 2.19), на которых оси соответствуют переменным, а данные изображаются в виде точек.

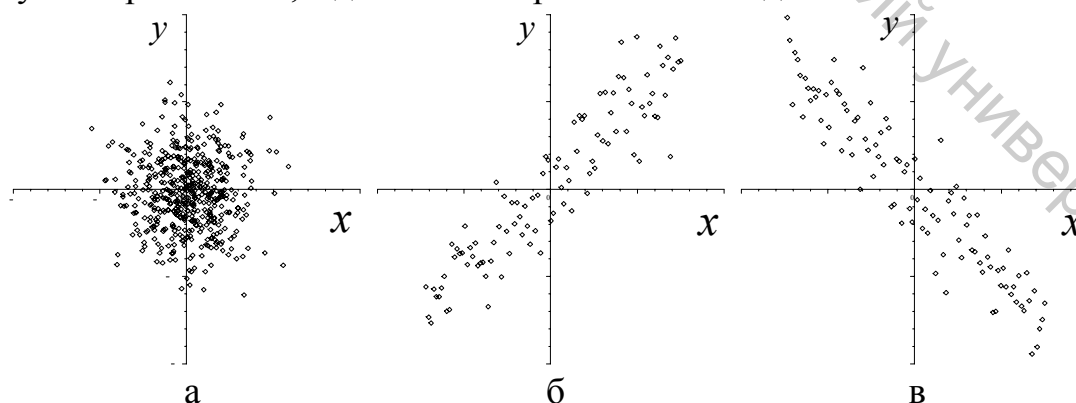


Рисунок 2.19 – Диаграммы рассеяния:

а) отсутствующая корреляция ($r_{xy} = 0$); б) сильная положительная корреляция ($r_{xy} = 0,9$); в) сильная отрицательная корреляция ($r_{xy} = -0,9$)

Понятие коэффициента парной корреляции тесно связано с линейной регрессионной зависимостью между двумя параметрами x и y . При этом каждый из этих параметров может выступать в роли как зависимого, так и влияющего параметра. Поэтому речь идет о двух прямых регрессии:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x$$

и

$$\hat{x} = a_0 + a_1 y,$$

которые в общем случае не совпадают (рисунок 2.20)

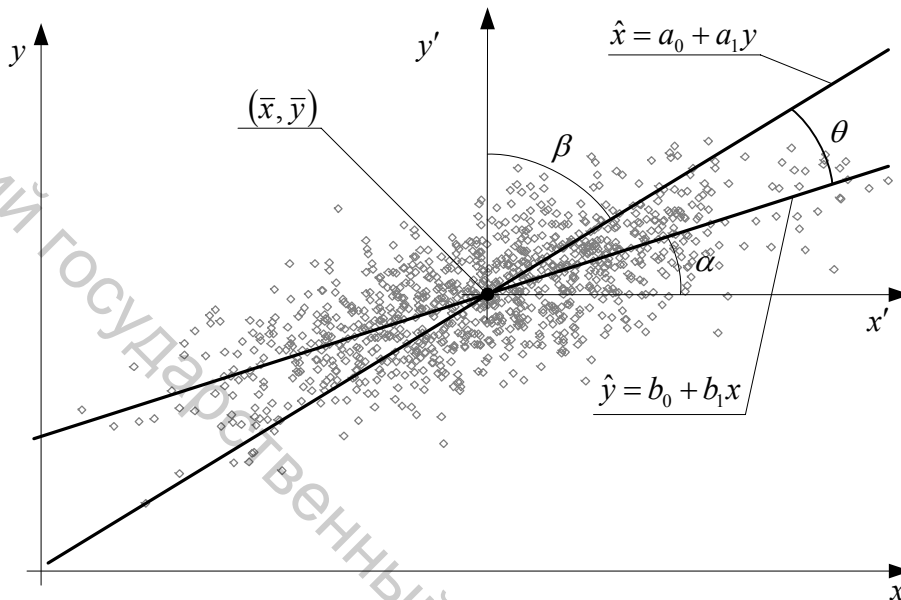


Рисунок 2.20 – Корреляционная связь

Коэффициенты перед объясняющей переменной (b_1 и a_1) определяют угол наклона регрессионной прямой к оси объясняемой переменной: $tg(\alpha) = b_1$ и $tg(\beta) = a_1$. Угол между регрессионными прямыми определяется как:

$$\begin{aligned} tg(\theta) &= tg\left(\frac{\pi}{2} - (\alpha + \beta)\right) = ctg(\alpha + \beta) = \frac{1 - tg(\alpha) \cdot tg(\beta)}{tg(\alpha) + tg(\beta)} = \\ &= \frac{1 - b_1 \cdot a_1}{b_1 + a_1} = \frac{1 - r_{x,y}^2}{2 \cdot r_{x,y}} \times \frac{S_y \cdot S_x}{S_x^2 + S_y^2}. \end{aligned}$$

Коэффициент корреляции как показатель тесноты связи определяется выражением

$$r_{x,y} = \pm \sqrt{a_1 \cdot b_1} = a_1 \cdot \frac{S_x}{S_y} = b_1 \cdot \frac{S_y}{S_x}, \quad (2.56)$$

где a_1 и b_1 – угловые коэффициенты уравнений регрессии; S_x и S_y – стандартные отклонения выборок x и y . Знак коэффициента корреляции совпадает со знаком коэффициентов регрессии и характеризует следующее:

- если между x и y существует положительная функциональная связь, то линии регрессии совпадают $tg(\theta) = 0$, коэффициенты регрессии a_1 и b_1 равны и оба положительны, коэффициент корреляции $r_{x,y} = 1$;
- если между x и y существует отрицательная функциональная связь, то линии регрессии совпадают $tg(\theta) = 0$, коэффициенты регрессии a_1 и b_1 равны и оба отрицательны, коэффициент корреляции $r_{x,y} = -1$;
- если между x и y отсутствует линейная взаимосвязь, то линии регрессии перпендикулярны друг другу и параллельны координатным осям, коэффициенты регрессии a_1 и b_1 равны нулю, коэффициент корреляции $r_{x,y} = 0$;
- в остальных случаях $-1 < r_{x,y} < 1$.

Для выявления статистической связи нескольких переменных используют **корреляционный анализ**, который заключается в изучении коэффициентов парной корреляции между одной или множеством пар признаков.

Анализ коэффициента корреляции позволяет проверить гипотезу, что связь между параметрами x и y является линейной функцией. При этом переменные x и y – необязательно объясняющий и объясняемый параметры, а корреляционная связь характеризует тесноту связи между двумя параметрами, но не причинно следственную связь. Эта связь может быть обусловлена влиянием на оба исследуемых параметра третьего параметра, и должна иметь обоснование в каждом отдельном случае.

При проведении корреляционного анализа строится таблица парных коэффициентов корреляции (таблица 2.11).

Таблица 2.11 – Таблица парных коэффициентов корреляции

	x_1	x_2	x_3	x_4
x_1	$r_{x_1x_1}$	$r_{x_2x_1}$	$r_{x_3x_1}$	$r_{x_4x_1}$
x_2	$r_{x_1x_2}$	$r_{x_2x_2}$	$r_{x_3x_2}$	$r_{x_4x_2}$
x_3	$r_{x_1x_3}$	$r_{x_2x_3}$	$r_{x_3x_3}$	$r_{x_4x_3}$
x_4	$r_{x_1x_4}$	$r_{x_2x_4}$	$r_{x_3x_4}$	$r_{x_4x_4}$

Таблица парных коэффициентов корреляции является симметричной относительно главной диагонали, поэтому часто приводят только нижнюю половину. Главная диагональ (корреляция переменных самих с собой) всегда заполнена единицами.

В практике текстильных исследований принята классификация по степени корреляционной связи (таблица 2.12).

Таблица 2.12 – Качественная оценка тесноты корреляционной связи в текстильных исследованиях [11 с. 186]

Мера тесноты связи	Характеристика силы связи
$ r_{xy} < 0,3$	Очень слабая
$0,3 \leq r_{xy} \leq 0,4$	Слабая
$0,4 < r_{xy} \leq 0,7$	Средняя
$0,7 < r_{xy} \leq 0,9$	Сильная
$0,9 < r_{xy} $	Очень сильная

Значимость коэффициента корреляции не определяется величиной его модуля и требует проверки с помощью статистической гипотезы.

Проверка значимости коэффициента корреляции.

Нулевая гипотеза $H_0: \rho = 0$, т. е. коэффициент корреляции ρ , оцениваемый по параметру $r_{x,y}$, не значим; альтернативная гипотеза $H_a: \rho \neq 0$.

Процедура проверки. Вычисляется наблюдаемое значение критерия Стьюдента:

$$t_{r_n} = \frac{r_{x,y}}{\sqrt{1-r_{x,y}^2}} \cdot \sqrt{n-2}. \quad (2.57)$$

Условие отклонения нулевой гипотезы H_0 :

$$|t_{r_n}| > t_{\kappa[\alpha/2; f]}, \quad (2.58)$$

где $t_{\kappa[\alpha/2; f]}$ – квантиль распределения Стьюдента; α – уровень значимости; степень свободы $f = n - 2$.

Значения выборочного коэффициента корреляции сильно зависят от объема выборок. Так, например, при $n = 2$ коэффициент корреляции всегда $r_{x,y} = \pm 1$. Поэтому использование коэффициента корреляции имеет смысл при $n \geq 3$. Воспользовавшись формулами (2.57) и (2.58), можно рассчитать минимальную величину модуля значимого коэффициента корреляции $|r_{x,y}|$ при заданном объеме выборок n :

$$|r_{x,y}| \geq \frac{t_{\kappa[\alpha/2; n-2]}}{\sqrt{t_{\kappa[\alpha/2; n-2]}^2 + n - 2}}. \quad (2.59)$$

Критические значения модуля выборочного коэффициента корреляции для уровня значимости α приведены в таблице 2.13.

Таблица 2.13

n	α			n	α		
	0,1	0,05	0,01		0,1	0,05	0,01
3	0,988	0,997	1,000	25	0,337	0,396	0,505
4	0,900	0,950	0,990	30	0,306	0,361	0,463
5	0,805	0,878	0,959	35	0,283	0,334	0,430
6	0,729	0,811	0,917	40	0,264	0,312	0,403
7	0,669	0,754	0,875	45	0,248	0,294	0,380
8	0,621	0,707	0,834	50	0,235	0,279	0,361
9	0,582	0,666	0,798	55	0,224	0,266	0,345
10	0,549	0,632	0,765	60	0,214	0,254	0,330
11	0,521	0,602	0,735	70	0,198	0,235	0,306
12	0,497	0,576	0,708	80	0,185	0,220	0,286
13	0,476	0,553	0,684	90	0,174	0,207	0,270
14	0,458	0,532	0,661	100	0,165	0,197	0,256
15	0,441	0,514	0,641	110	0,158	0,187	0,245
16	0,426	0,497	0,623	120	0,151	0,179	0,234
17	0,412	0,482	0,606	140	0,140	0,166	0,217
18	0,400	0,468	0,590	160	0,131	0,155	0,203
19	0,389	0,456	0,575	180	0,123	0,146	0,192
20	0,378	0,444	0,561	200	0,117	0,139	0,182

Анализ корреляционных связей часто используется для снижения размерности оптимизационных задач. Так, например, если между входным параметром технологического процесса x и двумя выходными параметрами y_1 и y_2 установлена нелинейная функциональная связь (рисунок 2.21), а между параметрами y_1 и y_2 установлена сильная корреляционная связь $r = 0,98$ (рисунок 2.22), то один из этих параметров может быть исключен из рассмотрения при решении оптимизационной задачи, а исследователь может сконцентрировать усилия по оптимизации процесса на оставшемся выходном параметре.

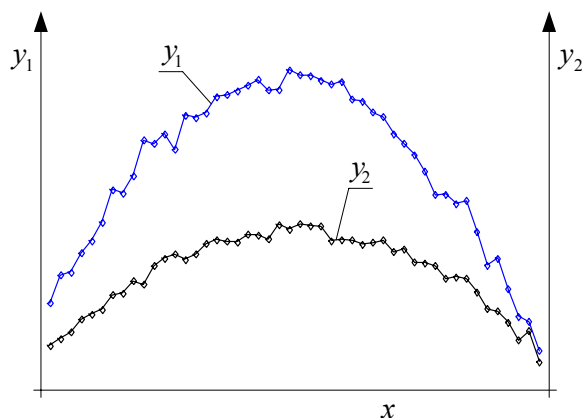


Рисунок 2.21

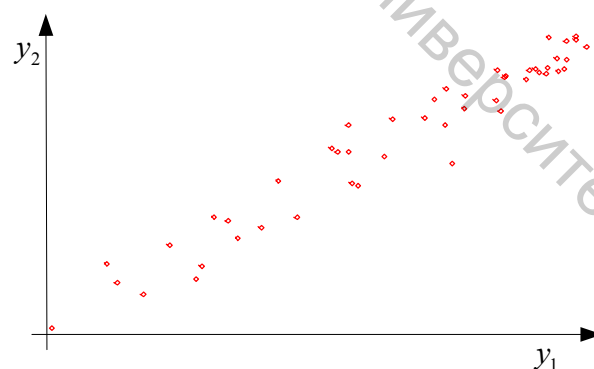


Рисунок 2.22

Пример 2.10

В результате проведения двухфакторного эксперимента (таблица 2.14) для комбинированной высокорастяжимой пряжи пневмомеханического способа прядения получены зависимости относительной разрывной нагрузки (y_1 , сН/текс) и разрывного удлинения (y_2 , мм) от крутки комбинированной пряжи (x_1 , кр/м) и предварительного растяжения эластомерной нити (x_2 , %) при формировании комбинированной пряжи. Необходимо найти оценку выборочного коэффициента корреляции между относительной разрывной нагрузкой и относительным разрывным удлинением комбинированной пряжи и определить значимость выборочного коэффициента корреляции на уровне значимости $\alpha = 0,05$.

Таблица 2.14

x_1	500	500	500	750	750	750	1000	1000	1000
x_2	200	300	400	200	300	400	200	300	400
y_1	7,73	8,18	8,73	11,51	11,74	12,11	10,81	11,11	11,59
y_2	6,25	9,49	12,52	11,48	13,04	13,77	11,33	12,61	13,51

Расчет выборочного коэффициента корреляции:

$$r_{y_1, y_2} = \frac{\overline{y_1 y_2} - \overline{y_1} \cdot \overline{y_2}}{\sqrt{y_1^2 - \overline{y_1}^2} \sqrt{y_2^2 - \overline{y_2}^2}} = \frac{122,93 - 10,39 \cdot 11,56}{\sqrt{110,49 - 107,95} \sqrt{138,58 - 133,53}} = 0,8005.$$

Проверим статистическую значимость коэффициента корреляции (нулевая гипотеза $H_0: \rho = 0$, альтернативная гипотеза $H_a: \rho \neq 0$). Наблюдаемое значение критерия Стьюдента

$$t_r = \frac{r_{x,y}}{\sqrt{1 - r_{x,y}^2}} \cdot \sqrt{n - 2} = \frac{0,8005}{\sqrt{1 - (0,8005)^2}} \cdot \sqrt{7 - 2} = 3,53,$$

критическое значение критерия Стьюдента $t_{k[\alpha/2; f=n-2]} = t_{k[0,025; 7]} = 2,365$. Так как $|t_r| > t_{k[0,025; 8]}$, то нужно отклонить нулевую гипотезу, т. е. выборочный коэффициент корреляции значимо отличается от нуля. Следовательно, при оптимизации технологического процесса прядения комбинированной высокорастяжимой пряжи целесообразно сосредоточить усилия на одном из выходных параметров (y_1 или y_2), так как между ними установлена положительная линейная связь.

Реализуем аналогичный расчет в *Excel* (рисунок 2.23).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P
1	7,73	8,18	8,73	11,51	11,74	12,11	10,81	11,11	11,59		r	n	t_r		t_k	p-value
2	6,25	9,49	12,52	11,48	13,04	13,77	11,33	12,61	13,51		0,8005	9	3,534	>	2,365	0,00955

Рисунок 2.23

В табличном процессоре *Excel* коэффициент корреляции можно рассчитать с помощью двух функций, использующих разные формулы для его расчета (2.55): **=ПИРСОН(A1:J1;A2:J2)** и (2.54): **=КОРРЕЛ(A1:J1;A2:J2)**. Результаты вычисления обеих функций идентичны. В диапазоне **A1:I1** находятся значения y_1 , в диапазоне **A2:I2** находятся значения y_2 . В ячейке **K2** рассчитан коэффициент корреляции **=КОРРЕЛ(A1:I1;A2:I2)**. В ячейке **L2** подсчитано количество значений в выборках y_1 и y_2 : **=СЧЁТ(A1:I1)**. В ячейке **M2** рассчитано наблюдаемое значение критерия Стьюдента: **=K2/КОРЕНЬ(1-K2^2)*КОРЕНЬ(L2-2)**. В ячейке **O2** рассчитано критическое значение критерия Стьюдента: **=СТЮДРАСПОБР(0,05;L2-2)**. В ячейке **P2** рассчитан достигаемый уровень значимости (p-value): **=СТЮДРАСП(ABS(M2);L2-2;2)**. Так как достигаемый уровень значимости меньше 0.05, то нужно отклонить нулевую гипотезу, т. е. выборочный коэффициент корреляции значимо отличается от нуля.

Пример 2.11

В результате проведения двухфакторного эксперимента (рисунок 2.24) для комбинированной высокорастяжимой пряжи пневмомеханического способа прядения получены зависимости относительной разрывной нагрузки (Y_1 , сН/текс), коэффициента вариации по разрывной нагрузке (Y_2 , %) и разрывного удлинения (Y_3 , мм) от крутки комбинированной пряжи и предварительного растяжения эластомерной нити при формировании комбинированной пряжи.

	1 Y_1	2 Y_2	3 Y_3
1	7,73	10,62	6,25
2	8,18	10,32	9,49
3	8,73	10,47	12,52
4	11,51	10,58	11,48
5	11,74	10,31	13,04
6	12,11	10,88	13,77
7	10,81	11,13	11,33
8	11,11	10,81	12,61
9	11,59	11,16	13,51

Рисунок 2.24

Проведем корреляционный анализ в пакете прикладных программ *Statistica*, используя модуль *Анализ – Основные статистики и таблицы – Парные и частные корреляции*, который позволяет построить таблицу парных коэффициентов корреляции и оценить их значимость на выбранном уровне значимости. В итоговой таблице статистически значимые коэффициенты выделяются красным цветом.

Для того, чтобы исследовать корреляционную связь между всеми параметрами, представленными в таблице, с помощью опции **квадратная матрица** выделим все столбцы таблицы Y_1 , Y_2 , Y_3 .

Воспользовавшись опцией **матрица парных корреляций**, построим соответствующую матрицу (рисунок 2.25).

Как видно из таблицы парных коэффициентов корреляции (рисунок 2.25), Y_1 и Y_3 имеют сильную положительную связь

Корреляции (Таблица)							
Отмеченные корреляции значимы на уровне $p < ,05000$							
N=9 (Построчное удаление ПД)							
Переменная	Y_1	Y_2	Y_3				
Y_1	1,00	0,44	0,80				
Y_2	0,44	1,00	0,29				
Y_3	0,80	0,29	1,00				

Рисунок 2.25

($r = 0,8$), это значит, что при увеличении Y_1 происходит увеличение значения Y_3 , и наоборот. Коэффициент корреляции между Y_1 и Y_3 является статистически значимым и выделяется красным цветом.

Параметр Y_2 имеет корреляционную связь средней силы с Y_1 ($r = 0,44$) и очень слабую корреляционную связь с Y_3 ($r = 0,29$). В обоих случаях коэффициенты корреляции статистически не значимы.

Воспользовавшись опцией **матричная диаграмма рассеяния**, построим соответствующую матрицу (рисунок 2.26).

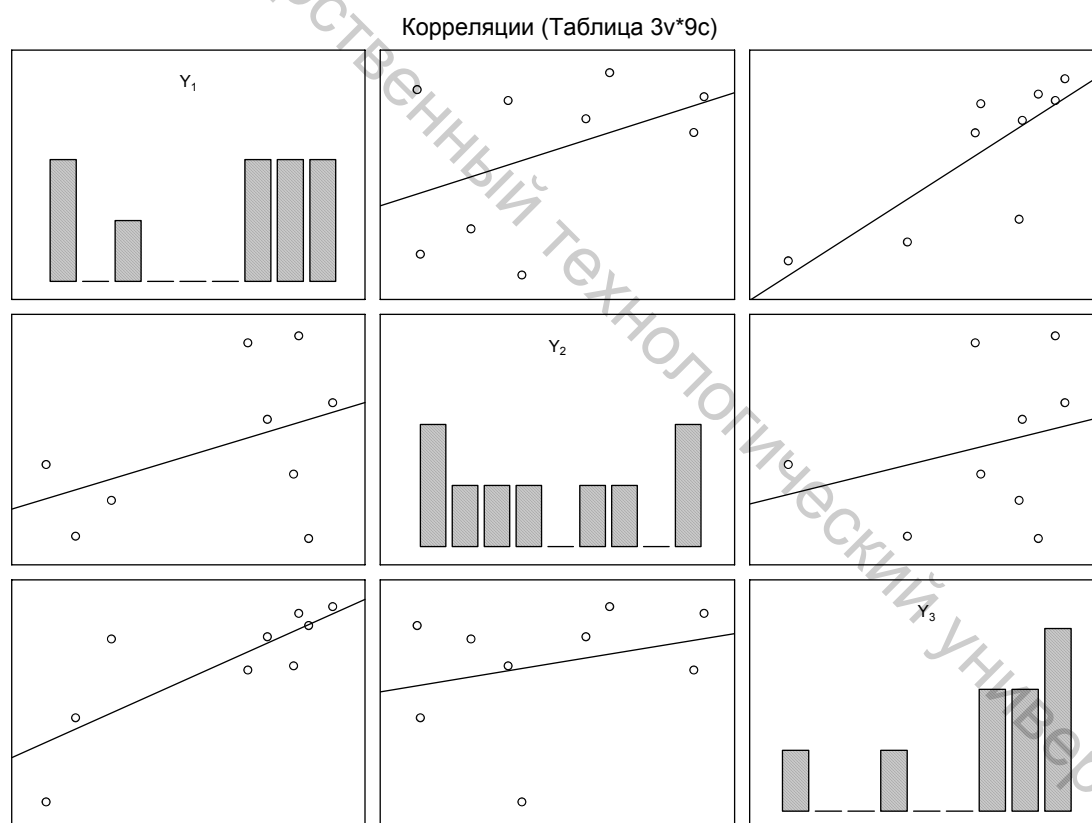


Рисунок 2.26

На рисунке 2.26 приведены диаграммы рассеяния для выбранных переменных. На каждой диаграмме рассеяния приведена линия регрессии, показывающая взаимосвязь между параметрами. В квадратах, соответствующих пересечению переменных самих с собой, показаны гистограммы, отражающие распределение значений параметра.

Воспользовавшись опцией *подробная таблица результатов*, получим результат, приведенный на рисунке 2.27.

Корреляции (Таблица)											
Отмеченные корреляции значимы на уровне $p < 0,05000$											
(Построчное удаление ПД)											
Пер. X и Пер. Y	Среднее	Стд. откл.	r(X,Y)	r2	t	p	N	Св.член завис. Y	Наклон завис. Y	Св.член завис. X	Наклон завис. X
Y ₁	10,39000	1,691353									
Y ₁	10,39000	1,691353	1,000000	1,000000			9	0,0000	1,000000	0,0000	1,000000
Y ₁	10,39000	1,691353									
Y ₂	10,69778	0,318425	0,439800	0,193424	1,295631	0,236188	9	9,8375	0,082800	-14,6005	2,336050
Y ₁	10,39000	1,691353									
Y ₃	11,55556	2,383307	0,800503	0,640805	3,533837	0,009549	9	-0,1644	1,127999	3,8254	0,568090
Y ₂	10,69778	0,318425									
Y ₁	10,39000	1,691353	0,439800	0,193424	1,295631	0,236188	9	-14,6005	2,336050	9,8375	0,082800
Y ₂	10,69778	0,318425									
Y ₂	10,69778	0,318425	1,000000	1,000000			9	0,0000	1,000000	0,0000	1,000000
Y ₂	10,69778	0,318425									
Y ₃	11,55556	2,383307	0,285660	0,081602	0,788648	0,456192	9	-11,3171	2,138075	10,2567	0,038166
Y ₃	11,55556	2,383307									
Y ₁	10,39000	1,691353	0,800503	0,640805	3,533837	0,009549	9	3,8254	0,568090	-0,1644	1,127999
Y ₃	11,55556	2,383307									
Y ₂	10,69778	0,318425	0,285660	0,081602	0,788648	0,456192	9	10,2567	0,038166	-11,3171	2,138075
Y ₃	11,55556	2,383307									
Y ₃	11,55556	2,383307	1,000000	1,000000			9	0,0000	1,000000	0,0000	1,000000

Рисунок 2.27

В таблице (рисунок 2.27) для каждого параметра подсчитано среднее значение (1.5) и стандартное отклонение (1.10). Для каждой пары значений подсчитаны:

- значение коэффициента корреляции $r(X,Y)$;
- коэффициента детерминации r^2 , квадрат коэффициента корреляции (2.23);
- наблюдаемое значение критерия Стьюдента t (2.57);
- достигаемый уровень значимости p ;
- количество значений в выборках N ;
- коэффициенты линейных уравнений регрессии, в которых каждый из параметров выступает поочередно в качестве объясняемого и объясняющего $\hat{y} = b_0 + b_1x$ и $\hat{x} = a_0 + a_1y$.

Если значение в столбце p меньше принятого уровня значимости ($\alpha = 0,05$), то коэффициент корреляции значимо отличается от нуля (см. пп. 1.3). Параметры, обладающие статистически значимой корреляционной связью, выделены красным цветом.

3 Планирование эксперимента

3.1 Основные понятия

Экспериментальное исследование процесса может представлять собой пассивный или активный эксперимент. При **пассивном эксперименте** исследователь фиксирует состояние исследуемого объекта или системы в процессе пассивного наблюдения. При **активном эксперименте** информация накапливается при активном управлении факторами. При наличии возможности управления входными параметрами целесообразно проводить опыты по заранее заданной схеме (**плану эксперимента**), обладающей какими-то оптимальными свойствами. Построением и исследованием рациональных схем организации измерений, подверженных случайным ошибкам, занимается раздел математической статистики **планирование эксперимента** (англ. *design of experiments*). Теоретические основы планирования эксперимента были заложены в 30-е годы Рональдом Фишером. Большой вклад в развитие теории планирования эксперимента сделан во второй половине 20-го века Джорджем Боксом.

Важность планирования эксперимента можно показать на простом примере (рисунок 3.1).

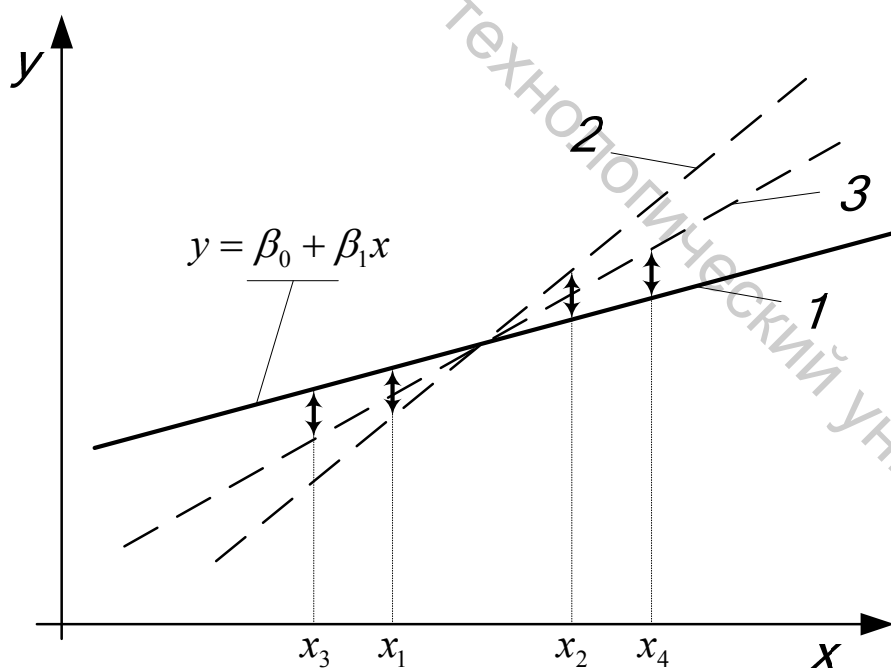


Рисунок 3.1 – Влияние выбора плана эксперимента на точность модели

Двух опытов достаточно для того, чтобы рассчитать оценки коэффициентов линейной однофакторной регрессионной модели. Однако, если измерения будут проводиться с одинаковой ошибкой, можно полу-

читать существенно различные оценки для коэффициентов регрессии при проведении опытов в разных точках. На рисунке 3.1 прямая 1 представляет «истинную» зависимость¹, прямая 2 получена в результате измерений в точках x_1 и x_2 , прямая 3 получена в результате измерений в точках x_3 и x_4 . Очевидно, что прямая 3 является лучшим приближением для прямой 1, хотя ошибка во всех опытах одинакова.

Исследование процесса или объекта само по себе представляет итерационный процесс (рисунок 3.2).

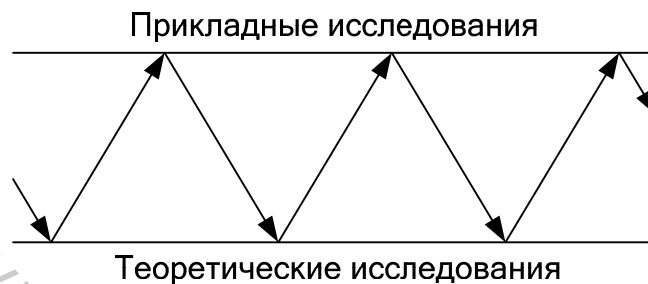


Рисунок 3.2 – Исследовательский процесс

Накапливаемые в результате проведения опытов знания о виде функциональной зависимости позволяют более рационально спланировать проведение эксперимента для получения информации об исследуемой системе.

Эксперимент условно можно разделить на три этапа:

- *предварительный эксперимент*, по его результатам определяются пределы изменения факторов, собирается информация, позволяющая выдвинуть предположение о модели, описывающей исследуемый процесс;
- *основной эксперимент*, выполняется по предварительно разработанной схеме, по его результатам находят оценки коэффициентов модели, устанавливают статистическую значимость модели и ее коэффициентов, тем самым определяют вид модели;
- *утрачивающий эксперимент*, также выполняется по предварительно разработанной схеме для известной модели, позволяющей получить более точные оценки параметров модели.

В теории планирования эксперимента выходной параметр (критерий) называют **откликом**, а функцию, устанавливающую связь между входными параметрами (факторами) и средним значением выходной переменной (регрессионную модель), называют **функцией отклика**, ее геометрическое представление называют **поверхностью отклика**.

Чтобы рассчитать оценку коэффициента регрессионной модели перед эффектом взаимодействия со степенью, необходимо, чтобы число уровней варьирования фактора было как минимум на единицу больше степени взаимодействия. Так, например, чтобы оценить коэффициент

¹ Далее, для упрощения записи, вместо обозначения оценки отклика $\hat{y}$ будет использоваться обозначение y .

перед квадратичной функцией x_i^2 , фактор x_i должен варьироваться, как минимум, на трех уровнях (рисунок 3.3 б).

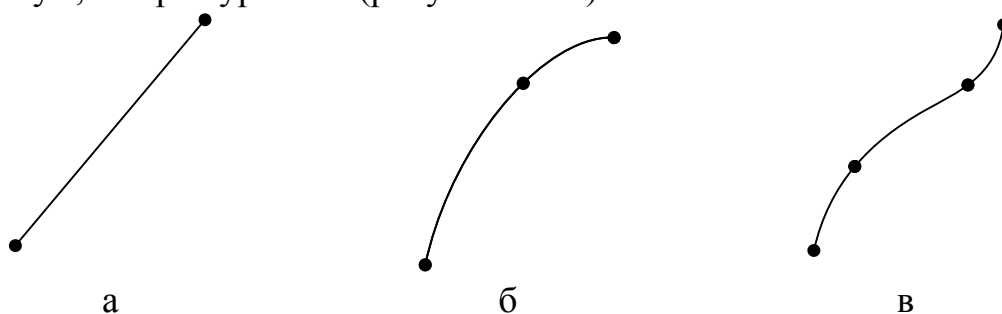


Рисунок 3.3 – Виды зависимостей:

а – линейная; б – квадратичная; в – кубическая

Для нахождения коэффициентов полиномиальной регрессионной модели необходимо провести количество опытов, как минимум, равное количеству коэффициентов полинома. План эксперимента, содержащий такое количество опытов, называется **насыщенным**. Если количество опытов больше, план эксперимента называют **ненасыщенным**. Если количество опытов меньше, план называют **сверхнасыщенным**. Под **степенью свободы** понимают разность между количеством опытов и количеством коэффициентов регрессионной модели, вычисленных по результатам этих опытов. Чтобы иметь возможность проверить адекватность полученной модели, степень свободы должна быть больше нуля.

Для удобства записи и обработки результатов эксперимента факторы в плане эксперимента кодируют таким образом, что верхний уровень обозначается +1, а нижний уровень -1. Если в плане эксперимента всего два уровня варьирования факторов, то их для сокращения записи обозначают (+) и (-).

Преобразование натуральных значений факторов в кодированные:

$$x_i^k = \frac{x_i - x_i^0}{\Delta x_i}, \quad (3.1)$$

где x_i^k – кодированное значение фактора; x_i – натуральное значение фактора; Δx_i – интервал варьирования натуральных значений фактора; x_i^0 – натуральное значение фактора на основном (нулевом) уровне:

$$x_i^0 = \frac{\max(x_i) + \min(x_i)}{2}.$$

В таблице 3.1 приведен пример исходного плана эксперимента, а в таблице 3.2 приведен пример кодированного плана эксперимента.

Таблица 3.1

№	Линейная плотность пряжи, текс	Крутка пряжи, кр/м
1	50	750
2	50	300
3	20	750
4	20	300

Таблица 3.2

№	X ₁	X ₂
1	+1	+1
2	+1	-1
3	-1	+1
4	-1	-1

В таблице 3.3 приведены уровни и интервалы варьирования для таблицы 3.1 и таблицы 3.2.

Таблица 3.3

Наименование фактора	Кодовое обозначение	Уровни варьирования			Интервал варьирования, Δ
		-1	0	+1	
Линейная плотность пряжи, текс	X ₁	20	35	50	15
Крутка пряжи, кр/м	X ₂	300	525	650	225

Обратное преобразование кодированных значений факторов в натуральные:

$$x_{in} = x_{in}^0 + x_{ik} \cdot \Delta x_{in}. \quad (3.2)$$

Добавляя в кодированный план эксперимента столбцы, необходимые для оценивания параметров регрессионной модели, получают **матрицу планирования эксперимента** (2.12). Матрица планирования эксперимента может обладать свойствами: *нормированности, центральности, ортогональности, ротатабельности*.

План эксперимента называется **нормированным**, если сумма квадратов элементов каждого столбца матрицы планирования равна числу опытов в плане:

$$\sum_{i=1}^N x_{ij}^2 = N, \text{ при } j = 1..k, \quad (3.3)$$

где N – число опытов (строк) в плане эксперимента; k – число столбцов в плане эксперимента. Это достигается благодаря тому, что значения факторов обозначаются соответственно +1 и -1.

План эксперимента называется **центральный** или **симметричным**, если все его точки располагаются симметрично относительно центра плана, при этом выполняется условие:

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^k x_{ij} = 0, \quad (3.4)$$

где i – номер опыта; j – номер параметра. Таким образом, у центрального плана эксперимента сумма любой строки или любого столбца равна нулю. Не центральный план может быть сделан центральным с помощью переноса начала координат.

План эксперимента называется **ортогональным**, если сумма произведений двух любых столбцов матрицы планирования равна нулю:

$$\sum_{i=1}^N x_{ai}x_{bi} = 0, \text{ при } a \neq b \text{ и } a = 1..k; b = 1..k, \quad (3.5)$$

где k – число факторов; N – число опытов; i – номер опыта. Ортогональный план позволяет получать независимые оценки для коэффициентов уравнения регрессии. Если оценки коэффициентов модели получены при обработке данных ортогонального плана эксперимента, то после исключения из модели незначимых коэффициентов не нужно пересчитывать значение оценок остальных коэффициентов.

План эксперимента называется **ротатабельным**, если он обеспечивает одинаковую дисперсию отклика на одном расстоянии от центра плана при любом направлении в факторном пространстве. Свойство ротатабельности характеризует не сам план эксперимента, как, например, свойства: нормированности, центральности и ортогональности, а характеризует свойства регрессионной модели, коэффициенты которой рассчитаны на основе данных, полученных при реализации плана эксперимента.

На начальной стадии планирования эксперимента выбирается наиболее простая модель, которая предположительно адекватно описывает исследуемый процесс, и составляется план эксперимента, содержащий достаточное количество опытов для определения коэффициентов выбранной модели и проверки ее адекватности. Чем проще выбранная модель, тем меньше опытов необходимо провести для оценки ее коэффициентов. Если выбранная модель оказывается неадекватной, то переходят к выбору другой, более сложной модели, и составляют для нее новый план эксперимента. Если новый план эксперимента включает в себя опыты, проведенные по плану для модели более низкого порядка, то его называют **композиционным**.

План, позволяющий найти параметры регрессионной модели с линейными эффектами факторов и эффектами их взаимодействия, называется **планом первого порядка**. План, позволяющий также найти квадратические эффекты факторов, называется **планом второго порядка**.

В процессе проведения эксперимента могут изменяться внешние условия, оказывающие влияние на значения выходной переменной (отклика). Для сведения эффекта влияния неконтролируемого фактора (например, точность фиксации показаний прибора разными операторами) к

случайной погрешности опыты в плане эксперимента подвергают **рандомизации**, то есть строки плана эксперимента располагают в случайном порядке.

3.2 Полный факторный эксперимент

При проведении **полного факторного эксперимента (ПФЭ)** осуществляются опыты для всех возможных комбинаций уровней входных параметров (факторов), при этом число опытов равно числу всех возможных комбинаций уровней факторов, при одинаковом числе уровней – для каждого фактора:

$$N = n^k, \quad (3.6)$$

где n – число уровней варьирования факторов, k – число факторов. Если факторы имеют разное число уровней варьирования, то число опытов равно:

$$N = n_1 \cdot n_2 \cdot \dots \cdot n_k = \prod_{i=1}^k n_i,$$

где n_i – число уровней варьирования i -го фактора. Такой план эксперимента может использоваться в случае, если, заранее известно что одни факторы оказывают линейное влияние на функцию отклика, а другие нелинейное, т. е. нет необходимости варьировать более чем на двух уровнях факторы, линейно изменяющие функцию отклика.

Полный факторный эксперимент с числом факторов k , варьированных на двух уровнях, обозначается 2^k . Планы ПФЭ 2^k позволяют определять коэффициенты регрессионной модели перед линейными эффектами факторов и эффектами взаимодействия факторов, например:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j. \quad (3.7)$$

Количество коэффициентов в модели (3.7):

$$k + 1 + c,$$

где c – число возможных эффектов парного взаимодействия: $c = (k \cdot (k - 1)) / 2$. Однако оценка эффектов взаимодействия факторов, включение которых в модель делает ее нелинейной, часто неоправданна без оценки квадратичных эффектов. При этом в планах ПФЭ 2^k каждый фактор варьируется только на двух уровнях и оценка квадратичных эффектов невозможна. Поэтому чаще всего планы ПФЭ 2^k используются для оценки моделей только с главными эффектами:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_k x_k. \quad (3.8)$$

Для нахождения коэффициентов линейной однофакторной модели:

$$y = b_0 + b_1 x_1 \quad (3.9)$$

матрица планирования ПФЭ 2^1 представлена в таблице 3.5, столбец X_0 вводится для расчета оценки свободного коэффициента b_0 .

Таблица 3.4 – План и Таблица 3.5 – Матрица планирования ПФЭ 2^1 и кодовое обозначение строк (КОС)

№	X_1	Y	X_0	X_1	КОС
1	-	y_1	+	-	(1)
2	+	y_2	+	+	a

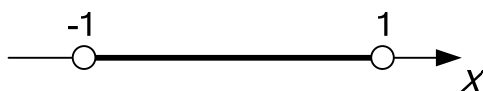


Рисунок 3.4 – Расположение точек ПФЭ 2^1 в факторном пространстве

Этот план является насыщенным, т. е. позволяет найти оценки коэффициентов модели, но не позволяет проверить ее адекватность. Общий подход при проверке адекватности моделей с насыщенными планами – включение в план повторных опытов для одной из комбинаций уровней факторов.

Для ПФЭ 2^2 уравнение регрессии с эффектом взаимодействия (b_{12}) имеет вид:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2, \quad (3.10)$$

матрица планирования для него представлена в таблице 3.7. Столбец X_0 вводится для расчета оценки свободного коэффициента b_0 . Столбец X_1X_2 введен для расчета оценки коэффициента b_{12} и получен перемножением столбцов X_1 и X_2 .

