

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

ФГБОУ ВО «Уральский государственный
лесотехнический университет»

В.В. Глухих

ПРИКЛАДНЫЕ НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Учебник

Электронное издание

Екатеринбург
2016

УДК 001.89:658.512(075.8)

ББК 72:3-6я73

Г55

Рецензенты:

Кафедра «Химическая технология древесины» Казанского национального исследовательского технологического университета (ФГБОУ ВО «КНИТУ»);

Доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой лесозаготовительных и деревоперерабатывающих производств ФГБОУ ВО «Костромской государственной технологической академии» С.А. Угрюмов

Глухих, В.В.

Г55 Прикладные научные исследования: учебник / В.В. Глухих. — Екатеринбург: Урал. гос. лесотехн. ун-т, 2016 — 240 с. — 3,57 Мб.

ISBN 978-5-94984-590-5

Изложены термины, определения, классификация научных исследований. Приводятся общие сведения о науке и её роли в жизни общества, методах научных исследований, прикладных научных исследованиях. Рассмотрены вопросы представления результатов измерений с учётом их погрешностей. Приводятся теоретические положения и рекомендации по организации, планированию и проведению эксперимента. Подробно описаны статистические методы анализа результатов эксперимента, методы математического планирования эксперимента. Приведена последовательность работы и рекомендации по решению оптимизационных задач. Представлены практические примеры составления планов эксперимента, статистического анализа их результатов, решения оптимизационных задач с применением программы Microsoft Excel 2013 и других компьютерных программ. Учебник предназначен для обучающихся технических вузов.

Издается по решению редакционно-издательского совета Уральского государственного лесотехнического университета.

УДК 001.89:658.512(075.8)

ББК 72:3-6я73

ISBN 978-5-94984-590-5

© ФГБОУ ВО «Уральский государственный лесотехнический университет», 2016

© Глухих В.В., 2016

ВВЕДЕНИЕ

В современных условиях научно-исследовательская и научно-техническая деятельность (далее – научная деятельность) является одним из основных видов профессиональной деятельности человека с высшим образованием. Подготовка к такой деятельности предусмотрена во всех российских федеральных образовательных стандартах высшего образования для бакалавров, магистров, специалистов и аспирантов.

На сегодняшний день считается общепризнанным, что обладатель любого высшего образования должен иметь компетенции в области научных исследований, так как они ему необходимы в его повседневной практической деятельности.

Обладатели высшего образования по различным направлениям в области технологий получения и применения различных веществ, материалов, изделий, конструкций, механизмов, машин, а также управления производственными процессами в различных отраслях экономики должны иметь компетенции и в прикладных научных исследованиях.

В соответствии с федеральным Законом Российской Федерации № 127-ФЗ от 23.08.96 "О науке и государственной научно-технической политике" прикладные научные исследования - исследования, направленные преимущественно на применение новых знаний для достижения практических целей и решения конкретных задач. Одним из основных требований к современной науке является внедрение полученных научных результатов в кратчайшие сроки.

Особенностью современного промышленного производства в различных отраслях экономики является быстрая смена поколений оборудования, техники и технологий, которые необходимо адаптировать к условиям конкретного предприятия посредством собственных производственных экспериментов.

С учётом личного практического научного опыта работы автора по решению технологических проблем, разработке методов и технологий получения новых веществ и материалов в учебнике обобщены современные знания в области прикладных научных исследований.

Основой данного учебника является учебное пособие автора (профессора, доктора технических наук) по дисциплине «Основы научных исследований», первое издание которого вышло в 1998 году и имело гриф Учебно-методического объединения по образованию в области лесного дела Министерства общего и профессионального

образования Российской Федерации, и было переиздано Уральским государственным лесотехническим университетом в 2009 году.

Автор использовал при подготовке учебника свой личный многолетний педагогический опыт преподавания дисциплин «Основы научных исследований», «Методы и средства научных исследований», «Планирование и анализ результатов эксперимента», «Методы и программы решения оптимизационных задач» при подготовке бакалавров и магистров по направлениям «Химическая технология», «Строительство», «Технология полиграфического и упаковочного производств», а также аспирантов по различным научным специальностям.

Автор будет благодарен за все высказанные замечания и пожелания, направленные на улучшение учебника.

ОБЩИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О НАУКЕ

1.1. Термины и определения

В научно-техническом мире нет единства терминологии в области научной деятельности. Приведём терминологию, используемую в законодательных актах Российской Федерации (РФ).

В статье 2 федерального Закона РФ № 127-ФЗ от 23.08.96 «О науке и государственной научно-технической политике» термин «наука» не определён, но приведены основные понятия, относящиеся к научной деятельности.

Научная (научно-исследовательская) **деятельность** (далее – научная деятельность) – деятельность, направленная на получение и применение новых знаний, в том числе:

фундаментальные научные исследования – экспериментальная или теоретическая деятельность, направленная на получение новых знаний об основных законах строения, функционирования и развития человека, общества, окружающей природной среды;

прикладные научные исследования - исследования, направленные преимущественно на применение новых знаний для достижения практических целей и решения конкретных задач.

Научно-техническая деятельность – деятельность, направленная на получение, применение новых знаний для решения технологических, инженерных, экономических, социальных, гуманитарных и иных проблем, обеспечение функционирования науки, техники и производства как единой системы.

Экспериментальные разработки – деятельность, которая основана на знаниях, приобретённых в результате проведения научных исследований или на основе практического опыта, и направлена на сохранение жизни и здоровья человека, создание новых материалов, продуктов, процессов, устройств, услуг, систем или методов и их дальнейшее совершенствование.

Научный и (или) научно-технический результат – продукт научной и (или) научно-технической деятельности, содержащий новые знания или решения и зафиксированный на любом информационном носителе.

Научная и (или) научно-техническая продукция – научный и (или) научно-технический результат, в том числе результат интеллектуальной деятельности, предназначенный для реализации.

В данном законе, а также в научно-технической литературе и в средствах массовой информации используется термин **«научные исследования»**, который подразумевает все процессы от зарождения идеи до её воплощения в виде новых теорий, веществ, материалов, процессов, технологий, устройств, образцов техники и объединяет в себе понятия терминов «научная деятельность», «научно-техническая деятельность» и «экспериментальные разработки».

Отсутствие в законе определения термина **«наука»**, вероятно, связано с отсутствием единства мнений. По мнению профессора И.В Назарова [1], для определения науки нужно использовать разные её аспекты (компоненты) и эти определения могут быть следующими.