Таблица 3.6 – План и Таблица 3.7 – Матрица планирования ПФЭ 2^2 и кодовое обозначение строк (КОС)

№	X_1	X_2	Y	X_0	X_1	X_2	X_1X_2	КОС
1	-	-	y_1	+	-	-	+	(1)
2	+	-	y_2	+	+	-	-	a
3	-	+	y_3	+	-	+	-	b
4	+	+	y_4	+	+	+	+	ab

В кодовом обозначении строк (таблица 3.7) приняты обозначения: **(1)** – все факторы установлены на нижнем уровне; **a** – первый фактор установлен на верхнем уровне; **b** – второй фактор установлен на верхнем уровне; **ab** – первый и второй факторы установлены на верхнем уровне.

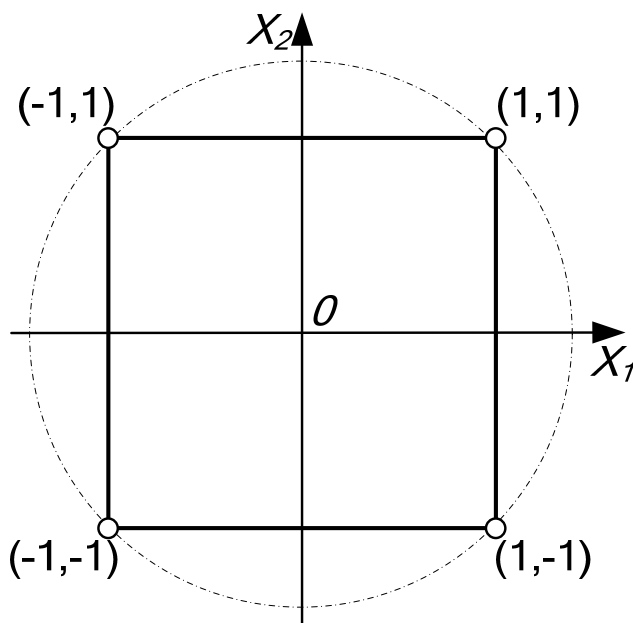


Рисунок 3.5 – Расположение точек ПФЭ 2^2 в факторном пространстве

План ПФЭ 2^2 для модели (3.10) является насыщенным. Если из модели исключить один из эффектов, например $b_{12}x_1x_2$, то станет возможным не только найти оценки коэффициентов модели, но и проверить ее адекватность. Если в модель включен коэффициент b_{12} , то модель нелинейная.

Общая рекуррентная формула для построения планов ПФЭ для различного количества факторов и двух уровней варьирования имеет вид:

$$M_1 = \begin{bmatrix} x_1 \\ - \\ + \end{bmatrix}, \quad M_2 = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ - & - \\ + & - \\ - & + \\ + & + \end{bmatrix}, \quad M_{k+1} = \begin{bmatrix} x_{k+1} \\ - \\ M_k \\ \vdots \\ - \\ + \\ M_k \\ \vdots \\ + \end{bmatrix},$$

матрица планирования для линейной модели ПФЭ 2^k :

$$X_k = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ M_k \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Для ПФЭ 2^3 уравнение регрессии со всеми возможными эффектами взаимодействия имеет вид:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{23}x_2x_3 + b_{13}x_1x_3 + b_{123}x_1x_2x_3, \quad (3.11)$$

матрица планирования для него представлена в таблице 3.8.

Таблица 3.8 – Матрица планирования ПФЭ 2^3 и кодовое обозначение строк

№	X_0	X_1	X_2	X_3	$X_1 X_2$	$X_2 X_3$	$X_1 X_3$	$X_1 X_2 X_3$	КОС
1	+	–	–	–	+	+	+	–	(1)
2	+	+	–	–	–	+	–	+	a
3	+	–	+	–	–	–	–	+	b
4	+	+	+	–	+	–	+	–	ab
5	+	–	–	+	+	–	+	+	c
6	+	+	–	+	–	–	–	–	ac
7	+	–	+	+	–	+	–	–	bc
8	+	+	+	+	+	+	+	+	abc

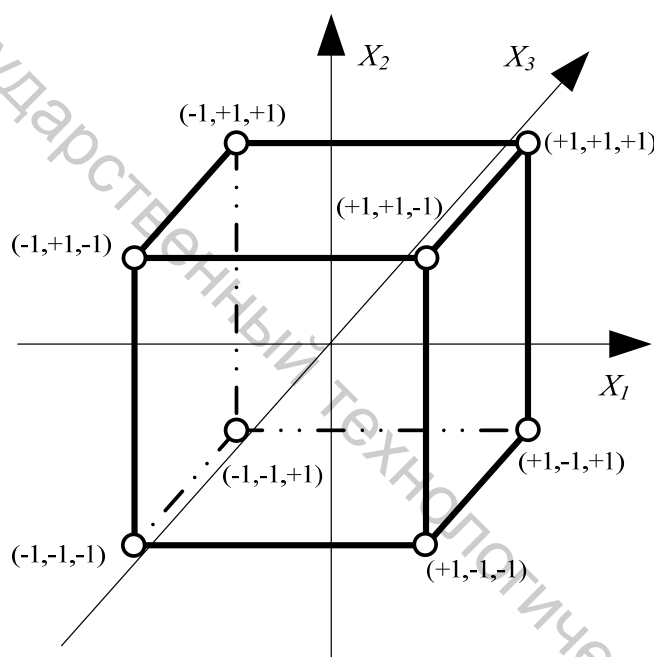


Рисунок 3.6 – Расположение точек ПФЭ 2^3 в факторном пространстве

Приведенные планы ПФЭ для моделей только с главными эффектами являются *центральными, нормированными и ортогональными*. Можно показать, что эти свойства упрощают расчет оценок регрессионной модели методом наименьших квадратов. Для регрессионной модели:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2$$

по МНК (см. пп. 2.1.1):

$$W(b_0, b_1, b_2) = \sum_{i=1}^N (y_i - (b_0 + b_1 x_{1i} + b_2 x_{2i}))^2 \rightarrow \min, \quad (3.12)$$

где y_i – среднее значение отклика при фиксированных значениях входного параметра x_{1i} и x_{2i} . Дифференцируя (3.12) по искомым коэффициентам и приравнивая к нулю:

$$\begin{cases} \frac{W(b_0, b_1, b_2)}{\partial b_0} = -2 \sum_{i=1}^N (y_i - b_0 - b_1 x_{1i} - b_2 x_{2i}) = 0 \\ \frac{W(b_0, b_1, b_2)}{\partial b_1} = -2 \sum_{i=1}^N x_{1i} (y_i - b_0 - b_1 x_{1i} - b_2 x_{2i}) = 0, \\ \frac{W(b_0, b_1, b_2)}{\partial b_2} = -2 \sum_{i=1}^N x_{2i} (y_i - b_0 - b_1 x_{1i} - b_2 x_{2i}) = 0 \end{cases}$$

получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} b_0 n + b_1 \sum_{i=1}^N x_{1i} + b_2 \sum_{i=1}^N x_{2i} = \sum_{i=1}^N y_i \\ b_0 \sum_{i=1}^N x_{1i} + b_1 \sum_{i=1}^N x_{1i}^2 + b_2 \sum_{i=1}^N x_{1i} x_{2i} = \sum_{i=1}^N y_i x_{1i} \\ b_0 \sum_{i=1}^N x_{2i} + b_1 \sum_{i=1}^N x_{1i} x_{2i} + b_2 \sum_{i=1}^N x_{2i}^2 = \sum_{i=1}^N y_i x_{2i} \end{cases}$$

Так как план эксперимента является центральным (3.4), то:

$$b_1 \sum_{i=1}^N x_{1i} = 0, \quad b_2 \sum_{i=1}^N x_{2i} = 0, \quad b_0 \sum_{i=1}^N x_{1i} = 0, \quad b_0 \sum_{i=1}^N x_{2i} = 0.$$

Так как план эксперимента является нормированным (3.3), то:

$$b_1 \sum_{i=1}^N x_{1i}^2 = b_1 N, \quad b_2 \sum_{i=1}^N x_{2i}^2 = b_2 N.$$

Так как план эксперимента является ортогональным (3.5), то:

$$b_1 \sum_{i=1}^N x_{1i} x_{2i} = 0, \quad b_2 \sum_{i=1}^N x_{1i} x_{2i} = 0.$$

Таким образом, оценки коэффициентов регрессии:

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^N y_i}{N} \text{ или } b_0 = \frac{\sum_{i=1}^N y_i x_{0i}}{N}, \quad b_1 = \frac{\sum_{i=1}^N y_i x_{1i}}{N}, \quad b_2 = \frac{\sum_{i=1}^N y_i x_{2i}}{N},$$

т. е. j -й коэффициент регрессионной модели b_j можно оценить с помощью скалярного произведения столбцов y и x_j матрицы планирования. Аналогично можно определить коэффициенты для регрессионных моделей с эффектами взаимодействий:

$$b_{12} = \frac{\sum_{i=1}^N y_i (x_1 x_2)_i}{N}, \quad b_{123} = \frac{\sum_{i=1}^N y_i (x_1 x_2 x_3)_i}{N} \text{ и т. д.}$$

3.3 Дробный факторный эксперимент

С ростом числа факторов происходит быстрый рост количества опытов, необходимых для проведения полного факторного эксперимента (рисунок 3.7). При этом количество опытов N значительно превосходит количество неизвестных коэффициентов линейной модели k . Так, например, матрица ПФЭ 2^{11} для линейной модели с 11 факторами будет включать 2048 опытов, в то время как для определения оценок коэффициентов линейной модели для 11 факторов со свободным коэффициентом b_0 достаточно 12 опытов.

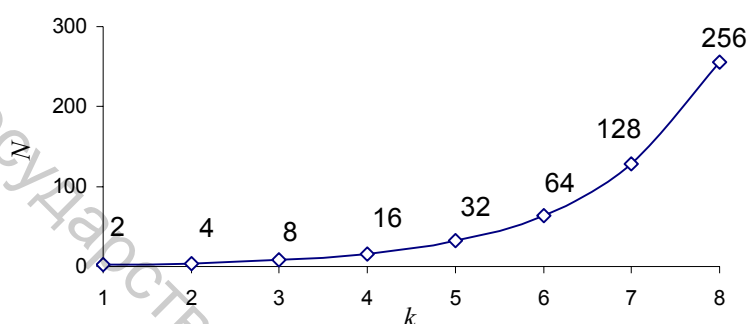


Рисунок 3.7 – Зависимость количества опытов ПФЭ с 2 уровнями варьирования от количества факторов

Часто осуществить большое количество опытов сложно, дорого или требует длительного времени. А для линейной модели количество опытов ПФЭ, как правило, избыточно, хотя и позволяет получить более точные оценки коэффициентов. Для построения регрессионных моделей с проведением меньшего числа опытов пользуются планами **дробных факторных экспериментов (ДФЭ)**. Например, планом ДФЭ пользуются, если известно, что технологический процесс описывается линейной моделью, и после перенастройки или регулировки оборудования необходимо уточнить коэффициенты модели.

При построении матрицы планирования ДФЭ происходит смешивание оценок незначимых коэффициентов с оценками коэффициентов перед линейными эффектами.

Так, например, ПФЭ для трех факторов и двух уровней варьирования включает $2^3 = 8$ опытов, в то время как для нахождения оценок коэффициентов линейной модели:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3$$

достаточно 4-х опытов. При построении плана ДФЭ, содержащего половину опытов ПФЭ 2^3 , то есть 4 опыта, происходит смешивание оценок:

$$b_1 = \beta_1 + \beta_{23}, \quad b_2 = \beta_2 + \beta_{13}, \quad b_3 = \beta_3 + \beta_{12},$$

поскольку коэффициенты β_{13} , β_{23} , β_{12} априори не значимы.

План эксперимента, реализующий половину опытов ПФЭ, называют **полуреplikой** ($1/2$). Число опытов в плане ДФЭ определяется как

$$N = n^{k-p}, \quad (3.13)$$

где n – число уровней варьирования факторов, k – общее число факторов, p – число факторов, чьи главные эффекты смешаны с эффектами взаимодействия.

Чтобы построить матрицу ДФЭ 2^{3-1} (полуреplikу ПФЭ 2^3), необходимо в матрицу ПФЭ 2^3 (содержащую столбцы для X_1 и X_2) добавить столбец X_3 , значения которого вычисляются с помощью **генерирующего соотношения**. Для ДФЭ 2^{3-1} возможны два генерирующих соотношения:

$$X_3 = X_1 \cdot X_2 \quad \text{и} \quad X_3 = -X_1 \cdot X_2,$$

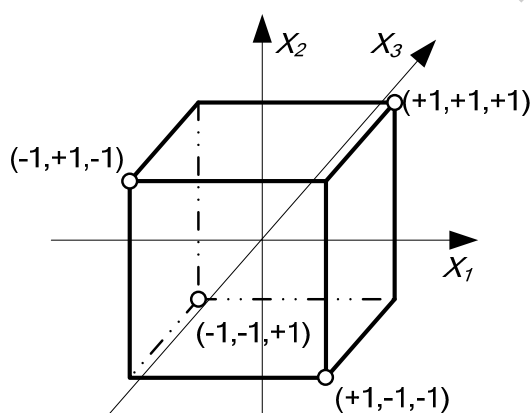
и, как следствие, два варианта матрицы дробного факторного эксперимента 2^{3-1} (таблица 3.9, таблица 3.10).

Таблица 3.9

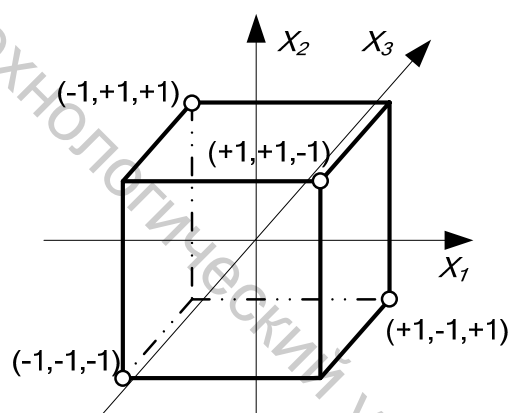
№	X_1	X_2	$X_3 = X_1 \cdot X_2$	$X_1 \cdot X_2 \cdot X_3$
1	–	–	+	+
2	+	–	–	+
3	–	+	–	+
4	+	+	+	+

Таблица 3.10

№	X_1	X_2	$X_3 = -X_1 \cdot X_2$	$-X_1 \cdot X_2 \cdot X_3$
1	–	–	–	+
2	+	–	+	+
3	–	+	+	+
4	+	+	–	+



а



б

Рисунок 3.8 – Расположение точек ДФЭ 2^{3-1} в факторном пространстве для генерирующих соотношений:

а) $X_3 = X_1 \cdot X_2$, б) $X_3 = -X_1 \cdot X_2$

При умножении генерирующего соотношения на независимую переменную получают **определяющий контраст**. Для ДФЭ 2^{3-1} (независимая переменная x_3) определяющими контрастами будут:

$$(x_1 \cdot x_2 \cdot x_3) = +1 \quad \text{и} \quad -(x_1 \cdot x_2 \cdot x_3) = +1,$$

которые в любой строке ДФЭ равны единице (таблица 3.9). С помощью определяющего контраста можно определить, с каким эффектом сме-

шан линейный эффект. Например, умножая определяющий контраст на x_1 , получим:

$$x_1 \cdot (x_1 \cdot x_2 \cdot x_3) = 1 \cdot x_1,$$

далее

$$x_1^2 \cdot x_2 \cdot x_3 = x_1,$$

а так как для любого $x_i^2 = 1$, то получим генерирующее соотношение для x_1 :

$$x_1 = x_2 \cdot x_3,$$

по аналогии получим генерирующие соотношения для x_2 и x_3 :

$$x_2 = x_1 \cdot x_3 \quad \text{и} \quad x_3 = x_1 \cdot x_2.$$

Это означает, что b_1 , b_2 , b_3 будут оценками совместных эффектов:

$$b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23}, \quad b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{13}, \quad b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12}.$$

Разрешающая способность плана R характеризует степень смешения эффектов регрессионной модели и обозначается римскими цифрами. В плане с разрешением III главные эффекты не смешаны между собой и, как минимум, один главный эффект смешан с эффектом двойного взаимодействия. В плане с разрешением IV главные эффекты не смешаны между собой и не смешаны с эффектами двойного взаимодействия. В плане с разрешением V главные эффекты и эффекты двойного взаимодействия не смешаны между собой. Чем выше разрешающая способность, тем больше несмешанных эффектов. Полуреплика ПФЭ 2^3 с разрешающей способностью $R = \text{III}$ (таблица 3.9 и таблица 3.10) обозначается 2_{III}^{3-1} . Прямая оценка разрешающей способности дробной реплики затруднительна, и для ее оценки можно воспользоваться генерирующим соотношением.

Планы с одинаковой разрешающей способностью могут иметь различное количество смешанных эффектов. Планы ДФЭ могут позволять определять коэффициенты не только главных эффектов, но и эффектов взаимодействия, не смешанных с другими эффектами. Таким образом, при выборе плана ДФЭ рекомендуется выбирать максимально несмешанный план с наибольшей разрешающей способностью.

Для матриц планирования ДФЭ с двумя уровнями варьирования факторов характерны свойства: симметричности, нормированности, ортогональности и ротатабельности.

3.4 Разбиение плана эксперимента на блоки

При проведении эксперимента на результаты опытов могут оказывать влияние не только те факторы, влияние которых представляет интерес исследователя. Например, кроме параметров технологического

процесса на результаты опытов может оказывать влияние тот факт, что в разных опытах используется сырье из разных партий, или опыты проводятся разными операторами, или различная влажность воздуха при проведении опытов и т. д.

Для уменьшения влияния таких факторов, сведения эффекта их влияния к случайной ошибке рекомендуется выполнять опыты из плана эксперимента в случайном порядке. В некоторых случаях такого эффекта можно добиться с помощью разбиения плана эксперимента на **блоки**. При таком разбиении происходит смешивание эффекта нежелательного фактора с оценкой эффекта, не используемого в регрессионной модели. Как правило, проводится смешивание с эффектом взаимодействия наиболее высокого уровня, для ПФЭ 2^2 это x_1x_2 , для ПФЭ 2^3 это $x_1x_2x_3$, для ПФЭ 2^4 это $x_1x_2x_3x_4$ и т. д.

Так например, ПФЭ 2^3 (таблица 3.11) для модели без эффекта тройного взаимодействия b_{123} может быть разбит на два блока (таблица 3.12).

Таблица 3.11

№	X_1	X_2	X_3
1	+	+	+
2	-	+	+
3	+	-	+
4	-	-	+
5	+	+	-
6	-	+	-
7	+	-	-
8	-	-	-

Таблица 3.12

№	X_0	X_1	X_2	X_3	блок	$X_1X_2X_3$
2	+	-	+	+	1	-
3	+	+	-	+		-
5	+	+	+	-		-
8	+	-	-	-		-
1	+	+	+	+	2	+
4	+	-	-	+		+
6	+	-	+	-		+
7	+	+	-	-		+

Внутри каждого блока каждый из факторов варьируется на всех уровнях. При разбиении на блоки опыты также рекомендуется рандомизировать в пределах каждого блока, т. е. располагать в случайном порядке.

3.5 Построение и анализ планов ПФЭ и ДФЭ

Для построения и анализа планов эксперимента в пакете прикладных программ STATISTICA используется модуль **Анализ** –  **Промышленная статистика и Шесть Сигма** –  **Планирование экспериментов (ПЭ)**. Для работы с описанными выше планами ПФЭ и ДФЭ используют модуль  **$2^{**}(K-p)$ стандартные планы (Бокс, Хантер & Хантер)**. Далее в диалоговом окне после выбора необходимого числа факторов эксперимента будет отображен список доступных

планов ПФЭ и ДФЭ. Планы эксперимента характеризуются числами: **факторы/блоки/опыты** и разрешающей способностью **R**. После выбора плана с требуемыми параметрами с помощью опций диалогового окна можно указать дополнительные параметры результирующей таблицы. Например, число повторов (реплик) опытов в плане эксперимента, количество пустых столбцов для занесения значений выходных параметров и др.

3.5.1 Пример построения плана ПФЭ

Если имеются теоретические предпосылки, что выходной параметр технологического процесса в заданных пределах варьирования факторов описывается регрессионной моделью первого порядка для четырех факторов, то для оценки ее параметров может быть использован план ПФЭ 2^4 . Рассмотрим пример построения плана эксперимента **4/4/16** (факторы/блоки/опыты), который представляет собой план ПФЭ для четырех факторов и содержит $2^4=16$ опытов. Опыты в плане эксперимента разбиты на четыре блока.

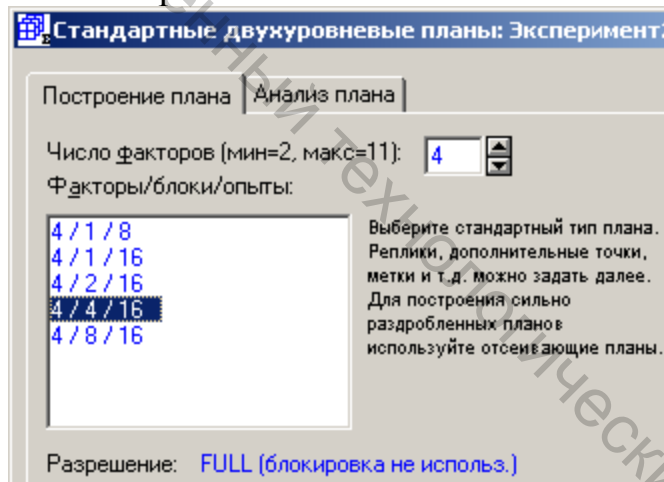


Рисунок 3.9

Планы ПФЭ имеют максимальную разрешающую способность (FULL). Если планируется, что опыты будут проводиться в разные дни или разными операторами, то целесообразно разбить план эксперимента на блоки. При этом приходится жертвовать эффектами взаимодействия высоких порядков. При разбиении плана эксперимента на два блока происходит смешивание эффекта блокировки с одним эффектом взаимодействия, на четыре блока – с двумя эффектами и т. д.

Для планов эксперимента, в которых опыты разбиты на блоки, выдается предупреждение о том, что происходит смешивание эффекта блоковой переменной с эффектами взаимодействия высокого порядка, определяемого *генератором блоковой переменной*. В данном примере (рисунок 3.9) FULL означает, что блокировка не используется.

С помощью опции **порядок опытов** можно задать порядок опытов в таблице, содержащей план эксперимента. При этом возможны варианты: стандартный порядок опытов; случайный порядок (рандомизированный) во всей таблице; случайный порядок в пределах блоков. На рисунке 3.10 приведен план ПФЭ 2^4 , разбитый на четыре блока, со случайным порядком опытов в пределах каждого блока.

план	Блок	A	B	C	D
15	1	-1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
8	1	1,00000	1,00000	1,00000	-1,00000
1	1	-1,00000	-1,00000	-1,00000	-1,00000
10	1	1,00000	-1,00000	-1,00000	1,00000
11	2	-1,00000	1,00000	-1,00000	1,00000
5	2	-1,00000	-1,00000	1,00000	-1,00000
14	2	1,00000	-1,00000	1,00000	1,00000
4	2	1,00000	1,00000	-1,00000	-1,00000
3	3	-1,00000	1,00000	-1,00000	-1,00000
6	3	1,00000	-1,00000	1,00000	-1,00000
12	3	1,00000	1,00000	-1,00000	1,00000
13	3	-1,00000	-1,00000	1,00000	1,00000
7	4	-1,00000	1,00000	1,00000	-1,00000
16	4	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
2	4	1,00000	-1,00000	-1,00000	-1,00000
9	4	-1,00000	-1,00000	-1,00000	1,00000

Рисунок 3.10

Опция **генераторы блоковой переменной** отображает таблицу, содержащую генерирующие соотношения для блоковых переменных (рисунок 3.11).

Генератор блока	(Факторы обозначены номерами)			
	Псевд.			
1	124			
2	134			

Рисунок 3.11

В таблице (рисунок 3.11) показано, что первая блоковая переменная образована генерирующим соотношением 124 (ABD), вторая блоковая переменная образована генерирующим соотношением 134 (ACD). Таким образом, модель, коэффициенты которой будут оцениваться после реализации приведенного плана эксперимента, не должна содержать эффектов тройного взаимодействия соответствующих генераторов блоковых переменных.

3.5.2 Пример построения плана ДФЭ

Если имеются теоретические предпосылки, что выходной параметр технологического процесса в заданных пределах варьирования факторов описывается линейной регрессионной моделью (без эффектов взаимодействия), то для оценки ее параметров может быть использован

план ДФЭ 2_{III}^{5-2} . План эксперимента 5/1/8 (факторы/блоки/опыты) представляет собой план ДФЭ для пяти факторов и содержит восемь опытов, план ПФЭ для пяти факторов содержал бы $2^5=32$ опыта. План эксперимента (рисунок 3.12) не содержит блоков, все опыты находятся в одном блоке.

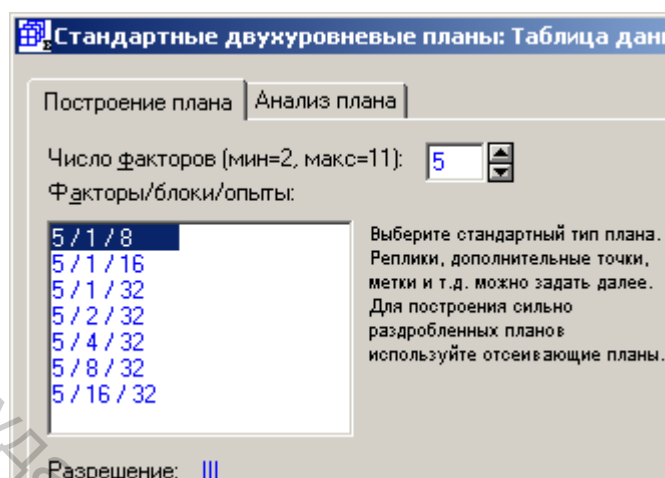


Рисунок 3.12

Разрешающая способность плана $R = III$, т.е. он позволяет оценить только главные эффекты модели, оценки эффектов взаимодействий смешаны между собой и с главными эффектами.

Рандомизированный план ДФЭ 2_{III}^{5-2} приведен на рисунке 3.13.

Планир. план	План: $2^{5-2}(5-2)$ план (Таблица данных1)				
	A	B	C	D	E
4	1,00000	1,00000	-1,00000	1,00000	-1,00000
7	-1,00000	1,00000	1,00000	-1,00000	-1,00000
5	-1,00000	-1,00000	1,00000	1,00000	-1,00000
8	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
2	1,00000	-1,00000	-1,00000	-1,00000	-1,00000
6	1,00000	-1,00000	1,00000	-1,00000	1,00000
3	-1,00000	1,00000	-1,00000	-1,00000	1,00000
1	-1,00000	-1,00000	-1,00000	1,00000	1,00000

Рисунок 3.13

Для планов ДФЭ можно получить дополнительную информацию с помощью опций: *псевдонимы эффектов*, *генераторы дробного плана*, *матрица смешивания*.

Опция *псевдонимы эффектов* позволяет построить таблицу, содержащую генерирующие соотношения плана ДФЭ (рисунок 3.14).

Фактор	ABD	ACE	BCDE
A	BD	CE	ABCDE
B	AD	ABCE	CDE
C	ABCD	AE	BDE
D	AB	ACDE	BCE
E	ABDE	AC	BCD
AB	D	BCE	ACDE
AC	BCD	E	ABDE
BC	ACD	ABE	DE
AD	B	CDE	ABCE
BD	A	ABCDE	CE
CD	ABC	ADE	BE
AE	BDE	C	ABCD
BE	ADE	ABC	CD
CE	ABCDE	A	BD
DE	ABE	ACD	BC

а

Фактор	Псевд. 1	Псевд. 2
A	2*4	3*5
B	1*4	
C	1*5	
D	1*2	
E	1*3	
2*3	4*5	
2*5	3*4	

б

Рисунок 3.14

В таблице (рисунок 3.14 а) буквами латинского алфавита А, В, С, D, Е обозначены факторы, эффекты взаимодействия факторов обозначены их сочетанием. Из таблицы, например, видно, что для главного эффекта первого фактора (А) существуют три генерирующих соотношения $A=BD$; $A=CE$; $A=ABCDE$. Аналогично для остальных эффектов.

В таблице (рисунок 3.14 б) главные эффекты обозначены буквами латинского алфавита, эффекты взаимодействия – цифрами, при этом в таблице приведены генерирующие соотношения только для эффектов двойного взаимодействия.

Опция **матрица смешивания** позволяет построить таблицу коэффициентов корреляции главных эффектов и эффектов двойного взаимодействия (рисунок 3.15).

Фактор	A	B	C	D	E	1*2	1*3	1*4	1*5	2*3	2*4	2*5	3*4	3*5	4*5
A	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	1,00	0,00
B	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
C	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
D	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
E	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
1*2	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
1*3	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
1*4	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
1*5	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
2*3	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00
2*4	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	1,00	0,00
2*5	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	1,00	0,00	0,00
3*4	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	1,00	0,00	0,00
3*5	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	1,00	0,00
4*5	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00

Рисунок 3.15

В таблице (рисунок 3.15) эффекты, связанные генерирующими соотношениями, имеют коэффициент корреляции, равный 1.

Опция **генераторы дробного плана** отображает таблицу (рисунок 3.16), содержащую генерирующие соотношения, использованные для построения плана ДФЭ.

Фактор	(Факторы обозначены номерами)			
	Псевд.			
4	12			
5	13			

Рисунок 3.16

В таблице (рисунок 3.16) факторы обозначены номерами (1, 2, 3, 4, 5). Из таблицы видно, что при построении ДФЭ 2^{5-2}_{III} столбцы для 4-го и 5-го факторов получены с помощью генерирующих соотношений $4=12$ и $5=13$, что равносильно $D=AB$ и $E=AC$ (см. рисунок 3.14).

3.5.3 Пример анализа плана ПФЭ

Для исследования зависимости коэффициента вариации по разрывной нагрузке льносодержащей пряжи, вырабатываемой пневмомеханическим способом формирования на машине ППМ 240-Ш, был построен и реализован план ПФЭ 2^2 (таблица 3.13).

Таблица 3.13

Наименование фактора	Кодовое обозначение	Уровни варьирования	
		-1	+1
Вид гарнитуры	X_1	игольчатая	пильчатая
Вложение льняного волокна, %	X_2	30	50

План эксперимента и результаты проведения опытов приведены на рисунке 3.17. Опыты в плане эксперимента рандомизированы. План эксперимента содержит три дополнительные реплики, то есть для каждой комбинации уровней входных факторов проводилось по 3 дополнительных опыта (всего 4 в каждой точке факторного пространства).

Планир. план	Репл.	X ₁	X ₂	Y
16	4	1,00000	1,00000	20,75
9	3	-1,00000	-1,00000	18,94
13	4	-1,00000	-1,00000	16,02
5	2	-1,00000	-1,00000	16,91
15	4	-1,00000	1,00000	8,64
1	1	-1,00000	-1,00000	17,51
10	3	1,00000	-1,00000	5,15
3	1	-1,00000	1,00000	8,48
6	2	1,00000	-1,00000	5,71
2	1	1,00000	-1,00000	4,24
8	2	1,00000	1,00000	21,02
14	4	1,00000	-1,00000	6,62
7	2	-1,00000	1,00000	9,82
4	1	1,00000	1,00000	24,06
12	3	1,00000	1,00000	21,06
11	3	-1,00000	1,00000	6,99

Рисунок 3.17

Для анализа плана эксперимента используем модуль *Анализ – Промышленная статистика и Шесть Сигма – Планирование экспериментов (ПЭ) – 2^к*(К-р) стандартные планы (Бокс, Хантер & Хантер)*.

На вкладке *анализ плана* с помощью опции *переменные* необходимо указать столбцы с входными параметрами (факторами) и выходным параметром (рисунок 3.18).

Стандартные двухуровневые планы: коэффициент вариации

Построение плана | Анализ плана

☒ Переменные

Зависимая: Y

Независимые (факторы): X1, X2

Блоковая переменная: нет

Число опытов для нецентральных точек: 4

Общее число опытов: 16

ОК

Отмена

Опции

Рисунок 3.18

Независимые (входные) параметры – столбцы А и В (второй и третий).

Зависимая переменная (выходной параметр) – столбец Y (четвертый).

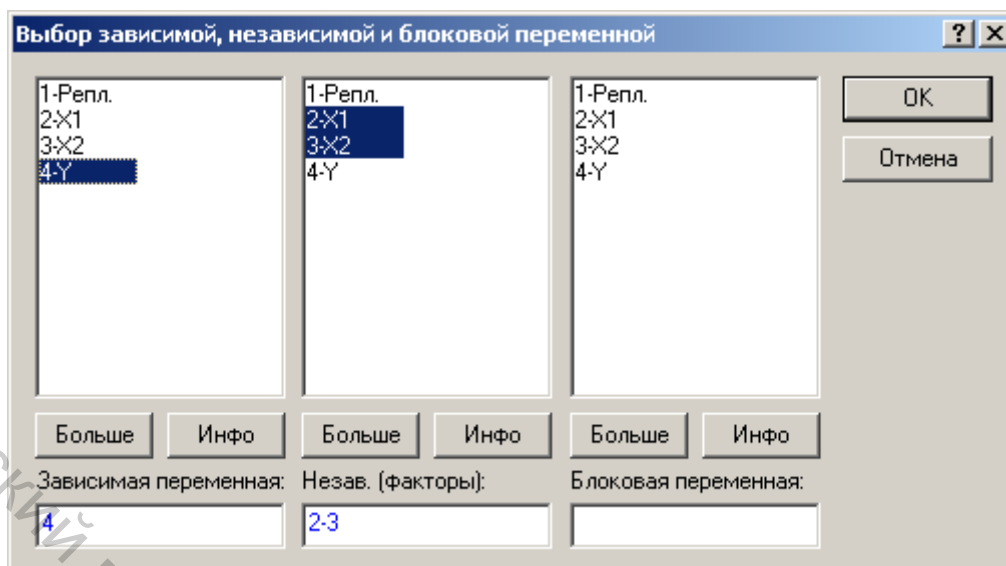


Рисунок 3.19

После нажатия кнопки **ОК** появится диалоговое окно, содержащее общую информацию об анализируемом плане эксперимента (рисунок 3.20).

ИТОГИ ПЛАНА (стандартный план): 2**(2-0), Разрешение R=FULL
 Число факторов (независимые переменные): 2
 Число опытов (станд. эксп.): 4
 Общее число опытов в эксперименте: 16
 Число блоков: 1
 Дробная реплика плана: Полный фак-ный
 Число реплик: 3

Рисунок 3.20

Опция *отобразить план и наблюдаемые средние* (вкладка **План**) отображает таблицу (рисунок 3.21), содержащую средние значения выходного параметра для каждой комбинации уровней факторов, их стандартные отклонения и доверительные пределы.

D-План C-Центр	План: 2**(2-0) план (коэффициент вариации)						
	X ₁ (Катег.)	X ₂ (Катег.)	Y Средние	Y Ст. Откл.	Y N	-95, % Дов. Пред	+95, % Дов. Пред
1	-1,00000	-1,00000	17,34500	1,226934	4	15,39267	19,29733
2	-1,00000	1,00000	8,48250	1,160643	4	6,63566	10,32934
3	1,00000	-1,00000	5,43000	0,998165	4	3,84170	7,01830
4	1,00000	1,00000	21,72250	1,564404	4	19,23318	24,21182
Все оп.			13,24500	6,873248	16	9,58250	16,90750

Рисунок 3.21

На вкладке **Модель** выбираем модель, коэффициенты которой необходимо оценить, в данном случае (рисунок 3.22) модель с главными эффектами факторов и эффектами взаимодействия второго порядка.

Включить в модель

☐ Без взаимодействий

☒ Взаимодействия 2-го порядка

☐ Взаимодействия 3-го порядка

☐ Проверка кривизны

☐ Игнорировать некоторые эффекты

Игнорируемые эффекты

Укажите эффекты, которые будут включены в модель. Все результаты ДА, оценки эффектов, предсказанные значения и остатки и т.д. будут вычислены на основе этой модели.

Член ошибки ДА

☒ Остаточная сумма квадратов

☐ Чистая ошибка

Ошибка будет использована во всех критериях статистической значимости, а также при вычислении стандартных ошибок.

Рисунок 3.22

В поле **Член ошибки ДА** указывается, какая дисперсия будет использоваться в качестве оценки дисперсии выходного параметра σ_y^2 . Если выбрана **остаточная сумма квадратов**, то в качестве оценки используется $S_{ад}^2$ (2.27); если выбрана **чистая ошибка**, то в качестве оценки используется $S_{восп}^2$ (2.31). Использование чистой ошибки возможно только в том случае, когда в плане эксперимента содержатся повторные опыты, что и позволяет вычислить дисперсию воспроизводимости $S_{восп}^2$. Известное значение дисперсии воспроизводимости позволяет провести проверку статистической гипотезы об адекватности регрессионной модели (см. пп. 2.1.3).

Опция **Корреляции эффектов (обратная $X'X$)** (вкладка **План**) отображает таблицу корреляции эффектов (рисунок 3.23). В приведенной таблице все коэффициенты корреляции, кроме стоящих на главной диагонали, равны нулю, т. е. план эксперимента является ортогональным, следовательно, все оценки коэффициентов регрессии будут не смешанными, при этом оценки значимых коэффициентов регрессии не изменятся после исключения незначимых коэффициентов из модели.

Эффект	Корреляции эффектов (коэффициент вариации) 2**(2-0) план			
	(1) X_1	(2) X_2	1 на 2	
(1) X_1	1,00	0,00	0,00	
(2) X_2	0,00	1,00	0,00	
1 на 2	0,00	0,00	1,00	

Рисунок 3.23

Опция **регрессионные коэффициенты** (вкладка **Дисперсионный анализ/Эффекты**) отображает таблицу (рисунок 3.24), содержащую значения коэффициентов регрессии, их стандартные ошибки и доверительные пределы, вычисленные значения t-статистики, достигаемый уровень значимости (**p-value**). В приведенном примере (рисунок 3.24) незначимым является коэффициент перед линейным эффектом первого фактора, для него достигаемый уровень значимости (столбец **p**) больше 0,05. Остальные коэффициенты статистически значимы на уровне значимости 0,05.

Регрессия; R-кв.=,97334; Скор.,96668 (коэффициент вариации) 2**(2-0) план; Остаточн.SS=1,574038 ЗП: Y						
Фактор	Регрес. Козф.	Ст.Ош.	t(12)	p	-95, % Дов.Пред	+95, % Дов.Пред
Сред/Св.член	13,24500	0,313652	42,22838	0,000000	12,56161	13,92839
(1)X ₁	0,33125	0,313652	1,05611	0,311718	-0,35214	1,01464
(2)X ₂	1,85750	0,313652	5,92218	0,000070	1,17411	2,54089
1 на 2	6,28875	0,313652	20,05011	0,000000	5,60536	6,97214

Рисунок 3.24

Опция **Карта Парето** (вкладка **Дисперсионный анализ/Эффекты**) отображает гистограмму (рисунок 3.25), позволяющую осуществить визуальную оценку значимости коэффициентов регрессии.

На гистограмме видно, что для регрессионного коэффициента перед линейным эффектом первого фактора вычисленное значение t-статистики не превышает критического значения статистики для уровня значимости 0,05.



Рисунок 3.25

Вернувшись на вкладку *Модель*, исключим из модели статистически незначимый коэффициент с помощью опции *игнорируемые эффекты* (рисунок 3.26 а) и для проверки адекватности регрессионной модели установим переключатель *Член ошибки ДА* в положение *Чистая ошибка* (рисунок 3.26 б).

Вновь воспользовавшись опцией *регрессионные коэффициенты* (вкладка *Дисперсионный анализ/Эффекты*), пересчитаем оценки коэффициентов регрессии (рисунок 3.27). Так как приведенный план эксперимента является ортогональным, то значения статистически значимых коэффициентов регрессии не изменились после исключения статистически незначимых коэффициентов.

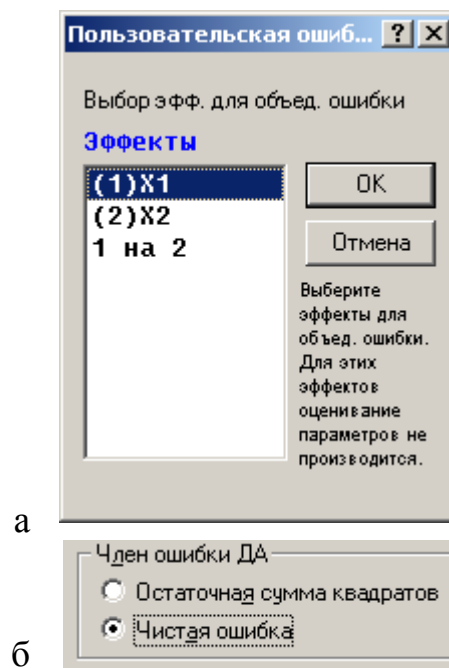


Рисунок 3.26

Регрессия: R-кв.=,97087; Скор.,96639 (коэффициент вариации) 2**(2-0) план; SS чист.ошиб.= ЗП: Y						
Фактор	Регрес. Козф.	Ст. Ош. Чис. Ош.	t(12)	p	-95, % Дов.Пред	+95, % Дов.Пред
Сред/Св.член	13,24500	0,313652	42,22838	0,000000	12,56161	13,92839
(2)X ₂	1,85750	0,313652	5,92218	0,000070	1,17411	2,54089
1 на 2	6,28875	0,313652	20,05011	0,000000	5,60536	6,97214

Рисунок 3.27

Таким образом, регрессионная модель имеет вид:

$$Y = 13,245 + 1,8575x_2 + 6,28875x_1x_3.$$

Опция *Дисперсионный анализ* (вкладка *Дисперсионный анализ/Эффекты*) отображает таблицу (рисунок 3.28) с результатами дисперсионного анализа выбранной модели. Таблица содержит столбцы: сумма квадратов (SS), степени свободы (cc), дисперсии ($MS=SS/cc$), наблюдаемое значение F-статистики ($F=MS/S_{\text{восп}}^2$) и достигаемый уровень значимости. В первых четырех строках проводится оценка величины вклада факторов в общую дисперсию выходного параметра. Все включенные в модель факторы (рисунок 3.28) оказывают статистически значимое влияние на выходной параметр ($p\text{-value}<0,05$).

		ДА; Прм.: Y; R-кв.=,97087; Скор.,96639 (коэффициент вариации) 2**(2-0) план; SS чист.ошиб.= 3П: Y					
Фактор	SS	сс	MS	F	p		
(2)X ₂	55,2049	1	55,2049	35,0722	0,000070		
1 на 2	632,7740	1	632,7740	402,0070	0,000000		
Потеря согл.	1,7556	1	1,7556	1,1154	0,311718		
Чист. ошибка	18,8885	12	1,5740				
Общая SS	708,6230	15					

Рисунок 3.28

В строке **чистая ошибка** приведена величина дисперсии воспроизводимости $S^2_{\text{восп}}=0,012$. В строке **потеря согласия** приведена величина дисперсии адекватности $S^2_{\text{ад}}$, наблюдаемое значение F-статистики (2.33) для проверки адекватности регрессионной модели (**Lack of Fit**) и достигаемый уровень значимости. Так как $p=0.376196>0.05$, то регрессионную модель можно считать адекватной.

С помощью опции **Квадратный график предсказанных средних** (вкладка **Средние**) можно просмотреть (рисунок 3.29) в трехмерном факторном пространстве предсказанные значения выходного параметра, рассчитанные с помощью построенной регрессионной модели.



Рисунок 3.29

С помощью опции **График поверхности (подгонка отклика)** (вкладка **Предсказание и профили**) можно построить поверхность отклика для зависимости коэффициента вариации по разрывной нагрузке

льносодержащей пряжи от вида используемой гарнитуры и вложения льняного волокна.

Подогнанная поверхность; Перемен.: Y
2**(2-0) план; SS чист.ошиб.=
ЗП: Y

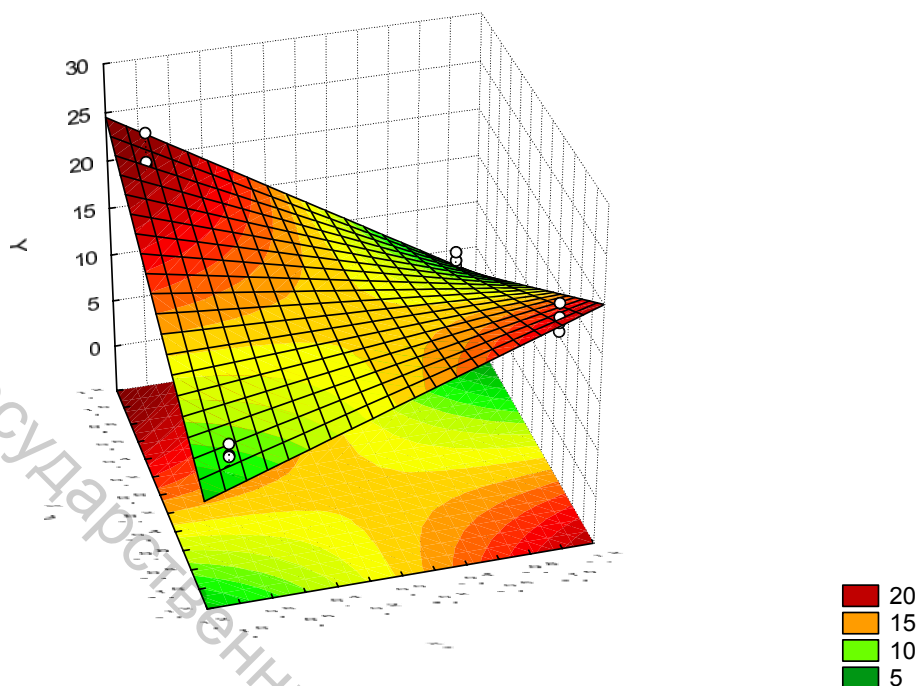


Рисунок 3.30

3.6 Полный факторный эксперимент 3^k

Для расчета коэффициентов модели с квадратичными эффектами факторов необходимо, чтобы в плане эксперимента факторы с квадратичными эффектами варьировались как минимум на трех уровнях. Для таких моделей могут использоваться планы второго порядка ПФЭ 3^k . В этих планах каждый фактор варьируется на трех уровнях.

Так, например, план **ПФЭ 3^2** является насыщенным для регрессионной модели с эффектами взаимодействия:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{12}x_1x_2 + b_{112}x_1^2x_2 + b_{122}x_1x_2^2 + b_{1122}x_1^2x_2^2, \quad (3.14)$$

матрица планирования для него представлена в таблице 3.14.

Таблица 3.14 – Матрица планирования ПФЭ 3^2 , кодовое обозначение строк и результаты эксперимента

№	X_0	X_1	X_2	$X_1 X_2$	X_1^2	X_2^2	$X_1^2 X_2$	$X_1 X_2^2$	$X_1^2 X_2^2$	КОС	Y
1	+	–	–	+	+	+	–	–	+	(1)	y_1
2	+	–	0	0	+	0	0	0	0	$b(0)$	y_2
3	+	–	+	–	+	+	+	–	+	b	y_3
4	+	0	–	0	0	+	0	0	0	$a(0)$	y_4
5	+	0	0	0	0	0	0	0	0	$a(0)b(0)$	y_5
6	+	0	+	0	0	+	0	0	0	$a(0)b$	y_6
7	+	+	–	–	+	+	–	+	+	a	y_7
8	+	+	0	0	+	0	0	0	0	$ab(0)$	y_8
9	+	+	+	+	+	+	+	+	+	ab	y_9

В кодовом обозначении строк **a(0)** обозначает, что фактор X_1 установлен на основном (нулевом) уровне. Соответственно, **b(0)** обозначает, что фактор X_2 установлен на основном (нулевом) уровне.

Приведенный план ПФЭ 3^2 для модели второго порядка ненормированный, неротатабельный и неортогональный.

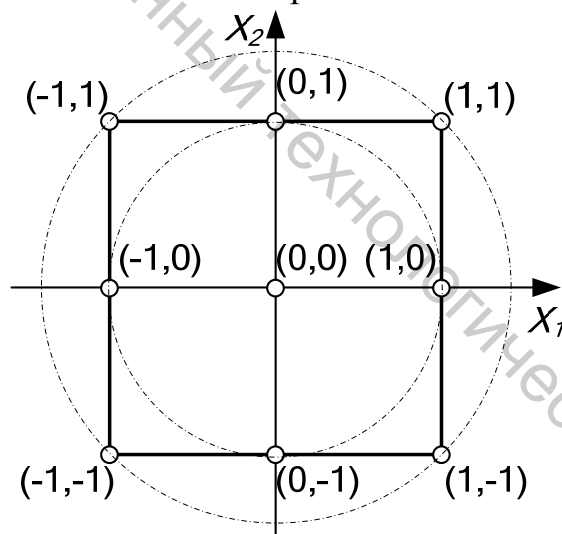


Рисунок 3.31 – Расположение точек ПФЭ 3^2 в факторном пространстве

План ПФЭ 3^3 позволяет оценить параметры регрессионной модели, содержащей до 27 коэффициентов, учитывающих различные эффекты взаимодействия между факторами:

$$\begin{aligned}
y = & b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + \\
& + b_{12}x_1x_2 + b_{23}x_2x_3 + b_{13}x_1x_3 + \\
& + b_{123}x_1x_2x_3 + \\
& + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{33}x_3^2 + \\
& + b_{112}x_1^2x_2 + b_{113}x_1^2x_3 + b_{221}x_2^2x_1 + b_{223}x_2^2x_3 + b_{331}x_3^2x_1 + b_{332}x_3^2x_2 + \\
& + b_{1123}x_1^2x_2x_3 + b_{1223}x_1x_2^2x_3 + b_{1233}x_1x_2x_3^2 + \\
& + b_{1122}x_1^2x_2^2 + b_{1133}x_1^2x_3^2 + b_{2233}x_2^2x_3^2 + \\
& + b_{11223}x_1^2x_2^2x_3 + b_{11233}x_1^2x_2x_3^2 + b_{11223}x_1^2x_2^2x_3 + \\
& + b_{112233}x_1^2x_2^2x_3^2.
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Расположение точек ПФЭ 3^3 в факторном пространстве приведено на рисунке 3.32. Такое количество возможных эффектов взаимодействия, скорее всего, может оказаться избыточным, а проведение такого количества опытов трудоемким.

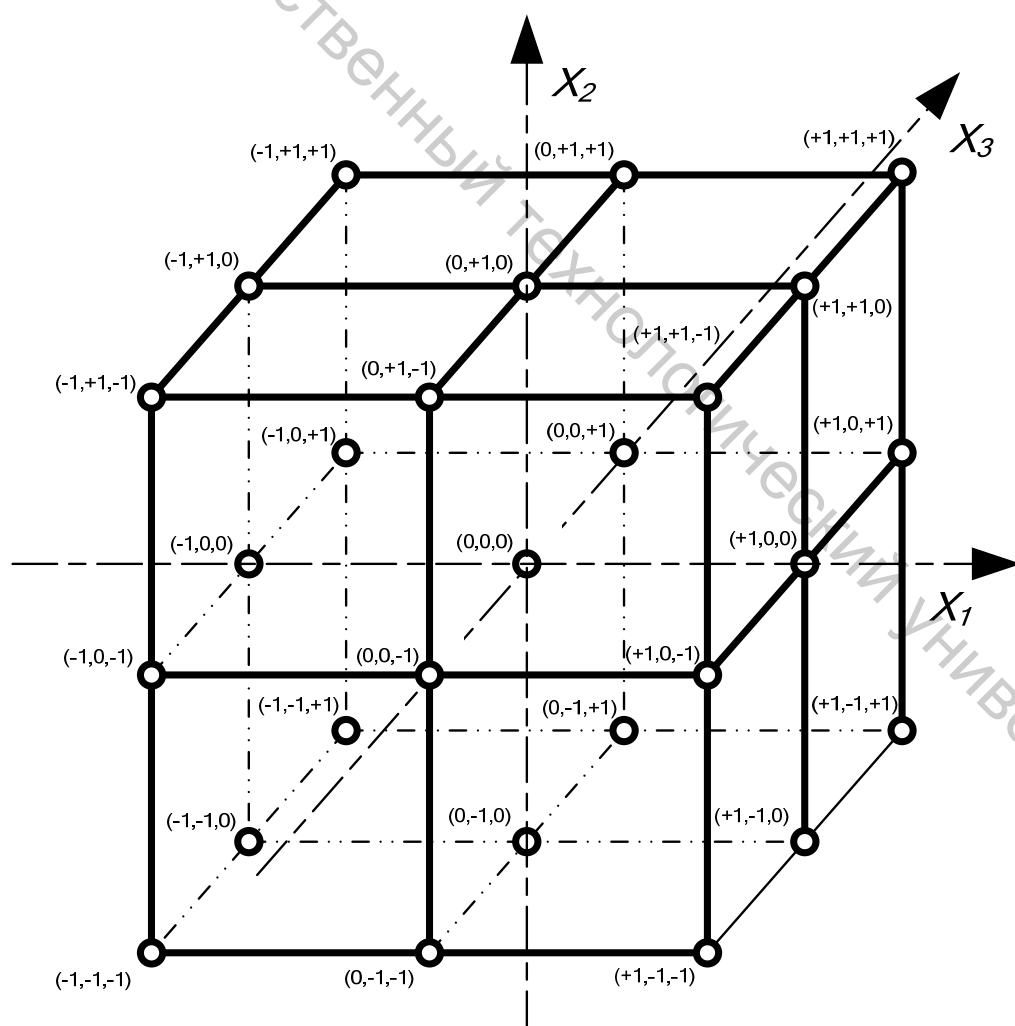


Рисунок 3.32 – Расположение точек ПФЭ 3^3 в факторном пространстве

Планы ПФЭ 3^k содержат количество опытов, как правило, превышающих количество оцениваемых коэффициентов модели. Поэтому для моделей с большим количеством факторов для сокращения количества проводимых опытов используются максимально несмешанные планы ДФЭ 3^{k-p} , которые позволяют оценить коэффициенты перед квадратичными эффектами или эффектами взаимодействия. Для сокращения количества опытов также могут использоваться планы Бокса-Бенкена, они имеют сложное смешивание эффектов взаимодействия и более экономичны, чем планы ДФЭ.

Для построения и анализа планов ПФЭ 3^k эксперимента в STATISTICA используется модуль *Анализ – Промышленная статистика и Шесть Сигма – Планирование экспериментов (ПЭ) – Планы $3^{**}(K-p)$ и планы Бокса-Бенкена*. Порядок работы с модулем аналогичен описанному в пп. 3.5.

3.6.1 Пример анализа плана ПФЭ 3^k

С использованием отходов текстильного производства вырабатывают органо-синтетические волокнистые плиты (ОСВП) по технологии производства древесно-стружечных плит (ДСП). Для определения вида зависимости физико-механических свойств ОСВП от доли вложения коротковолокнистых отходов в ОСВП и температуры прессования был построен план ПФЭ 3^2 (таблица 3.15).

Таблица 3.15

Наименование фактора	Кодовое обозначение	Уровни варьирования			Интервал варьирования, Δ
		-1	0	+1	
Доля текстильного волокна, %	X_1	30	40	50	10
Температура прессования, °C	X_2	170	180	190	10

Исследовались физико-механические показатели ОСВП: Y_1 – плотность, кг/м³; Y_2 – прочность при изгибе, МПа; Y_3 – разбухание, %. После построения и реализации плана ПФЭ 3^2 получена таблица, приведенная на рисунке 3.33. План эксперимента содержит одну реплику, то есть для каждой комбинации уровней входных факторов проводилось по два опыта.

	1 X ₁	2 X ₂	3 Y ₁	4 Y ₂	5 Y ₃
1	-1,00000	-1,00000	670,375	1,45	33,4
2	-1,00000	0,00000	690,836	1,82	34,4
3	-1,00000	1,00000	698,473	1,81	35,4
4	0,00000	-1,00000	618,733	2,08	30,7
5	0,00000	0,00000	618,552	2,27	30,2
6	0,00000	1,00000	611,693	2,33	30,7
7	1,00000	-1,00000	513,821	3,23	25,7
8	1,00000	0,00000	520,824	3,32	24,5
9	1,00000	1,00000	524,365	3,32	24,9
10	-1,00000	-1,00000	697,483	1,64	34,5
11	-1,00000	0,00000	701,049	1,65	32,9
12	-1,00000	1,00000	723,018	1,76	34,1
13	0,00000	-1,00000	613,783	2,13	29,7
14	0,00000	0,00000	620,315	2,14	31,5
15	0,00000	1,00000	629,364	2,27	28,5
16	1,00000	-1,00000	529,834	3,15	26,5
17	1,00000	0,00000	532,756	3,27	28,3
18	1,00000	1,00000	529,915	3,37	24,8

Рисунок 3.33

Для анализа плана эксперимента используем модуль *Анализ – Промышленная статистика и Шесть Сигма – Планирование экспериментов (ПЭ) – Планы 3** (К-р) и планы Бокса-Бенкена*.

На вкладке *анализ плана* с помощью опции *переменные* необходимо указать столбцы с входными параметрами (факторами) и выходными параметрами (рисунки 3.34).

Выбор зависимой, независимой и блоковой переменной

1-X1 2-X2 3-Y1 4-Y2 5-Y3	1-X1 2-X2 3-Y1 4-Y2 5-Y3	1-X1 2-X2 3-Y1 4-Y2 5-Y3
--------------------------------------	--------------------------------------	--------------------------------------

Больше Инфо Больше Инфо Больше Инфо

Зависимая переменная: 4-5 Незав. (факторы): 1-2 Блоковая переменная:

Рисунок 3.34

Входные (независимые) параметры – столбцы X₁, X₂. Так как целью эксперимента являлось установление зависимости между двумя входными и тремя выходными параметрами, то в качестве выходных параметров (зависимые переменные) были выбраны столбцы Y₁, Y₂, Y₃.

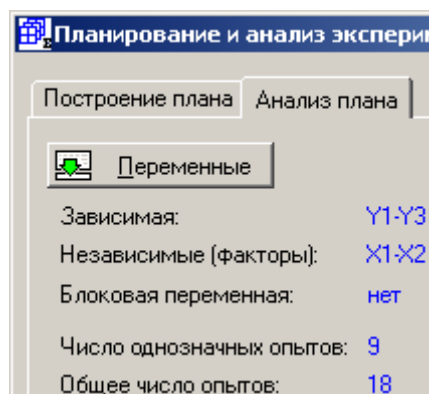


Рисунок 3.35

После нажатия кнопки **ОК** появится диалоговое окно (рисунок 3.36), содержащее общую информацию об анализируемом плане эксперимента.

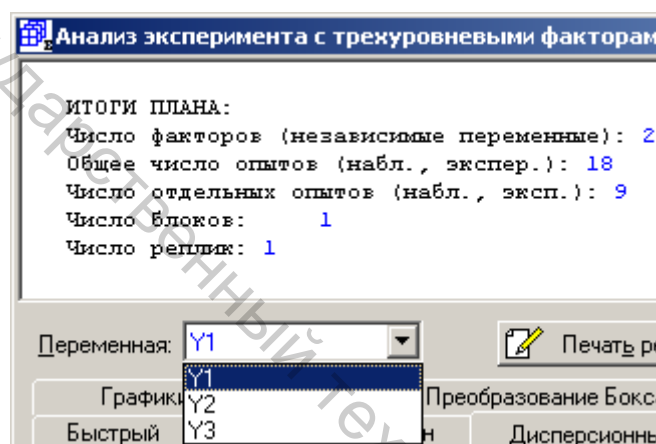


Рисунок 3.36

В нижней части окна (рисунок 3.36) в поле опции **переменная** указывается имя столбца, содержащего значения выходной (зависимой) переменной. Именно для этой переменной будут выполняться все виды анализа, доступные в текущем диалоговом окне.

На вкладке **Модель** (рисунок 3.37) выбираем модель, содержащую максимальное количество эффектов, т. е. модель вида (3.14). Так как план эксперимента содержит повторные опыты, это позволяет вычислить дисперсию воспроизводимости $S_{\text{восп}}^2$ (2.31) (опция **чистая ошибка**) и проверить гипотезу о потере согласия (*Lack of Fit* см пп 2.1.3). Так как выбрана опция **чистая ошибка**, то во всех критериях статистической значимости будет использоваться дисперсия воспроизводимости $S_{\text{восп}}^2$ (2.31) вместо дисперсии адекватности $S_{\text{ад}}^2$ (2.27).

Включить в модель

☐ Без взаимодействий
☐ Взаимодействия 2-го порядка (лин. х лин.)
☒ Взаимодействие 2-го порядка (лин., квадр.)
☐ Игнорировать некоторые эффекты

Игнорируемые эффекты

Укажите эффекты, которые будут включены в модель. Все результаты ДА, оценки эффектов, предсказанные значения и т.д. будут вычислены на основе этой модели.

Член ошибки ДА

☐ Остаточная сумма квадратов
☒ Чистая ошибка

Ошибка будет использована во всех критериях статистической значимости, а также при вычислении стандартных ошибок.

Рисунок 3.37

Опция **регрессионные коэффициенты** (вкладка **Дисперсионный анализ/Эффекты**) отображает таблицу (рисунок 3.38), содержащую значения коэффициентов регрессии, их стандартные ошибки и доверительные пределы, вычисленные значения t-статистики и достигаемый уровень значимости (**p-value**). Как видно из таблицы (рисунок 3.38), статистически значимы только свободный коэффициент и коэффициент перед линейным эффектом первого фактора ($p\text{-value} < 0,05$).

Регрессия; R-кв. = ,98778; Скор. ,97692 (Покрытия) 2 3-х уровневые ф, 1 Блоки; SS чист.ошиб.= ЗП: Y ₁						
Фактор	Регрес. Козф.	Ст.Ош. Чис. Ош.	t(9)	p	-95,% Дов.Пред	+95,% Дов.Пред
Сред/Св.член	619,4335	7,83701	79,0396	0,000000	601,7050	637,1620
(1)X ₁ (L)	-84,5762	5,54160	-15,2621	0,000000	-97,1122	-72,0403
X ₁ (Q)	-8,0673	9,59833	-0,8405	0,422403	-29,7802	13,6457
(2)X ₂ (L)	2,1353	5,54160	0,3853	0,708954	-10,4007	14,6712
X ₂ (Q)	-1,0403	9,59833	-0,1084	0,916073	-22,7532	20,6727
1L на 2L	-5,3760	3,91850	-1,3720	0,203303	-14,2403	3,4883
1L на 2Q	-1,8505	6,78705	-0,2727	0,791273	-17,2039	13,5029
1Q на 2L	5,8970	6,78705	0,8689	0,407496	-9,4564	21,2504
1Q на 2Q	0,5845	11,75551	0,0497	0,961430	-26,0083	27,1773

Рисунок 3.38

Вернувшись на вкладку **Модель** с помощью опции **игнорируемые эффекты**, исключаем из модели все статистически незначимые эффекты, оставив только линейный эффект X₁ (рисунок 3.39).

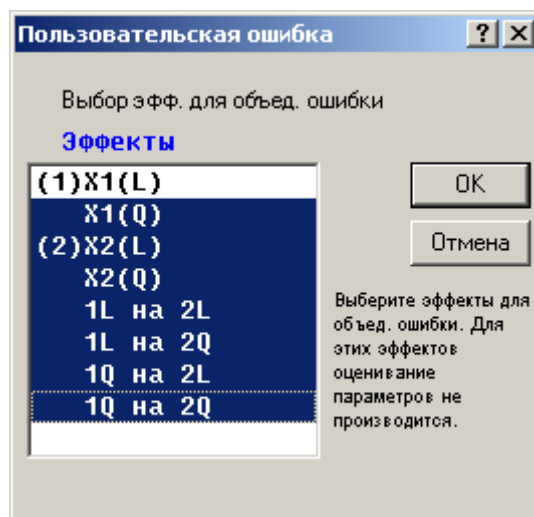


Рисунок 3.39

Вновь воспользуемся опцией *регрессионные коэффициенты* (вкладка *Дисперсионный анализ/Эффекты*) и получим таблицу (рисунок 3.40) коэффициентов регрессии. Так как план эксперимента не является ортогональным, то оценки коэффициентов изменились после исключения из модели незначимых коэффициентов.

Регрессия; R-кв.=,97659; Скор.,97513 (Покрывтия) 2 3-х уровневые ф, 1 Блоки; SS чист.ошиб.= ЗП: Y_1						
Фактор	Регрес. Козф.	Ст.Ош. Чис. Ош.	t(9)	p	-95, % Дов.Пред	+95, % Дов.Пред
Сред/Св.член	613,6216	2,612336	234,8939	0,000000	607,7121	619,5311
(1)X ₁ (L)	-85,8099	3,199445	-26,8203	0,000000	-93,0476	-78,5723

Рисунок 3.40

Таким образом, регрессионная модель имеет вид:

$$Y_1 = 613.6216 - 85.8099x_1.$$

Опция *Дисперсионный анализ* (вкладка *Дисперсионный анализ/Эффекты*) отображает таблицу (рисунок 3.41) с результатами дисперсионного анализа выбранной модели (см. пп. 2.1.3 и 2.1.4).

ДА; Прм.: Y_1 ; R-кв.=,97659; Скор.,97513 (Покрывтия) 2 3-х уровневые ф, 1 Блоки; SS чист.ошиб.= ЗП: Y_1						
Фактор	SS	сс	MS	F	p	
(1)X ₁ L	88360,10	1	88360,10	719,3260	0,000000	
Потеря согл.	1012,49	7	144,64	1,1775	0,400141	
Чист. ошибка	1105,54	9	122,84			
Общая SS	90478,13	17				

Рисунок 3.41

В строке *чистая ошибка* приведена величина дисперсии воспроизводимости $S_{\text{восп}}^2 = 122,84$. В строке *потеря согласия* приведена величина дисперсии адекватности $S_{\text{ад}}^2 = 144,64$, наблюдаемое значение

F-статистики $F_H=1,1775$ (2.33) для проверки адекватности регрессионной модели (*Lack of Fit*) и достигаемый уровень значимости. Так как $p=0.400141>0.05$, то регрессионную модель можно считать адекватной.

С помощью опции **График поверхности (подгонка отклика)** (вкладка **Предсказание и профили**) построим поверхность отклика (рисунок 3.42) для полученного уравнения регрессии.

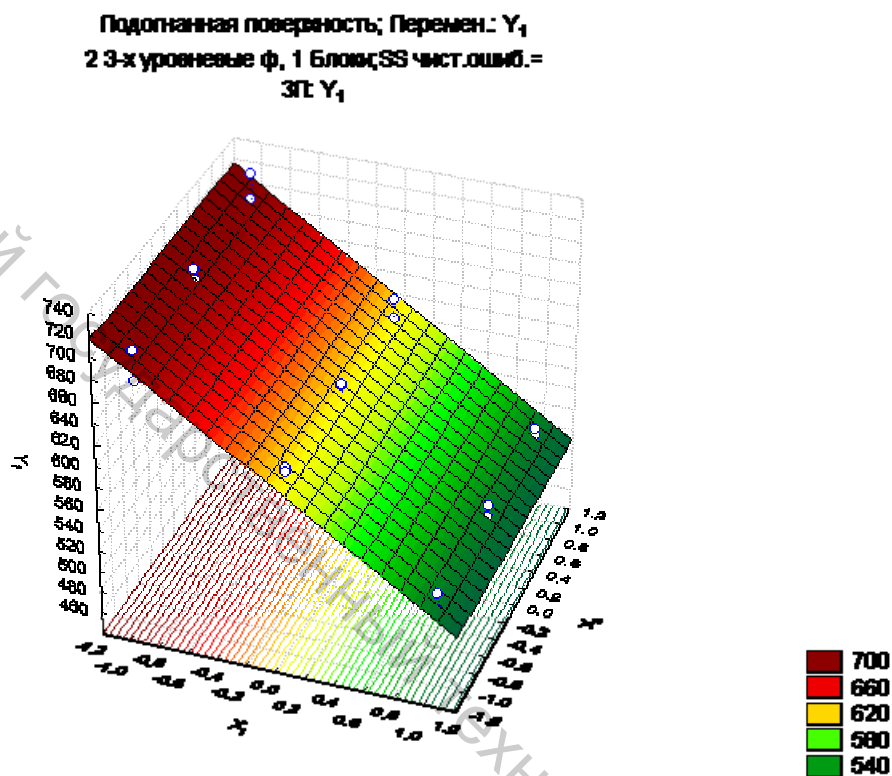


Рисунок 3.42

Чтобы провести регрессионный анализ для выходной переменной Y₂, укажем ее в поле опции **переменная** (рисунок 3.43).



Рисунок 3.43

Проведя для выбранной выходной переменной Y₂ процедуры, аналогичные проделанным для Y₁, с помощью опции **регрессионные коэффициенты** (вкладка **Дисперсионный анализ/Эффекты**) определим статистически значимые коэффициенты регрессионной модели (рисунок 3.44).

Фактор	Регрессия; R-кв.=,99229; Скор.,99064 (Покрытия) 2 3-х уровневые ф, 1 Блоки; SS чист.ошиб.= 3П: Y ₂					
	Регрес. Козф.	Ст.Ош. Чис. Ош.	t(9)	p	-95,% Дов.Пред	+95,% Дов.Пред
Сред/Св.член	2,203333	0,030717	71,73069	0,000000	2,133847	2,272819
(1)X ₁ (L)	0,794167	0,021720	36,56381	0,000000	0,745033	0,843301
X ₁ (Q)	0,279167	0,037620	7,42066	0,000040	0,194064	0,364269
(2)X ₂ (L)	0,098333	0,021720	4,52731	0,001432	0,049199	0,147467

Рисунок 3.44

Все приведенные в таблице коэффициенты регрессии (рисунок 3.44) значимы (p-value<0,05). Таким образом, регрессионная модель имеет вид:

$$Y_2 = 2,203 + 0,794x_1 + 0,279x_1^2 + 0,0983x_2.$$

Проведем проверку адекватности модели с помощью опции **Дисперсионный анализ** (вкладка **Дисперсионный анализ/Эффекты**, рисунок 3.45).

Фактор	ДА; Прм.: Y ₂ ; R-кв.=,99229; Скор.,99064 (Покрытия) 2 3-х уровневые ф, 1 Блоки; SS чист.ошиб.= 3П: Y ₂					
	SS	сс	MS	F	p	
(1)X ₁ L+Q	7,880144	2	3,940072	695,9892	0,000000	
(2)X ₂ L	0,116033	1	0,116033	20,4966	0,001432	
Потеря согл.	0,011167	5	0,002233	0,3945	0,840886	
Чист. ошибка	0,050950	9	0,005661			
Общая SS	8,058294	17				

Рисунок 3.45

Так как в строке **потеря согласия** p=0.840886>0.05, то регрессионную модель можно считать адекватной.

График поверхности отклика для выходного параметра Y₂ приведен на рисунке 3.46.

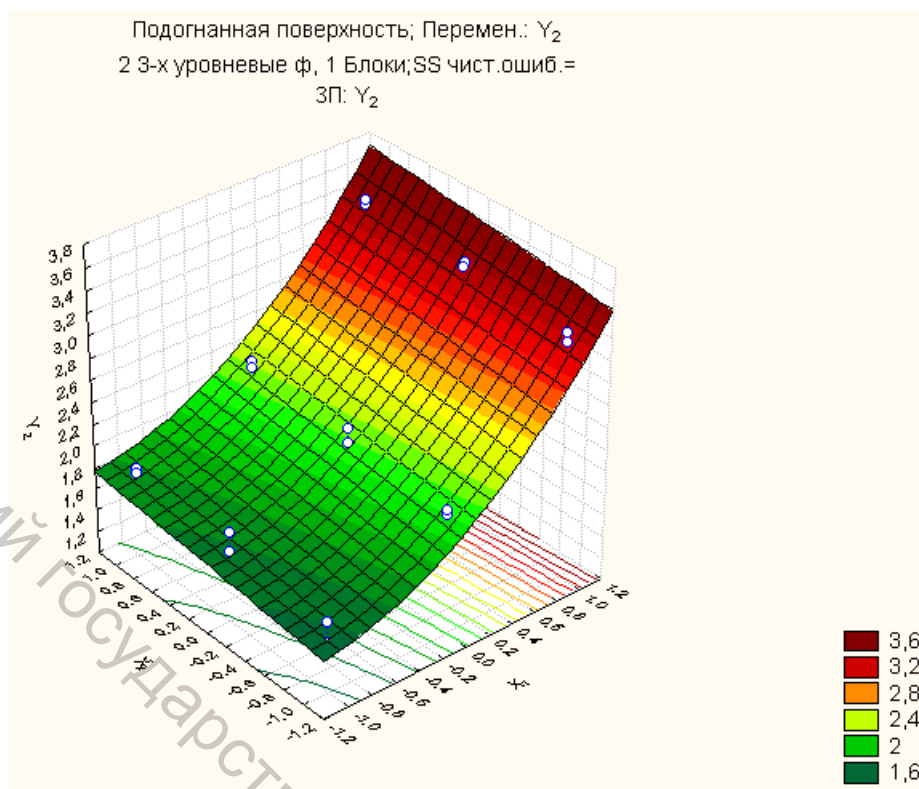


Рисунок 3.46

Чтобы провести регрессионный анализ для переменной Y₃, выберем ее в поле опции **переменная** (рисунок 3.47).

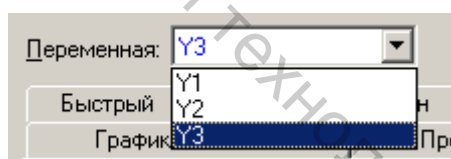


Рисунок 3.47

Далее, проведя для переменной Y₃ процедуры, аналогичные проделанным для Y₁ и Y₂, определим статистически значимые коэффициенты регрессионной модели (рисунок 3.48).

Регрессия; R-кв.=,91349; Скор. 90808 (Покрытия) 2 3-х уровневые ф, 1 Блоки; SS чист.ошиб.= ЗП: Y ₃						
Фактор	Регрес. Козф.	Ст. Ош. Чис. Ош.	t(9)	p	-95, % Дов. Пред	+95, % Дов. Пред
Сред/Св.член	30,03889	0,292762	102,6050	0,000000	29,37661	30,70116
(1)X ₁ (L)	-4,16667	0,358559	-11,6206	0,000001	-4,97778	-3,35555

Рисунок 3.48

В регрессионной модели для Y₃ статистически значимыми оказались только свободный коэффициент и коэффициент перед линейным эффектом первого фактора (p-value<0,05). Таким образом, регрессионная модель имеет вид:

$$Y_3 = 30,03889 - 4,16667x_1.$$

Проведем проверку адекватности модели с помощью опции **Дисперсионный анализ** (вкладка **Дисперсионный анализ/Эффекты**, рисунок 3.49).

ДА; Прм.: Y_3 ; R-кв.=,91349; Скор.,90808 (Покрытия) 2 3-х уровневые ф, 1 Блоки; SS чист.ошиб.= 3П: Y_3					
Фактор	SS	сс	MS	F	p
(1) X_1 L	208,3333	1	208,3333	135,0378	0,000001
Потеря согл.	5,8444	7	0,8349	0,5412	0,784812
Чист. ошибка	13,8850	9	1,5428		
Общая SS	228,0628	17			

Рисунок 3.49

Так как в строке **потеря согласия** $p=0.784812>0.05$, то регрессионную модель можно считать адекватной.

График поверхности отклика для выходного параметра Y_3 приведен на рисунке 3.50.

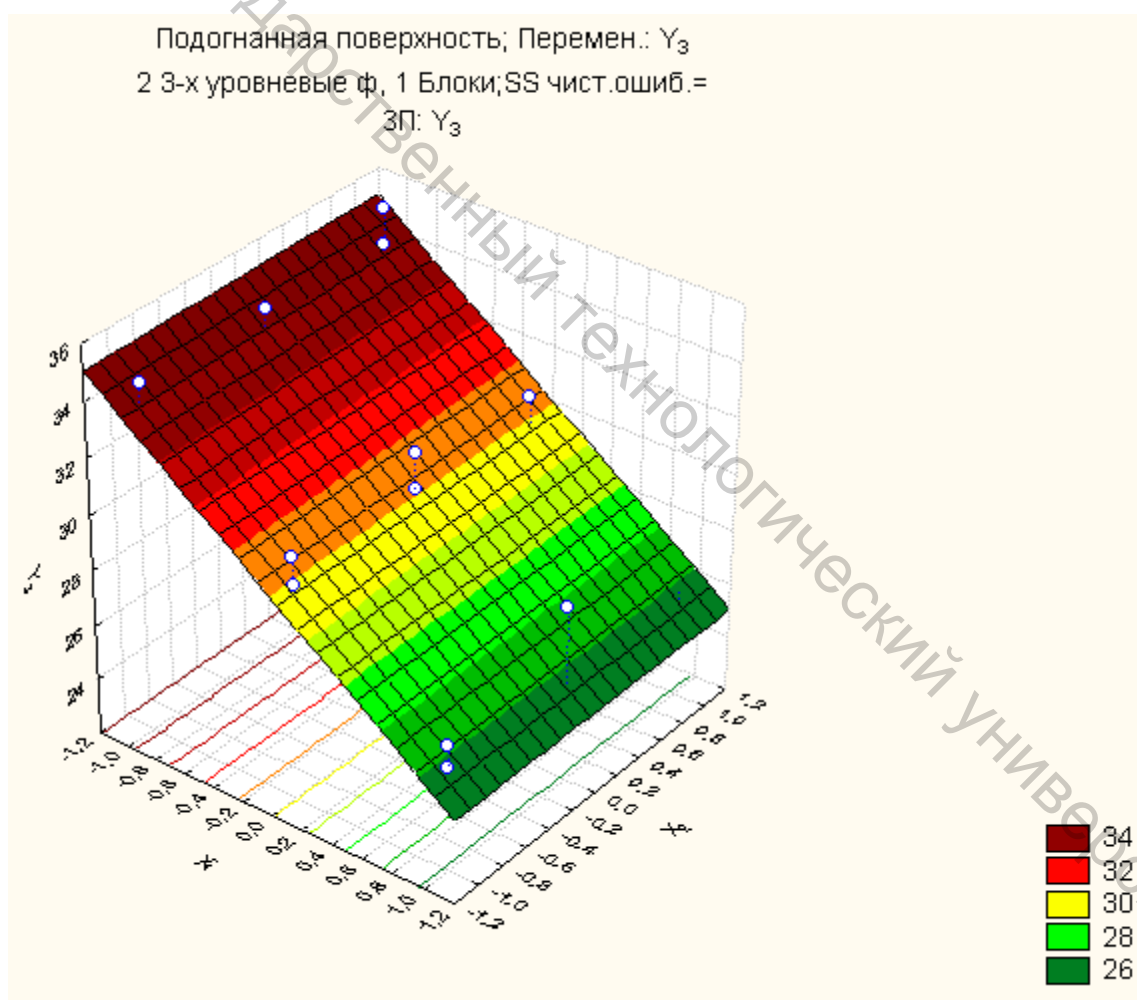


Рисунок 3.50

3.7 Свойства ортогональности и ротатабельности плана эксперимента

Матрица планирования X называется **ортогональной**, если информационная матрица $X^T X$ диагональная, то есть все элементы, кроме стоящих на главной диагонали, равны нулю:

$$X^T X = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N f_0^2(x_1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sum_{i=1}^N f_1^2(x_2) & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \sum_{i=1}^N f_d^2(x_N) \end{bmatrix},$$

где N – количество строк в матрице планирования; $(d+1)$ – количество столбцов в матрице планирования.

Для центрального, нормированного, ортогонального плана информационная матрица имеет вид:

$$X^T X = \begin{bmatrix} N & 0 & \dots & 0 \\ 0 & N & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & N \end{bmatrix} = N \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} = N \cdot E_{(k+1)},$$

где $E_{(k+1)}$ – единичная матрица размерностью $(k+1)$. В этом случае дисперсионная матрица также диагональная:

$$C = (X^T X)^{-1} = \frac{1}{N} \cdot E_{(k+1)}. \quad (3.16)$$

При этом дисперсии оценок коэффициентов минимальны и равны между собой. Это позволяет интерпретировать вклад каждого фактора независимо от остальных, т. е. судить о силе и характере их влияния на выходной параметр.

Если матрица планирования X ортогональна, то оценки коэффициентов некоррелированы (2.40), т. е. матрица коэффициентов корреляции диагональная:

$$R = \begin{bmatrix} \frac{c_{1,1}}{\sqrt{c_{1,1}c_{1,1}}} & \frac{c_{1,2}}{\sqrt{c_{1,1}c_{2,2}}} & \dots & \frac{c_{1,N}}{\sqrt{c_{1,1}c_{N,N}}} \\ \frac{c_{2,1}}{\sqrt{c_{2,2}c_{1,1}}} & \frac{c_{2,2}}{\sqrt{c_{2,2}c_{2,2}}} & \dots & \frac{c_{2,N}}{\sqrt{c_{2,2}c_{N,N}}} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{c_{N,1}}{\sqrt{c_{N,N}c_{1,1}}} & \frac{c_{N,2}}{\sqrt{c_{N,N}c_{2,2}}} & \dots & \frac{c_{N,N}}{\sqrt{c_{N,N}c_{N,N}}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} = E_{(k+1)}.$$

Ортогональность матрицы планирования упрощает вычисление коэффициентов модели, и в случае добавления или исключения эффектов из модели значения коэффициентов перед другими эффектами останутся неизменными.

План эксперимента называется **ротатабельным**, если дисперсия отклика одинакова на одинаковых расстояниях от центра плана при любом направлении в факторном пространстве. Дисперсия оценки отклика $\hat{y}$:

$$\sigma_{\hat{y}}^2 = \sigma_y^2 f^T(x) (X^T X)^{-1} f(x), \quad (3.17)$$

где σ_y^2 – дисперсия ошибки наблюдения, как правило, неизвестна и оценивается по результатам проведенных опытов; $f(x)$ – вектор функций факторов (2.49).

Как видно из (3.17), точность прогнозирования выходного параметра зависит не только от погрешности наблюдений, но и от точки факторного пространства (x); плана эксперимента (X) и вида регрессионной модели $f^T(x)$. Если выражение (3.17) сводится к:

$$\sigma_{\hat{y}}^2 = \sigma_y^2 f(R),$$

где $R = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_k^2}$, то дисперсия ошибки отклика будет одинакова на одном расстоянии от центра плана, т. е. такой план эксперимента является **ротатабельным**.