Наука - это форма деятельности людей по производству новых знаний о действительности и о самом познании с целью открытия объективных законов. В этом аспекте она представляет собой явление духовной жизни общества, форму отражения в сознании внешнего мира. Научная деятельность направлена на получение и применение новых знаний об этом мире.

С другой стороны, **наука – это система постоянно обогащающегося знания о мире**, развивающаяся на основе общественно-исторической практики. Со временем в этой системе изменяются элементы, структура и взаимосвязь элементов между собой. В этом аспекте подчёркивается результат научной деятельности в форме фактов, законов, теорий.

В следующем аспекте **наука представляет собой особого рода социальный институт**. Её обслуживают ряд научных учреждений: научно-исследовательских институтов, академий, учебных заведений, конструкторских бюро, осуществляющих научные исследования.

Наука в то же время является непосредственной производительной силой. Она значительно влияет на орудия и средства труда и самого человека, увеличивая его власть над природой. Производство все более становится полем применения научных достижений, практического использования научных знаний.

Человек с древних времён занимался научными исследованиями, продолжает ими заниматься и будет заниматься всегда. В первую очередь, из-за необходимости скорейшего удовлетворения своих потребностей. Именно практические потребности человека определяют развитие науки.

Основные *потребности в науке* для человека заключаются в следующем:

- объяснение явлений, происходящих в природе и обществе;
- прогнозирование поведения (развития) объектов природы и общества;
- создание новых объектов;
- решение проблем.

Можно привести большое количество явлений, которое интересовало древнего человека (появление огня, молнии, связь между вспышкой молнии и громом, солнечное затмение и др.) и современного человека.

Человек всегда хочет иметь прогноз поведения (развития) объектов природы и общества (прогноз погоды, курса валют, инфляции, поведения начальника, развития предприятия, изменения качества производимой продукции при изменении значений технологических параметров и др.).

Мощным рычагом развития науки и, особенно, прикладной науки, является удовлетворение потребностей человека в новых (модернизированных) бытовых и производственных объектах (лекарств, материалов, конструкций, бытовой и производственной техники и др.).

Решение общечеловеческих проблем требует консолидации усилий и средств многих стран, что закрепляется в различных видах межгосударственных юридических документов (договоров, соглашений, протоколов и др.).

Судьба будущих поколений землян зависит от эффективности и оперативности научных исследований по решению различных проблем, например, следующих:

- потепление климата за счёт «парникового эффекта», обусловленного производственной деятельностью человека;
- ухудшение экологической обстановки на Земле;
- исчерпание резервов роста сельскохозяйственного производства продуктов питания;
- исчерпание невозобновляемых (трудновосполнимых) ресурсов: металлических руд, нефти, природного газа, каменного угля и др.

Следует отметить, что основными **целями прикладной науки** являются:

- не вся совокупность знаний, а знание законов природы и общества;
- не только получение новых знаний, но и их применение для нужд человека и общества.

В своём развитии во времени любая отрасль науки проходит три основных этапа:

1. Сбор фактов.
2. Качественное описание явлений и поведения объектов.
3. Количественное описание и прогнозирование явлений и поведения объектов.

Ценность (развитость) прикладной науки определяется *подтверждением* выявленных ей *закономерностей* на практике.

1.2. Классификация научных исследований

Научные исследования подразделяются на два вида: фундаментальные и прикладные.

Для конкретизации определения фундаментальных научных исследований, приведённых выше, можно добавить, что это экспериментальная или теоретическая деятельность, направленная на получение новых знаний об общих законах физики, химии, биологии, механики, социологии и др.

Прикладные научные исследования – это исследования, направленные на изучение частных явлений в рамках общих законов и на применение новых знаний для достижения практических целей и решения конкретных задач.

По номенклатуре научных работников в России науку делят на отрасли науки, затем на группы специальностей и отдельные научные специальности.

Например, выделена отрасль науки «Физико-математические науки», в состав которой входит группа научных специальностей «Математика», состоящая из научных специальностей «Математический анализ», «Дифференциальные уравнения» и др.

Отрасль «Химические науки» состоит из научных специальностей «Неорганическая химия», «Органическая химия», «Высокомолекулярные соединения» и др.

В отрасль науки «Технические науки» входят группы специальностей «Технология, машины и оборудование лесозаготовок, лесного хозяйства, деревопереработки и химической переработки биомассы дерева», «Химическая технология», «Строительство» и др.

В группу «Технология, машины и оборудование лесозаготовок, лесного хозяйства, деревопереработки и химической переработки биомассы дерева» входят специальности «Технология и оборудование химической переработки биомассы дерева; химия древесины», «Древесиноведение, технология и оборудование деревопереработки» и др.

В группу «Химическая технология» входят специальности «Технология неорганических веществ», «Технология органических веществ», «Технология и переработка полимеров и композитов» и др.

В группу «Строительство» входят специальности «Строительные конструкции, здания и сооружения», «Строительные материалы и изделия», «Проектирование и строительство дорог, метрополитенов, аэродромов, мостов и транспортных тоннелей».

1.3. История науки и её роль в жизни общества

Взгляды на историю науки и её роль в жизни общества многообразны [2-7]. Сделаны попытки описания истории отдельных отраслей науки и производств, например, наук о лесе [8-10] и ландшафтной архитектуры [11], лесной промышленности [12], производства мебели [13] и бумаги [14].

Наука оказывала, оказывает и будет оказывать огромное влияние на развитие общества.

Приведу выдержки из заметки «Полвека, изменившие мир», опубликованной в 1996 г. еженедельной газетой «Поиск» по версиям американского журнала «Popular Science» и газеты «Московские новости» о датах научных событий, оказавших влияние на человечество:

1945 г. – осуществление манхэттенского проекта принесло Земле первые атомные бомбы;

1946 г. – в Пенсильванском университете США создана первая крупная ЭВМ;

1947 г. – американские специалисты изобрели транзистор, сменивший электролампы;

1951 г. – американцы продемонстрировали первый видеомagneтофон;

1953 г. – начало эры пластмасс;

1954 г. – в г. Обнинске (СССР) начала действовать первая в мире атомная электростанция;

1955 г. – начало эры цветного телевидения;

1957 г. – в СССР запущен первый искусственный спутник Земли;

1960 г. – начало массового применения стиральных порошков;

1961 г. – полет в космос первого в мире космонавта Юрия Гагарина;

1967 г. – в ЮАР сделали первую операцию по пересадке сердца человеку;

- 1969 г. – первый человек на Луне - американец Нил Армстронг;
- 1970 г. – зарождение генной инженерии;
- 1971 г. – в США создали первый персональный компьютер;
- 1975 г. – в Лос-Анджелесе открылся первый магазин, торгующий персональными ЭВМ;
- 1978 г. – в Великобритании родилась Луиза Браун, первый ребёнок «из пробирки»;
- 1978 г. – начало эры компакт-дисков;
- 1980 г. – начало производства телефаксов;
- 1985 г. – переворот в криминалистике: англичанин Алекс Джеффрис открыл метод генной «дактилоскопии» путём анализа ДНК;
- 1994 г. – в США открыт топ-кварк.

В еженедельной газете научного сообщества «Поиск» № 4 (1182) от 27 января 2012 года опубликована статья С.Беляевой «Восточная десятка. Китай предложил свой рейтинг научных и технических достижений 2011 года». В этой статье сообщается, что Китайская академия наук (Chinese Academy of Sciences) совместно с Инженерной академией Китая (Chinese Academy of Engineering) составили следующий рейтинг 10 лучших мировых достижений науки и техники за 2011 год, которые окажут влияние на нашу жизнь в ближайшее время:

1. **Универсальный метод создания одноатомных плёнок из большого разнообразия материалов.** По оценке специалистов, новый метод приведёт к революционному «технологическому продвижению».

2. **Крупнейший в мире самолёт, работающий на солнечной энергии.** Это швейцарский самолёт Solar Impulse, который в мае 2011 года успешно пролетел 630 км из Швейцарии в Брюссель приблизительно за 13 часов.

3. **Удержание атомов антиводорода в течение 1000 секунд.** Это достижение поможет проникнуть в суть природы антивещества.

4. **Биологический лазер.** Такие лазеры могут быть полезны цитологам и медикам в лечении различных заболеваний.

5. **Антилазер.** Это открытие будет полезно для вычислительной оптики и в других областях науки.

6. **Запуск американского марсохода «Любопытство» (Curiosity).** Будет исследована способность планеты Марс в прошлом и настоящем поддерживать микробную жизнь.

7. **Кристалл, способный хранить информацию, закодированную в спутанных квантах.** Открытие может быть важным шагом на пути к квантовым сетям.

8. **Секвенирование генома картофеля.** Это достижение поможет повысить урожайность картофеля и его качество.

9. **Самый быстрый компьютер.** Японский суперкомпьютер – первое мегаустройство, которое преодолевает порог в 10 квадриллионов операций в секунду.

10. **Самый маленький электромобиль. Электрокар на основе одной молекулы.** Может использоваться для доставки небольшого количества лекарственного препарата к определённой точке человеческого организма.

С 1996 года журнал Science, один из самых авторитетных в мире научных периодических изданий, публикует мнение своей редакции о главных научных прорывах уходящего года.

По итогам 2012 года этот журнал выделил следующую десятку наиболее значимых научных достижений:

1. **Наблюдения признаков бозона Хиггса**, субатомной частицы, образовавшейся при столкновении протонов в кольце Большого адронного коллайдера. Бозон Хиггса ищут около полувека, без него нет физического смысла массы.

2. Самом точном из возможных на сегодняшний день **прочтенный «генома денисовца»**. Речь идёт о геноме человека, останки которого были найдены в пещере Денисова на Алтае. Анализ ДНК, выделенной из кости фаланги мизинца молодой девушки или девочки, показал, что её обладательница была кареглазой шатенкой со смуглой кожей, умерла она в Сибири от 74 тысяч до 82 тысяч лет назад, а сам архаичный человек, денисовец, является близким родственником неандертальца.

3. **Достижение японских учёных, вырастивших из стволовых клеток мыши функциональные яйцеклетки**, которые, будучи оплодотворёнными, превратились в зародышей, успешно развившихся в организме суррогатной матери-мыши, и в родившихся здоровых мышат.

4. **Посадочная система трёхтонного марсохода Curiosity с его «Небесным краном»** – наиболее тяжёлой частью всего спускаемого аппарата. Кран спустил космический ровер на поверхность Марса на нейлоновых тросах с восьмиметровой высоты. Этот революционный способ спуска сложнее, чем подушки безопасности, использовавшиеся предыдущими марсоходами.

5. **Применение рентгенолучевого лазера для исследования структуры белка.** Оно позволило рассмотреть один из ферментов,

необходимых для жизни паразита *Trypanosoma brucei*, который вызывает африканскую сонную болезнь, в миллиарды раз чётче, чем это было возможно с помощью источников синхротронного излучения.

6. **Усовершенствование метода “цинковых пальцев”**, искусственных цинксодержащих белков, специально сконструированных для связывания с определённой последовательностью ДНК и дополнительных ферментами, расщепляющими её в участке - мишени. Новые цинковые пальцы называются TALEN и позволяют исследователям включать и выключать любой ген в живом организме, потому что содержат так называемые эффекторные нуклеазы, подобные активаторам транскрипции генов.

7. Результаты экспериментов, в которых были получены убедительные свидетельства **существования фермиона Майораны**, являющегося своей собственной античастицей. Эти фермионы получили название в честь предсказавшего их в 30-х годах прошлого века итальянского физика Этторе Майораны (Ettore Majorana).

8. Результаты проекта ENCODE, которые показали, что около **80 процентов генома человека составляет регуляторная ДНК**, «включатели» и «выключатели» генов, прежде называвшиеся «мусорной ДНК».

9. **Результаты экспериментов по усовершенствованию интерфейса мозг - компьютер**, в частности, демонстрация управления рукой робота силой мысли с помощью компьютера, подключённого к парализованной пациентке.

10. Результаты эксперимента с нейтринными детекторами Дайябэй (Daya Bay Reactor Neutrino Experiment) в Китае по исследованию “превращений” нейтрино, в которых учёные измерили **переход электронного нейтрино в тау- и мюонные нейтрино**, что должно способствовать пониманию причин практического отсутствия во Вселенной антиматерии.

В 2013 году, по мнению экспертов журнала, самыми значимыми научными достижениями стали следующие:

1. **Метод иммунотерапии рака**. Клинические испытания технологий борьбы с болезнью, которые основаны на воздействии на иммунную систему пациента, а не на опухоль, дали многообещающие результаты. И хотя пока ещё нельзя говорить, что этот метод перевернул медицину, и теперь борьба с онкологическими заболеваниями будет вестись по-иному, чем прежде, однако эксперты уверены, что такой подход борьбы с раком в будущем станет наиболее действенным. Более того, в перспективу такого метода верят не только эксперты, но и фармацевтические компании, которые стали инвестировать в

иммунотерапию, хотя ещё несколько лет назад их представители скептически относились к такому подходу борьбы с онкологией.