Планы ПФЭ 2^k для регрессионных моделей только с главными эффектами являются ротатабельными. Это можно показать на примере плана ПФЭ 2^2 (рисунок 3.5) для регрессионной модели:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2, \quad (3.18)$$

рассчитав $f^T(x) (X^T X)^{-1} f(x)$. Исходные данные:

$$X = \begin{bmatrix} x_0 & x_1 & x_2 \\ + & + & + \\ + & - & + \\ + & + & - \\ + & - & - \end{bmatrix}, X^T = \begin{bmatrix} + & + & + & + \\ + & - & + & - \\ + & + & - & - \end{bmatrix}, f(x) = \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, f^T(x) = [1 \quad x_1 \quad x_2],$$

тогда

$$X^T X = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}, \quad (X^T X)^{-1} = \frac{1}{4} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Так как матрица $X^T X$ для плана ПФЭ 2^2 диагональная, то матрица плана X является ортогональной. Далее:

$$f^T(x)(X^T X)^{-1} = \frac{1}{4} \cdot [1 \quad x_1 \quad x_2] \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{4} \cdot [1 \quad x_1 \quad x_2],$$

умножим справа на $f(x)$, получим:

$$f^T(x)(X^T X)^{-1} f(x) = \frac{1}{4} \cdot [1 \quad x_1 \quad x_2] \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{4} \cdot (1 + x_1^2 + x_2^2) = \frac{1}{4} \cdot (1 + R^2),$$

где $R = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$. Таким образом, дисперсия оценки выходного параметра:

$$\sigma_{\hat{y}}^2 = \frac{\sigma_y^2}{4} (1 + R^2),$$

т. е. зависит от дисперсии ошибки наблюдения σ_y^2 и расстояния R до центра плана эксперимента.

Аналогичным образом для плана ПФЭ 2^2 и модели:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2 \quad (3.19)$$

можно найти:

$$\sigma_{\hat{y}}^2 = \sigma_y^2 f^T(x)(X^T X)^{-1} f(x) = \sigma_y^2 \frac{1}{4} \cdot (1 + x_1^2 + x_2^2 + x_1^2 x_2^2) = \sigma_y^2 \frac{1}{4} \cdot (1 + R^2 + x_1^2 x_2^2),$$

в этом случае дисперсия оценки $\sigma_{\hat{y}}^2$ зависит не только от расстояния R между точкой факторного пространства и центром плана, т. е. план не является ротатабельным.

Предсказание дисперсии поверхности отклика в точке факторного пространства, обусловленной свойствами плана эксперимента, можно рассчитать как:

$$S_i^2 = f^T(x_i)(X^T X)^{-1} f(x_i), \quad (3.20)$$

где x_i – вектор состояний входных факторов для i -й строки матрицы планирования.

С помощью обратной стандартизированной дисперсии можно оценить информацию, содержащуюся в уравнении регрессии [9, с. 84]:

$$I_x = \frac{1}{N \sigma_{\hat{y}}^2}, \quad (3.21)$$

при $\sigma_y^2 = 1$ для плана ПФЭ 2^2 и моделей (3.18) и (3.19) трехмерное представление информационной функции представлено на рисунок 3.51 и рисунок 3.52.

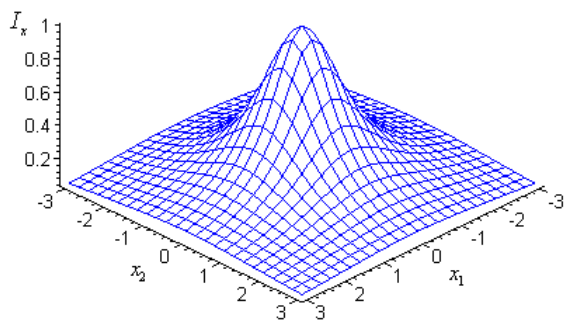


Рисунок 3.51 – Информационная функция плана ПФЭ 2^2 для модели (3.18)

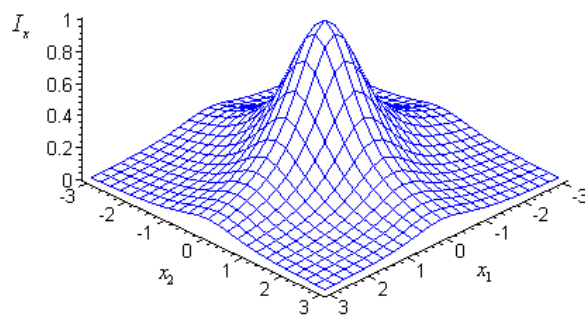


Рисунок 3.52 – Информационная функция плана ПФЭ 2^2 для модели (3.19)

Как видно на рисунке 3.53, информационные контуры ротатбельного плана эксперимента представляют собой концентрические окружности. Информационные контуры плана ПФЭ 2^2 для модели (3.19) представлены на рисунке 3.54.

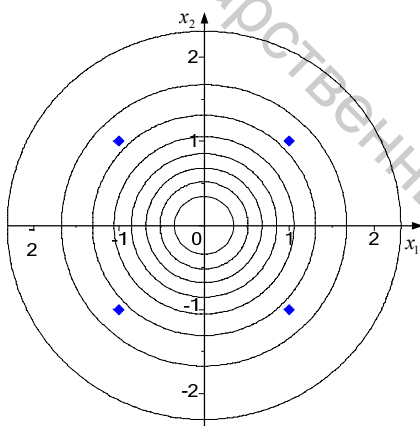


Рисунок 3.53 – Информационные контуры плана ПФЭ 2^2 для модели (3.18)

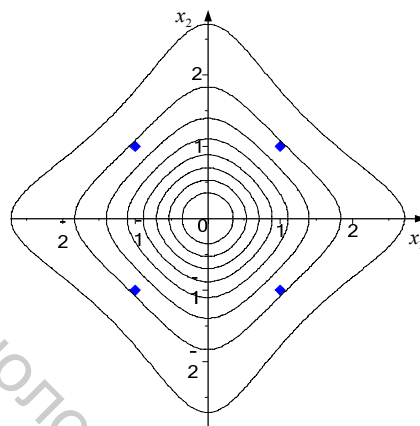


Рисунок 3.54 – Информационные контуры плана ПФЭ 2^2 для модели (3.19)

Зависимость

$$\xi(R) = 1 / \left(N f^T(x) (X^T X)^{-1} f(x) \right)$$

называется информационным профилем ротатбельного плана (рисунок 3.55).

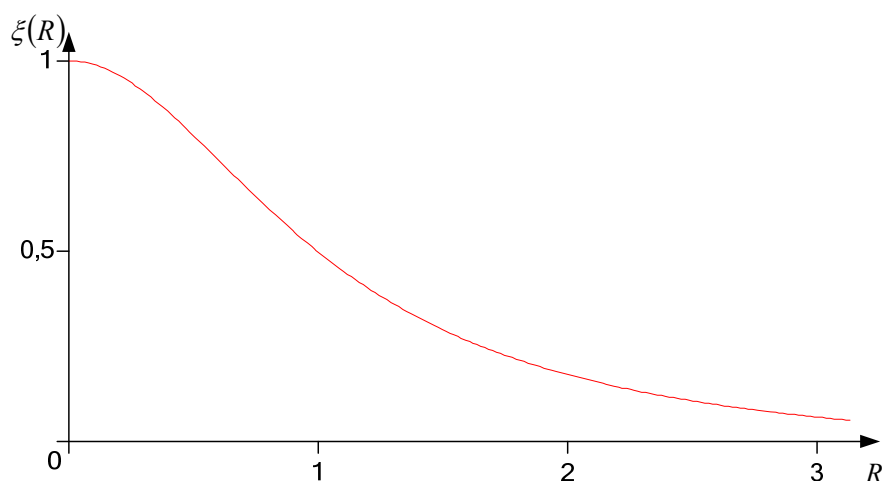


Рисунок 3.55 – Информационный профиль ротатабельного плана ПФЭ 2^2 для модели (3.18)

Точность прогнозирования выходного параметра одинакова на одинаковом расстоянии от центра плана, при этом точность прогноза уменьшается при удалении от центра плана (рисунок 3.55).

Для плана ПФЭ 3^2 и модели

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 \quad (3.22)$$

информационная функция имеет вид:

$$I_x = \frac{4}{N\sigma_y^2(20 - 18 \cdot x_1^2 - 18 \cdot x_2^2 + 9 \cdot x_1^2x_2^2 + 18 \cdot x_1^4 + 18 \cdot x_2^4)}.$$

При $\sigma_y^2 = 1$ трехмерное представление информационной функции представлено на рисунке 3.56, на рисунке 3.57 представлены информационные контуры.

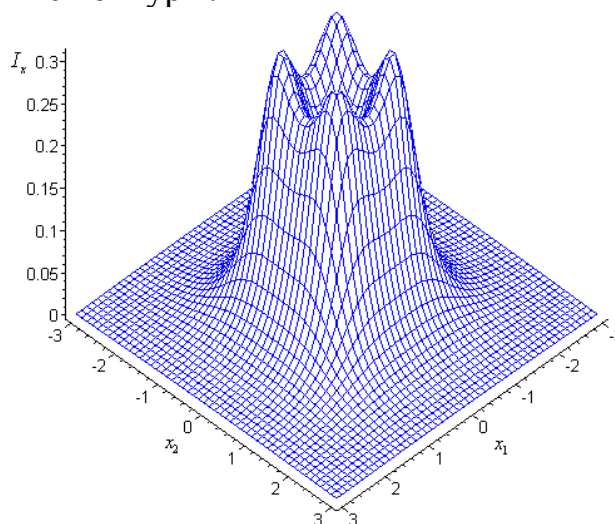


Рисунок 3.56 – Информационная функция плана ПФЭ 3^2

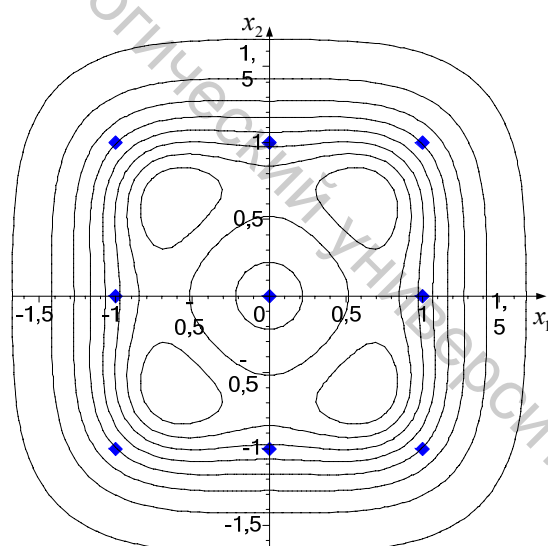


Рисунок 3.57 – Информационные контуры плана ПФЭ 3^2

Аналогично изложенному ранее для плана ПФЭ 3^2 и модели (3.22) матрица планирования X , информационная матрица $X^T X$, дисперсионная матрица $(X^T X)^{-1}$ и корреляционная матрица R имеют вид:

$$X = \begin{matrix} & \begin{matrix} x_0 & x_1 & x_2 & x_1^2 & x_2^2 & x_1 x_2 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{matrix} & \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \end{matrix}, \quad X^T X = \begin{bmatrix} 9 & 0 & 0 & 6 & 6 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix},$$

$$(X^T X)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{5}{9} & 0 & 0 & \frac{-1}{3} & \frac{-1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-1}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{-1}{3} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{-\sqrt{10}}{5} & \frac{-\sqrt{10}}{5} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\sqrt{10}}{5} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{-\sqrt{10}}{5} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Так как информационная матрица $X^T X$ недиагональная, то матрица планирования X неортогональна. Как видно из матрицы R , коэффициент b_0 имеет корреляционную связь с коэффициентами b_{11} и b_{22} , т. е. при исключении хотя бы одного из этих коэффициентов из модели изменится оценка коэффициента b_0 .

Пример 3.1

Рассчитать в СКМ Maple информационную, дисперсионную и корреляционную матрицы плана ПФЭ 2^2 для модели: $y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2$.

Решение:


```

restart;
with(LinearAlgebra):

#матрица планирования
X:=Matrix([
[1, 1, 1],
[1,-1, 1],
[1, 1,-1],
[1,-1,-1]
]);

#информационная матрица
F:=evalm(Transpose(X) &*X);

#дисперсионная матрица
C:=evalm(1/F);

#корреляционная матрица
R:=Matrix(
  ColumnDimension(X),
  (i,j) -> C[i,j]/sqrt(C[i,i]*C[j,j])
);

```

$$X := \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \quad F := \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \quad C := \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \quad R := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Так как информационная матрица F диагональная, то матрица планирования X является ортогональной, вследствие чего дисперсионная матрица C и корреляционная матрица R также диагональны, следовательно, оценки коэффициентов регрессии некоррелированы между собой.

Пример 3.2

Построить в СКМ Maple информационную функцию плана ПФЭ 2^2 для модели: $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$.

Решение:

```

restart;
with(plots):
with(LinearAlgebra):

#матрица планирования
X:=Matrix([
[1, 1, 1],
[1,-1, 1],
[1, 1,-1],
[1,-1,-1]
]);

```

```

1);

N:=RowDimension(X);

#вектор базисных функций
f:=Vector([ 1, x[1], x[2] ]);

#информационная функция
zeta:=simplify(1/(N*evalm(Transpose(f) &*evalm(1/evalm(Transp
ose(X) &*X) ) &*f) ));

contourplot(zeta,x[1]=-1..1,x[2]=-1..1, color=black, con-
tours=4, scaling=constrained);

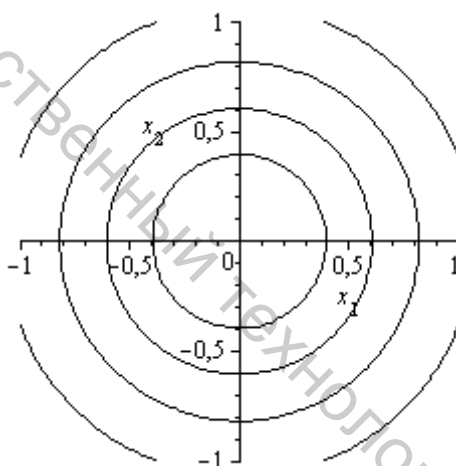
```

$$X := \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \end{bmatrix}$$

$$N := 4$$

$$f := \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

$$\zeta := \frac{1}{1 + x_1^2 + x_2^2}$$



Проанализировав информационную функцию ζ , можно сделать вывод, что количество полезной информации зависит от расстояния от центра плана. Аналогичный вывод можно сделать, проанализировав график линий равного уровня информационной функции.

3.8 Центральные композиционные планы

Если при исследовании процесса или объекта была выдвинута гипотеза о том, что он описывается линейной моделью, а в результате реализации плана эксперимента и расчета оценок коэффициентов для модели первого порядка (ПФЭ илиДФЭ) регрессионная модель оказалась неадекватной, необходимо провести эксперимент по плану для более сложной, квадратичной модели. При этом желательно, чтобы в новый план эксперимента максимально были включены опыты, реализованные по плану для более простой, линейной модели. Эти опыты называют **ядром плана**. Если план эксперимента получен путем добавления

опытов в план для более простой модели, его называют **композиционным**.

Далее будут рассмотрены примеры построения композиционных планов для моделей второго порядка:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_{12}x_1x_2 + \dots + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + \dots, \quad (3.23)$$

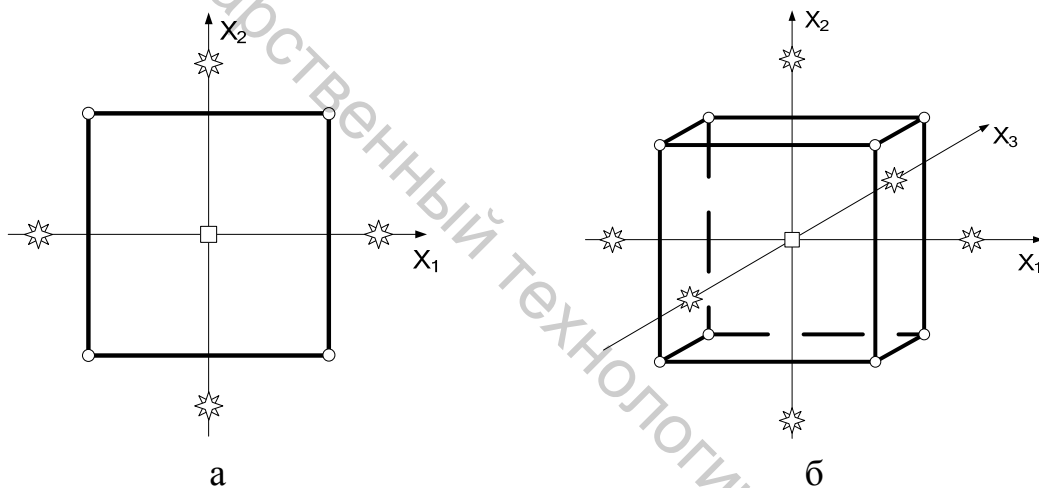
в случае двух переменных эта модель имеет вид:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2. \quad (3.24)$$

Для получения композиционного плана эксперимента к ядру плана (плана ПФЭ и ДФЭ) добавляют так называемые «звездные точки», откладываемые на осях факторного пространства, и точки в центре плана, таким образом, число опытов в композиционном плане:

$$N = n_{\text{я}} + 2 \cdot k + n_0, \quad (3.25)$$

где $n_{\text{я}}$ – количество точек в ядре плана, рассчитывается по (3.6) для ПФЭ и (3.13) для ДФЭ; k – число факторов ($2 \cdot k$ – количество звездных точек); n_0 – количество точек в центре плана.



○ – точки ядра плана; * – «звездные» точки; □ – точки в центре плана.

Рисунок 3.58 – Центральные композиционные планы второго порядка для а) 2 факторов; б) 3 факторов

При построении центральных композиционных планов, задаваясь расстоянием α от центра плана до «звездной» точки и числом точек в центре плана n_0 , можно добиться оптимальности плана эксперимента по одному из критериев: ортогональности или ротатабельности.

3.8.1 Ортогональное центральное композиционное планирование (ОЦКП)

Для того, чтобы план эксперимента был ортогональным, скалярное произведение двух его любых столбцов должно быть равно нулю

(3.5). Чтобы этого добиться, оказывается необходимым преобразовать регрессионную модель к виду:

$$\begin{aligned} y &= a_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_{12}x_1x_2 + \dots + b_{11}(x_1^2 - \beta) + b_{22}(x_2^2 - \beta) + \dots = \\ &= a_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=i+1}^k b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^k b_{ii} (x_i^2 - \beta), \end{aligned} \quad (3.26)$$

где

$$\beta = \frac{\sum_{i=1}^N x_{ij}^2}{N} = \frac{2^{k-p} + 2 \cdot \alpha^2}{N}, \quad (3.27)$$

в случае двух переменных эта модель имеет вид:

$$y = a_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}(x_1^2 - \beta) + b_{22}(x_2^2 - \beta). \quad (3.28)$$

Чтобы после расчета оценок коэффициентов модели вернуться от модели (3.28) к модели (3.23), достаточно пересчитать значение коэффициента b_0 :

$$b_0 = a_0 - \beta \cdot \sum_{j=1}^k b_{jj}. \quad (3.29)$$

Независимо от величины звездного плеча α скалярное произведение двух любых столбцов, кроме столбцов квадратичных эффектов (таблица 3.16 $X_1^2 - \beta$ и $X_2^2 - \beta$), равно нулю. Скалярное произведение столбцов $(X_j^2 - \beta)$ в общем случае не равно нулю, но зависит от величины звездного плеча α . Таким образом, подбирая величину звездного плеча α , можно добиться ортогональности плана эксперимента. Приравняв к нулю скалярное произведение этих столбцов друг на друга и решая полученное уравнение относительно α , получают величину «звездного» плеча. Таким образом, для **ортогональных** композиционных планов «звездное» плечо:

$$\alpha = \sqrt{2^{\frac{k-p}{2}-1} \left(\sqrt{N} - 2^{\frac{k-p}{2}} \right)}, \quad (3.30)$$

где k – число факторов; p – число факторов, чьи главные эффекты смешаны с эффектами взаимодействия, если в качестве ядра композиционного плана использовался план ПФЭ, то $p=0$; N – число опытов плана (3.25), таким образом, величина α зависит также от количества точек ядра плана $n_{\text{я}}$ и количества точек в центре плана n_0 .

Таблица 3.16 – Матрица планирования ортогонального центрального композиционного плана второго порядка

	№	Матрица планирования										
		X ₀	План эксперимента				X ₁ ² – β	...	X _k ² – β	X ₁ X ₂	...	X _{k-1} X _k
			X ₁	X ₂	...	X _k						
ядро плана n _я	1	+1	+1	+1	...	+1	1 – β	...	1 – β	+1	...	+1
	2	+1	-1	+1	...	+1	1 – β	...	1 – β	-1	...	+1
	3	+1	+1	-1	...	+1	1 – β	...	1 – β	-1	...	...
	4	+1	-1	-1	...	+1	1 – β	...	1 – β	+1	...	...
	5	+1	+1	+1	...	+1	1 – β	...	1 – β	+1	...	...
	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
	2 ^{k-p}	+1	-1	-1	...	-1	1 – β	...	1 – β	+1	...	+1
«звезд- ные» точки 2 · k	2 ^{k-p} + 1	+1	+α	0	...	0	α ² – β	...	– β	0	...	0
	2 ^{k-p} + 2	+1	-α	0	...	0	α ² – β	...	– β	0	...	0
	2 ^{k-p} + 3	+1	0	+α	...	0	– β	...	– β	0	...	0
	2 ^{k-p} + 4	+1	0	-α	...	0	– β	...	– β	0	...	0
	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
	2 ^{k-p} + 2 · k – 1	+1	0	0	...	+α	– β	...	α ² – β	0	...	0
	2 ^{k-p} + 2 · k	+1	0	0	...	-α	– β	...	α ² – β	0	...	0
центр плана n ₀	N = n _я + 2 · k + 1	+1	0	0	...	0	– β	...	– β	0	...	0

В таблице 3.17 приведен пример матрицы планирования ОЦКП для регрессионной модели (3.28).

Таблица 3.17

№	X_0	X_1	X_2	$X_1 X_2$	$X_1^2 - \beta$	$X_2^2 - \beta$	
1	1	1	1	1	$1 - \beta$	$1 - \beta$	ядро плана $n_{\text{я}}$
2	1	-1	1	-1	$1 - \beta$	$1 - \beta$	
3	1	1	-1	-1	$1 - \beta$	$1 - \beta$	
4	1	-1	-1	1	$1 - \beta$	$1 - \beta$	
5	1	α	0	0	$\alpha^2 - \beta$	$-\beta$	«звезд- ные» точки $2 \cdot k$
6	1	$-\alpha$	0	0	$\alpha^2 - \beta$	$-\beta$	
7	1	0	α	0	$-\beta$	$\alpha^2 - \beta$	
8	1	0	$-\alpha$	0	$-\beta$	$\alpha^2 - \beta$	
9	1	0	0	0	$-\beta$	$-\beta$	центр плана n_0

Для таблицы 3.17 $\alpha=1$; $\beta=2/3=0,666$; $\alpha^2 - \beta=1/3=0,333$. Для приведенной в таблице 3.17 матрицы планирования ОЦКП информационная матрица $X^T X$ и дисперсионная матрица $(X^T X)^{-1}$:

$$X^T X = \begin{bmatrix} 9 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}, \quad (X^T X)^{-1} = \begin{bmatrix} 1/9 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix},$$

при этом корреляционная матрица представляет собой единичную матрицу $R = E_{(6)}$.

Параметры ОЦКП для различного числа факторов с числом дополнительных опытов в центре композиционного ортогонального плана $n_0=1$ приведены в таблице 3.18.

Таблица 3.18 – Параметры ортогональных центральных композиционных планов

Число факторов, k	Ядро плана	Число точек ядра плана, $n_{\text{я}}$	Число точек в центре плана, n_0	Число «звездных» точек, $2 \cdot k$	Общее число точек, N	«Звездное» плечо, α	β
2	2^2	4	1	4	9	1	0,6667
3	2^3	8	1	6	15	1,215	0,730
4	2^4	16	1	8	25	1,414	0,8
5	2^{5-1}	16	1	10	27	1,547	0,77
6	2^{6-1}	32	1	12	45	1,724	0,843
7	2^{7-1}	64	1	14	79	1,885	0,9
8	2^{8-2}	64	1	16	81	2,000	0,8889

Из таблицы 3.18, например, видно, что для трех факторов в качестве ядра используется план ПФЭ 2^3 (рисунок 3.6) после добавления дополнительных точек. Полученный ОЦКП содержит на 12 опытов меньше (15 вместо 27), чем ПФЭ 3^3 (рисунок 3.32), и при этом также позволяет оценить квадратичные эффекты взаимодействия.

3.8.2 Ротatable центральное композиционное планирование (РЦКП)

При построении ротatable центрального композиционного плана в качестве ядра плана берут план ПФЭ или ДФЭ и добавляют $2 \cdot k$ «звездных» точек. Для выполнения условия ротatableности величина «звездного» плеча α рассчитывается как:

$$\alpha = \sqrt[k-p]{n_{\text{я}}} = 2^{\frac{k-p}{4}}, \quad (3.31)$$

где $n_{\text{я}}$ – количество точек в ядре плана; k – число факторов; p – число факторов, смешанных с эффектом взаимодействия.

Часто, например, в задачах оптимизации или оптимального управления бывает важна возможность получить предсказание функции отклика не только с одинаковой точностью на равных расстояниях от центра плана, но и с одинаковой точностью в пределах заданной области, представляющей интерес для исследователя. С этой целью при построении композиционных планов используют так называемое **ротatable униформ-планирование**, т. е. свойства плана оптимизируются для получения информации о поверхности отклика с одинаковой дисперсией внутри информационного контура радиусом ρ ($0 \leq \rho \leq 1$),

который для двух факторов представляет собой окружность, для трех – сферу, четырех – гиперсферу и т. д.

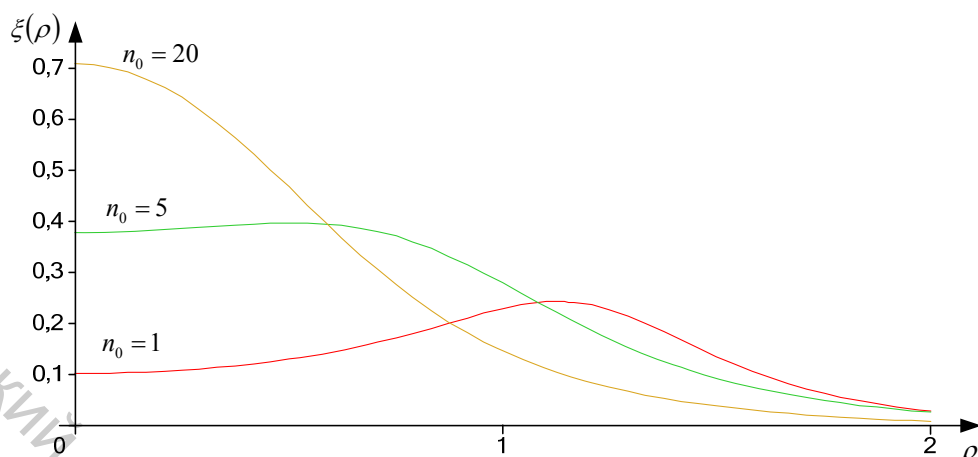


Рисунок 3.59 – Информационные профили РЦКП второго порядка для модели (3.24)

Задаваясь величиной звездного плеча α по формуле (3.31) и изменяя число опытов в центре плана n_0 , можно добиться равномеротатабельности плана. Информационные профили РЦКП для модели (3.24) и различного количества точек в центре плана n_0 приведены на рисунке 3.59. Как видно из рисунка, при $n_0=5$ график информационного профиля РЦКП наиболее близок к линейному внутри информационного контура ($0 \leq \rho \leq 1$).

Трехмерное представление и контуры, образованные линиями равного уровня информационной функции РЦКП для модели (3.24), приведены на рисунке 3.60 и рисунке 3.61.

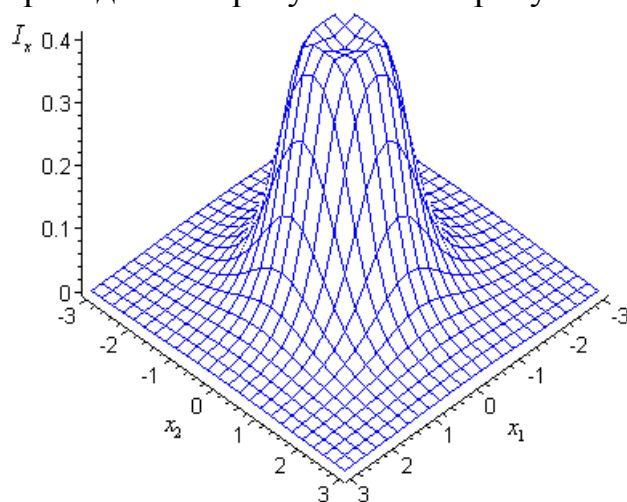


Рисунок 3.60 – Информационная функция плана РЦКП для модели (3.24)

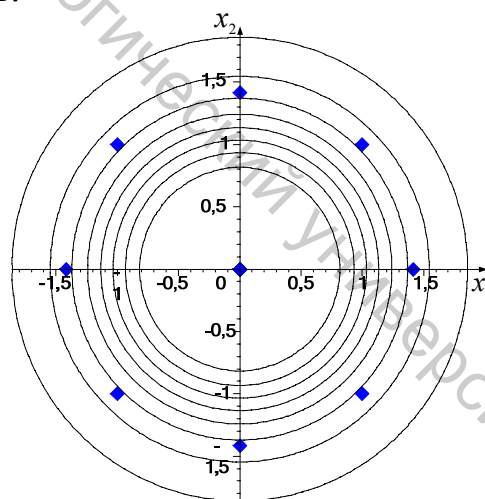


Рисунок 3.61 – Информационные контуры плана РЦКП для модели (3.24)

В таблице 3.19 приведен пример матрицы планирования РЦКП для двух факторов.

Таблица 3.19

№	X_0	X_1	X_2	$X_1 X_2$	X_1^2	X_2^2	
1	1	1	1	1	1	1	ядро плана $n_{\text{я}}$
2	1	-1	1	-1	1	1	
3	1	1	-1	-1	1	1	
4	1	-1	-1	1	1	1	
5	1	α	0	0	α^2	0	«звезд- ные» точки $2 \cdot k$
6	1	$-\alpha$	0	0	α^2	0	
7	1	0	α	0	0	α^2	
8	1	0	$-\alpha$	0	0	α^2	
9	1	0	0	0	0	0	центр плана n_0
10	1	0	0	0	0	0	
11	1	0	0	0	0	0	
12	1	0	0	0	0	0	
13	1	0	0	0	0	0	

В таблице 3.19 $\alpha = \sqrt{2} = 1,414$ и $\alpha^2 = 2$. Для приведенной в таблице 3.19 матрицы планирования РЦКП для двух факторов информационная матрица:

$$X^T X = \begin{bmatrix} 13 & 0 & 0 & 8 & 8 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 \\ 8 & 0 & 0 & 12 & 4 & 0 \\ 8 & 0 & 0 & 4 & 12 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix},$$

дисперсионная матрица:

$$(X^T X)^{-1} = \begin{bmatrix} 1/5 & 0 & 0 & -1/10 & -1/10 & 0 \\ 0 & 1/8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/8 & 0 & 0 & 0 \\ -1/10 & 0 & 0 & 23/160 & 3/160 & 0 \\ -1/10 & 0 & 0 & 3/160 & 23/160 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix},$$

корреляционная матрица:

$$R = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{-2\sqrt{46}}{23} & \frac{-2\sqrt{46}}{23} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-2\sqrt{46}}{23} & 0 & 0 & 1 & \frac{3}{23} & 0 \\ \frac{-2\sqrt{46}}{23} & 0 & 0 & \frac{3}{23} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

таким образом, из корреляционной матрицы видно, что не коррелированы с другими только линейные эффекты факторов и эффект взаимодействия факторов.

В ротатабельном центральном композиционном плане для модели (3.23) несмешанными остаются только оценки линейных эффектов и эффектов взаимодействия. Т. е. при исключении из модели одного из эффектов, чьи оценки смешаны с эффектами, остающимися в модели, необходимо пересчитать оценки соответствующих коэффициентов.

Параметры РЦКП для различного числа факторов приведены в таблице 3.20.

Таблица 3.20 – Параметры ротатабельных равномерных центральных композиционных планов

Число факторов, k	Ядро плана	Число точек ядра плана, $n_{\text{я}}$	Число «звездных» точек	n_0	N	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	2,000
5	2^5	32	10	10	52	2,378
5	2^{5-1}	16	10	6	32	2,000
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	3,363
7	2^{7-1}	64	14	14	92	2.828

РЦКП можно приблизить к ортогональному, сделав дисперсионную матрицу почти диагональной, изменяя число опытов в центре плана. Для этого число опытов в центре плана должно определяться как:

$$n_0 = 4\sqrt{n_{\text{я}}} - 2 \cdot k + 4. \quad (3.32)$$

Так, для регрессионной модели (3.24) в РЦКП для двух факторов: $n_0 = 4\sqrt{4} - 2 \cdot 2 + 4 = 8$. При этом корреляционная матрица имеет вид:

$$R = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

как видно, оценки коэффициентов b_{11} и b_{22} перед квадратичными эффектами не коррелируют между собой, но связаны с оценкой свободного коэффициента b_0 . Т. е. при исключении из модели коэффициента b_{11} или b_{22} необходимо пересчитать оценку коэффициента b_0 .

3.9 Построение и анализ центрального композиционного плана

Для построения центральных композиционных планов эксперимента в пакете прикладных программ STATISTICA используется модуль *Анализ – Промышленная статистика и Шесть Сигма – Планирование экспериментов (ПЭ) – Центральные композиционные планы, планы для поверхности*. Порядок работы с модулем аналогичен описанному в пп. 3.5, но имеет дополнительные опции, связанные с выбором величины звездного плеча и числа точек в центре плана.

3.9.1 Пример построения центрального композиционного плана

Построение центрального композиционного плана для трех факторов. За основу можно взять план эксперимента **3/1/16** (факторы/блоки/опыты) для трех факторов, содержащий 16 опытов (8 точек в ядре плана, 6 «звездных» точек и 2 точки в центре плана). План эксперимента не содержит блоков, т. е. все опыты находятся в одном блоке. После выбора плана будет отображена информация о нем (рисунок 3.62).

ИТОГИ СТАНДАРТНОГО ПЛАНА: 2**(3) кубич. и звезд. точки (центр. комп. план)			
Число факторов:	3		
Число блоков:	1		
Число опытов:	16	nc=8	ns=6 n0=2
Альфа для ротатабельн.:	1,6818	Альфа для ортогональн.:	1,2872

Рисунок 3.62

В описании плана приводится величина звездного плеча α для ортогонального (1,2872) и для ротатабельного (1,6818) планов эксперимента. Так как величина звездного плеча ортогонального плана эксперимента зависит от общего числа опытов в плане эксперимента, то в окончательном варианте ортогонального плана эксперимента величина звездного плеча будет пересчитана.

Опции, являющиеся специфическими для центральных композиционных планов:

- **альфа для ротатабельности** – указывает, что величина звездного плеча рассчитывается по формуле (3.31) для центрального композиционного ротатабельного плана ;
- **альфа для ортогональности** – указывает, что величина звездного плеча рассчитывается по формуле (3.30) для центрального композиционного ортогонального плана;
- **центрированные звездные точки** – указывает, что величина звездного плеча устанавливается равной 1;
- **добавить центрированные точки (орт. и ротат.)** – добавляет в план центральные точки, чтобы приблизить центральный ротатабельный план к ортогональному согласно формуле (3.32);
- **центральные точки (на блок)** – позволяет добавить необходимое число точек в центре плана; если выбрана опция *добавить центрированные точки*, то эта опция игнорируется.

Для построения ортогонального центрального композиционного плана (ОЦКП) необходимо выбрать опцию *альфа для ортогональности*. Построенный план ОЦКП со стандартным порядком опытов приведен на рисунке 3.63 а.

план	A	B	C
1	-1,00000	-1,00000	-1,00000
2	-1,00000	-1,00000	1,00000
3	-1,00000	1,00000	-1,00000
4	-1,00000	1,00000	1,00000
5	1,00000	-1,00000	-1,00000
6	1,00000	-1,00000	1,00000
7	1,00000	1,00000	-1,00000
8	1,00000	1,00000	1,00000
9	-1,28719	0,00000	0,00000
10	1,28719	0,00000	0,00000
11	0,00000	-1,28719	0,00000
12	0,00000	1,28719	0,00000
13	0,00000	0,00000	-1,28719
14	0,00000	0,00000	1,28719
15 (C)	0,00000	0,00000	0,00000
16 (C)	0,00000	0,00000	0,00000

а

Эффект	A		B		C		1L*2L	1L*3L
	линейн.	квадрат.	линейн.	квадрат.	линейн.	квадрат.		
(1)A (L)	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
A (Q)	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
(2)B (L)	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B (Q)	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00
(3)C (L)	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00
C (Q)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00
1L*2L	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00
1L*3L	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00
2L*3L	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

б

Рисунок 3.63

Таблица коэффициентов корреляции главных эффектов (L), квадратичных эффектов (Q) и эффектов двойного взаимодействия для ОЦКП приведена на рисунке 3.63 б. Как видно, все эффекты не коррелируют друг с другом.

Для построения ротатабельного центрального композиционного плана (РЦКП) необходимо выбрать опцию *альфа для ротатабельности*. Для того, чтобы построенный план для трех факторов был ротатабельным и равномерным, он должен содержать 6 точек в центре плана (см. таблицу 3.20). Так как базовый план содержит 2 центральные точки, то с помощью опции *добавить центрированные точки* необходимо добавить еще 4 центральные точки.

Построенный план РЦКП со стандартным порядком опытов приведен на рисунке 3.64 а.

план	A	B	C
1	-1,00000	-1,00000	-1,00000
2	-1,00000	-1,00000	1,00000
3	-1,00000	1,00000	-1,00000
4	-1,00000	1,00000	1,00000
5	1,00000	-1,00000	-1,00000
6	1,00000	-1,00000	1,00000
7	1,00000	1,00000	-1,00000
8	1,00000	1,00000	1,00000
9	-1,68179	0,00000	0,00000
10	1,68179	0,00000	0,00000
11	0,00000	-1,68179	0,00000
12	0,00000	1,68179	0,00000
13	0,00000	0,00000	-1,68179
14	0,00000	0,00000	1,68179
15 (C)	0,00000	0,00000	0,00000
16 (C)	0,00000	0,00000	0,00000
17 (C)	0,00000	0,00000	0,00000
18 (C)	0,00000	0,00000	0,00000
19 (C)	0,00000	0,00000	0,00000
20 (C)	0,00000	0,00000	0,00000

а

Эффект	A	A	B	B	C	C	1L*2L	1L*3L	2L*3L
	линейн.	квадрат.	линейн.	квадрат.	линейн.	квадрат.			
(1)A (L)	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
A (Q)	0,00	1,00	0,00	-0,09	0,00	-0,09	0,00	0,00	0,00
(2)B (L)	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B (Q)	0,00	-0,09	0,00	1,00	0,00	-0,09	0,00	0,00	0,00
(3)C (L)	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00
C (Q)	0,00	-0,09	0,00	-0,09	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00
1L*2L	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00
1L*3L	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00
2L*3L	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00

б

Рисунок 3.64

Таблица коэффициентов корреляции главных эффектов (L), квадратичных эффектов (Q) и эффектов двойного взаимодействия для равномерного РЦКП приведена на рисунке 3.64 б. Как видно, некоторые эффекты коррелируют друг с другом. Для того, чтобы приблизить построенный ротатабельный центральный композиционный план к ортогональному, необходимо выбрать опцию *добавить центрированные точки*. Число центральных точек будет автоматически рассчитано по формуле (3.32): $n_0 = 4\sqrt{n_f} - 2 \cdot k + 4 = 4\sqrt{8} - 2 \cdot 3 + 4 \approx 9$. Так как базовый план содержит 2 центральные точки, то будет добавлено 7 центральных точек.

Построенный план РЦКП со стандартным порядком опытов приведен на рисунке 3.65 а.

план	A	B	C
1	-1,00000	-1,00000	-1,00000
2	-1,00000	-1,00000	1,00000
3	-1,00000	1,00000	-1,00000
4	-1,00000	1,00000	1,00000
5	1,00000	-1,00000	-1,00000
6	1,00000	-1,00000	1,00000
7	1,00000	1,00000	-1,00000
8	1,00000	1,00000	1,00000
9	-1,68179	0,00000	0,00000
10	1,68179	0,00000	0,00000
11	0,00000	-1,68179	0,00000
12	0,00000	1,68179	0,00000
13	0,00000	0,00000	-1,68179
14	0,00000	0,00000	1,68179
15 (C)	0,00000	0,00000	0,00000
16 (C)	0,00000	0,00000	0,00000
17 (C)	0,00000	0,00000	0,00000
18 (C)	0,00000	0,00000	0,00000
19 (C)	0,00000	0,00000	0,00000
20 (C)	0,00000	0,00000	0,00000
21 (C)	0,00000	0,00000	0,00000
22 (C)	0,00000	0,00000	0,00000
23 (C)	0,00000	0,00000	0,00000

Эффект	A	A	B	B	C	C	1L*2L	1L*3L	2L*3L
	линейн.	квадрат.	линейн.	квадрат.	линейн.	квадрат.			
(1)A (L)	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,0
A (Q)	0,00	1,00	0,00	-0,01	0,00	-0,01	0,00	0,00	0,0
(2)B (L)	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,0
B (Q)	0,00	-0,01	0,00	1,00	0,00	-0,01	0,00	0,00	0,0
(3)C (L)	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,0
C (Q)	0,00	-0,01	0,00	-0,01	0,00	1,00	0,00	0,00	0,0
1L*2L	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,0
1L*3L	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,0
2L*3L	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,0

а

б

Рисунок 3.65

Таблица коэффициентов корреляции главных эффектов (L), квадратичных эффектов (Q) и эффектов двойного взаимодействия для РЦКП, приближенного к ортогональному, приведена на рисунке 3.65 б. Как видно, значения коэффициентов корреляции между эффектами уменьшились по сравнению с центральным ротатабельным равномерным планом (рисунок 3.64 б).