2. **Технология CRISPR**, т. е. метод «генетической микрохирургии», с помощью которого учёные получают возможность очень точно «редактировать» геном.

3. **Технология CLARITY**, позволившая учёным изменить пути к изучению мозга. Учёные придумали, как сделать ткани мозга прозрачными, как стекло: для этого они заменили рассеивающие свет молекулы липидов, которые образуют клеточные мембраны, на молекулы прозрачного геля. При этом им удалось оставить нейроны, другие клетки мозга и их органеллы нетронутыми.

4. **Выделение стволовых клеток из клонированного человеческого эмбриона.**

5. **Выращивание «мини-органов» в лаборатории** – например, печени, почек и того же мозга, которые в будущем смогут оказаться более подходящими объектами исследований и экспериментов, чем животные.

6. **Нахождение учёными «природных ускорителей частиц» в космосе.**

7. **Новые материалы для солнечных батарей на основе перовскита**, которые легче и дешевле производить.

8. **Признание того факта, что сон нужен мозгу в основном для того, чтобы «самоочиститься» от отходов жизнедеятельности.**

9. Результаты изучения того, **какие из микроорганизмов, обитающих в человеческом теле, отвечают за наше здоровье** или, наоборот, способны вызывать заболевания. Изучение отдельных микробов и их влияния на здоровье – первый шаг к персонифицированной медицине.

10. **Использование инструментов структурной биологии для разработки вакцины от респираторного синцитиального вируса.**

По итогам 2014 года этот журнал выделил следующую десятку наиболее значимых научных достижений:

1. **Высадка спускаемого аппарата Philae на поверхность кометы Чурюмова-Герасименко.** Научное значение этой миссии, по мнению авторов рейтинга, тяжело переоценить: информацию, полученную с Розетты, они называют «рогом изобилия». Главное, что выяснилось: если кометы и принесли воду на Землю, то это были не кометы типа 67P, где соотношение водород/дейтерий совсем другое, чем на Земле, и уже одно это отменяет большое количество старых гипотез о происхождении жизни на планете.

2. Работы нескольких независимых исследовательских групп, изучающих появление птиц в ходе эволюции динозавров. Результаты проведённых исследований позволяют понять, как птицы потеряли зубы, почему они такие разные, что общего между пением птиц и речью человека.

3. Открытие, согласно которому молодая кровь, введённая в стареющий организм, способна его омолодить. К такому выводу исследователи пришли после эксперимента с кровью молодой мыши, которая существенно улучшила состояние мозга старого сородича и омолодила его мускулы. Сейчас подобные эксперименты проводятся и над людьми - 18-летними добровольцами и стариками, страдающими болезнью Альцгеймера, получающими инъекции плазмы крови от более молодых доноров.

4. Программное обеспечение, которое позволяет роботам взаимодействовать друг с другом без участия человека. Группа из тысячи роботов размером с пятикопеечную монету смогли самостоятельно формировать собой буквы, примитивные фигуры и прочее. Вторая, третья и четвертая группы сделали то же, только с другими наборами. Эксперты отметили, что данное достижение стало первым шагом к реализации мирового господства техники над людьми.

5. Исследование, позволившее создать софт, который копирует архитектуру человеческого мозга. Человеческий мозг имеет 100 миллиардов клеток, которые связаны между собой 5,4 миллиардами синапсов. Команда IBM создала чип TrueNorth, имеющий 4 миллиарда транзисторов, соединённых 256 миллионами синапсов, что является основой для дальнейшего развития технологии. В ближайших же перспективах этот чип сможет усовершенствовать способности компьютера обрабатывать сложные задания, а также способствует развитию машинного зрения.

6. Исследование, в котором эмбрионные стволовые клетки удалось превратить в клетки, "похожие" на бета-клетки иммунного механизма. Эти клетки особенно важны для борьбы с сахарным диабетом первого типа.

7. Возраст наскальных рисунков в пещерах острова Сулавеси – не менее 40 тысяч лет. Ранее возраст этих рисунков оценивали в 10 тысяч лет.

8. Достижение, которое позволило людям манипулировать памятью мышей с помощью света. В методике под названием оптогенетика исследуют работу нервных клеток через внедрение в их мембрану специальных молекул, которые реагируют на возбуждение

светом. Используя её, учёные могли стирать у мышей память о трагических событиях. В этом же году учёные пошли ещё дальше – им удалось заменить приятные воспоминания ужасными и наоборот.

9. Миниатюрные спутники серии Cubesat, каждая из сторон которых не больше 10 квадратных сантиметров. Собранные сотнями, они способны вести наблюдения за земной поверхностью из точек, недоступных даже большим спутникам.

10. Исследование, после которого к четырём буквам генетического алфавита (A, C, T и G) добавили ещё две – X и Y. Существуют они только в искусственном варианте бактерии *Escherichiacoli*. С их помощью учёные надеются кодировать белки, которых нет в природе, но которые могли бы помочь одолеть неизлечимые сегодня болезни.

По мнению читателей журнала, в 2015 г. прорывами в науке были:

1. Пролёт зонда «Новые горизонты» над Плутоном (35 % голосов). Так, благодаря зонду астрономы узнали, что на Плуtone есть ледяные равнины и вулканы, которые выбрасывают в воздух замёрзшую смесь из льда, азота, аммиака или метана. Кроме того, выяснилось, что небо над Плутоном такого же цвета, как и над Землёй, голубого, а в атмосфере присутствуют смеси органических сополимеров – толинов.

2. Технология редактирования генов CRISPR/Cas9 (20 % голосов), которая уже отмечалась в достижениях 2013 года. В 2015 году метод достиг очень высокой степени развития: китайским учёным удалось с его помощью изменить геном человеческого эмбриона.

3. Обнаружение лимфатической системы головного мозга (15 % голосов). Лимфатическая система — это часть сосудистой системы, благодаря которой по организму позвоночных животных, в том числе и человека, распространяются клетки иммунной системы — лимфоциты. Ранее учёные полагали, что в головном мозге иммунные клетки появляются только тогда, когда в них появляется необходимость, т. е. во время болезни.

4. Вакцина от лихорадки Эбола (10 % голосов). вакцина способна защитить от вируса в 75–100 % случаев.

5. Доказательство существования квантовой запутанности (6 % голосов). Квантовая запутанность означает, что измерение свойств одной квантовой частицы, например, фотона, влияет на другую квантовую частицу, которую в момент измерения от первой частицы могут отделять не просто тысячи километров, а световые годы.

1.4. Организация научной деятельности в России

В соответствии с Законом РФ "О науке и государственной научно-технической политике" научная деятельность в стране может осуществляться физическими лицами (гражданами России, иностранцами, гражданами, лицами без гражданства) и юридическими лицами (организациями, предприятиями и т.п.).

Очевидно, что эффективная научная деятельность возможна только при условии её финансирования. Источниками финансирования научной деятельности в нашей стране являются:

1. Государственный бюджет (госбюджет).
2. Средства юридических и физических лиц.

Для финансирования научной деятельности могут направляться средства из госбюджета различных уровней: федерального и местных (бюджета субъекта Российской Федерации, городского бюджета и т.д.).

Для развития науки используются денежные и иные средства различных юридических и физических лиц: отечественных и зарубежных фондов, предприятий, организаций и фирм, отдельных людей. При этом применяется выделение на конкурсной основе для конкретной научной деятельности *грантов* – денежных и иных средств, передаваемых безвозмездно и безвозвратно.

Управление научной деятельностью в нашей стране осуществляется на основе сочетания принципов государственного регулирования и самоуправления.

Физические лица и юридические лица негосударственной формы собственности имеют право самостоятельно определять все аспекты своей научной деятельности, не противоречащей законодательству страны.

Органы государственной власти в пределах своих полномочий, не нарушающих свободу научного творчества, выполняют следующие основные *функции управления научной деятельностью*:

- определяют приоритетные направления развития науки и техники;
- обеспечивают формирование и функционирование системы государственных научных организаций;
- осуществляют межотраслевую координацию научной деятельности;
- осуществляют разработку и реализацию научных и научно-технических программ и проектов;
- развивают формы интеграции науки и производства;
- осуществляют реализацию достижений науки и техники;

осуществляют контроль над эффективным использованием субъектами научной деятельности предоставленных им государственных средств и имущества;

осуществляют контроль над подготовкой научных кадров.

Так, например, в Указе Президента РФ от 7 июля 2011 г. № 899 «Об утверждении приоритетных направлений развития науки, технологий и техники в Российской Федерации и перечня критических технологий Российской Федерации» в целях модернизации и технологического развития российской экономики и повышения её конкурентоспособности были утверждены следующие приоритетные направления развития науки, технологий и техники в Российской Федерации и перечень критических технологий Российской Федерации.

Приоритетные направления развития науки, технологий и техники в Российской Федерации

1. Безопасность и противодействие терроризму.
2. Индустрия наносистем.
3. Информационно-телекоммуникационные системы.
4. Науки о жизни.
5. Перспективные виды вооружения, военной и специальной техники.
6. Рациональное природопользование.
7. Транспортные и космические системы.
8. Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика.

Перечень критических технологий Российской Федерации

1. Базовые и критические военные и промышленные технологии для создания перспективных видов вооружения, военной и специальной техники.
2. Базовые технологии силовой электротехники.
3. Биокаталитические, биосинтетические и биосенсорные технологии.
4. Биомедицинские и ветеринарные технологии.
5. Геномные, протеомные и постгеномные технологии.
6. Клеточные технологии.
7. Компьютерное моделирование наноматериалов, наноустройств и нанотехнологий.
8. Нано-, био-, информационные, когнитивные технологии.

9. Технологии атомной энергетики, ядерного топливного цикла, безопасного обращения с радиоактивными отходами и отработавшим ядерным топливом.
10. Технологии биоинженерии.
11. Технологии диагностики наноматериалов и наноустройств.
12. Технологии доступа к широкополосным мультимедийным услугам.
13. Технологии информационных, управляющих, навигационных систем.
14. Технологии наноустройств и микросистемной техники.
15. Технологии новых и возобновляемых источников энергии, включая водородную энергетику.
16. Технологии получения и обработки конструкционных наноматериалов.
17. Технологии получения и обработки функциональных наноматериалов.
18. Технологии и программное обеспечение распределённых и высокопроизводительных вычислительных систем.
19. Технологии мониторинга и прогнозирования состояния окружающей среды, предотвращения и ликвидации её загрязнения.
20. Технологии поиска, разведки, разработки месторождений полезных ископаемых и их добычи.
21. Технологии предупреждения и ликвидации чрезвычайных ситуаций природного и техногенного характера.
22. Технологии снижения потерь от социально значимых заболеваний.
23. Технологии создания высокоскоростных транспортных средств и интеллектуальных систем управления новыми видами транспорта.
24. Технологии создания ракетно-космической и транспортной техники нового поколения.
25. Технологии создания электронной компонентной базы и энергоэффективных световых устройств.
26. Технологии создания энергосберегающих систем транспортировки, распределения и использования энергии.
27. Технологии энергоэффективного производства и преобразования энергии на органическом топливе.

Структура государственного управления научной деятельностью в России в 2015 году на федеральном уровне приведена на рис. 1.1.