3.9.2 Пример анализа центрального композиционного плана

После разработки нового ассортимента смесовой пряжи пневмомеханического способа прядения из натуральных и химических волокон была поставлена задача определения доли вложения химических волокон (%) и заправочной крутки пряжи (кр/м) с целью обеспечения максимального значения относительной разрывной нагрузки пряжи (Y), сН/текс. После предварительных экспериментов было определено, что оптимальное значение заправочной крутки (X_1) находится в пределах от 600 до 900 кр/м, оптимальное значение доли вложения химических волокон (X_2) находится в пределах от 10 до 20 %. Для проведения эксперимента был построен центральный композиционный равномерный ротатабельный план (таблица 3.21).

Таблица 3.21

	Кодированные значения		Натуральные значения	
	x_1	x_2	кр/м	%
Ядро плана	-1	-1	600	10
	-1	1	600	20
	1	-1	900	10
	1	1	900	20
«Звездные» точки	1,414214	0	962	15
	-1,414214	0	537	15
	0	-1,414214	750	7
	0	1,414214	750	22
Центр плана	0	0	750	15
	0	0	750	15
	0	0	750	15
	0	0	750	15
	0	0	750	15

После реализации центрального композиционного ротatable-го униформ-плана получена таблица, приведенная на рисунке 3.66. В плане для каждой комбинации уровней входных параметров содержится одно (среднее) значение, определенное в результате десяти измерений относительной разрывной нагрузки пряжи. Для центральной точки указано пять значений отдельных опытов. Опыты в плане эксперимента рандомизированы.

Планир. план	X_1	X_2	Y
1	-1,00000	-1,00000	8,83
4	1,00000	1,00000	10,15
10 (C)	0,00000	0,00000	12,58
11 (C)	0,00000	0,00000	12,61
13 (C)	0,00000	0,00000	12,70
2	-1,00000	1,00000	7,84
8	0,00000	1,41421	8,54
7	0,00000	-1,41421	8,41
5	-1,41421	0,00000	8,78
9 (C)	0,00000	0,00000	12,57
12 (C)	0,00000	0,00000	12,80
3	1,00000	-1,00000	9,23
6	1,41421	0,00000	10,37

Рисунок 3.66

Для анализа плана эксперимента используем модуль *Анализ* – *Промышленная статистика и Шесть Сигма* – *Планирование экспериментов (ПЭ)* – *Центральные композиционные планы, планы для поверхности*.

На вкладке **анализ плана** с помощью опции **переменные** необходимо указать столбцы с входными параметрами (факторами) и выходным параметром (рисунок 3.67).

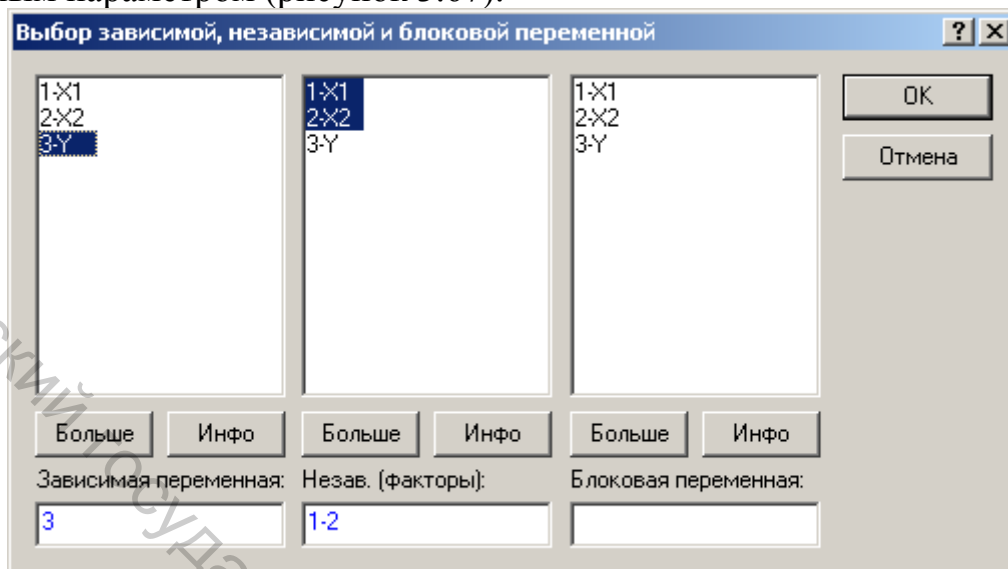


Рисунок 3.67

Входные (независимые) параметры – столбцы X_1 , X_2 . Выходной параметр (зависимая) переменная – столбец Y .

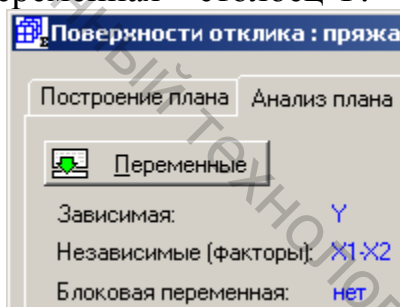


Рисунок 3.68

После нажатия кнопки **ОК** появится диалоговое окно (рисунок 3.69), содержащее общую информацию об анализируемом плане эксперимента.

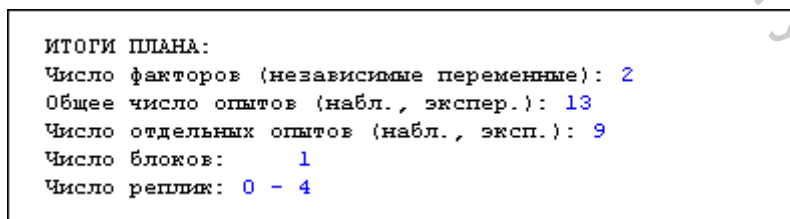


Рисунок 3.69

Опция **отобразить план и наблюдаемые средние** (вкладка **План**) отображает таблицу (рисунок 3.70), содержащую средние значения выходного параметра Y_1 для каждой комбинации уровней факторов. Так как повторные опыты проводились только в центральной точке

плана, то только для нее рассчитана величина стандартного отклонения и доверительные пределы.

План: 2 факторы, 1 Блоки (пряжа)							
	X_1	X_2	$\bar{Y}$ Средние	$\bar{Y}$ Ст. Откл.	$\bar{Y}$ N	-95, % Дов. Пред	+95, % Дов. Пред
1	-1,41421	0,00000	8,78000	0,000000	1		
2	-1,00000	-1,00000	8,83000	0,000000	1		
3	-1,00000	1,00000	7,84000	0,000000	1		
4	0,00000	-1,41421	8,41000	0,000000	1		
5	0,00000	0,00000	12,65200	0,097314	5	12,53117	12,77283
6	0,00000	1,41421	8,54000	0,000000	1		
7	1,00000	-1,00000	9,23000	0,000000	1		
8	1,00000	1,00000	10,15000	0,000000	1		
9	1,41421	0,00000	10,37000	0,000000	1		
Все оп.			10,41615	1,955482	13	9,23447	11,59784

Рисунок 3.70

На вкладке **Модель** (рисунок 3.71) выбираем модель, содержащую максимальное количество эффектов (линейные и квадратические главные эффекты и эффекты двойного взаимодействия). Так как план эксперимента содержит повторные опыты, это позволяет вычислить дисперсию воспроизводимости $S_{\text{восп}}^2$ (2.31) (опция **чистая ошибка** рисунок 3.71) и проверить гипотезу о потере согласия (**Lack of Fit** см. пп. 2.1.3).

Включить в модель

☐ Только линейные главные эффекты

☐ Линейные/квадратичные главные эффекты

☐ Линейные главные эффекты и 2-взаимодействие

☒ Линейные/квадр. главн. эффекты и 2-взаимодействие

☐ Игнорировать некоторые эффекты

Укажите эффекты, которые будут включены в модель. Все результаты ДА, оценки эффектов, предсказанные значения и остатки и т.д. будут вычислены на основе этой модели.

Член ошибки ДА

☐ Остаточная сумма квадратов

☒ Чистая ошибка

Ошибка будет использована во всех критериях статистической значимости, а также при вычислении стандартных ошибок.

Рисунок 3.71

Опция **Корреляции эффектов (обратная $X'X$)** (вкладка **План**) отображает таблицу корреляции эффектов (рисунок 3.72). Из приведенной таблицы видно, что квадратичные эффекты входных факторов коррелируют между собой. Следовательно, при исключении из модели одного из квадратичных эффектов изменится оценка коэффициента перед другим квадратичным эффектом.

Эффект	Корреляции эффектов (пряжа) 2 факторы, 1 Блоки				
	X ₁	X ₁	X ₂	X ₂	1L на 2L
	(L)	(Q)	(L)	(Q)	
(1)X ₁ (L)	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00
X ₁ (Q)	0,00	1,00	0,00	0,13	0,00
(2)X ₂ (L)	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00
X ₂ (Q)	0,00	0,13	0,00	1,00	0,00
1L на 2L	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00

Рисунок 3.72

Опция *Дисперсионный анализ* (вкладка *Дисперсионный анализ/Эффекты*) отображает таблицу (рисунок 3.73) с результатами дисперсионного анализа выбранной модели (см. пп. 2.1.4). В первых пяти строках проводится оценка величины вклада факторов, обусловленных линейными, квадратичными эффектами и эффектом взаимодействия факторов в общую дисперсию выходного параметра. Из таблицы видно (рисунок 3.73), что линейный эффект второго фактора не оказывает статистически значимое влияние на общую дисперсию выходного параметра ($p\text{-value} < 0,05$). Регрессионная модель адекватна (см. пп. 2.1.3), так как в тесте потери согласия $p\text{-value} = 0,407934 > 0,05$.

Фактор	ДА; Прм.: Y; R-кв.=,99841; Скор.,99728 (пряжа) 2 факторы, 1 Блоки; SS чист.ошиб.= ЗП: Y				
	SS	сс	MS	F	p
(1)X ₁ (L)	3,07346	1	3,07346	324,547	0,000056
X ₁ (Q)	16,53292	1	16,53292	1745,821	0,000002
(2)X ₂ (L)	0,00162	1	0,00162	0,171	0,700365
X ₂ (Q)	30,43405	1	30,43405	3213,733	0,000001
1L на 2L	0,91202	1	0,91202	96,307	0,000604
Потеря согл.	0,03498	3	0,01166	1,231	0,407934
Чист. ошибка	0,03788	4	0,00947		
Общая SS	45,88691	12			

Рисунок 3.73

Опция *регрессионные коэффициенты* (вкладка *Дисперсионный анализ/Эффекты*) отображает таблицу (рисунок 3.74), содержащую значения коэффициентов регрессии, их стандартные ошибки и доверительные пределы, вычисленные значения t-статистики и достигаемый уровень значимости ($p\text{-value}$). Как видно из таблицы (рисунок 3.74), коэффициент перед линейным эффектом второго фактора статистически незначим ($p\text{-value} > 0,05$).

Регрессия; R-кв.=,99841;Скор.,99728 (пряжа) 2 факторы, 1 Блоки;SS чист.ошиб.= ЗП: Y						
Фактор	Регрес. Козф.	Ст.Ош. Чис. Ош.	t(4)	p	-95,% Дов.Пред	+95,% Дов.Пред
Сред/Св.член	12,65200	0,043520	290,7162	0,000000	12,53117	12,77283
(1)X ₁ (L)	0,61982	0,034406	18,0152	0,000056	0,52430	0,71535
X ₁ (Q)	-1,54163	0,036896	-41,7830	0,000002	-1,64406	-1,43919
(2)X ₂ (L)	0,01423	0,034406	0,4136	0,700365	-0,08129	0,10976
X ₂ (Q)	-2,09163	0,036896	-56,6898	0,000001	-2,19406	-1,98919
1L на 2L	0,47750	0,048657	9,8136	0,000604	0,34241	0,61259

Рисунок 3.74

Оценить значимость коэффициентов можно также, воспользовавшись опцией **Карта Парето** (вкладка **Дисперсионный анализ/Эффекты**), которая позволяет визуально определить, превышает ли t-статистика коэффициента регрессии критическое значение статистики для заданного уровня значимости.

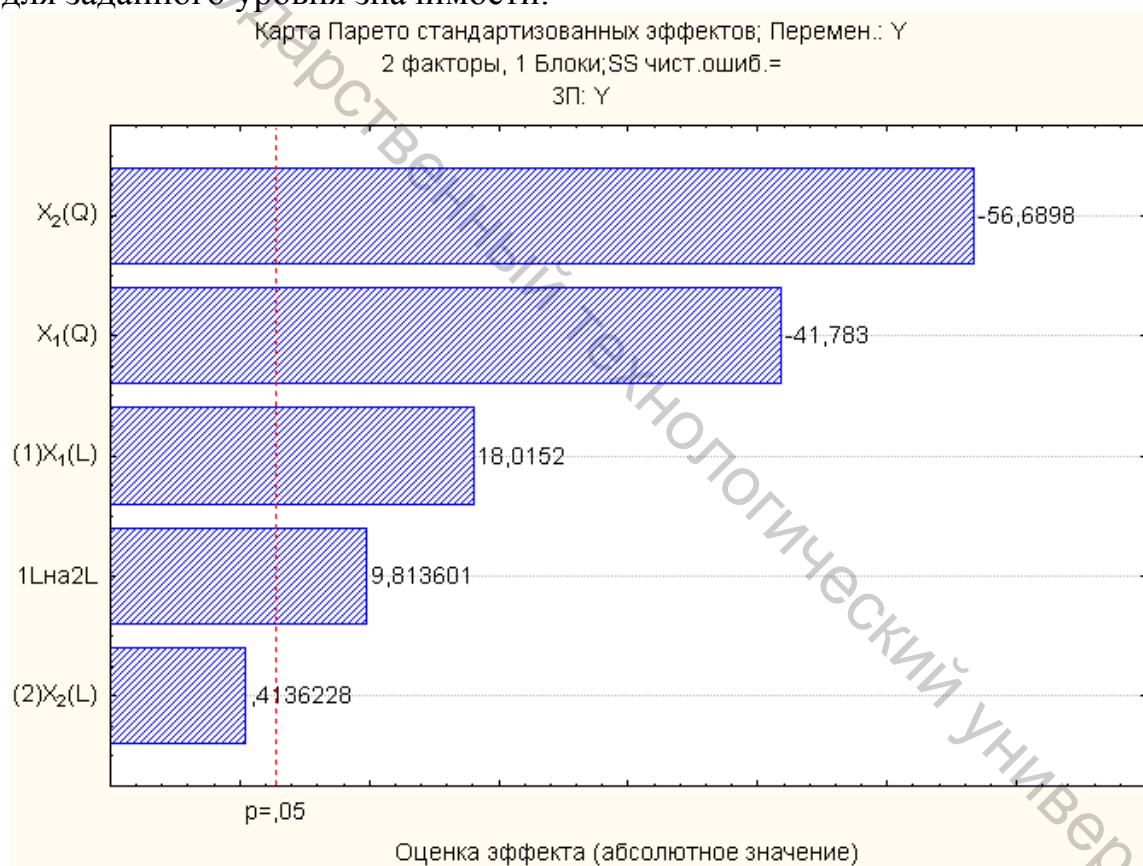


Рисунок 3.75

На гистограмме (рисунок 3.75) видно, что значение t-статистики коэффициента перед линейным эффектом второго фактора не превышает критического значения, следовательно, он статистически незначимо отличается от нуля.

Вернувшись на вкладку **Модель** с помощью опции **игнорируемые эффекты**, исключаем из модели линейный эффект второго фактора (рисунок 3.74).

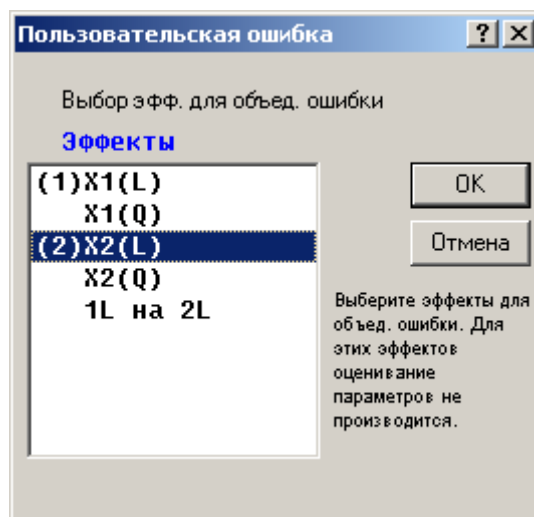


Рисунок 3.76

Вернувшись к опции *регрессионные коэффициенты* (вкладка *Дисперсионный анализ/Эффекты*), найдем оценки коэффициентов регрессии и проверим статистическую гипотезу о значимости их отличия от нуля (рисунок 3.77). Все оставленные в регрессионной модели коэффициенты значимы, и их оценки не изменились после исключения незначимого коэффициента, так как их эффекты не коррелировали (рисунок 3.72) с эффектом, исключенным из модели.

Регрессия; R-кв.=,99838; Скор.,99757 (пряжа) 2 факторы, 1 Блоки; SS чист.ошиб.= ЗП: Y						
Фактор	Регрес. Козф.	Ст. Ош. Чис. Ош.	t(4)	p	-95, % Дов. Пред	+95, % Дов. Пред
Сред/Св.член	12,65200	0,043520	290,7162	0,000000	12,53117	12,77283
(1)X ₁ (L)	0,61982	0,034406	18,0152	0,000056	0,52430	0,71535
X ₁ (Q)	-1,54163	0,036896	-41,7830	0,000002	-1,64406	-1,43919
X ₂ (Q)	-2,09163	0,036896	-56,6898	0,000001	-2,19406	-1,98919
1L на 2L	0,47750	0,048657	9,8136	0,000604	0,34241	0,61259

Рисунок 3.77

Таким образом, регрессионная модель имеет вид:

$$Y = 12.652 + 0.61982x_1 - 1.54163x_1^2 - 2.09163x_2^2 + 0.4775x_1x_2.$$

Обратим внимание на то, как изменились значения коэффициента детерминации R^2 (2.22) и скорректированного коэффициента детерминации $\bar{R}^2$ (2.24) до (рисунок 3.74) и после исключения статистически незначимого коэффициента (рисунок 3.77). После исключения статистически незначимого коэффициента коэффициент детерминации R^2 уменьшился, а скорректированный коэффициент детерминации $\bar{R}^2$ увеличился, так как $\bar{R}^2$ никогда не увеличивается при добавлении в модель статистически незначимых параметров, в отличие от R^2 .

С помощью опции *Дисперсионный анализ* (вкладка *Дисперсионный анализ/Эффекты*) проверим адекватность регрессионной моде-

ли (рисунок 3.78). Регрессионная модель адекватна (см. пп. 2.1.3), так как $p\text{-value}=0,5129>0,05$.

ДА; Прм.: Y; R-кв.=,99838; Скор.,99757 (пряжа) 2 факторы, 1 Блоки; SS чист.ошиб.= ЗП: Y					
Фактор	SS	сс	MS	F	p
(1)X ₁ (L)	3,07346	1	3,07346	324,547	0,000056
X ₁ (Q)	16,53292	1	16,53292	1745,821	0,000002
X ₂ (Q)	30,43405	1	30,43405	3213,733	0,000001
1L на 2L	0,91202	1	0,91202	96,307	0,000604
Потеря согл.	0,03660	4	0,00915	0,966	0,512900
Чист. ошибка	0,03788	4	0,00947		
Общая SS	45,88691	12			

Рисунок 3.78

С помощью опции **График поверхности (подгонка отклика)** (вкладка **Предсказание и профили**) построим график поверхности отклика (рисунок 3.79), отражающий изменение выходного параметра Y_1 при изменении входных параметров X_1 и X_2 .

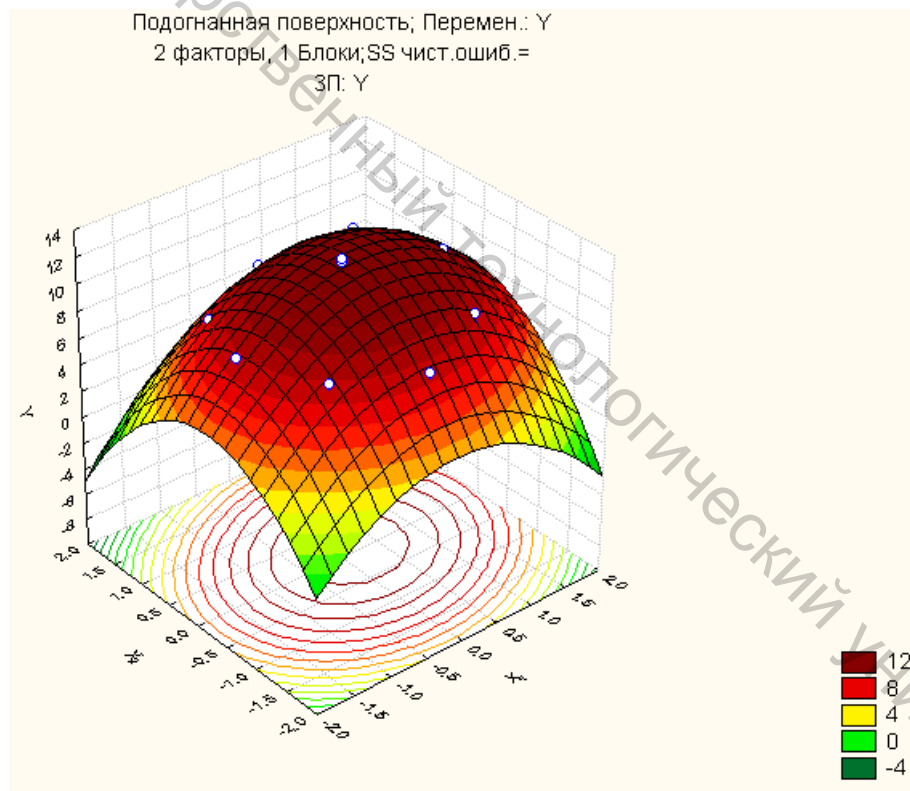


Рисунок 3.79

С помощью опции **Карта линий уровня (подгонка отклика)** (вкладка **Предсказание и профили**) построим график линий равного уровня для поверхности отклика (рисунок 3.80).

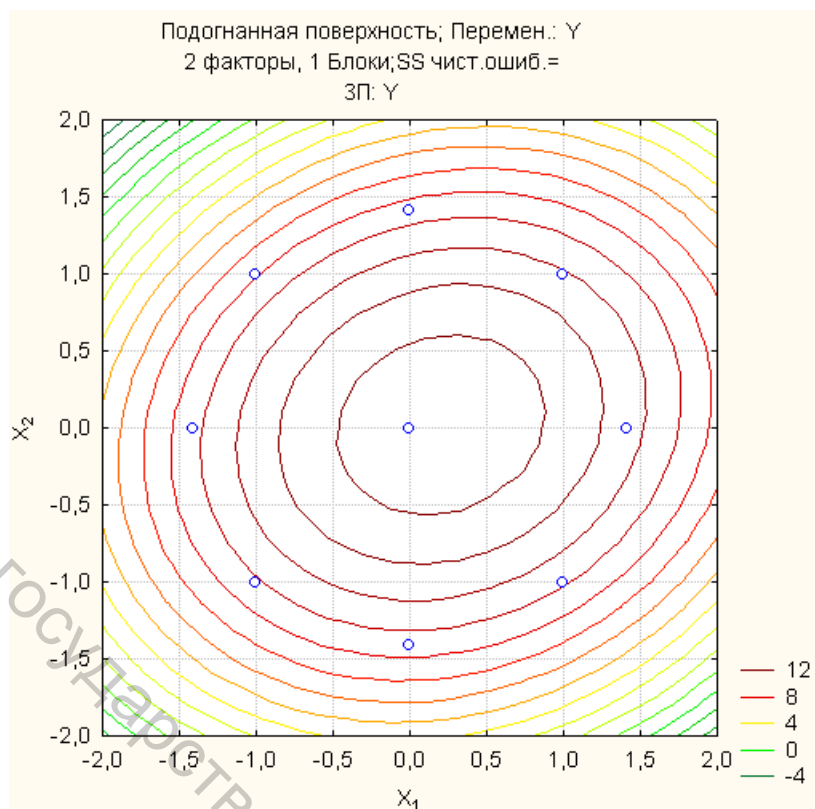


Рисунок 3.80

С помощью опции **Критические значения (мин. макс. седло.)** (вкладка **Предсказание и профили**) найдем координаты экстремума функции отклика (рисунок 3.81).

Критич.значения; Перемен.: Y (пряжа)			
Решение:			
Предск.значение при решении: 12,71578			
Фактор	Наблюд. Минимум	Крит. Знач.	Наблюд. Максимум
X_1	-1,41421	0,205184	1,414214
X_2	-1,41421	0,026823	1,414214

Рисунок 3.81

Таким образом, максимальное значение относительной разрывной нагрузки $Y=12,71$ сН/текс достигается при $X_1=0,205$ и $X_2=0,026$. С помощью формулы (3.2) можно провести преобразование кодированных значений факторов в их натуральные значения. Таким образом, максимум относительной разрывной нагрузки пряжи достигается при заправочной крутке 780 кр/м и вложении химических волокон 15 %.

3.10 Оптимальное планирование

В прикладных задачах часто бывает, что вид модели известен в результате проведения предварительных экспериментов или в результате теоретического исследования. При этом проведение опытов возмож-

но только в определенных точках факторного пространства. В результате ставится задача о разработке плана эксперимента, обеспечивающего заданные свойства (оптимальность) регрессионной модели. При разработке плана эксперимента могут накладываться ограничения на:

- количество включенных опытов, например, из соображений их себестоимости, трудоемкости и т. д.;
- допустимые комбинации уровней варьирования входных параметров.

Таким образом, задача построения плана эксперимента сводится к формированию матрицы планирования, содержащей заданное количество строк из множества допустимых комбинаций и отвечающей одному из критериев оптимальности.

При построении плана эксперимента используют критерии оптимальности, связанные с точностью оценки коэффициентов регрессионной модели (A, D, E), и критерии, связанные с точностью предсказания оценки поверхности отклика (G, Q). Оптимальность плана по одному из критериев предполагает, что для выбранной модели он имеет лучшее значение критерия оптимальности среди всех планов, содержащих такое же количество строк (опытов), взятых из общего набора точек-кандидатов.

Графически критерии, связанные с точностью оценки коэффициентов регрессии, удобно интерпретировать с помощью эллипсоида рассеяния. Например, пусть $\hat{\beta}$ – вектор оценок коэффициентов регрессионной модели, тогда эллипсоид рассеяния (рисунок 3.82) с вероятностью $1 - \alpha$ накрывает точку с истинными значениями коэффициентов.

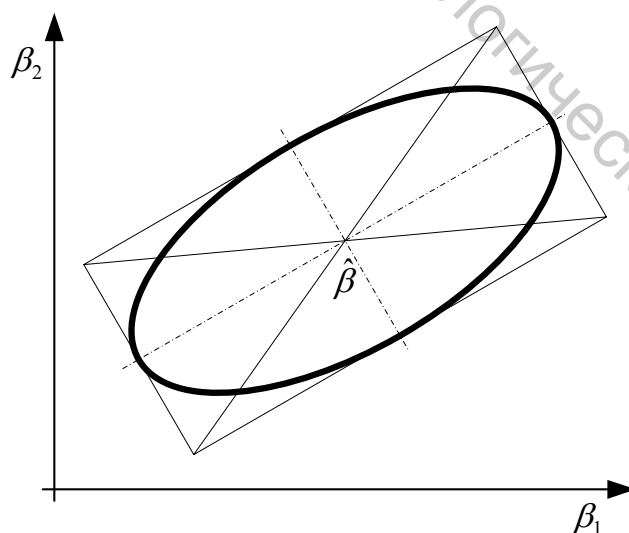


Рисунок 3.82 – Эллипсоид рассеяния для оценок коэффициентов регрессионной модели с двумя параметрами

План называется *A-оптимальным* (или *T-оптимальным*), если обеспечивает минимальную среднюю дисперсию оценок коэффициен-

тов регрессии ($\bar{S}_b^2 \rightarrow \min$). В этом случае параллелепипед, описанный около эллипсоида рассеяния (рисунок 3.82), имеет наименьшую длину диагонали.

План называется **E-оптимальным**, если обеспечивает минимальное значение для максимума из дисперсий отдельных коэффициентов ($\max S_b^2 \rightarrow \min$). Этому соответствует эллипсоид рассеяния с наименьшей максимальной осью (рисунок 3.82).

План называется **D-оптимальным**, если обеспечивает минимум обобщенной дисперсии коэффициентов регрессии ($S_b^2 \rightarrow \min$). На рисунке 3.82 это соответствует эллипсоиду с минимальной площадью.

План называется **G-оптимальным**, если обеспечивает минимум максимального значения дисперсии выходного параметра ($\max S_y^2 \rightarrow \min$). Такие планы также называют **минимаксными**.

План называется **Q-оптимальным**, если обеспечивает минимум средней дисперсии выходного параметра ($\bar{S}_y^2 \rightarrow \min$).

В общем случае трудно получить план, удовлетворяющий сразу нескольким критериям оптимальности, однако планы ПФЭ и ДФЭ для линейных моделей D-, A-, E- и G- оптимальны.

Критерием D-оптимальности плана эксперимента является минимум определителя дисперсионной матрицы $(X^T X)^{-1}$, это эквивалентно максимизации определителя информационной матрицы $X^T X$, так как:

$$|X^T X| = 1 / |(X^T X)^{-1}|.$$

Мерой D-эффективности является величина

$$D_{eff} = \frac{|X^T X|^{1/k}}{N} \cdot 100.$$

Критерий A-оптимальности плана эксперимента обеспечивается минимизацией следа (суммы диагональных элементов) дисперсионной матрицы:

$$\text{trace}((X^T X)^{-1}).$$

Мерой A-эффективности является величина:

$$A_{eff} = \frac{k}{\text{trace}(N \cdot (X^T X)^{-1})} \cdot 100.$$

Критерий G-оптимальности плана эксперимента обеспечивается минимизацией максимального диагонального элемента матрицы $f^T(x)(X^T X)^{-1}f(x)$. Мерой G-эффективности является величина:

$$G_{eff} = \sqrt{\frac{k/N}{\max\left(f^T(x)(X^T X)^{-1}f(x)\right)}} \cdot 100.$$

Наиболее распространенным в прикладных исследованиях является критерий D-оптимальности. Существует ряд прикладных алгоритмов, позволяющих из множества допустимых точек факторного пространства (точки-кандидаты) построить план эксперимента, для которого мера эффективности, функция от матрицы планирования, выбранного целевого критерия принимает оптимальное значение. Как правило, в качестве целевого выбирается критерий D- или A- оптимальности, при этом оценивается величина G- критерия.

В настоящее время широко применяются алгоритмы: *последовательного поиска, простого обмена, обмен с отклонениями, алгоритм одновременного переключения*.

Алгоритм ***последовательного поиска*** (алгоритм Дейкстры). В пустой план эксперимента последовательно добавляется заданное число точек из списка «кандидатов», каждый раз добавляется та точка, которая улучшает критерий оптимальности больше остальных. Процесс продолжается, пока удастся улучшить критерий оптимальности. Наиболее простой и быстрый алгоритм, используется другими алгоритмами для формирования начального плана.

Алгоритм ***простого обмена*** (Винна-Митчелла). Из начального плана удаляется точка, меньше всего влияющая на критерий оптимальности, а вместо нее добавляется точка, которая улучшает критерий оптимальности больше остальных точек-кандидатов.

Алгоритм ***обмен с отклонениями*** (DETMAX, алгоритм Митчелла). Усовершенствованный алгоритм *простого обмена*: если не удастся улучшить критерий оптимальности, из плана выбрасывается и добавляется более одной точки за раз, число точек может задаваться пользователем.

Алгоритм ***одновременного переключения*** (В.В. Федорова). На каждой итерации рассматриваются все возможные варианты обмена одной точки из плана и точки из списка кандидатов, замена производится для пары точек, улучшающих критерий оптимальности.

В результате работы разных алгоритмов для одинаковых исходных условий могут генерироваться различные планы эксперимента. Поэтому рекомендуется генерировать планы эксперимента различными алгоритмами и сравнивать по значению критерия оптимальности. Возможны ситуации, когда алгоритмы генерируют различные планы, но с одинаковым значением критерия оптимальности. В этом случае выбор плана эксперимента остается за *лицом, принимающим решение (ЛПР)*.

3.11 Построение D-оптимальных планов

Пакет прикладных программ Statistica позволяет генерировать оптимальные планы эксперимента и осуществлять их анализ.

Пример, необходимо составить D-оптимальный план эксперимента для определения параметров модели, описывающей относительную разрывную нагрузку хлопчатобумажной пряжи. Из предварительных опытов известно, что относительная разрывная нагрузка пряжи в заданных пределах изменения факторов может быть описана уравнением:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{12}x_1x_2, \quad (3.33)$$

где x_1 – крутка пряжи, (100-200 кр/м); x_2 – линейная плотность пряжи (25-45 текс).

Возможные комбинации уровней входных параметров приведены в таблице 3.22.

Таблица 3.22

Натуральные значения		Кодированные значения	
Крутка, кр/м	Линейная плотность, текс	x_1	x_2
100	25	-1	-1
100	35	-1	0
100	45	-1	1
125	25	-0,5	-1
125	35	-0,5	0
125	45	-0,5	1
150	25	0	-1
150	35	0	0
150	45	0	1
175	25	0,5	-1
175	35	0,5	0
175	45	0,5	1
200	25	1	-1
200	35	1	0
200	45	1	1

Исходные данные, оформленные в виде таблицы в Statistica, представлены на рисунке 3.83 а. Для построения D-оптимального плана эксперимента используется модуль *Анализ* –  *Промышленная статистика и Шесть Сигма* –  *Планирование экспериментов (ПЭ)* –  *D- и A- (T-) оптимальные планы*.

Данные: Табли...

	1 Var1	2 Var2
1	-1	-1
2	-1	0
3	-1	1
4	-0,5	-1
5	-0,5	0
6	-0,5	1
7	0	-1
8	0	0
9	0	1
10	0,5	-1
11	0,5	0
12	0,5	1
13	1	-1
14	1	0
15	1	1

а

Точки-кандидаты | Модель | Парамет

Переменные **ВСЕ**

Точки-кандидаты

Добавить N точек: N: 0

б

Выберите переменные с точками-кандидатами

1-Var1
2-Var2

OK

в

D- и A-оптимальные планы: Таблицы

Точки-кандидаты | Модель | Параметры

☒ Поверхность отклика (со св. членом)

Модель:

☐ Линейные гл. эффекты

☐ Лин./квадр. гл. эффекты

☐ Лин. гл. эффекты +2-взаим.

☒ Лин./квадр. гл. эффекты +2-взаим.

☒ Игнорировать некоторые эффекты

Игнорируемые эффекты

д

Пользовательская ошиб...

Выбор эфф. для объедин. ошибки

Эффекты

(A)Var1
A*A
(B)Var2
B*B
A*B

OK

Отмена

Выберите эффекты для объедин. ошибки. Для этих эффектов оценивание параметров не производится.

е

Список точек-кандидатов для оптимального плана.

Список точек-кандидатов для оптимального плана. Введите или измените значения; для направления точек в оконч. план введите 'I' в последнем столбце; затем нажмите OK.

план	Var1	Var2	I' для напр. в		
1	-1	-1			
2	-1	0			
3	-1	1			
4	-0,5	-1			
5	-0,5	0			
6	-0,5	1			
7	0	-1			
8	0	0			
9	0	1			
10	0,5	-1			
11	0,5	0			
12	0,5	1			
13	1	-1			
14	1	0			
15	1	1			

OK

г

Рисунок 3.83

После запуска модуля на вкладке **точки-кандидаты** (рисунок 3.83 б) с помощью опции **переменные** выбираются столбцы из таблицы исходных данных (рисунок 3.83 в), после чего с помощью опции **точки-кандидаты** можно дополнительно отредактировать список точек (рисунок 3.83 г). Если какие-то опыты должны быть в обязательном порядке включены в окончательный план (это может быть в случае, если эти опыты уже проведены), то в соответствующем столбце (рисунок 3.83 г) должна быть введена латинская буква «I».

Далее на вкладке **модель** (рисунок 3.83 д) необходимо указать вид модели для оценки коэффициентов, которой проектируется план эксперимента. Для нашего примера (3.33) выбираем модель с линейными и квадратичными эффектами и с помощью опции **игнорируемые эффекты** (рисунок 3.83 е) исключаем из модели квадратичный эффект второго фактора.

Затем на вкладке **параметры оптимизации** устанавливаем **число точек плана** (рисунок 3.84).

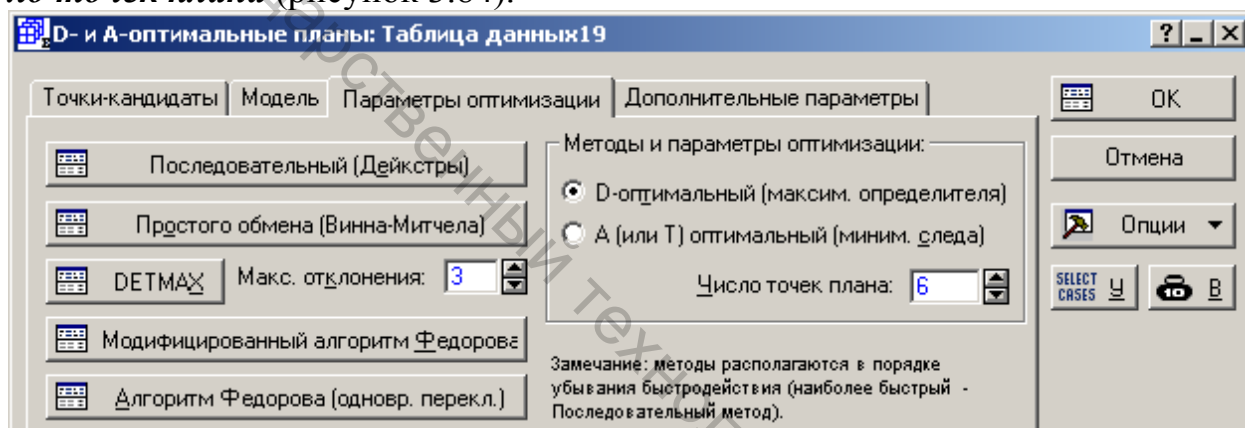


Рисунок 3.84

В левой части вкладки **параметры оптимизации** можно выбрать алгоритм, с помощью которого будет осуществлен поиск оптимального плана (для нашего примера все алгоритмы дают одинаковый результат). Далее в диалоговом окне можно увидеть характеристики сгенерированного плана (рисунок 3.85).

```
ИТОГИ ПЛАНА:
Тип плана: План для пов-ти отклика
Число факторов или компонент: 2
Число опытов: 6; выбранных из 15
Критерий: D (макс опр. м-цы, обр.к X'X)
Алгоритм: Алг. Федорова (одновр.перекл.)
Начальный план: Наилучш. план (метод Дейкстры)
Число итераций: 1
Оконч. статистики: D=768,000 (D-эффективн.=62,94%)
```

Рисунок 3.85

Опция **отобразить план** выводит на экран таблицу (рисунок 3.86), содержащую сгенерированный план эксперимента и рассчитанные значения предсказанной дисперсии (3.20) для точек плана.

N в нач списк	Предсказ Дисперс.	Var1	Var2
15	0,916667	1,00000	1,00000
13	0,916667	1,00000	-1,00000
3	0,916667	-1,00000	1,00000
1	0,916667	-1,00000	-1,00000
9	0,666667	0,00000	1,00000
7	0,666667	0,00000	-1,00000

Рисунок 3.86

С помощью опции  **2М рассеяния** можно построить диаграмму рассеяния для сгенерированного плана эксперимента (рисунок 3.87), т. е. отобразить расположение точек плана в факторном пространстве.

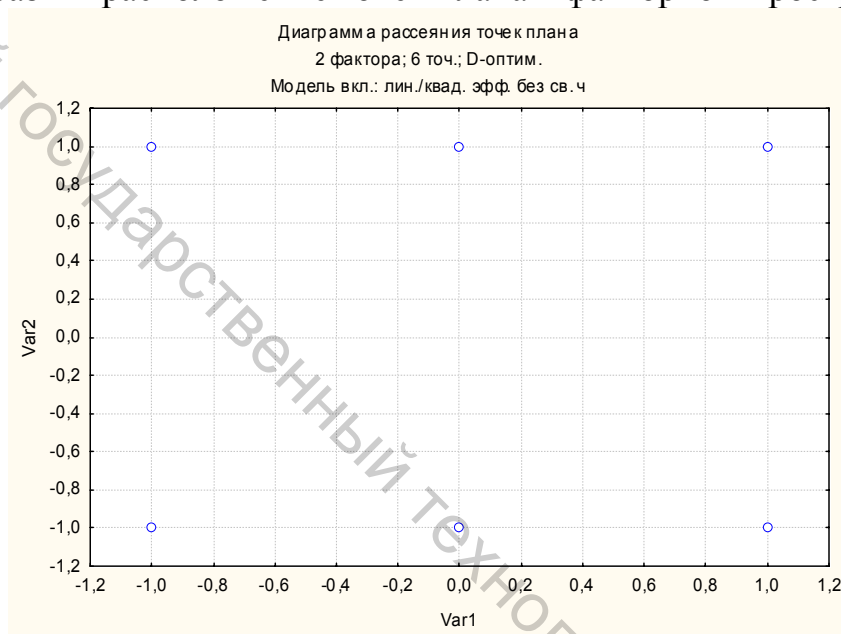


Рисунок 3.87

Опция **итоговая эффективность** выводит на экран таблицу (рисунок 3.88) со сравнительными характеристиками окончательного плана и плана, образованного точками-кандидатами.

Мера	Окон. план	Все кандид.
Число опытов	6	15
Определитель	768	14765,63
Log(e) от опред.	6,64379	9,600057
След	1,916667	,9761905
Log(e) от следа	,6505876	-,024098
D-эффективн. (%)	62,93917	45,47358
A-эффективн. (%)	43,47826	34,14634
Макс.предск.пер.	,9166667	,5952381
G-эффективн. (%)	95,34626	74,83315

Рисунок 3.88

Как видно из рисунок 3.88, D-, A- и G- эффективность сгенерированного плана из шести опытов выше, чем у плана, включающего все 15 опытов из списка точек-кандидатов.

4 Оптимизация

Оптимизация (от лат. *optimus* – наилучший) технологического процесса заключается в определении режимов работы технологического оборудования, обеспечивающих экстремальное (наибольшее или наименьшее) значение выходного параметра, характеризующего качество технологического процесса или получаемого продукта. В предыдущих главах были рассмотрены методы, позволяющие построить математическую модель технологического процесса. В этой главе будет рассмотрен процесс оптимизации технологического процесса на основе использования его математической модели.

Процесс или объект, применительно к которому формулируется задача оптимизации, называется **объектом оптимизации**. Управляемые параметры, входящие в математическую модель объекта оптимизации, оптимальные значения которых необходимо найти, называют **параметрами оптимизации**. Соотношения, устанавливающие границы изменения параметров оптимизации, называют **ограничениями**, они могут быть заданы в виде равенств или неравенств. В качестве **критерия оптимизации** выступает выходной параметр процесса, характеризующий эффективность процесса или свойства производимого продукта. Если критерием оптимизации выступает функция от параметров оптимизации, максимум или минимум которой необходимо найти, ее называют **целевой функцией**. Задачу с несколькими целевыми функциями называют **задачей многокритериальной оптимизации**.

Если целевая функция и ограничения являются линейными уравнениями или неравенствами, то оптимизационную задачу называют **задачей линейного программирования**. Если же целевая функция или ограничения представляют собой нелинейные уравнения, говорят о **задаче нелинейного программирования**. Слово *программирование* было введено лауреатом нобелевской премии Л. В. Канторовичем, который одним из первых сформулировал и решил задачу, связанную с выбором оптимальной производственной *программы*.

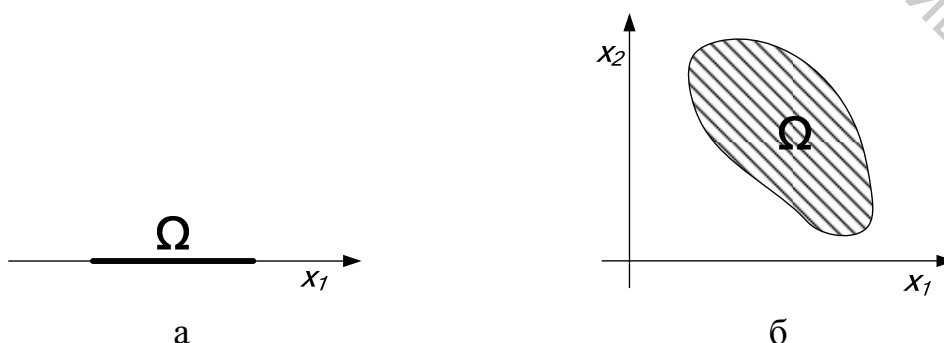


Рисунок 4.1 – Область допустимых значений а) для одного параметра оптимизации; б) для двух параметров оптимизации

В общем случае математическая запись задачи оптимизации:

$$f(x) \rightarrow \text{extr}, x \in \Omega,$$

где $f(x)$ – целевая функция, зависящая от параметров оптимизации; x – вектор параметров оптимизации $x = x_1, x_2, \dots, x_n$; Ω – область допустимых значений параметров оптимизации. Возможный вид области допустимых значений параметров оптимизации в случае одной и двух переменных представлен на рисунке 4.1.

Как правило, при оптимизации технологического процесса интерес представляет локальный экстремум, т. е. экстремум в области, ограниченной уровнями варьирования входных параметров. Существуют *необходимые* и *достаточные* условия локального экстремума функции нескольких переменных. **Необходимое условие:** если x^0 – точка экстремума функции $f(x)$ и существует производная в этой точке $f'(x^0)$, то $f'(x^0) = 0$. Для функции многих переменных все частные производные равны нулю. Точки, в которых все частные производные равны нулю, называются критическими точками, именно среди таких точек находятся точки экстремума. Точка с производной, равной нулю, но не являющейся точкой экстремума, называется **седловой точкой**. В седловой точке касательная (прямая, поверхность, гиперповерхность) к графику функции пересекает график функции.

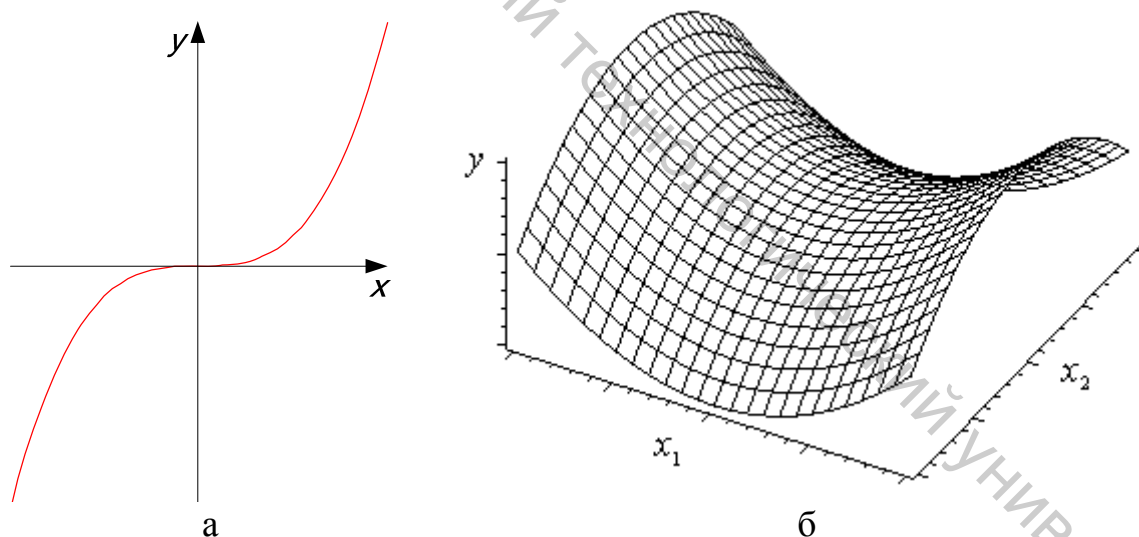


Рисунок 4.2 – Функции одной (а) и двух (б) переменных с седловой точкой

Первое достаточное условие: если при переходе через точку x^0 производная $f'(x)$ функции $f(x)$ меняет знак плюс на минус, то x^0 – точка максимума, в противном случае x^0 – точка минимума. **Второе достаточное условие:** если первая производная $f'(x)$ функции $f(x)$ обращается в ноль, а её вторая производная $f''(x)$ отлична от нуля, то в точке

x^0 функция $f(x)$ достигает экстремума (минимума, если $f''(x) > 0$, и максимума, если $f''(x) < 0$).

Двухфакторная регрессионная модель, описывающая реакцию системы на изменение входных воздействий, удобно представить графически в виде поверхности отклика рисунок 4.3.

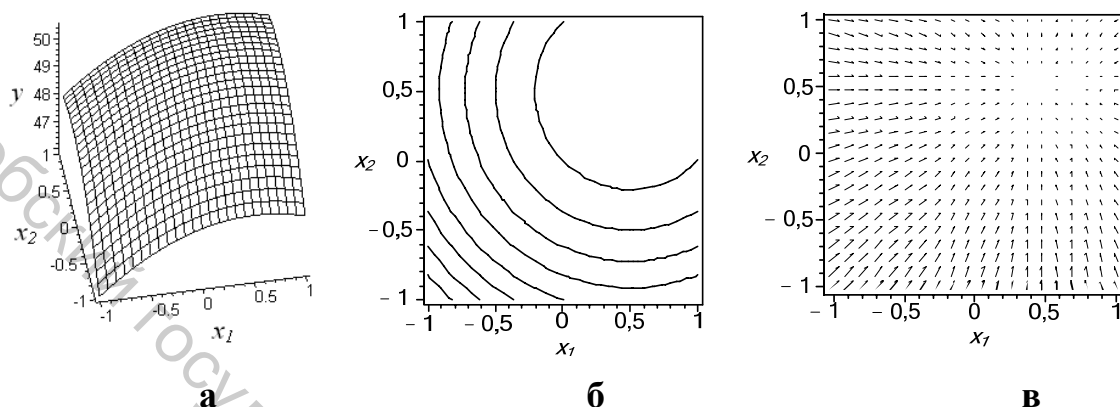


Рисунок 4.3 – Графическое представление функции отклика:

- а) поверхность отклика; б) линии равного уровня;
в) поле векторов градиента

Если модель имеет более двух входных параметров, то ее также можно исследовать графически, для этого все входные параметры, кроме двух выбранных, фиксируются на заданных уровнях.

4.1 Методы оптимизации

Методы оптимизации можно разделить по количеству оптимизируемых параметров на **методы одномерной оптимизации** и **методы оптимизации функций многих переменных**. Также методы оптимизации можно классифицировать в зависимости от информации, используемой при их реализации. **Методы нулевого порядка** используют информацию только о свойствах целевой функции. К ним относятся методы: дихотомии (половинного деления); золотого сечения; Фибоначчи; покоординатного спуска и др. **Методы первого порядка** используют информацию как о свойствах целевой функции, так и о ее первой производной. **Методы второго порядка** используют информацию о свойствах целевой функции и о ее первой и второй производной. К методам, использующим производные целевой функции, относятся методы: средней точки, Ньютона (касательных), градиентного спуска и др.

При поиске оптимума функции **методом дихотомии** (половинного деления) (рисунок 4.4) отрезок $[a, b]$, на котором необходимо найти максимум функции, разбивается на два отрезка точкой $c = (a + b)/2$, затем находят значение функции $f(x)$ в точках $(c - \delta)$ и $(c + \delta)$, где δ – определяет величину допустимой ошибки. Если $f(c - \delta) > f(c + \delta)$, то точку (a) переносят в точку $(c - \delta)$: $a = (c - \delta)$, в противном случае точку (b) переносят в точку $(c + \delta)$: $b = (c + \delta)$. После этого повторяют процедуру разбиения отрезка снова. Процесс продолжается до тех пор, пока длина отрезка $[a, b]$ не станет меньше 2δ : $(b - a) < 2\delta$. По окончании в качестве точки максимума $f_{\max}(x)$ принимается середина отрезка $[a, b]$: $x_0 = (a + b)/2$.

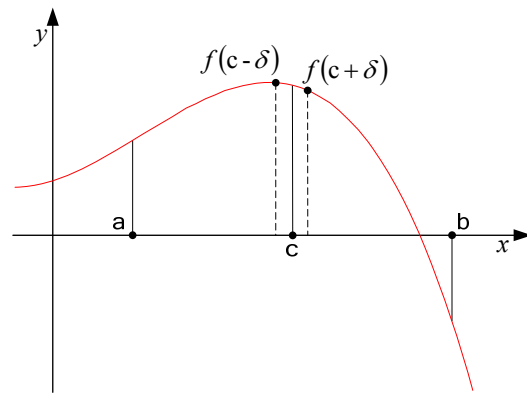


Рисунок 4.4 – Метод дихотомии

Усовершенствованием метода дихотомии является **метод Фибоначчи**. Отличие метода Фибоначчи от метода дихотомии заключается в том, что разбиение отрезка $[a, b]$ проводится не пополам, а в пропорции чисел из ряда Фибоначчи (таблица 4.1). В ряду Фибоначчи каждое число, начиная с третьего, равно сумме двух предыдущих: $F_n = F_{n-1} + F_{n-2}$

Таблица 4.1 – Ряд чисел Фибоначчи

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
F_n	1	1	2	3	5	8	13	21	34	55	89	144	233	377	610

Точка (c), разбивающая отрезок на две части, может быть найдена как: $c = a + (b - a) \cdot (F_n / F_{n+1})$.

Еще одним усовершенствованием метода дихотомии является **метод золотого сечения**. Отрезок $[a, b]$ разбивается точкой (c) на две части в пропорции золотого сечения, то есть таким образом, чтобы длина всего отрезка АВ относилась к его большей части АС так же, как большая часть АС относится к меньшей части СВ: $AB/AC = AC/CB = \varphi$. Принимая $AB = AC + CB = 1$ и решая полученное квадратное уравнение, получаем

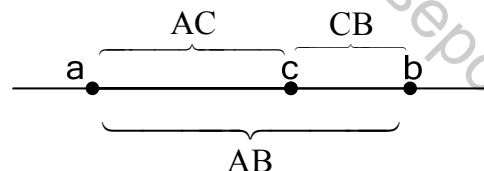


Рисунок 4.5 – Золотое сечение

$\varphi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} = 1,6180339887$. Точка, делящая отрезок АВ в пропорции золотого сечения, может быть найдена как: $c = a + (b - a)/\varphi$.

Связь между методами Фибоначчи и золотого сечения такова, что при n , стремящемся к бесконечности, отношение двух соседних чисел ряда Фибоначчи стремится к пропорции золотого сечения:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{F_n}{F_{n-1}} = \varphi.$$

Метод средней точки

также является усовершенствованием метода дихотомии и использует информацию о производной функции. Геометрический смысл (рисунок 4.6) производной функции — $tg(\alpha)$, т. е. тангенс угла наклона касательной к графику функции. После нахождения середины отрезка $c = (a + b)/2$ рассчитывают значение производной функции $f'(x)$ в точке (с). Если $f'(c) > 0$, то точку (а) переносят в точку (с): $a = c$, в противном случае точку (b) переносят в точку (с): $b = c$. Условием окончания процесса может служить равенство производной нулю $f'(c) = 0$.

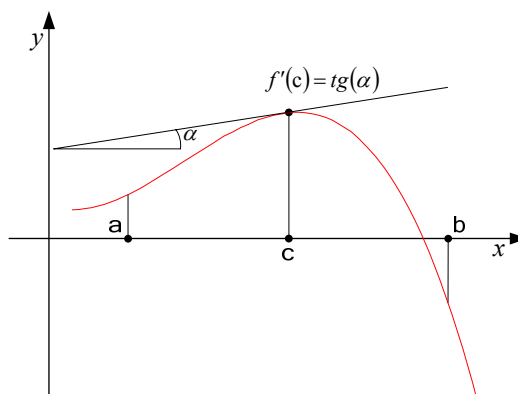


Рисунок 4.6 – Метод средней точки

Примером метода второго порядка для функции одной переменной может служить **метод Ньютона**. В нем используется информация о первой и второй производной функции. Задается начальное приближение параметра оптимизации x^0 и с помощью рекуррентной формулы вычисляется следующее x^1 приближение:

$$x^{n+1} = x^n + f'(x)/f''(x).$$

В случае квадратичной функции метод Ньютона находит экстремум за одну итерацию.

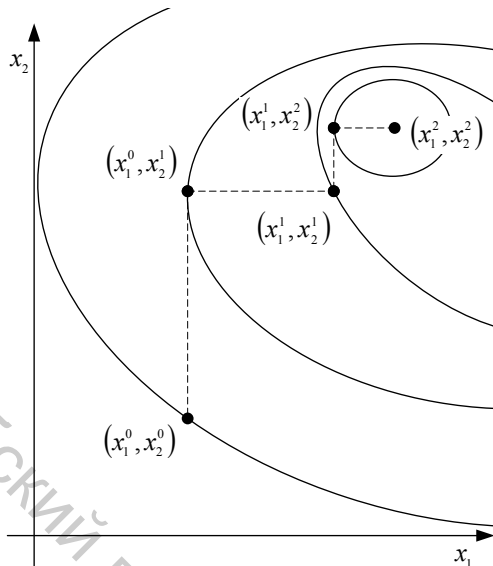


Рисунок 4.7 – Покоординатный спуск

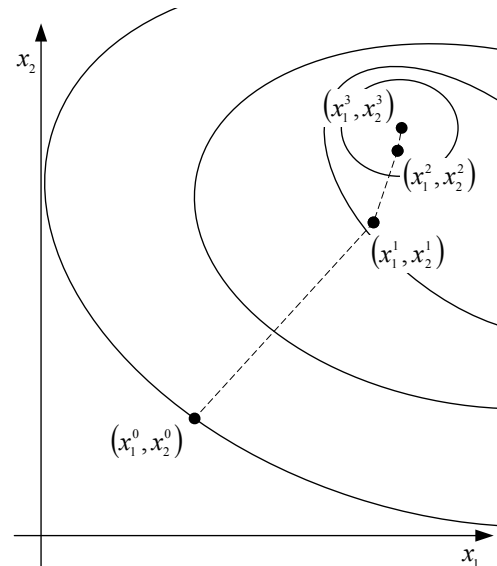


Рисунок 4.8 – Градиентный спуск

Примером метода первого порядка для оптимизации функции многих переменных может служить **метод покоординатного спуска**. Задается точка начального приближения. Все параметры оптимизации, кроме i -го, фиксируются на заданных уровнях, то есть происходит переход к задаче одномерной оптимизации $f(x_i)$. Происходит движение вдоль оси x_i с заданным шагом до тех пор, пока значение функции $f(x_i)$ возрастает, или же решается задача одномерной оптимизации любым доступным способом. После этого переходят к следующему параметру оптимизации. Процесс продолжается до тех пор, пока происходит увеличение значения целевой функции.

Метод градиентного спуска использует информацию о частных производных функции многих переменных. **Градиент** – это векторная функция, состоящая из частных производных целевой функции:

$$\text{grad } f(x_1; x_2; \dots; x_n) = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x_1}; \frac{\partial \varphi}{\partial x_2}; \dots; \frac{\partial \varphi}{\partial x_n} \right).$$

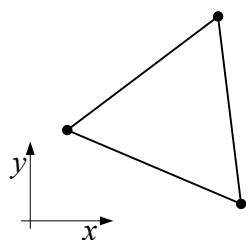
Например, для:

$$f(x_1; x_2) = 5 + 4x_1 + 2x_2 - 3x_2^2$$

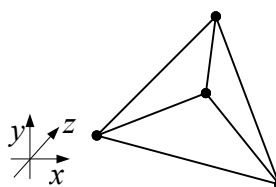
градиент:

$$\text{grad } f(x_1; x_2) = (4; 2 - 6x_2).$$

Вектор градиента показывает направление наибольшего возрастания функции. Вектор, направленный в противоположную сторону, называется **антиградиентом**. Из точки начального приближения происходит движение вдоль градиента, то есть для каждого параметра оптимизации задается приращение, пропорциональное значению частной производной.



а



б

Рисунок 4.9 – Двухмерный (а) и трехмерный (б) симплексы

Еще одним примером метода многомерной оптимизации первого порядка может служить **симплекс-метод**. Симплексом называют фигуру, являющуюся n -мерным обобщением треугольника. **Регулярным симплексом** называют фигуру, состоящую из $n + 1$ равноудаленных точек в n -мерном пространстве (отрезок, треугольник, тетраэдр и т. д.).

Задаются координатами начального симплекса с вершинами 1-2-3 (рисунок 4.10). Среди вершин симплекса определяют точку с наихудшим значением целевой функции (1) и определяют координаты точки, симметричной относительно центра противоположной грани (4), таким образом получают новый симплекс 2-3-4. Процесс построения новых симплексов продолжается до тех пор, пока не происходит заикливание около точки оптимума. Найденная область на поверхности отклика называется почти стационарной. Для уточнения решения в почти стационарной области строится новый симплекс с меньшей длиной грани, и процесс построения симплексов повторяется вновь. Симплексный метод наиболее эффективен, если поверхность отклика представляет собой гиперплоскость.

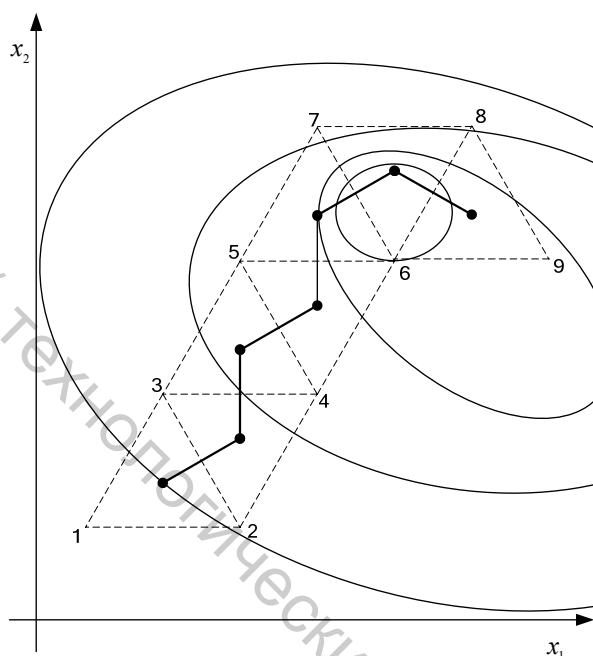


Рисунок 4.10 – Симплекс метод

В настоящее время не существует универсального метода, применимость которого была бы оправдана и эффективна во всех случаях. На практике могут использоваться алгоритмы, использующие различные методы на разных этапах поиска оптимальных параметров.

Пример 4.1

При формировании композиционного текстильного материала на бумажной основе зависимость стойкости волокнистого покрытия к ис-

тиранию (y , циклы) от количества наносимого связующего (x_1 , г/м²) и волокнистого продукта (x_2 , г/м²) описывается регрессионным уравнением:

$$y = -259.3085 + 3.0029x_1 + 0.4702x_2 - 0.0086x_1^2 - 0.00228x_1x_2,$$

где $x_1 \in [155; 195]$ и $x_2 \in [30; 130]$. Найдем в СКМ Maple значения x_1 и x_2 , при которых обеспечивается максимальная стойкость волокнистого покрытия к истиранию:

```
restart;
with(Optimization):
#функция
y:=-259.3085+3.0029*x1+.4702*x2-.0086*x1^2-.00228*x1*x2;
#максимум функции
NLPSolve(y, x1=155..195, x2=30..130,maximize);
```

$$y = -259.3085 + 3.0029 x_1 + 0.4702 x_2 - 0.0086 x_1^2 - 0.00228 x_1 x_2$$

$$[14.7576816860464676, [x_1 = 157.354651162790702, x_2 = 130.]]$$

Таким образом, для обеспечения максимальной устойчивости к истиранию композиционного текстильного материала на бумажной основе необходимо наносить количество связующего $x_1 = 157$ г/м² и количество волокнистого продукта $x_2 = 130$ г/м².

4.2 О задаче многокритериальной оптимизации

В большинстве случаев реальная задача оптимизации технологического процесса является многокритериальной, т. е. преследуется сразу несколько целей (*частных критериев*), например: снижение себестоимости продукции и улучшение физико-механических свойств. Цели в многокритериальных оптимизационных задачах могут соотноситься друг с другом различным образом:

- цели взаимно нейтральны;
- цели кооперируются друг с другом, т. е. при улучшении одного критерия происходит улучшение остальных;
- цели конкурируют, т. е. улучшение одного из критериев может быть достигнуто лишь за счет ухудшения других.

Решение задач со взаимно нейтральными или кооперирующимися целями сводится к решению нескольких отдельных задач или к задаче с одним критерием. Для оптимизационных задач с конкурирующими целями достижение экстремальных значений одновременно для каждого из критериев оптимизации невозможно, поэтому решение таких задач является компромиссным. Эти цели достигаются за счет изменения вектора входных параметров x объекта оптимизации, а целевая функция является векторной:

$$F(x) = (f_1(x), f_2(x), f_3(x) \dots f_m(x))^T,$$

где $f_i(x)$ – целевая функция i -го критерия; m – количество частных целевых функций. Оптимизационные задачи такого вида называют многокритериальными, или векторными. В общем случае математически задача многокритериальной оптимизации может быть записана как:

$$f_j(x) \rightarrow \text{extr}, \quad j = \overline{1, m},$$

$$x \in \Omega$$

где Ω – область допустимых значений параметров оптимизации x .

При смене знака целевой функции на противоположный от задачи минимизации можно перейти к задаче максимизации и наоборот, т. е. критерий вида:

$$f_j(x) \rightarrow \max, \quad x \in \Omega$$

можно заменить критерием:

$$-f_j(x) \rightarrow \min, \quad x \in \Omega$$

и наоборот. Поэтому далее для удобства изложения будем говорить о задаче максимизации.

При решении многокритериальных задач рассматривают **пространство варьируемых параметров** (или факторное пространство) $\{X\}$, которое включает множество допустимых значений вектора варьируемых параметров Ω . Также рассматривают **пространство критериев** (пространство выходных параметров) $\{\Phi\}$. С помощью векторной целевой функции $F(x)$ происходит отображение множества допустимых значений вектора варьируемых параметров $\Omega \subset \{X\}$ в множество $G \subset \{\Phi\}$ (рисунок 4.11).

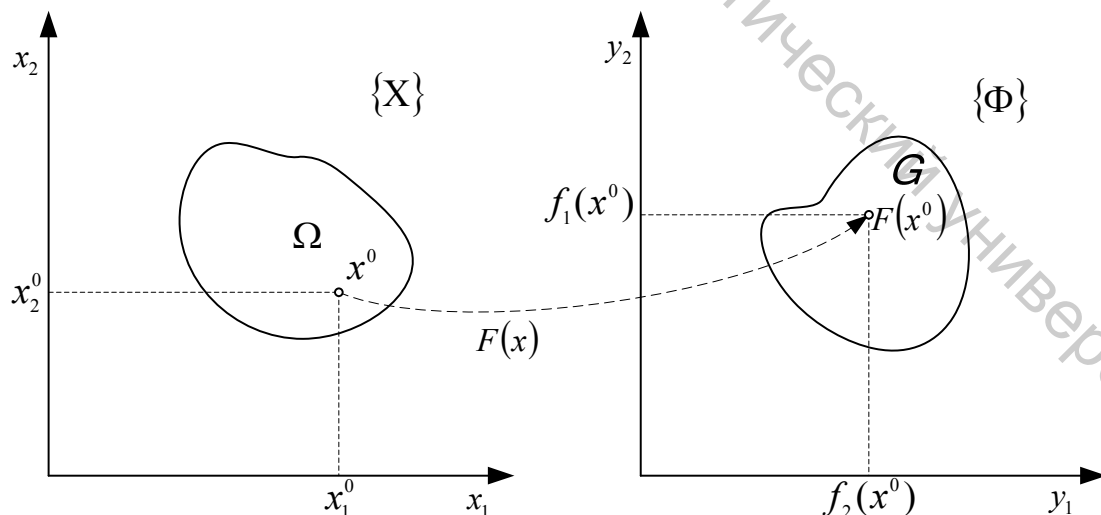


Рисунок 4.11

На рисунке 4.11 представлено отображение множества допустимых значений вектора варьируемых параметров Ω в множество G с помощью векторной целевой функции $F(x)$. На рисунке 4.11 размерность

пространства варьируемых параметров $\{X\}$ $n = 2$ и размерность пространства критериев $\{\Phi\}$ $m = 2$.

Задачу многокритериальной оптимизации связывают с именем итальянского ученого Вильфредо Парето (Vilfredo Pareto), автора эмпирического **закона Парето 20/80**: «20 % усилий дают 80 % результата, а остальные 80 % усилий - лишь 20 % результата».

Оптимизация по Парето. Множество решений оптимизационной задачи, для которых невозможно улучшить значение одного из критериев, не ухудшая значений других критериев, называется **множеством Парето**. На рисунке 4.12 множество G определяет допустимые решения оптимизационной задачи для критериев оптимизации y_1 и y_2 . Критерий оптимизации y_1 достигает наибольшего значения в точке **В**. Критерий оптимизации y_2 достигает наибольшего значения в точке **А**. В точке **Д** оба критерия имели бы значения, равные максимальным, но она не принадлежит области допустимых значений. Для произвольной точки **С** решение оптимизационной задачи может быть улучшено и по критерию y_1 (точка C_1), и по критерию y_2 (точка C_2), и по обоим критериям одновременно (кривая $C_1 C_2$). Решения, определяемые кривой **А В**, не могут быть улучшены по двум критериям одновременно. Таким образом, на рисунке 4.12 множество Парето определяется кривой **А В**, т. е. северо-восточной границей множества G .

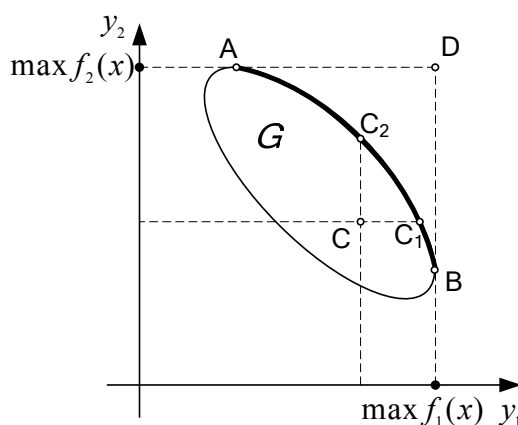


Рисунок 4.12 – Плоскость критериев оптимизации и область Парето

На множестве допустимых значений вектора варьируемых параметров Ω определено **отношение предпочтения** ($\succ$). Вектор x^* предпочтительнее вектора x^{**} ($x^* \succ x^{**}$), если при выполнении неравенств:

$$f_j(x^*) \geq f_j(x^{**}), \quad j = 1..m$$

хотя бы одно является строгим: $f_j(x^*) > f_j(x^{**})$. На множестве G определено **отношение доминирования** ($\triangleright$), говорят, что вектор $F(x^*)$ доминирует над вектором $F(x^{**})$ ($F(x^*) \triangleright F(x^{**})$), если x^* предпочтительнее x^{**} . При этом, если $x^* \succ x^{**}$ и $x^{**} \succ x^{***}$, то $x^* \succ x^{***}$. Аналогично, если $F(x^*) \triangleright F(x^{**})$ и $F(x^{**}) \triangleright F(x^{***})$, то $F(x^*) \triangleright F(x^{***})$.

Решение задачи многокритериальной оптимизации находится среди множества Парето. Для определения единственного компромиссного решения необходима дополнительная информация, которую «лицо, принимающее решение» должно сформулировать в виде **принципа компромисса**, определяющего, в каком смысле оптимальное решение лучше остальных. Число возможных принципов компромисса очень велико. На сегодня не существует универсального метода решения многокритериальных задач, поэтому выбор метода многокритериальной оптимизации ложится на специалиста в прикладной области и осуществляется на основе анализа поставленной задачи.

4.2.1 Методы решения многокритериальных оптимизационных задач

Для получения дополнительной информации, призванной помочь при выборе решения многокритериальных оптимизационных задач, **критерии оптимизации ранжируют**, т. е. упорядочивают по их значимости, при этом номер (ранг) критерия определяет его предпочтение перед другими.

Если задача формулируется как нахождение такого решения, которое являлось бы компромиссом, учитывающим все критерии оптимизации, используют **метод уступок**. Метод заключается в следующем. После ранжирования критериев находят экстремум j -го (наиболее важного) критерия оптимизации:

$$\rho_j = \max_{x \in \Omega} f_j(x),$$

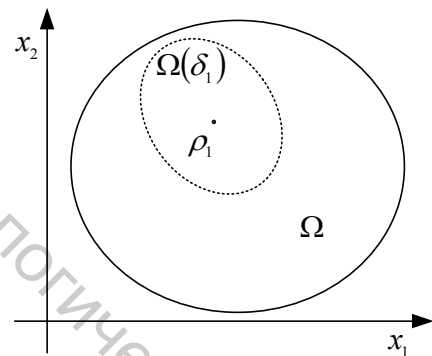


Рисунок 4.13

после чего для него устанавливается величина допустимой уступки δ_j , что определяет подмножество $\Omega(\delta_j)$ (рисунок 4.13) в множестве Ω допустимых значений параметров оптимизации:

$$\Omega(\delta_j) = \{x \in \Omega : f_j(x) > \rho_j - \delta_j\}.$$

Эту процедуру повторяют для $m-1$ критерия. Если пересечение полученных множеств ω не является пустым (рисунок 4.14):

$$\omega = \bigcap_{j=1}^{m-1} \Omega(\delta_j) \neq \emptyset,$$

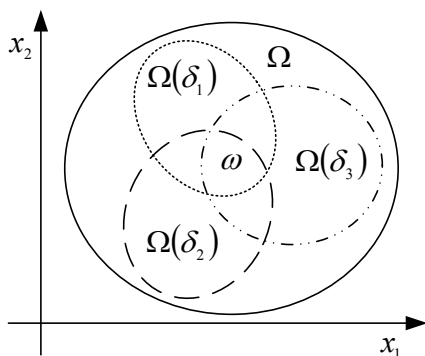


Рисунок 4.14

то задача сводится к решению одномерной оптимизационной задачи:

$$f_m(x) \rightarrow \max_{x \in \omega}.$$

Если множество ω оказывается пустым, производится корректировка величин уступок δ_j . Таким образом, метод уступок заключается в ранжировании критериев оптимизации и определении величины допустимой уступки по каждому из них с последующей коррекцией. На каждом из этих этапов требуется привлечение экспертов, что усложняет процедуру принятия решения.

Если для критериев заранее известны величины допустимой уступки, то может использоваться **метод главного критерия**. Он заключается в том, что все целевые функции, кроме главной, наиболее важной по экспертной оценке, переводятся в разряд ограничений. Т. е. их значения должны быть не меньше (или не больше) заданного значения, определенного экспертом. После этого решается задача однокритериальной оптимизации.

Если (рисунок 4.15) в оптимизационной задаче с двумя критериями (y_1, y_2) в качестве главного критерия будет принят y_1 :

$$f_1(x) \rightarrow \max_{x \in G} \text{ при } f_2(x) \geq y_{2к},$$

то решением оптимизационной задачи будет точка C_1 . Если в качестве главного критерия будет принят y_2 :

$$f_2(x) \rightarrow \max_{x \in G} \text{ при } f_1(x) \geq y_{1к},$$

то решением оптимизационной задачи будет точка C_2 . Часто в технологиче-

ских задачах в роли главного критерия выступает экономический эффект.

Ряд методов многокритериальной оптимизации основан на понятии **обобщенного критерия**, т. е. на синтезе нового критерия оптимизации:

$$F(x) = \Phi[f_1(x), f_1(x), \dots, f_m(x)],$$

зависящего от исходных целевых функций. Таким образом, решение многокритериальной оптимизационной задачи сводится к решению однокритериальной задачи:

$$F(x) \rightarrow \text{extr}_{x \in \Omega}.$$

Так как часто критерии измеряются в различных единицах, то это делает их сравнение бессмысленным. Поэтому критерии нормализуют, т. е. приводят к безразмерному виду:

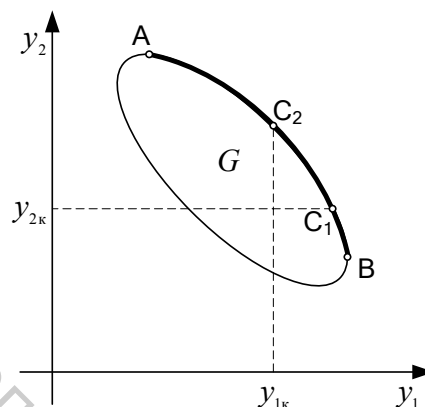


Рисунок 4.15

$$\overset{\circ}{f}_j(x) = \frac{f_j(x) - \min_{x \in \Omega} f_j(x)}{\max_{x \in \Omega} f_j(x) - \min_{x \in \Omega} f_j(x)}, \quad (4.1)$$

где $\min_{x \in \Omega} f_j(x)$ – минимально возможное значение целевой функции;
 $\max_{x \in \Omega} f_j(x)$ – максимально возможное значение целевой функции.

Обобщенный критерий может быть составлен с помощью **метода справедливого компромисса**, когда обобщенный критерий представляет собой произведение, при котором относительный уровень снижения одного или нескольких частных критериев может быть компенсирован повышением остальных критериев. Если все частные критерии необходимо максимизировать (или минимизировать), то обобщенный критерий представляет собой произведение частных критериев:

$$F(x) = \prod_{j=1}^m \overset{\circ}{f}_j(x).$$

Линейная свертка критериев (метод Ю.Б. Гермейера) заключается в формировании целевой функции:

$$F(x) = \sum_{j=1}^m \alpha_j \cdot \overset{\circ}{f}_j(x),$$

где $\overset{\circ}{f}_j(x)$ – нормированная функция значений критерия оптимизации (4.1); α_i – **весовые коэффициенты**, или **коэффициенты важности** критериев, для которых:

$$\sum_{j=1}^m \alpha_j = 1, \text{ где } 0 \leq \alpha_j \leq 1.$$

Значения коэффициентов α_i могут быть определены с помощью экспертных оценок (см. пп. 4.3).

Метод **приближения к идеальному решению** заключается в выборе точки, расположенной ближе остальных к так называемой **идеальной точке** ξ , или **точке утопии**. Идеальная точка:

$$\xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m\} \text{ где } \xi_j = \underset{x \in \Omega}{extr} f_j(x),$$

как правило, такой точки нет среди множества рассматриваемых альтернатив, в противном случае именно она будет решением оптимизационной задачи.

На рисунке 4.16 приведен пример для случая двух критериев ($m=2$). Расстояние от i -й до идеальной точки определяется как:

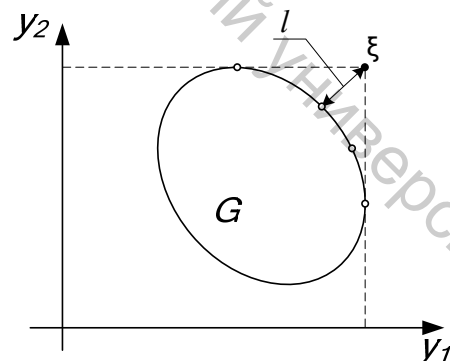


Рисунок 4.16

$$l_i = \sqrt{\sum_{j=1}^m \left(1 - \overset{\circ}{f}_j(x_i)\right)^2},$$

где m – количество критериев оптимизации; $\overset{\circ}{f}_j(x)$ – нормированная функция значений критерия оптимизации (4.1). После нахождения расстояний l_i между идеальной точкой и каждой рассматриваемой в качестве оптимальным решением будет точка с минимальным значением l_i .

Комплексный критерий может представлять собой дробь, числитель которой представляет собой произведение целевых функций, которые нужно максимизировать, а знаменатель – произведение целевых функций, которые нужно минимизировать. Для хлопчатобумажной пряжи [8, с. 276] таким критерием может служить комплексный показатель качества:

$$\Pi = \frac{P}{T \cdot C_{VP}},$$

где P – разрывная нагрузка нити, сН; C_{VP} – коэффициент вариации по разрывной нагрузке, %; T – линейная плотность нити, текс.

4.2.2 Пример решения многокритериальной оптимизационной задачи

Необходимо найти оптимальные значения первичной (x_1 , кр/м) и вторичной (x_2 , кр/м) крутки комбинированных электропроводящих нитей (КЭПН), используемых для выработки тканей специального назначения. По результатам проведенных экспериментов (таблица 4.2) определены регрессионные модели для физико-механических свойств КЭПН.