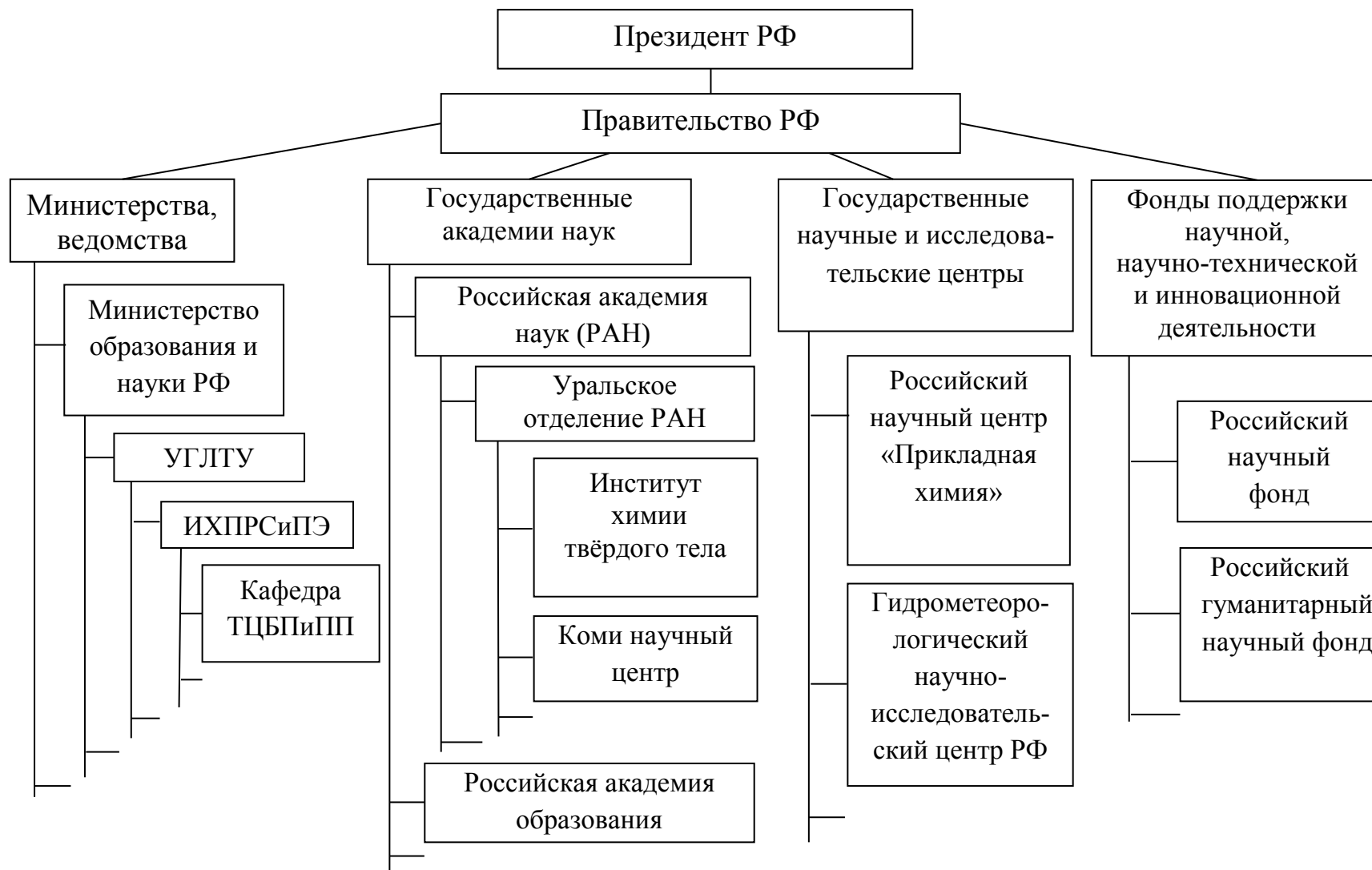


Рис. 1.1. Структура государственного управления научной деятельностью в России в 2015 году на федеральном уровне

Более детальная структура государственного управления научной деятельностью на федеральном уровне имеет свои особенности в рамках различных федеральных министерств и ведомств. Например, во многих федеральных вузах дальнейшая детализация этой структуры представляется схемой: ректор – проректор по научной работе – научно-исследовательская часть (сектор) – кафедры (лаборатории) – исследователи (преподаватели, научные работники, докторанты, аспиранты, студенты).

Структура государственного управления научной деятельностью на уровне субъектов Российской Федерации может быть различной. Так, например, в 2015 году в Свердловской области эта структура выглядела следующим образом (рис. 1.2).

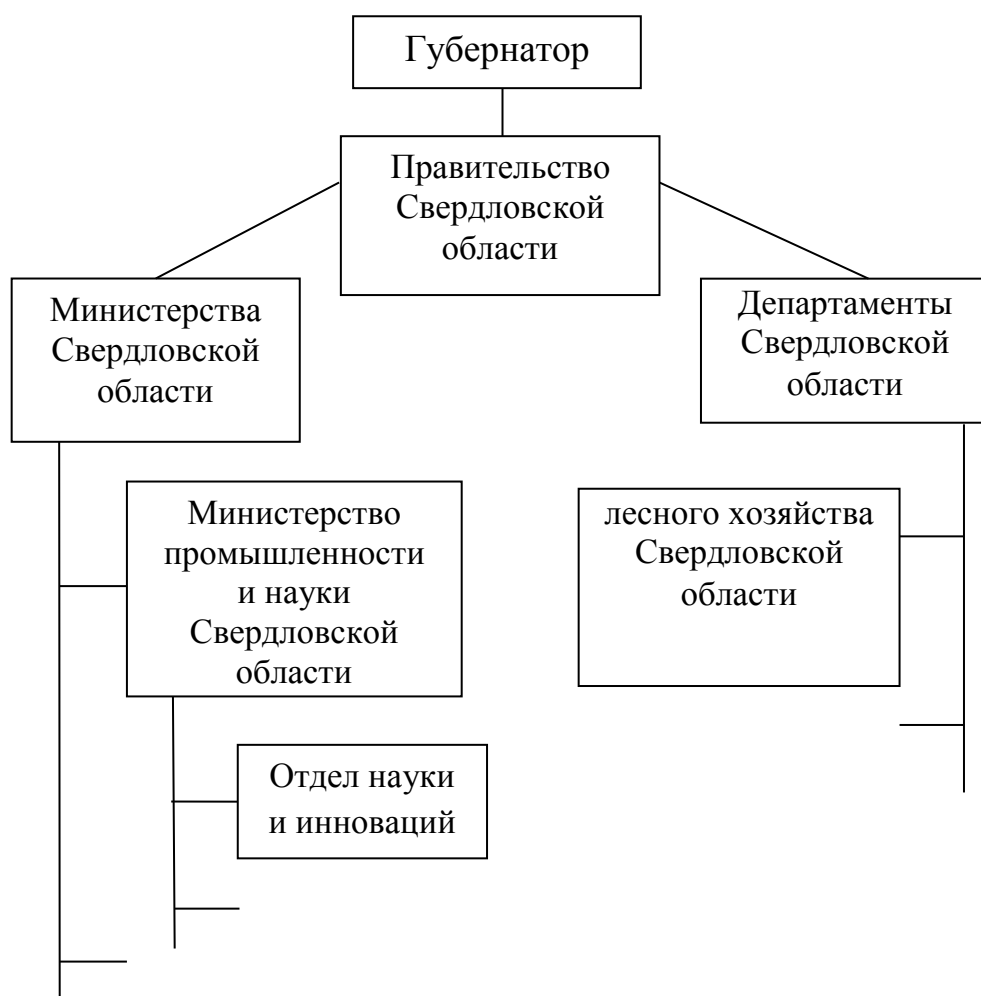


Рис. 1.2. Структура государственного управления научной деятельностью в Свердловской области в 2015 году на уровне субъекта РФ

Специфика научной деятельности требует работников, имеющих специальную профессиональную подготовку. Базовая научная подготовка кадров осуществляется в вузах.

Наличие высшего образования позволяет получить в вузе или научной организации послевузовское образование в аспирантуре (адъюнктуре в военных вузах) за 3-4 года и подготовить диссертацию на соискание учёной степени кандидата наук по различным научным специальностям (кандидат химических наук, кандидат технических наук и т.п.).

После успешного обучения в российском вузе можно получить квалификацию бакалавра или магистра наук по различным направлениям и квалификацию специалиста по различным специальностям.

Эти квалификации свидетельствуют о соответствующих знаниях и компетенциях человека с высшим образованием и в области науки.

Любой человек с высшим образованием может претендовать на учёную степень кандидата наук без обучения в аспирантуре при условии подготовки и успешной защиты диссертации в диссертационном совете, состав которого утверждается Высшим аттестационным комитетом Министерства образования и науки Российской Федерации (ВАК).

Лица, имеющие учёную степень кандидата наук, могут получить учёную степень доктора наук по различным научным специальностям при условии подготовки и успешной защиты соответствующей диссертации в диссертационном совете.

Наличие у лиц учёных степеней (кандидата и доктора наук) подтверждается соответствующими дипломами государственного образца.

Лицам, имеющим глубокие профессиональные знания и достижения не только в науке, но и в педагогике, ВАК присваиваются учёные звания доцента и профессора по соответствующим научным специальностям. Наличие у лиц учёных степеней профессора и доцента подтверждается аттестатами государственного образца.

В системе государственных академий наук предусматривается присвоение учёных званий действительного члена (академика) и члена-корреспондента соответствующих академий наук.

Государство материально стимулирует повышение научной квалификации лиц, работающих в государственных структурах. Для должностей, предусматривающих наличие учёных степеней и званий, устанавливаются соответствующие надбавки к заработной плате.

Для морального стимулирования научной деятельности и признания высокой научной квалификации органами государственной

власти предусматривается присвоение работникам различных почётных званий, например:

заслуженный деятель науки Российской Федерации;

заслуженный деятель науки и техники Российской Федерации.

В заключение данной темы можно сказать следующее:

наука имеет огромное значение для общества;

научная деятельность является одной из самых перспективных и интересных видов деятельности человека;

человек с высшим образованием значительную часть своей деятельности будет посвящать научным исследованиям независимо от специфики его служебной деятельности;

научная квалификация специалиста закладывается во время обучения в вузе и повышается только в результате самостоятельной работы;

уровень научной квалификации специалиста влияет на его имидж, положение в обществе и уровень материального благосостояния.

1.5. Контрольные вопросы и задания

1. Дайте определение терминов «научно-техническая деятельность» и «прикладные научные исследования».

2. Выполнение каких процессов и действий предусматривает термин «научные исследования»?

3. Что определяет развитие науки?

4. Какие общечеловеческие проблемы необходимо решать, по Вашему мнению, в первоочередном порядке?

5. Приведите основные цели прикладной науки.

6. Какие факты из истории науки Вас заинтересовали?

7. Приведите примеры научных событий, оказавших, по Вашему мнению, значительное влияние на развитие общества, и оцените их значимость для сегодняшней жизни.

8. По каким приоритетным направлениям развития науки, технологий и техники в Российской Федерации Вам было бы интересно работать?

9. Предложите схему поиска финансовых средств для выполнения своих научных исследований.

10. Какие условия необходимо выполнить для получения учёной степени кандидата наук?

МЕТОДЫ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

2.1. Классификация методов научных исследований

С философских позиций все *методы научных исследований* можно условно разделить на следующие группы [1, 2, 17]: *всеобщие* (действующие во всех областях науки и на всех этапах научных исследований), *общенаучные* (для всех отраслей науки), *частные или частнонаучные* (для определённых наук), *специальные или специфические* (для данной науки). Такое разделение методов всегда условно, так как по мере развития метода он может переходить из одной категории в другую.

К всеобщим методам научных исследований относятся диалектический и метафизический методы [17]. Метафизика, в отличие от диалектики, не видит взаимосвязи и развития объектов, направлена на абсолютизацию только какой-либо одной стороны познания. Она рассматривает объекты как неизменные и вне связи с другими объектами.

Общенаучные методы используются в самых различных отраслях науки (имеют междисциплинарный спектр применения). Некоторые общенаучные методы применяются только на эмпирическом уровне (наблюдение, эксперимент, измерение); другие – только на теоретическом (идеализация, формализация), а некоторые (например, моделирование) – как на эмпирическом, так и на теоретическом.

В прикладных научных исследованиях широко применяются такие эмпирические методы исследований, как наблюдение, эксперимент, измерение.

Под *наблюдением* подразумевают сбор фактов реально происходящих явлений без существенного вмешательства исследователя в их ход. Примером наблюдения является ежедневный сбор данных о метеорологических условиях местности: температуре и влажности воздуха, направлении и силе ветра.

При *эксперименте* исследователь сознательно вмешивается в обычную среду функционирования изучаемого объекта с помощью материальных средств и изменяет или создаёт новые условия (нетрадиционные и часто экстремальные) для его функционирования.

При наблюдении и эксперименте во многих случаях проводят измерения.

Измерение – это определение значения измеряемой величины путём сравнения её с эталоном. Конечным результатом измерения являются единичные значения измеряемой величины (первичные данные).

Результаты измерений могут иметь качественный или количественный характер. Качественные значения обычно выражаются словами. Количественные значения – числами.

Пример 2.1

Вы измеряли свой рост. Результат измерения можно выразить качественным значением (средний, ниже среднего, выше среднего, низкий, нормальный, высокий и др.). В этом случае за эталон вы приняли рост какого-то человека. Можно представить результат измерения роста и количественным числовым значением, если за эталон вы выбрали какой-нибудь эталон меры (мм, см, м).

Основы обеспечения единства измерений в Российской Федерации регулируются федеральным законом от 26.06.2008 № 102-ФЗ «Об обеспечении единства измерений» и национальными стандартами.

2.2. Количественные измерения

Любой результат измерения имеет погрешность в силу влияния на него различных неизвестных или известных, но нерегулируемых факторов. Поэтому результаты измерений относятся к случайным величинам.

2.2.1. Характеристика результатов измерений как случайных величин

Под случайной величиной понимают величину, принимающую значение, которое нельзя точно предсказать. Случайная величина имеет набор допустимых значений, но в каждом конкретном случае принимает только одно значение из этого набора. Это значение может быть различным при попытке повторения из-за действия случайных (неизвестных или неконтролируемых) факторов. Набор допустимых значений недостаточен для полной характеристики случайной величины. Необходимо ещё указывать вероятность (частоту появления) каждого конкретного значения из этого набора.