Таблица 4.2

Наименование фактора	Кодовое обозначение	Уровни варьирования			Интервал варьирования, Δ
		-1	0	+1	
Первичная крутка, кр/м	x_1	390	480	570	90
Вторичная крутка, кр/м	x_2	480	525	570	45

Регрессионные модели имеют вид:

- для абсолютной разрывной нагрузки (сН):

$$Y_1 = 1540.44 - 89x_1 - 87.41x_2 + 53.75x_1x_2 + 50.83x_1^2 + 125.58x_2^2,$$

- для жесткости нити при растяжении (сН/мм):

$$Y_2 = 15.13 - 1.65x_1 - 0.96x_2 + 1.69x_2^2,$$
- для работы разрыва нити (Дж/мм):

$$Y_3 = 2.2 - 0.383x_1 - 0.25x_2 + 0.383x_2^2,$$
- для коэффициента вариации по разрывной нагрузке (%):

$$Y_4 = 5.1 + 0.283x_2 + 0.4x_1x_2 - 1.35x_2^2,$$
- для коэффициент вариации по разрывному удлинению(%):

$$Y_5 = 10.46 - 0.875x_1x_2 - 2.15x_1^2 - 1.65x_2^2.$$

При решении многокритериальной оптимизационной задачи **методом главного критерия** лицом, принимающим решение (ЛПР), в качестве главного критерия была выбрана работа при разрыве нити (Y_3), а на остальные критерии были установлены ограничения:

$$\begin{cases} Y_1 \geq 1700 \text{ сН}, \\ Y_2 \leq 19 \text{ сН/мм}, \\ Y_4 \leq 4 \%, \\ Y_5 \leq 12 \%. \end{cases}$$

Рассмотрим решение оптимизационной задачи в СКМ Maple. Запись регрессионных уравнений имеет вид:

```
restart;
with (plots) :
#абсолютная разрывная нагрузка
Y1:=1540.44-89*x1-
87.41*x2+53.75*x1*x2+50.83*x1^2+125.58*x2^2;
#жесткость нити при растяжении
Y2:=15.13-1.65*x1-0.96*x2+1.69*x2^2;
#работа разрыва нити
Y3:=2.2-0.383*x1-0.25*x2+0.383*x2^2;
#коэффициент вариации по разрывной нагрузке
Y4:=5.1+0.283*x2+0.4*x1*x2-1.35*x2^2;
#коэффициент вариации по разрывному удлинению
Y5:=10.46-0.875*x1*x2-2.15*x1^2-1.65*x2^2;
```

$$Y1 := 1540.44 - 89 x1 - 87.41 x2 + 53.75 x1 x2 + 50.83 x1^2 + 125.58 x2^2$$

$$Y2 := 15.13 - 1.65 x1 - 0.96 x2 + 1.69 x2^2$$

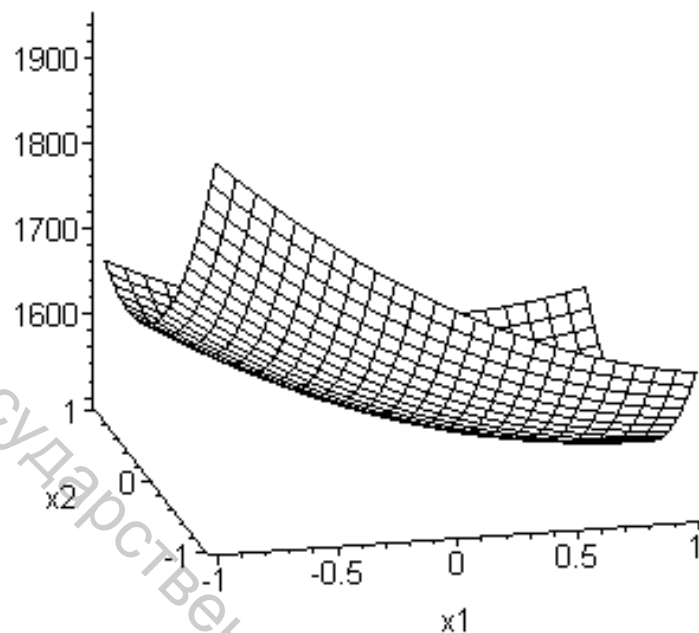
$$Y3 := 2.2 - 0.383 x1 - 0.25 x2 + 0.383 x2^2$$

$$Y4 := 5.1 + 0.283 x2 + 0.4 x1 x2 - 1.35 x2^2$$

$$Y5 := 10.46 - 0.875 x1 x2 - 2.15 x1^2 - 1.65 x2^2$$

Чтобы построить трехмерный график поверхности отклика для абсолютной разрывной нагрузки, запишем команду:

```
plot3d(Y1,x1=-1..1, x2=-1..1, axes=frame,
color=black, style=hidden);
```



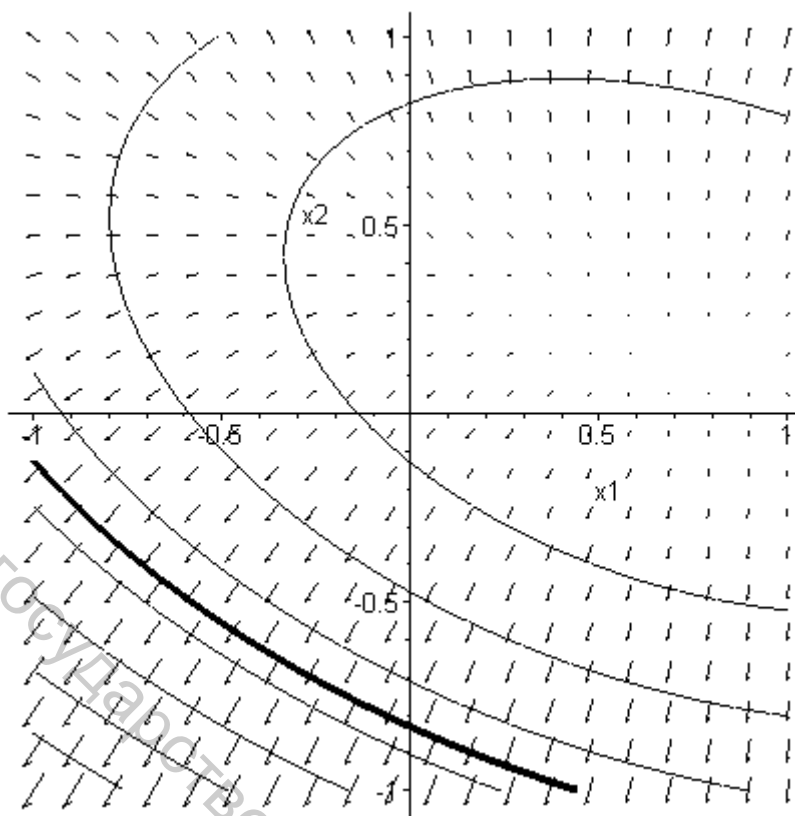
Заменяя в приведенной команде Y_1 на Y_2 , Y_3 , Y_4 , Y_5 , можно построить поверхности отклика для остальных критериев оптимизации.

Чтобы отобразить совмещенный график:

- линий равного уровня поверхности отклика;
- поле векторов градиента (векторов, показывающих направление возрастания функции отклика);
- линию равного уровня, соответствующую ограничению на критерий оптимизации (для Y_1 – линия уровня, равного 1700 сН);

введем команду:

```
G1:=contourplot(Y1,x1=-1..1,x2=-1..1, color=black,
thickness=1, contours=7):
G2:=implicitplot(Y1=1700,x1=-1..1,x2=-1..1,
color=black,
thickness=4):
G3:=gradplot(Y1,x1=-1..1,x2=-1..1):
display(G1,G2,G3);
```



Заменяя в приведенной команде $Y1$ на $Y2, Y3, Y4, Y5$ и изменив ограничение на выбранный критерий оптимизации (1700, 19, 4, 12), можно построить аналогичные совмещенные графики для остальных критериев оптимизации.

Численное решение оптимизационной задачи *методом главного критерия* имеет вид:

```
restart;
with(plots):
with(Optimization):
#абсолютная разрывная нагрузка
Y1:=1540.44-89*x1-
87.41*x2+53.75*x1*x2+50.83*x1^2+125.58*x2^2;
#жесткость нити при растяжении
Y2:=15.13-1.65*x1-0.96*x2+1.69*x2^2;
#работа разрыва нити
Y3:=2.2-0.383*x1-0.25*x2+0.383*x2^2;
#коэффициент вариации по разрывной нагрузке
Y4:=5.1+0.283*x2+0.4*x1*x2-1.35*x2^2;
#коэффициент вариации по разрывному удлинению
Y5:=10.46-0.875*x1*x2-2.15*x1^2-1.65*x2^2;
#поиск максимума целевой функции
NLPSolve(
#критерий оптимизации
```

```

Y3,
#ограничения на целевые функции
{Y1>=1700, Y2<=19, Y4<=4, Y5<=12},
#границы варьирования факторов
x1=-1..1, x2=-1..1,
maximize);
assign(%[2]);
#значения критериев оптимизации в точке оптимума
Y1:=Y1;
Y2:=Y2;
Y3:=Y3;
Y4:=Y4;
Y5:=Y5;
#натуральные значения факторов в точке оптимума
x1:=480+x1*90;
x2:=525+x2*45;

```

```
[3.116187878787895, [x1 = -0.739393939393939602, x2 = -1.]]
```

```
Y1 = 1886.767419
```

```
Y2 = 19.000000000
```

```
Y3 = 3.116187879
```

```
Y4 = 3.762757576
```

```
Y5 = 6.987617998
```

```
x1 = 413.4545454
```

```
x2 = 480.
```

Таким образом, оптимальные значения для первичной и вторичной крутки КЭПН, найденные методом главного критерия, соответственно $x_1=413$ кр/м и $x_2=480$ кр/м.

4.2.3 Решение многокритериальной оптимизационной задачи с использованием функции желательности

Использование обобщенной функции желательности (англ. *desirability function*) – один из наиболее распространенных на сегодня методов многокритериальной оптимизации, используемых для поиска оптимальных параметров технологических процессов. Суть метода заключается в том, что значения частных критериев оптимизации приводятся к нормированному безразмерному виду таким образом, что наиболее «желательному» значению критерия соответствует 1, «нежелательному» соответствует 0. Это позволяет совместно рассматривать критерии оптимизации. На основе нормализованных частных критериев с помощью обобщенной функции желательности формируется новый скалярный

критерий оптимизации, учитывающий желательности всех частных критериев.

Приведение частного критерия оптимизации к безразмерному виду производится с помощью **частной функции желательности**. Частная функция желательности, обеспечивающая уменьшение желательности при движении только в одну сторону, называется **односторонней**. Если при *увеличении* значения частного критерия происходит *уменьшение* его желательности, то частная функция желательности называется **ограниченной сверху**. Если при *уменьшении* значения частного критерия происходит *уменьшение* его желательности, то частная функция желательности называется **ограниченной снизу**. Если отклонение значения частного критерия от наиболее желательной величины как в большую, так и в меньшую сторону приводит к уменьшению желательности, то частную функцию желательности называют **двусторонней**.

Использование обобщенной функции желательности можно проиллюстрировать на оптимизационной задаче с одним входным параметром (фактором) x и тремя выходными параметрами (критериями): y_1 , y_2 , y_3 . На рисунке 4.17 графически показана связь между параметром оптимизации x , частным критерием оптимизации y_1 и частной функцией желательности d_1 . В приведенном примере чем больше значение критерия y_1 , тем более желательным оно является, т. е. частная функция желательности является ограниченной снизу.

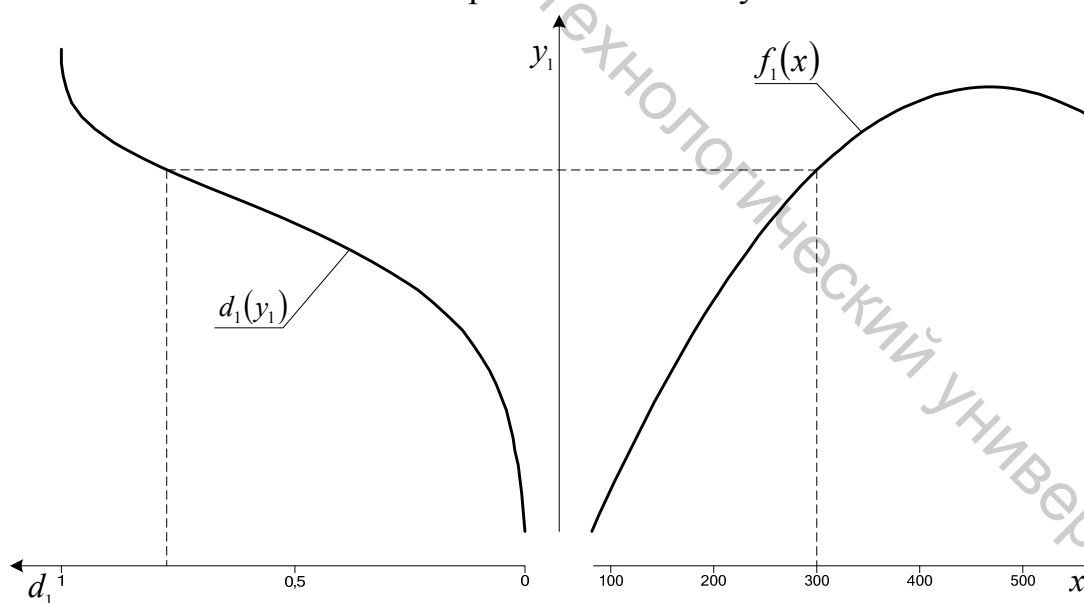


Рисунок 4.17

На рисунке 4.18 приведен пример частной функции желательности d_2 , ограниченной сверху, т. е. чем меньше значение y_2 , тем оно более желательно.

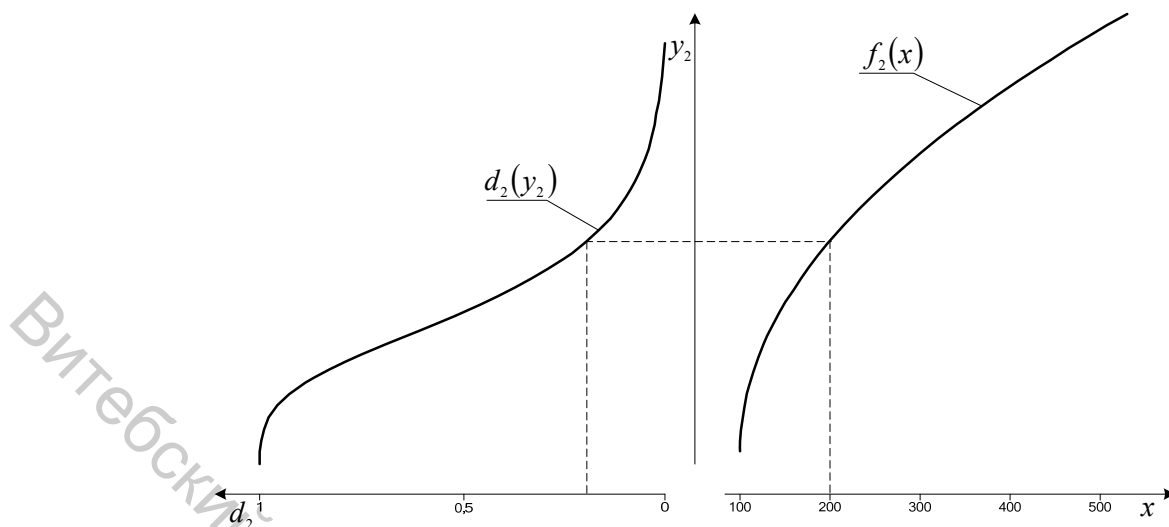


Рисунок 4.18

На рисунке 4.19 приведен пример двусторонней функции желательности d_3 , то есть отклонения как в большую, так и в меньшую сторону от наиболее приемлемого значения являются нежелательными.

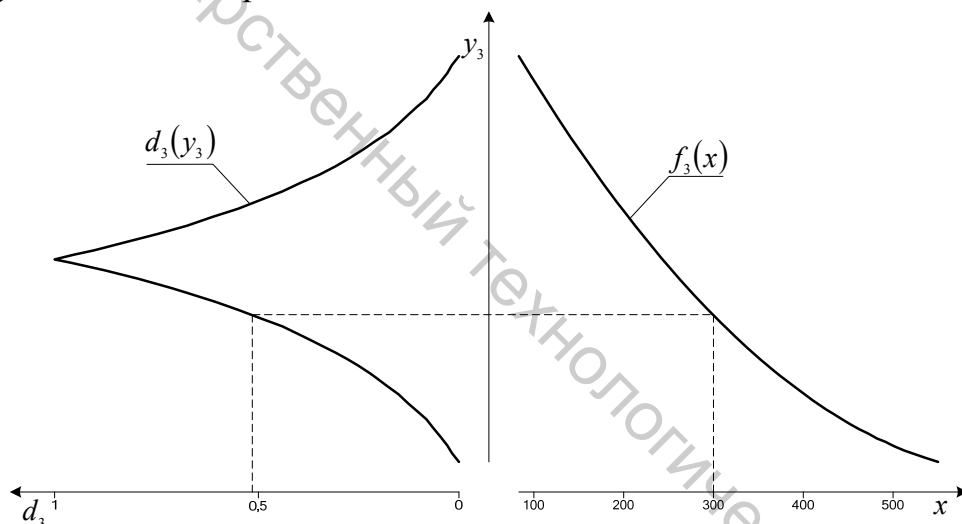


Рисунок 4.19

После определения частных функций желательности на их основе формируют обобщенную функцию желательности (англ. **Desirability Index, DI**) D , учитывающую желательности каждого критерия оптимизации (рисунок 4.20). Таким образом, производится переход от многокритериальной к однокритериальной оптимизационной задаче.

Обобщенная функция желательности может быть образована различными способами, например:

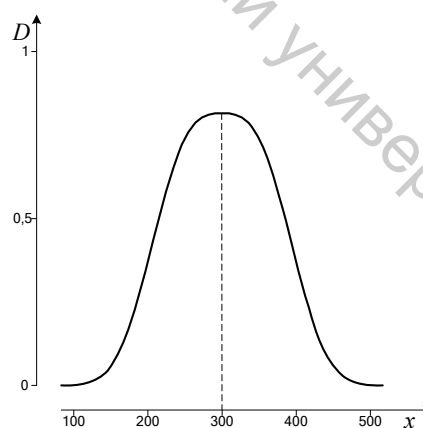


Рисунок 4.20

$$D = \prod_{i=1}^m d_i, \quad D_{\max} = \max_{i=1 \dots m} d_i, \quad D = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m d_i.$$

Наиболее распространенный тип обобщенной функции желательности представляет собой среднее геометрическое желательностей частных критериев оптимизации:

$$D = \sqrt[m]{\prod_{i=1}^m d_i}.$$

Такой способ формирования обеспечивает равенство обобщенного критерия $D=1$ только в случае, когда все частные желательности равны единице ($d_1 = d_2 = \dots = d_m = 1$), и обеспечивает равенство $D=0$, если хотя бы одна из частных желательностей равна нулю $d_i=0$. Если необходимо учитывать значимость отдельных критериев оптимизации, может быть использована функция:

$$D = \left(d_1^{\delta_1} \cdot d_2^{\delta_2} \cdot \dots \cdot d_m^{\delta_m} \right)^{\frac{1}{\sum_{i=1}^m \delta_i}} = \sqrt[m]{\prod_{i=1}^m d_i^{\delta_i}},$$

где δ_i – весовые коэффициенты отдельных критериев оптимизации (см. пп. 4.3).

Для нормирования частных критериев оптимизации наибольшее распространение получили функция желательности Харрингтона (Harrington E.C. 1965) [11 с. 203; 14 с. 24, 212] и функция желательности Дэрринжера (George Derringer 1980).

Для определения желательностей частных критериев оптимизации с помощью **односторонней функции желательности Харрингтона** для каждого критерия устанавливается соответствие его натурального значения и его желательности. В таблице 4.3. приведен пример установления соответствия между натуральными значениями физико-механических свойств пряжи и их желательностью.

Таблица 4.3 – Базовые отметки шкалы желательности

Желательность	Отметки на шкале желательности	Разрывная нагрузка пряжи, сН	Коэффициент вариации по линейной плотности, %
Очень хорошо	1,00 – 0,80	540 – 480	0 – 5
Хорошо	0,80 – 0,63	480 – 450	5 – 6
Удовлетворительно	0,63 – 0,37	450 – 410	6 – 8
Плохо	0,37 – 0,20	410 – 300	8 – 11
Очень плохо	0,20 – 0,00	300 – 0	11 – 15

Если функция желательности используется для ранжирования решений многокритериальной оптимизационной задачи, при которых каждый из критериев оптимизации имеет как минимум удовлетвори-

тельное значение, то обходятся отметками: *удовлетворительно, хорошо, очень хорошо*.

Графически процесс преобразования натуральных значений критериев в нормированные представлен на рисунке 4.21. Так, например, разрывной нагрузке пряжи 450 сН соответствует желательность 0.63, а коэффициенту вариации по линейной плотности 5 % соответствует желательность 0,8.

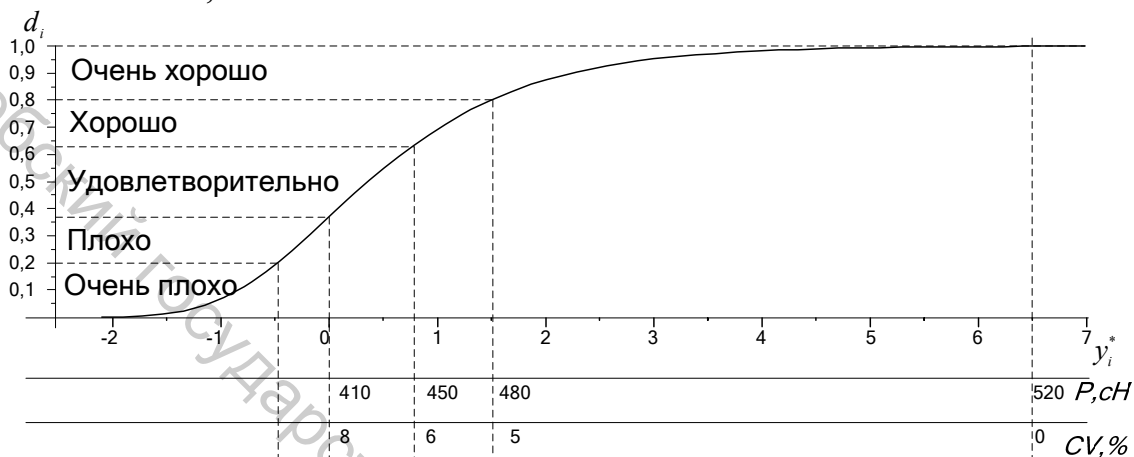


Рисунок 4.21

При этом каждый критерий оптимизации должен быть сначала приведен к безразмерному виду:

$$y_i^* = a_{0i} + a_{1i}y_i,$$

после чего он приводится к нормированной величине $[0;1]$ с помощью односторонней частной функции желательности Харрингтона:

$$d_i = \exp(-\exp(-y_i^*)) = \exp(-\exp(-(a_{0i} + a_{1i}y_i))). \quad (4.2)$$

Коэффициенты a_0 и a_1 определяются из решения системы уравнений:

$$\begin{cases} \ln|\ln(d_{1i})| = -(a_{0i} + a_{1i}y_{1i}) \\ \ln|\ln(d_{2i})| = -(a_{0i} + a_{1i}y_{2i}) \end{cases} \quad (4.3)$$

где d_{1i} и d_{2i} – соседние отметки на шкале желательности, например, $d_{1i}=0,8$ и $d_{2i}=0,63$; y_{1i} и y_{2i} – натуральные значения критерия оптимизации, соответствующие отметкам на шкале желательности, например, $y_{1i}=480$ и $y_{2i}=450$ (таблица 4.3). Решая систему (4.3) с приведенными данными, рассчитаем оценки коэффициентов $a_{0i}=-10,145$ и $a_{1i}=0,0242$. Таким образом, подставив в (4.2) рассчитанные оценки коэффициентов, можем рассчитать значение желательности d_i критерия y_i . Так, например, для $a_{0i}=-10,145$, $a_{1i}=0,0242$ и $y_i=465$ значение желательности $d_i=0,725$.

Двусторонняя функция желательности Харрингтона используется, если для критерия нежелательны отклонения как в меньшую, так и в большую сторону. Функция имеет вид:

$$d_i = \exp\left(-|y_i^*|^{n_i}\right), \quad (4.4)$$

где y_i^* – критерий оптимизации, приведенный к безразмерному виду с помощью выражения:

$$y_i^* = \frac{2y_i - (Y_i^{\max} + Y_i^{\min})}{Y_i^{\max} - Y_i^{\min}}; \quad (4.5)$$

n_i – параметр, задающий кривизну функции желательности. Задавая значение d_i ($0,4 < d_i < 0,9$), можно вычислить величину n_i , используя выражение:

$$n_i = \frac{\ln|\ln(1/d_i)|}{\ln|y_i^*|}. \quad (4.6)$$

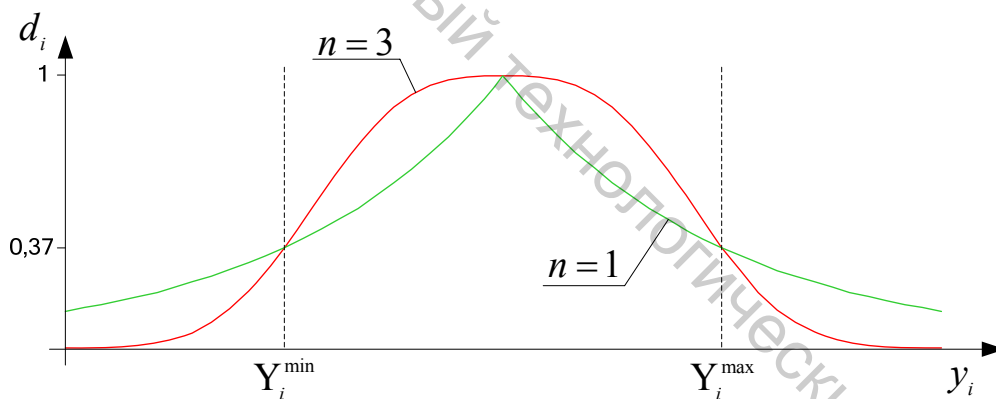


Рисунок 4.22 – Двусторонняя функция желательности Харрингтона

Альтернативный подход к построению частных функций желательности – частные функции **желательности Дэрринжера** (George Derringer 1980). Для односторонней функции желательности, ограниченной снизу, используется выражение

$$d_i = \begin{cases} 0, & y_i \leq Y_i^{\min} \\ \left(\frac{y_i - Y_i^{\min}}{Y_i^{\max} - Y_i^{\min}}\right)^{l_i}, & Y_i^{\min} < y_i < Y_i^{\max} \\ 1, & y_i \geq Y_i^{\max} \end{cases}, \quad (4.7)$$

где $Y_i^{\min}$ и $Y_i^{\max}$ – значения критерия оптимизации, соответствующие желательности 0 и 1 соответственно; l_i – параметр, определяющий кривизну функции желательности (рисунок 4.23).

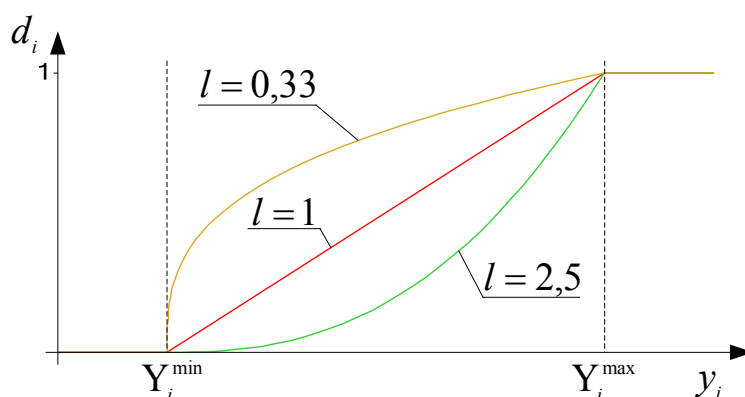


Рисунок 4.23

Если с увеличением значения критерия оптимизации его желательность должна уменьшаться, то используется функция желательности, ограниченная сверху:

$$d_i = \begin{cases} 1, & y_i \leq Y_i^{\min} \\ \left(\frac{y_i - Y_i^{\max}}{Y_i^{\min} - Y_i^{\max}} \right)^{r_i}, & Y_i^{\min} < y_i < Y_i^{\max}, \\ 0, & y_i \geq Y_i^{\max} \end{cases} \quad (4.8)$$

где $Y_i^{\min}$ и $Y_i^{\max}$ – значения критерия оптимизации, соответствующие желательности 1 и 0 соответственно; r_i – параметр, определяющий кривизну функции желательности (рисунок 4.24).

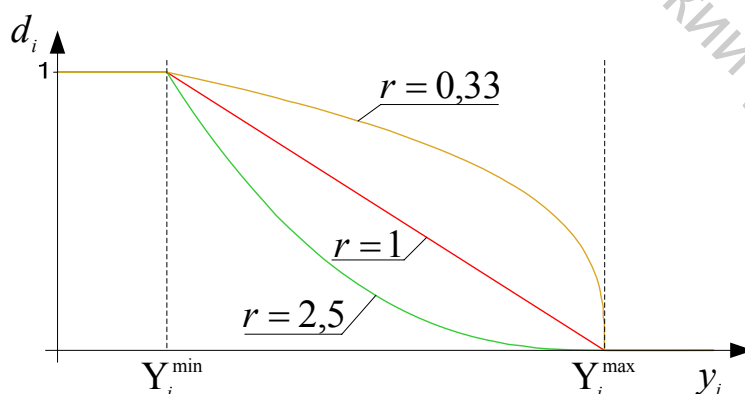


Рисунок 4.24

Для двусторонней функции желательности используется выражение:

$$d_i = \begin{cases} 0 & y_i < Y_i^{\min} \\ \left(\frac{y_i - Y_i^{\min}}{T_i - Y_i^{\min}} \right)^{s_i} & Y_i^{\min} \leq y_i \leq T_i \\ \left(\frac{y_i - Y_i^{\max}}{T_i - Y_i^{\max}} \right)^{t_i} & T_i < y_i \leq Y_i^{\max} \\ 0 & y_i > Y_i^{\max} \end{cases}, \quad (4.9)$$

где $Y_i^{\min}$ и $Y_i^{\max}$ – значения критерия оптимизации, соответствующие нулевой желательности; T_i – значения критерия оптимизации, соответствующее желательности 1; s_i и t_i – параметры, определяющие кривизну функции желательности (рисунок 4.24).

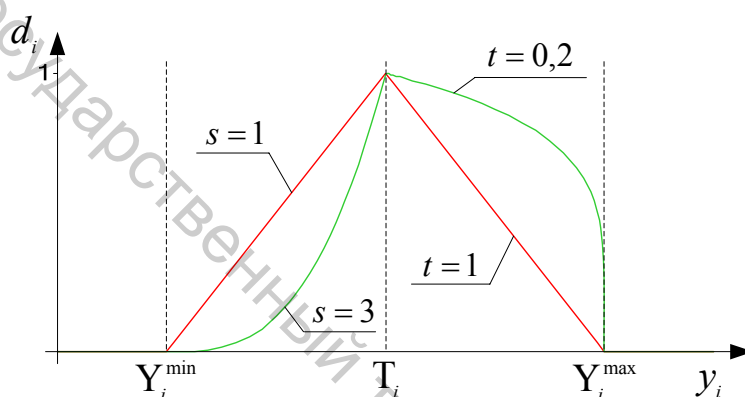


Рисунок 4.25 – Двусторонняя функция желательности Дэрринжера

Пример 4.2

Необходимо выбрать один из трех дискретизирующих барабанчиков, отличающихся типом гарнитуры, для использования при формировании (из химических волокон) на пневмомеханической прядильной машине волокнистого компонента комбинированной высокопрочной пряжи специального назначения. Для выбора дискретизирующего барабанчика воспользуемся обобщенной функцией желательности и частными функциями желательности Дерринжера. Физико-механические свойства пряжи, выработанной с использованием дискретизирующих барабанчиков с различным типом гарнитур, приведены в таблице 4.4.

Таблица 4.4

Критерии	Тип гарнитуры		
	Ок-40 (X_1)	Ок-37 (X_2)	Ок-36 (X_3)
Коэффициент вариации по линейной плотности (Y_1), %	3,2	3	2,8
Коэффициент вариации по разрывной нагрузке (Y_3), %	10	8,1	6,7
Относительная разрывная нагрузка (Y_4), сН/текс	8,1	8,3	7,7

Для каждого из критериев оптимизации технологом (лицом, принимающим решение) установлены границы, соответствующие наиболее и наименее желательным значениям (таблица 4.5).

Таблица 4.5

Критерии	Наименее желательное значение (0)	Наиболее желательное значение (1)
Коэффициент вариации по линейной плотности (Y_1), %	3,5	2,5
Коэффициент вариации по разрывной нагрузке (Y_2), %	10,5	5,0
Относительная разрывная нагрузка (Y_3), сН/текс	7,5	8,5

Критерии Y_1 , Y_2 ограничены сверху и их желательности определяются по формуле (4.8). Так как значения критериев Y_1 , Y_2 располагаются внутри диапазонов $Y_i^{\min} < Y_i < Y_i^{\max}$, то их желательности рассчитываются по формулам:

$$d_1 = \frac{Y_1 - 3,5}{2,5 - 3,5} \quad \text{и} \quad d_2 = \frac{Y_2 - 10,5}{5 - 10,5}. \quad (4.10)$$

Критерий Y_3 ограничен снизу, его желательность определяется по формуле (4.7). Значения критерия Y_3 также располагаются внутри диапазона $Y_i^{\min} = 7,5 < Y_i < Y_i^{\max} = 8,5$, и его желательность рассчитывается по формуле

$$d_3 = \frac{Y_3 - 7,5}{8,5 - 7,5}. \quad (4.11)$$

Частные желательности критериев, рассчитанные по формулам (4.10) и (4.11), приведены в таблице 4.6.

Таблица 4.6

Критерии	Тип гарнитуры		
	Ок-40 (X_1)	Ок-37 (X_2)	Ок-36 (X_3)
Желательность коэффициента вариации по линейной плотности (Y_1)	$d_{1,1} = 0,3$	$d_{1,2} = 0,5$	$d_{1,3} = 0,7$
Желательность коэффициента вариации по разрывной нагрузке (Y_2)	$d_{2,1} = 0,0909$	$d_{2,2} = 0,4363$	$d_{2,3} = 0,6909$
Желательность относительной разрывной нагрузки (Y_3)	$d_{3,1} = 0,6$	$d_{3,2} = 0,8$	$d_{3,3} = 0,2$

Значение обобщенной функции желательности рассчитывается по формуле

$$D_j = \sqrt[m]{\prod_{i=1}^m d_{i,j}}. \quad (4.12)$$

Значения обобщенной функции желательности для дискретизирующих барабанчиков с различным типом гарнитуры приведены в таблице 4.7

Таблица 4.7

Тип гарнитуры	Желательность
Ок-40	$D_1 = (d_{1,1} \times d_{2,1} \times d_{3,1})^{1/3} = 0,2538$
Ок-37	$D_2 = (d_{1,2} \times d_{2,2} \times d_{3,2})^{1/3} = 0,5588$
Ок-36	$D_3 = (d_{1,3} \times d_{2,3} \times d_{3,3})^{1/3} = 0,4590$

Таким образом, наиболее предпочтительным является дискретизирующий барабанчик с гарнитурой Ок-37, так как при его использовании достигается наибольшее значение обобщенной функции желательности.

Пример 4.3

Рассмотрим пример использования обобщенной функции желательности для оптимизации параметров формирования органосинтетических волокнистых плит (ОСВП) с использованием текстильных отходов.

В качестве входных параметров были приняты: доля коротковолокнистых отходов, % – x_1 (30 - 50) и температура прессования, °С – x_2 (170 – 190). В качестве критериев оптимизации были приняты основные физико-механические показатели ОСВП в соответствии с требованиями, предъявляемыми к изоляционным материалам: Y_1 – плотность, кг/м³; Y_2 – прочность при изгибе, МПа; Y_3 – разбухание, %.

В результате проведенного эксперимента были получены регрессионные модели критериев оптимизации:

$$\begin{aligned} Y_1 &= 616,540 - 83,445x_1; \\ Y_2 &= 2,226 + 0,8x_1 + 0,264x_1^2 + 0,115x_2; \\ Y_3 &= 29,745 - 4,235x_1. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Для определения желательностей частных критериев оптимизации были составлены частные функции желательности, их графики приведены на рисунке 4.26.

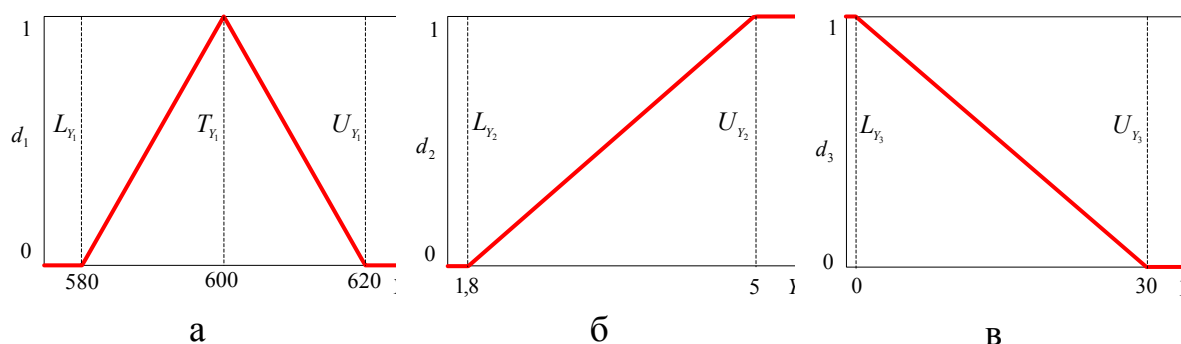


Рисунок 4.26 – Графики частных функций желательности:

а) критерий Y_1 ; б) критерий Y_2 ; в) критерий Y_3

Частная функция желательности для Y_1 (плотность) является ограниченной с двух сторон т.е. отклонения как в большую, так и в меньшую сторону ($\pm 20 \text{ кг/м}^3$) от 600 кг/м^3 являются нежелательными.

Частная функция желательности для Y_2 (прочность при изгибе) является ограниченной сверху, т. е. чем выше значение прочности ОСВП, тем более желательным оно является. Величина $\leq 1,8$ является нежелательной.

Частная функция желательности для Y_3 (разбухание) является ограниченной снизу, т. е. чем меньше значение этого параметра, тем более желательным оно является. Величина ≥ 30 является нежелательной.

На параметры оптимизации наложены ограничения: $-1 \leq x_1 \leq 1$ и $-1 \leq x_2 \leq 0.5$.

Решение оптимизационной задачи в СКМ Maple:

```
restart;
with(Optimization):
#уравнение регрессии для плотности
Y1:=616.540222222222-83.4458333333333*x1:
#уравнение регрессии для прочности
Y2:=2.226667+0.800667*x1+0.264000*x1^2+0.115667*x2:
#уравнение регрессии для разбухания
Y3:=29.74556-4.23500*x1:

#частная функция желательности первого критерия
(двусторонняя)
f:=piecewise(
y<L, 0,
(L<=y) and (y<=T), ((y-L)/(T-L))^1,
(T<y) and (y<=U), ((y-U)/(T-U))^r,
y>U, 0);
```

```

#нижнее ограничение желательности
L:=580;
#наиболее желательное значение
T:=600;
#верхнее ограничение желательности
U:=620;
#кривизна функции желательности
l:=1;
r:=1;
d1:=unapply(f,y);

#частная функция желательности второго критерия
L:='L':U:='U':
f:=piecewise(
y<L,0,
(L<y) and (y<=U), ((y-L)/(U-L))^1,
y>U,1);

#нижнее ограничение желательности
L:=1.8;
#верхнее ограничение желательности
U:=5;
#кривизна функции желательности
l:=1;

d2:=unapply(f,y);

#частная функция желательности третьего критерия
L:='L':U:='U':
f:=piecewise(
y<L,1,
(L<y) and (y<=U), ((y-U)/(L-U))^r,
y>U,0);

#нижнее ограничение желательности
L:=0;
#верхнее ограничение желательности
U:=30;
#кривизна функции желательности
r:=1;

d3:=unapply(f,y);

#обобщенная функция желательности

```

```

Des:=(d1(Y1)*d2(Y2)*d3(Y3))^(1/3);
#максимум обобщенной функции желательности
NLPsolve(Des,x1=-1..1,x2=-1..0.5,maximize);
assign(%[2]);
#значения критериев оптимизации в точке оптимума
Y1:=Y1; Y2:=Y2; Y3:=Y3;
#значения параметров оптимизации в точке оптимума
x1:=40+x1*10;
x2:=180+x2*10;

```

```

[0.196410089824249012, [x1 = 0.229665919341154184, x2 = 0.500000000000000000]]

```

```
Y1 = 597.3755582
```

```
Y2 = 2.482311482
```

```
Y3 = 28.77292483
```

```
x1 = 42.29665919
```

```
x2 = 185.0000000
```

Таким образом, оптимальными значениями параметров формирования являются: $x_1=0,229$ и $x_2=0,5$, или в натуральных значениях: $x_1=42,29$ % и $x_2=185$ °С. При этом достигается значение обобщенной функции желательности 0,196 и значения критериев оптимизации: плотность – $Y_1=596$ кг/м³; прочность при изгибе – $Y_2=2,48$ МПа; разбухание – $Y_3=28,7$ %.

4.3 Экспертные оценки

Для ранжирования критериев в многокритериальных оптимизационных задачах им могут назначаться весовые коэффициенты. Для этих целей может применяться **метод анализа иерархий** [10] (метод Томаса Саати, *Thomas Saaty*). Назначение весовых коэффициентов ω производится на основе экспертных оценок, полученных в результате парных сравнений видов действия или объектов.

По результатам парных сравнений (экспертных оценок) n элементов формируют квадратную матрицу. При сравнении i -го и j -го элементов выставляются количественные оценки значимости i -го элемента по сравнению с j -м – a_{ij} согласно 9-балльной шкале (таблица 4.8).

При сравнении элемента с самим собой значимость равна 1, поэтому на главной диагонали матрицы сравнения стоят 1. Если i -й элемент менее важен, чем j -й, выставляются величины, обратные приведенным в таблице 4.8 ($1/3$; $1/5$ и т. д.).

Таблица 4.8

Качественная оценка сравнения	Количественная оценка a_{ij}
i -й и j -й одинаково важны	1
i -й незначительно важнее, чем j -й	3
i -й значительно важнее, чем j -й	5
i -й явно важнее, чем j -й	7
i -й абсолютно превосходит по значимости j -й	9
Промежуточные значения важности	2, 4, 6, 8

По результатам парного сравнения заполняется только часть матрицы над главной диагональю, то есть сравнение i -го и j -го элементов; нижняя часть матрицы, сравнение j -го и i -го элементов, содержит обратные величины. Матрица парных сравнений имеет вид:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 1/a_{12} & 1 & \dots & a_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1/a_{1n} & 1/a_{2n} & \dots & 1 \end{bmatrix}.$$

Матрица A является положительной ($a_{ij} > 0; i, j = 1..n$) и обратносимметричной ($a_{ji} = 1/a_{ij}; i, j = 1..n$).

Важным свойством матрицы парного сравнения является свойство согласованности. Под **согласованностью** понимается возможность на основе массива необработанных данных, содержащего $(n-1)$ суждение, логически получить остальные. Например, если в матрице парного сравнения объект А превосходит объект В в три раза ($A = 3B$) и превосходит объект С в шесть раз ($A = 6C$), то $3B = 6C$ или $B = 2C$ и $C = 1/2B$, такая матрица называется согласованной. В этом случае $a_{ij} = \omega_i / \omega_j$, где $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$ — числовые веса сравниваемых элементов. Согласованная матрица парных сравнений имеет вид:

$$A = \begin{bmatrix} \omega_1/\omega_1 & \omega_1/\omega_2 & \dots & \omega_1/\omega_n \\ \omega_2/\omega_1 & \omega_2/\omega_2 & \dots & \omega_2/\omega_n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \omega_n/\omega_1 & \omega_n/\omega_2 & \dots & \omega_n/\omega_n \end{bmatrix}.$$

На практике матрица парных сравнений часто бывает несогласованной, так как согласованную матрицу можно получить только, если сравнения основаны на идеально точных измерениях. Практически, если три равные физические величины А, В и С могут быть измерены одним прибором, допускающим погрешность, то в результате измерений

при каждом парном сравнении может оказаться $A > B$, $B > C$ и при этом $C > A$.

В случае, когда оценки при парных сравнениях выставляются несколькими экспертами, важным является достижение консенсуса. С этой целью может быть использован *метод Дельфи*, анонимный опрос и анкетирование в несколько туров. В качестве среднего значения рекомендуется использовать среднее геометрическое.

Мерой отклонения от согласованности служит *индекс согласованности* (ИС):

$$ИС = \frac{\lambda_{\max} - n}{n - 1},$$

где $\lambda_{\max}$ – максимальное из собственных значений матрицы A . Чем ближе $\lambda_{\max}$ к n , тем более согласован результат. Собственные значения можно найти, решив уравнение $|A - \lambda E| = 0$, где E – единичная матрица; $||$ – определитель.

В таблице 4.9 приведены средние значения индекса согласованности для сгенерированных случайным образом по шкале от 1 до 9 матриц парного сравнения размерностью n . Приведенные значения называют *случайным индексом* (СИ). Отношение индекса согласованности к случайному индексу называют *отношением согласованности*, оно не должно превышать 0,1.

Таблица 4.9

n	1	2	3	4	5	6	7	8
ОС	0,00	0,00	0,58	0,90	1,12	1,24	1,32	1,41
n	9	10	11	12	13	14	15	
ОС	1,45	1,49	1,51	1,48	1,56	1,57	1,59	

Если отношение согласованности превышает 0,1, то матрица парного сравнения является несогласованной, и необходимо вернуться к процессу выставления экспертных оценок.

Приближенное решение задачи нахождения весовых коэффициентов можно найти следующим образом:

- сформировать вектор, состоящий из средних геометрических элементов строк матрицы A (перемножить n элементов каждой строки и извлечь корень n -й степени);
- нормализовать полученный вектор (разделить каждый элемент вектора на сумму всех элементов вектора).

Точное решение задачи получают путем возведения матрицы в произвольно большие степени и деления суммы каждой строки на общую сумму элементов матрицы.

Пример 4.4

При парном сравнении четырех критериев **A**, **B**, **C**, **D** лицом, принимающим решение, были даны оценки:

- **A** явно важнее **B** (7); **A** значительно важнее **C** (5); **A** значительно важнее **D** (5);
- **B** незначительно менее важно, чем **C** (1/3); при сравнении **B** и **D** было принято компромиссное решение между незначительно и значительно меньшей важностью **B** (1/4);
- при сравнении **C** и **D** принято компромиссное решение между одинаковой важностью и незначительно меньшей важностью **C** (1/2).

Матрица парных сравнений и приближенный расчет весовых коэффициентов приведены в таблице 4.10.

Таблица 4.10

Матрица парных сравнений					Среднее геометрическое строк	Весовые коэффициенты
	A	B	C	D		
A	1	7	5	5	$\sqrt[4]{1 \cdot 7 \cdot 5 \cdot 5} = 3,637$	$3,637/5,832 = 0,62$
B	1/7	1	1/3	1/4	$\sqrt[4]{(1/7) \cdot 1 \cdot (1/3) \cdot (1/4)} = 0,33$	$0,33/5,832 = 0,06$
C	1/5	3	1	1/2	$\sqrt[4]{(1/5) \cdot 3 \cdot 1 \cdot (1/2)} = 0,74$	$0,74/5,832 = 0,13$
D	1/5	4	2	1	$\sqrt[4]{(1/5) \cdot 4 \cdot 2 \cdot 1} = 1,125$	$1,125/5,832 = 0,19$
Суммы:					$3,637+0,33+0,74+1,125=5,832$	1

Таким образом, весовые коэффициенты критериев: $\omega_A = 0,62$; $\omega_B = 0,06$; $\omega_C = 0,13$; $\omega_D = 0,19$.

Проверим согласованность матрицы парного сравнения. Для этого найдем максимальное из собственных значений матрицы **A**.

$$|A - \lambda E| = \det \left(\begin{bmatrix} 1 & 7 & 5 & 5 \\ 1/7 & 1 & 1/3 & 1/4 \\ 1/5 & 3 & 1 & 1/2 \\ 1/5 & 4 & 2 & 1 \end{bmatrix} - \lambda \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right) =$$

$$= \det \begin{bmatrix} 1-\lambda & 7 & 5 & 5 \\ 1/7 & 1-\lambda & 1/3 & 1/4 \\ 1/5 & 3 & 1-\lambda & 1/2 \\ 1/5 & 4 & 2 & 1-\lambda \end{bmatrix} = -0.247 - 2.483 \cdot \lambda - 4 \cdot \lambda^3 + \lambda^4 = 0.$$

Это уравнение имеет два действительных корня: -0.098152 и 4.1478. Таким образом, максимальное из собственных значений матрицы **A**: $\lambda_{\max} = 4.1478$. Индекс согласованности $ИС = \frac{\lambda_{\max} - n}{n - 1} =$

$$= \frac{4.1478 - 4}{4 - 1} = 0.0492. \text{ Для } n=4 \text{ случайный индекс СИ}=0.9 \text{ (таблица 4.9),}$$

тогда отношение согласованности $ОС=ИС/СИ=0.0492/0.9=0.0546$. Так как $ОС<0.1$, то матрица парного сравнения критериев, на основании которой вычислялись весовые коэффициенты критериев, является согласованной.

Точное решение задачи нахождения весовых коэффициентов методом Саати в СКМ Maple:

```
restart;
with(LinearAlgebra):
#матрица сравнений
A:=Matrix([
[1, 7, 5, 5],
[1/7, 1, 1/3, 1/4],
[1/5, 3, 1, 1/2],
[1/5, 4, 2, 1]
]);
#размерность матрицы
n:=RowDimension(A):
#возведение матрицы в степень
M:=evalm(A^100):
#вектор сумм строк
omega:=[seq(sum(M[i,j],j=1..n),i=1..n)]:
#нормализованный вектор
omega:=evalf(omega/sum(omega[i],i=1..n));
#максимальное собственное значение
lambda:=max(fsolve(Determinant(A-
lambda*Matrix(n,shape=identity))=0));
#индекс согласованности
IS:=(lambda-n)/(n-1);
#случайный индекс
SI:=0.9;
#отношение согласованности
OS:=IS/SI;
```

$$A := \begin{bmatrix} 1 & 7 & 5 & 5 \\ \frac{1}{7} & 1 & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{5} & 3 & 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{5} & 4 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\omega := [0.6276131571, 0.05683740619, 0.1244059206, 0.1911435161]$$

$$\lambda := 4.147813274$$

$$IS := 0.04927109133$$

$$SI := 0.9$$

$$OS := 0.05474565703$$

Результаты расчетов и выводы аналогичны приведенным выше.

Список рекомендуемой литературы

1. Аттетков, А. В. Методы оптимизации : учебник для вузов / А. В. Аттетков, С. В. Галкин, В. С. Зарубин ; под ред. В. С. Зарубина, А. П. Крищенко. – 2-е изд., стереотип. – Москва : Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2003. – 440 с.
2. Адлер, Ю. П. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий / Ю. П. Адлер, Е. В. Маркова, Ю. В. Грановский. – Москва : Наука, 1976. – 279 с.
3. Айвазян, С. А. Прикладная статистика: Основы моделирования и первичная обработка данных / С. А. Айвазян [и др.]. – Москва : Финансы и статистика, 1983. – 471 с.
4. Ахназарова, С. Л. Использование функции желательности Харрингтона при решении оптимизационных задач химической технологии : учебно-методическое пособие / С. Л. Ахназарова, Л. С. Гордеев. – Москва : Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, 2003. – 76 с.
5. Вентцель, Е. С. Теория вероятностей и ее инженерные приложения / Е. С. Вентцель, Л. А. Овчаров. – 2-е изд., стер. – Москва : Высшая школа, 2000. – 480 с.
6. Виноградов, Ю. С. Математическая статистика и ее применение в исследованиях в текстильной промышленности / Ю. С. Виноградов. – Москва : Легкая индустрия, 1970. – 312 с.
7. Волков, И. К. Исследование операций : учебник для вузов / И. К. Волков, Е. А. Загоруйко ; под ред. В. С. Зарубина, А. П. Крищенко. – Москва : Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2000. – 436 с.
8. Кукин, Г. Н. Текстильное материаловедение (волокна и нити) : учебник для вузов / Г. Н. Кукин, А. Н. Соловьев, А. И. Кобляков. – 2-е изд., перераб. и доп. – Москва : Легпромбытиздат, 1989. – 352 с.
9. Налимов, В. В. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов / В. В. Налимов, Н. А. Чернова. – Москва : Физматлит, 1965. – 340 с.
10. Саати, Т. Л. Принятие решений. Метод анализа иерархий / Т. Л. Саати. – Москва : Радио и связь, 1993. – 316 с.
11. Севостьянов, А. Г. Методы и средства исследования механико-технологических процессов текстильной промышленности / А. Г. Севостьянов. – Москва : Легкая индустрия, 1980. – 392 с.
12. Севостьянов, П. А. Математические методы обработки данных : учебное пособие для вузов / П. А. Севостьянов. – Москва : Изд-во МГТУ им. А. Н. Косыгина, 2004. – 256 с.
13. Спиридонов, А. А. Планирование эксперимента при исследовании технологических процессов / А. А. Спиридонов. – Москва : Машиностроение, 1981. – 184 с.

14. Тихомиров, В. Б. Планирование и анализ эксперимента (при проведении исследований в легкой и текстильной промышленности) / В. Б. Тихомиров. – Москва : Легкая индустрия, 1974. – 262 с.
15. Хартман, К. Планирование эксперимента в исследовании технологических процессов / К. Хартман, Э. Лецкий, В. Шефер. – Москва : Мир, 1977. – 552 с.

Витебский государственный технологический университет

Приложение 1

Таблица значений критерия Стьюдента

f	p								
	0,6	0,7	0,8	0,9	0,95	0,975	0,99	0,995	0,9999
	α								
	0,4	0,3	0,2	0,1	0,05	0,025	0,01	0,005	0,0001
1	0,325	0,727	1,376	3,078	6,314	12,706	31,821	63,657	3183,099
2	0,289	0,617	1,061	1,886	2,920	4,303	6,965	9,925	70,700
3	0,277	0,584	0,978	1,638	2,353	3,182	4,541	5,841	22,204
4	0,271	0,569	0,941	1,533	2,132	2,776	3,747	4,604	13,034
5	0,267	0,559	0,920	1,476	2,015	2,571	3,365	4,032	9,678
6	0,265	0,553	0,906	1,440	1,943	2,447	3,143	3,707	8,025
7	0,263	0,549	0,896	1,415	1,895	2,365	2,998	3,499	7,063
8	0,262	0,546	0,889	1,397	1,860	2,306	2,896	3,355	6,442
9	0,261	0,543	0,883	1,383	1,833	2,262	2,821	3,250	6,010
10	0,260	0,542	0,879	1,372	1,812	2,228	2,764	3,169	5,694
11	0,260	0,540	0,876	1,363	1,796	2,201	2,718	3,106	5,453
12	0,259	0,539	0,873	1,356	1,782	2,179	2,681	3,055	5,263
13	0,259	0,538	0,870	1,350	1,771	2,160	2,650	3,012	5,111
14	0,258	0,537	0,868	1,345	1,761	2,145	2,624	2,977	4,985
15	0,258	0,536	0,866	1,341	1,753	2,131	2,602	2,947	4,880
16	0,258	0,535	0,865	1,337	1,746	2,120	2,583	2,921	4,791
17	0,257	0,534	0,863	1,333	1,740	2,110	2,567	2,898	4,714
18	0,257	0,534	0,862	1,330	1,734	2,101	2,552	2,878	4,648
19	0,257	0,533	0,861	1,328	1,729	2,093	2,539	2,861	4,590
20	0,257	0,533	0,860	1,325	1,725	2,086	2,528	2,845	4,539
21	0,257	0,532	0,859	1,323	1,721	2,080	2,518	2,831	4,493
22	0,256	0,532	0,858	1,321	1,717	2,074	2,508	2,819	4,452
23	0,256	0,532	0,858	1,319	1,714	2,069	2,500	2,807	4,415
24	0,256	0,531	0,857	1,318	1,711	2,064	2,492	2,797	4,382
25	0,256	0,531	0,856	1,316	1,708	2,060	2,485	2,787	4,352
26	0,256	0,531	0,856	1,315	1,706	2,056	2,479	2,779	4,324
27	0,256	0,531	0,855	1,314	1,703	2,052	2,473	2,771	4,299
28	0,256	0,530	0,855	1,313	1,701	2,048	2,467	2,763	4,275
29	0,256	0,530	0,854	1,311	1,699	2,045	2,462	2,756	4,254
30	0,256	0,530	0,854	1,310	1,697	2,042	2,457	2,750	4,234
31	0,256	0,530	0,853	1,309	1,696	2,040	2,453	2,744	4,216
32	0,255	0,530	0,853	1,309	1,694	2,037	2,449	2,738	4,198
33	0,255	0,530	0,853	1,308	1,692	2,035	2,445	2,733	4,182
34	0,255	0,529	0,852	1,307	1,691	2,032	2,441	2,728	4,167
35	0,255	0,529	0,852	1,306	1,690	2,030	2,438	2,724	4,153
40	0,255	0,529	0,851	1,303	1,684	2,021	2,423	2,704	4,094
50	0,255	0,528	0,849	1,299	1,676	2,009	2,403	2,678	4,014
60	0,254	0,527	0,848	1,296	1,671	2,000	2,390	2,660	3,962
80	0,254	0,526	0,846	1,292	1,664	1,990	2,374	2,639	3,899
100	0,254	0,526	0,845	1,290	1,660	1,984	2,364	2,626	3,862
200	0,254	0,525	0,843	1,286	1,653	1,972	2,345	2,601	3,789
500	0,253	0,525	0,842	1,283	1,648	1,965	2,334	2,586	3,747

Приложение 2

Таблица значений критерия Фишера

$\alpha = 0,05$ ($p = 0,95$); f_1 – степень свободы для меньшей дисперсии;
 f_2 – степень свободы для большей дисперсии

$f_2 \backslash f_1$	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	161,448	199,500	215,707	224,583	230,162	233,986	236,768	238,883	240,543
2	18,513	19,000	19,164	19,247	19,296	19,330	19,353	19,371	19,385
3	10,128	9,552	9,277	9,117	9,013	8,941	8,887	8,845	8,812
4	7,709	6,944	6,591	6,388	6,256	6,163	6,094	6,041	5,999
5	6,608	5,786	5,409	5,192	5,050	4,950	4,876	4,818	4,772
6	5,987	5,143	4,757	4,534	4,387	4,284	4,207	4,147	4,099
7	5,591	4,737	4,347	4,120	3,972	3,866	3,787	3,726	3,677
8	5,318	4,459	4,066	3,838	3,687	3,581	3,500	3,438	3,388
9	5,117	4,256	3,863	3,633	3,482	3,374	3,293	3,230	3,179
10	4,965	4,103	3,708	3,478	3,326	3,217	3,135	3,072	3,020
11	4,844	3,982	3,587	3,357	3,204	3,095	3,012	2,948	2,896
12	4,747	3,885	3,490	3,259	3,106	2,996	2,913	2,849	2,796
13	4,667	3,806	3,411	3,179	3,025	2,915	2,832	2,767	2,714
14	4,600	3,739	3,344	3,112	2,958	2,848	2,764	2,699	2,646
15	4,543	3,682	3,287	3,056	2,901	2,790	2,707	2,641	2,588
16	4,494	3,634	3,239	3,007	2,852	2,741	2,657	2,591	2,538
17	4,451	3,592	3,197	2,965	2,810	2,699	2,614	2,548	2,494
18	4,414	3,555	3,160	2,928	2,773	2,661	2,577	2,510	2,456
19	4,381	3,522	3,127	2,895	2,740	2,628	2,544	2,477	2,423
20	4,351	3,493	3,098	2,866	2,711	2,599	2,514	2,447	2,393
21	4,325	3,467	3,072	2,840	2,685	2,573	2,488	2,420	2,366
22	4,301	3,443	3,049	2,817	2,661	2,549	2,464	2,397	2,342
23	4,279	3,422	3,028	2,796	2,640	2,528	2,442	2,375	2,320
24	4,260	3,403	3,009	2,776	2,621	2,508	2,423	2,355	2,300
25	4,242	3,385	2,991	2,759	2,603	2,490	2,405	2,337	2,282
26	4,225	3,369	2,975	2,743	2,587	2,474	2,388	2,321	2,265
27	4,210	3,354	2,960	2,728	2,572	2,459	2,373	2,305	2,250
28	4,196	3,340	2,947	2,714	2,558	2,445	2,359	2,291	2,236
29	4,183	3,328	2,934	2,701	2,545	2,432	2,346	2,278	2,223
30	4,171	3,316	2,922	2,690	2,534	2,421	2,334	2,266	2,211
31	4,160	3,305	2,911	2,679	2,523	2,409	2,323	2,255	2,199
32	4,149	3,295	2,901	2,668	2,512	2,399	2,313	2,244	2,189
33	4,139	3,285	2,892	2,659	2,503	2,389	2,303	2,235	2,179
34	4,130	3,276	2,883	2,650	2,494	2,380	2,294	2,225	2,170
35	4,121	3,267	2,874	2,641	2,485	2,372	2,285	2,217	2,161
36	4,113	3,259	2,866	2,634	2,477	2,364	2,277	2,209	2,153
37	4,105	3,252	2,859	2,626	2,470	2,356	2,270	2,201	2,145
38	4,098	3,245	2,852	2,619	2,463	2,349	2,262	2,194	2,138
39	4,091	3,238	2,845	2,612	2,456	2,342	2,255	2,187	2,131
40	4,085	3,232	2,839	2,606	2,449	2,336	2,249	2,180	2,124

Таблица значений критерия Фишера (окончание)

$f_1 \backslash f_2$									
	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	241,882	242,983	243,906	244,690	245,364	245,950	246,464	246,918	247,323
2	19,396	19,405	19,413	19,419	19,424	19,429	19,433	19,437	19,440
3	8,786	8,763	8,745	8,729	8,715	8,703	8,692	8,683	8,675
4	5,964	5,936	5,912	5,891	5,873	5,858	5,844	5,832	5,821
5	4,735	4,704	4,678	4,655	4,636	4,619	4,604	4,590	4,579
6	4,060	4,027	4,000	3,976	3,956	3,938	3,922	3,908	3,896
7	3,637	3,603	3,575	3,550	3,529	3,511	3,494	3,480	3,467
8	3,347	3,313	3,284	3,259	3,237	3,218	3,202	3,187	3,173
9	3,137	3,102	3,073	3,048	3,025	3,006	2,989	2,974	2,960
10	2,978	2,943	2,913	2,887	2,865	2,845	2,828	2,812	2,798
11	2,854	2,818	2,788	2,761	2,739	2,719	2,701	2,685	2,671
12	2,753	2,717	2,687	2,660	2,637	2,617	2,599	2,583	2,568
13	2,671	2,635	2,604	2,577	2,554	2,533	2,515	2,499	2,484
14	2,602	2,565	2,534	2,507	2,484	2,463	2,445	2,428	2,413
15	2,544	2,507	2,475	2,448	2,424	2,403	2,385	2,368	2,353
16	2,494	2,456	2,425	2,397	2,373	2,352	2,333	2,317	2,302
17	2,450	2,413	2,381	2,353	2,329	2,308	2,289	2,272	2,257
18	2,412	2,374	2,342	2,314	2,290	2,269	2,250	2,233	2,217
19	2,378	2,340	2,308	2,280	2,256	2,234	2,215	2,198	2,182
20	2,348	2,310	2,278	2,250	2,225	2,203	2,184	2,167	2,151
21	2,321	2,283	2,250	2,222	2,197	2,176	2,156	2,139	2,123
22	2,297	2,259	2,226	2,198	2,173	2,151	2,131	2,114	2,098
23	2,275	2,236	2,204	2,175	2,150	2,128	2,109	2,091	2,075
24	2,255	2,216	2,183	2,155	2,130	2,108	2,088	2,070	2,054
25	2,236	2,198	2,165	2,136	2,111	2,089	2,069	2,051	2,035
26	2,220	2,181	2,148	2,119	2,094	2,072	2,052	2,034	2,018
27	2,204	2,166	2,132	2,103	2,078	2,056	2,036	2,018	2,002
28	2,190	2,151	2,118	2,089	2,064	2,041	2,021	2,003	1,987
29	2,177	2,138	2,104	2,075	2,050	2,027	2,007	1,989	1,973
30	2,165	2,126	2,092	2,063	2,037	2,015	1,995	1,976	1,960
31	2,153	2,114	2,080	2,051	2,026	2,003	1,983	1,965	1,948
32	2,142	2,103	2,070	2,040	2,015	1,992	1,972	1,953	1,937
33	2,133	2,093	2,060	2,030	2,004	1,982	1,961	1,943	1,926
34	2,123	2,084	2,050	2,021	1,995	1,972	1,952	1,933	1,917
35	2,114	2,075	2,041	2,012	1,986	1,963	1,942	1,924	1,907
36	2,106	2,067	2,033	2,003	1,977	1,954	1,934	1,915	1,899
37	2,098	2,059	2,025	1,995	1,969	1,946	1,926	1,907	1,890
38	2,091	2,051	2,017	1,988	1,962	1,939	1,918	1,899	1,883
39	2,084	2,044	2,010	1,981	1,954	1,931	1,911	1,892	1,875
40	2,077	2,038	2,003	1,974	1,948	1,924	1,904	1,885	1,868

Приложение 3

Таблица значений критерия Пирсона χ^2

f	α							
	0,2	0,1	0,05	0,025	0,2	0,1	0,01	0,001
1	1,642	2,706	3,841	5,024	1,642	2,706	6,635	10,828
2	3,219	4,605	5,991	7,378	3,219	4,605	9,210	13,816
3	4,642	6,251	7,815	9,348	4,642	6,251	11,345	16,266
4	5,989	7,779	9,488	11,143	5,989	7,779	13,277	18,467
5	7,289	9,236	11,070	12,833	7,289	9,236	15,086	20,515
6	8,558	10,645	12,592	14,449	8,558	10,645	16,812	22,458
7	9,803	12,017	14,067	16,013	9,803	12,017	18,475	24,322
8	11,030	13,362	15,507	17,535	11,030	13,362	20,090	26,124
9	12,242	14,684	16,919	19,023	12,242	14,684	21,666	27,877
10	13,442	15,987	18,307	20,483	13,442	15,987	23,209	29,588
11	14,631	17,275	19,675	21,920	14,631	17,275	24,725	31,264
12	15,812	18,549	21,026	23,337	15,812	18,549	26,217	32,909
13	16,985	19,812	22,362	24,736	16,985	19,812	27,688	34,528
14	18,151	21,064	23,685	26,119	18,151	21,064	29,141	36,123
15	19,311	22,307	24,996	27,488	19,311	22,307	30,578	37,697
16	20,465	23,542	26,296	28,845	20,465	23,542	32,000	39,252
17	21,615	24,769	27,587	30,191	21,615	24,769	33,409	40,790
18	22,760	25,989	28,869	31,526	22,760	25,989	34,805	42,312
19	23,900	27,204	30,144	32,852	23,900	27,204	36,191	43,820
20	25,038	28,412	31,410	34,170	25,038	28,412	37,566	45,315
21	26,171	29,615	32,671	35,479	26,171	29,615	38,932	46,797
22	27,301	30,813	33,924	36,781	27,301	30,813	40,289	48,268
23	28,429	32,007	35,172	38,076	28,429	32,007	41,638	49,728
24	29,553	33,196	36,415	39,364	29,553	33,196	42,980	51,179
25	30,675	34,382	37,652	40,646	30,675	34,382	44,314	52,620
26	31,795	35,563	38,885	41,923	31,795	35,563	45,642	54,052
27	32,912	36,741	40,113	43,195	32,912	36,741	46,963	55,476
28	34,027	37,916	41,337	44,461	34,027	37,916	48,278	56,892
29	35,139	39,087	42,557	45,722	35,139	39,087	49,588	58,301
30	36,250	40,256	43,773	46,979	36,250	40,256	50,892	59,703
31	37,359	41,422	44,985	48,232	37,359	41,422	52,191	61,098
32	38,466	42,585	46,194	49,480	38,466	42,585	53,486	62,487
33	39,572	43,745	47,400	50,725	39,572	43,745	54,776	63,870
34	40,676	44,903	48,602	51,966	40,676	44,903	56,061	65,247
35	41,778	46,059	49,802	53,203	41,778	46,059	57,342	66,619
40	47,269	51,805	55,758	59,342	47,269	51,805	63,691	73,402
50	58,164	63,167	67,505	71,420	58,164	63,167	76,154	86,661
100	111,667	118,498	124,342	129,561	111,667	118,498	135,807	149,449
200	216,609	226,021	233,994	241,058	216,609	226,021	249,445	267,541
500	526,401	540,930	553,127	563,852	526,401	540,930	576,493	603,446
1000	1037,431	1057,724	1074,679	1089,531	1037,431	1057,724	1106,969	1143,917
2000	2053,025	2081,469	2105,154	2125,842	2053,025	2081,469	2150,066	2201,156
5000	5083,962	5128,576	5165,615	5197,884	5083,962	5128,576	5235,572	5314,731

Приложение 4

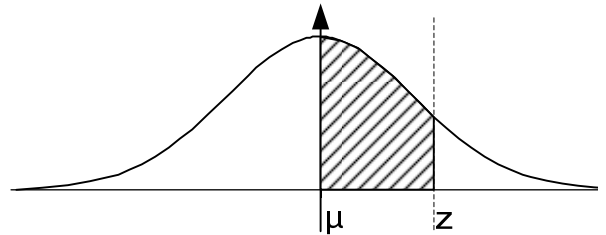
Таблица значений критерия Граббса

N	α			N	α			N	α		
	0,01	0,05	0,1		0,01	0,05	0,1		0,01	0,05	0,1
3	1,155	1,154	1,153	42	3,404	3,057	2,887	81	3,678	3,311	3,136
4	1,496	1,481	1,462	43	3,415	3,067	2,897	82	3,682	3,315	3,141
5	1,764	1,715	1,671	44	3,425	3,076	2,906	83	3,687	3,319	3,145
6	1,973	1,887	1,822	45	3,435	3,085	2,915	84	3,691	3,323	3,149
7	2,139	2,020	1,938	46	3,445	3,094	2,924	85	3,695	3,328	3,153
8	2,274	2,127	2,032	47	3,455	3,103	2,933	86	3,700	3,332	3,157
9	2,387	2,215	2,110	48	3,464	3,112	2,941	87	3,704	3,336	3,161
10	2,482	2,290	2,176	49	3,474	3,120	2,949	88	3,708	3,340	3,165
11	2,564	2,355	2,234	50	3,482	3,128	2,957	89	3,712	3,344	3,169
12	2,636	2,412	2,285	51	3,491	3,136	2,965	90	3,716	3,348	3,173
13	2,699	2,462	2,331	52	3,500	3,144	2,972	91	3,720	3,352	3,177
14	2,755	2,507	2,372	53	3,508	3,151	2,98	92	3,724	3,355	3,181
15	2,806	2,548	2,409	54	3,516	3,159	2,987	93	3,728	3,359	3,185
16	2,852	2,586	2,443	55	3,524	3,166	2,994	94	3,732	3,363	3,188
17	2,894	2,620	2,475	56	3,531	3,173	3,001	95	3,736	3,366	3,192
18	2,932	2,652	2,504	57	3,539	3,180	3,007	96	3,740	3,370	3,196
19	2,968	2,681	2,531	58	3,546	3,187	3,014	97	3,743	3,374	3,199
20	3,001	2,708	2,557	59	3,553	3,193	3,021	98	3,747	3,377	3,203
21	3,031	2,734	2,580	60	3,560	3,200	3,027	99	3,750	3,381	3,206
22	3,060	2,758	2,603	61	3,567	3,206	3,033	100	3,754	3,384	3,210
23	3,087	2,780	2,624	62	3,573	3,212	3,039	101	3,758	3,387	3,213
24	3,112	2,802	2,644	63	3,580	3,218	3,045	102	3,761	3,391	3,216
25	3,135	2,822	2,663	64	3,586	3,224	3,051	103	3,764	3,394	3,220
26	3,158	2,841	2,681	65	3,592	3,230	3,057	104	3,768	3,397	3,223
27	3,179	2,859	2,698	66	3,598	3,236	3,062	105	3,771	3,401	3,226
28	3,199	2,876	2,714	67	3,604	3,241	3,068	106	3,774	3,404	3,229
29	3,218	2,893	2,730	68	3,610	3,247	3,073	107	3,778	3,407	3,232
30	3,236	2,908	2,745	69	3,616	3,252	3,079	108	3,781	3,410	3,236
31	3,253	2,924	2,760	70	3,622	3,258	3,084	109	3,784	3,413	3,239
32	3,270	2,938	2,773	71	3,627	3,263	3,089	110	3,787	3,416	3,242
33	3,286	2,952	2,787	72	3,633	3,268	3,094	111	3,790	3,419	3,245
34	3,301	2,965	2,799	73	3,638	3,273	3,099	112	3,793	3,422	3,248
35	3,316	2,978	2,812	74	3,643	3,278	3,104	113	3,796	3,425	3,251
36	3,330	2,991	2,824	75	3,648	3,283	3,109	114	3,799	3,428	3,254
37	3,343	3,003	2,835	76	3,653	3,288	3,114	115	3,802	3,431	3,257
38	3,356	3,014	2,846	77	3,658	3,292	3,118	116	3,805	3,434	3,259
39	3,369	3,025	2,857	78	3,663	3,297	3,123	117	3,808	3,437	3,262
40	3,381	3,036	2,868	79	3,668	3,302	3,127	118	3,811	3,440	3,265
41	3,392	3,047	2,878	80	3,673	3,306	3,132	119	3,814	3,442	3,268

Приложение 5

Нормальное распределение

$$F(z; \mu = 0, \sigma = 1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^z e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx$$



z	0,00	0,01	0,02	0,03	0,04	0,05	0,06	0,07	0,08	0,09
0,00	0,00000	0,00399	0,00798	0,01197	0,01595	0,01994	0,02392	0,02790	0,03188	0,03586
0,10	0,03983	0,04380	0,04776	0,05172	0,05567	0,05962	0,06356	0,06749	0,07142	0,07535
0,20	0,07926	0,08317	0,08706	0,09095	0,09483	0,09871	0,10257	0,10642	0,11026	0,11409
0,30	0,11791	0,12172	0,12552	0,12930	0,13307	0,13683	0,14058	0,14431	0,14803	0,15173
0,40	0,15542	0,15910	0,16276	0,16640	0,17003	0,17364	0,17724	0,18082	0,18439	0,18793
0,50	0,19146	0,19497	0,19847	0,20194	0,20540	0,20884	0,21226	0,21566	0,21904	0,22240
0,60	0,22575	0,22907	0,23237	0,23565	0,23891	0,24215	0,24537	0,24857	0,25175	0,25490
0,70	0,25804	0,26115	0,26424	0,26730	0,27035	0,27337	0,27637	0,27935	0,28230	0,28524
0,80	0,28814	0,29103	0,29389	0,29673	0,29955	0,30234	0,30511	0,30785	0,31057	0,31327
0,90	0,31594	0,31859	0,32121	0,32381	0,32639	0,32894	0,33147	0,33398	0,33646	0,33891
1,00	0,34134	0,34375	0,34614	0,34849	0,35083	0,35314	0,35543	0,35769	0,35993	0,36214
1,10	0,36433	0,36650	0,36864	0,37076	0,37286	0,37493	0,37698	0,37900	0,38100	0,38298
1,20	0,38493	0,38686	0,38877	0,39065	0,39251	0,39435	0,39617	0,39796	0,39973	0,40147
1,30	0,40320	0,40490	0,40658	0,40824	0,40988	0,41149	0,41309	0,41466	0,41621	0,41774
1,40	0,41924	0,42073	0,42220	0,42364	0,42507	0,42647	0,42785	0,42922	0,43056	0,43189
1,50	0,43319	0,43448	0,43574	0,43699	0,43822	0,43943	0,44062	0,44179	0,44295	0,44408
1,60	0,44520	0,44630	0,44738	0,44845	0,44950	0,45053	0,45154	0,45254	0,45352	0,45449
1,70	0,45543	0,45637	0,45728	0,45818	0,45907	0,45994	0,46080	0,46164	0,46246	0,46327
1,80	0,46407	0,46485	0,46562	0,46638	0,46712	0,46784	0,46856	0,46926	0,46995	0,47062
1,90	0,47128	0,47193	0,47257	0,47320	0,47381	0,47441	0,47500	0,47558	0,47615	0,47670
2,00	0,47725	0,47778	0,47831	0,47882	0,47932	0,47982	0,48030	0,48077	0,48124	0,48169
2,10	0,48214	0,48257	0,48300	0,48341	0,48382	0,48422	0,48461	0,48500	0,48537	0,48574
2,20	0,48610	0,48645	0,48679	0,48713	0,48745	0,48778	0,48809	0,48840	0,48870	0,48899
2,30	0,48928	0,48956	0,48983	0,49010	0,49036	0,49061	0,49086	0,49111	0,49134	0,49158
2,40	0,49180	0,49202	0,49224	0,49245	0,49266	0,49286	0,49305	0,49324	0,49343	0,49361
2,50	0,49379	0,49396	0,49413	0,49430	0,49446	0,49461	0,49477	0,49492	0,49506	0,49520
2,60	0,49534	0,49547	0,49560	0,49573	0,49585	0,49598	0,49609	0,49621	0,49632	0,49643
2,70	0,49653	0,49664	0,49674	0,49683	0,49693	0,49702	0,49711	0,49720	0,49728	0,49736
2,80	0,49744	0,49752	0,49760	0,49767	0,49774	0,49781	0,49788	0,49795	0,49801	0,49807
2,90	0,49813	0,49819	0,49825	0,49831	0,49836	0,49841	0,49846	0,49851	0,49856	0,49861
3,00	0,49865	0,49869	0,49874	0,49878	0,49882	0,49886	0,49889	0,49893	0,49896	0,49900
3,10	0,49903	0,49906	0,49910	0,49913	0,49916	0,49918	0,49921	0,49924	0,49926	0,49929
3,20	0,49931	0,49934	0,49936	0,49938	0,49940	0,49942	0,49944	0,49946	0,49948	0,49950
3,30	0,49952	0,49953	0,49955	0,49957	0,49958	0,49960	0,49961	0,49962	0,49964	0,49965
3,40	0,49966	0,49968	0,49969	0,49970	0,49971	0,49972	0,49973	0,49974	0,49975	0,49976
3,50	0,49977	0,49978	0,49978	0,49979	0,49980	0,49981	0,49981	0,49982	0,49983	0,49983
3,60	0,49984	0,49985	0,49985	0,49986	0,49986	0,49987	0,49987	0,49988	0,49988	0,49989
3,70	0,49989	0,49990	0,49990	0,49990	0,49991	0,49991	0,49992	0,49992	0,49992	0,49992
3,80	0,49993	0,49993	0,49993	0,49994	0,49994	0,49994	0,49994	0,49995	0,49995	0,49995
3,90	0,49995	0,49995	0,49996	0,49996	0,49996	0,49996	0,49996	0,49996	0,49997	0,49997
4,00	0,49997	0,49997	0,49997	0,49997	0,49997	0,49997	0,49998	0,49998	0,49998	0,49998

Приложение 6

Критерий W Шапиро-Уилка

Коэффициенты a_{n-i+1}

n	i									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
3	0,7071									
4	0,6872	0,1677								
5	0,6646	0,2413								
6	0,6431	0,2806	0,0875							
7	0,6233	0,3031	0,1401							
8	0,6052	0,3164	0,1743	0,0561						
9	0,5888	0,3244	0,1976	0,0947						
10	0,5739	0,3291	0,2141	0,1224	0,0399					
11	0,5601	0,3315	0,2260	0,1429	0,0695					
12	0,5475	0,3325	0,2347	0,1586	0,0922	0,0303				
13	0,5359	0,3325	0,2412	0,1707	0,1099	0,0539				
14	0,5251	0,3318	0,2460	0,1802	0,1240	0,0727	0,0240			
15	0,5150	0,3306	0,2495	0,1878	0,1353	0,0880	0,0433			
16	0,5056	0,3290	0,2521	0,1939	0,1447	0,1005	0,0593	0,0196		
17	0,4968	0,3237	0,2540	0,1988	0,1524	0,1109	0,0725	0,0359		
18	0,4886	0,3253	0,2553	0,2027	0,1587	0,1197	0,0837	0,0496	0,0173	
19	0,4808	0,3232	0,2561	0,2059	0,1641	0,1271	0,0932	0,0612	0,0303	
20	0,4734	0,3211	0,2565	0,2085	0,1686	0,1334	0,1013	0,0711	0,0422	0,0140
21	0,4634	0,3185	0,2578	0,2119	0,1736	0,1399	0,1092	0,0804	0,0530	0,0263

Критические значения критерия W

n	α				
	0,01	0,02	0,05	0,1	0,5
3	0,753	0,756	0,767	0,789	0,959
4	0,687	0,707	0,748	0,792	0,935
5	0,686	0,715	0,762	0,806	0,927
6	0,713	0,743	0,788	0,826	0,927
7	0,730	0,760	0,803	0,838	0,928
8	0,749	0,778	0,818	0,851	0,932
9	0,764	0,791	0,829	0,859	0,935
10	0,781	0,806	0,842	0,869	0,938
11	0,792	0,817	0,850	0,876	0,940
12	0,805	0,828	0,859	0,883	0,943
13	0,814	0,837	0,866	0,889	0,945
14	0,825	0,846	0,874	0,895	0,947
15	0,835	0,855	0,881	0,901	0,950
16	0,844	0,863	0,887	0,906	0,952
17	0,851	0,869	0,892	0,910	0,954
18	0,858	0,874	0,897	0,914	0,956
19	0,863	0,879	0,901	0,917	0,957
20	0,868	0,884	0,905	0,920	0,959
21	0,873	0,888	0,908	0,923	0,960

Таблица значений критерия Кохрена

k – количество выборок; n – число наблюдений в выборках, степень свободы $f = n - 1$; $\alpha = 0,05$.

[illegible]

Учебное издание

Дягилев Андрей Степанович
Коган Александр Григорьевич

**Методы и средства исследований
технологических процессов**

Учебное пособие

Редактор В. И. Ольшанский
Технический редактор А. А. Науменко
Компьютерный набор и верстка авторские
Корректор Е. М. Богачева

Подписано в печать 29.03.12 Формат 60×90/16
Бумага офсетная № 1 Гарнитура Times. Усл. печ. л. 6,5.
Уч. – изд. л. 12,0. Тираж 150 экз. Заказ № 154

Отпечатано на ризографе Учреждения образования
«Витебский государственный технологический университет».
210035, Витебск, Московский проспект, 72.
Лицензия № 02330/0494384 от 16 марта 2009 г.