Наиболее полной характеристикой любой случайной величины (в том числе и результата измерения) является закон её распределения. *Закон распределения случайной величины* – это соотношения между возможными значениями случайной величины и соответствующими им вероятностями. Закон распределения случайной величины может быть представлен графически, в виде таблицы и математической функции (интегральная или дифференциальная *функция распределения*), из которых можно определить вероятность (P) появления конкретных значений случайной величины.

Различают *дискретные и непрерывные* случайные величины. Примером случайной дискретной величины может быть число студентов, присутствующих на лекции (это число, которое может принимать только целочисленное значение, кратное единице). Примером непрерывной случайной величины является масса тела человека, которая может принимать любое значение.

Известно много функций распределения случайных величин. Наиболее часто для непрерывных величин встречаются нормальное (распределение Гаусса) и экспоненциальное распределение. На нормальном распределении базируются распределения хи-квадрат (Пирсона), Стьюдента, Фишера и др.

Для дискретных величин может наблюдаться биномиальное распределение, распределение Пуассона и др.

Математические выражения функций распределения имеют достаточно сложный вид. На практике часто пользуются табличными и графическими формами функций распределения.

Знание закона распределения позволяет рассчитать некоторые статистические параметры результата измерения как случайной величины, используя методы математической статистики. Некоторые параметры и формулы их расчёта представлены в табл. 2.1

Таблица 2.1

Параметры результатов измерений и их характеристика

Название	Условное обозначение	Расчётная формула	Краткая характеристика
Единичный результат измерения	y_i	-	Результат одного измерения
Выборка единичных результатов измерений	Y_n	-	Конечный ряд единичных результатов измерений ($y_1, y_2, y_3, \dots, y_i, \dots, y_n$)

Продолжение табл. 2.1

Название	Условное обозначение	Расчётная формула	Краткая характеристика
Генеральная совокупность результатов измерений		-	Бесконечный ряд единичных результатов измерений ($y_1, y_2, y_3, \dots, y_i, \dots, y_n, \dots, y_\infty$)
Объем выборки результатов измерений	Y	-	Число единичных (повторных) результатов измерений (число членов в ряду Y_n)
Среднее арифметическое значение результатов измерений	n	$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}$	Один из параметров, наиболее точно оценивающий истинное значение результата измерения
Выборочная дисперсия единичных результатов измерений	s_y^2, S^2	$s_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n-1}$	Параметр, характеризующий рассеивание (разброс) единичных результатов относительно среднего арифметического результата измерения
Генеральная дисперсия единичных результатов измерения	σ_y^2, σ^2	-	Параметр, характеризующий рассеивание (разброс) единичных результатов относительно истинного результата измерения
Выборочное среднее квадратическое (абсолютное стандартное) отклонение единичного результата измерения	S_y	$S_y = \sqrt{s_y^2}$	То же (в единицах измерения y_i)
Выборочное относительное стандартное отклонение единичного результата измерения	$S_{R,y}$	$S_{R,y} = \frac{S_y}{\bar{y}}$	То же (в долях величины $\bar{y}$)

Окончание табл. 2.1

Название	Условное обозначение	Расчётная формула	Краткая характеристика
Выборочная дисперсия среднего арифметического результата измерения	$S_{\bar{y}}^2$	$S_{\bar{y}}^2 = \frac{S_y^2}{n}$	Параметр, характеризующий рассеивание (разброс) средних арифметических результатов измерений относительного истинного результата измерения
Выборочное среднее квадратическое (абсолютное стандартное) отклонение среднего арифметического результата измерения	$S_{\bar{y}}$	$S_{\bar{y}} = \sqrt{S_{\bar{y}}^2}$	Параметр, характеризующий рассеивание (разброс) средних арифметических результатов измерений относительного истинного результата измерения (в единицах измерения y_i)
Выборочное относительное стандартное отклонение среднего арифметического результата измерения	$S_{R,\bar{y}}$	$S_{R,\bar{y}} = \frac{S_{\bar{y}}}{\bar{y}}$	То же (в долях величины $\bar{y}$)
Вероятность получения результата измерения	P	$P = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m_j}{n} \right)$ $P \approx \left(\frac{m_j}{n} \right)$	При большой величине n величина вероятности P приближается к частоте получения данного результата измерения y_i , т.е. отношению числа $y_i (m_j)$ в выборке к общему числу измерений
Уровень значимости (ошибки) при получении результата измерения	α	$\alpha = 1 - P$	При большой величине n величина α приближается к частоте получения результатов измерений, не равных y_i

2.2.2. Погрешности и ошибки измерений

Под погрешностью измерения будем понимать совокупность всех ошибок измерения.

Ошибки измерений можно классифицировать на следующие виды:

грубые;

абсолютные и относительные;

положительные и отрицательные;

постоянные и пропорциональные;

случайные и систематические;

прочие.

Грубая ошибка измерения (промах) возникает при нарушении методики измерения, ошибки при записи результата измерения, поломки прибора во время измерения. Результат измерения, содержащий грубую ошибку, обычно значительно отличается по величине от других результатов. Предположение о наличии в выборке грубых ошибок измерений можно получить методами математической статистики (при числе повторений измерения $n \geq 3$ и наличии не менее трёх различных единичных значений). С методами обнаружения грубых ошибок можно познакомиться самостоятельно в книгах [18-20]. Окончательное решение о наличии в выборке грубых ошибок измерений принимается после тщательной экспертизы соблюдения методики измерений.

Пример 2.2

При измерении величины рН пробы водопроводной воды были получены следующие единичные результаты: 5,8, 5,8; 5,2; 5,4; 5,5; 5,4; 5,3; 5,5. В данной выборке $n = 8$ ($n < 9$) и в выборке более трёх различных значений (пять), то для обнаружения грубых ошибок измерений рН используем статистический критерий Q [18].

Единичные результаты измерений представим в виде вариационного ряда с возрастающими величинами рН (κ_i): 5,2; 5,3; 5,4; 5,4; 5,5; 5,5; 5,8; 5,8. Размах этой выборки (R) будет равен:

$$R = \kappa_6 - \kappa_1 = 5,8 - 5,2 = 0,6.$$

Проверим на грубую ошибку правый крайний член этого ряда (κ_6), который кажется аномальным по сравнению с другими результатами измерений.

Соседний с проверяемым результатом κ_6 , отличающийся от него по величине, является результат $\kappa_4 = 5,5$.

Рассчитаем экспериментальное значение критерия Q ($Q_{\text{эксп}}$):

$$Q_{\text{эксп}} = |5,8 - 5,5| / (5,8 - 5,2) = 0,5.$$

В данных табл. 1 [18, с. 82] находим значение критерия Q ($Q_{\text{табл}}$) для анализируемой выборки ($n = 8$) и выбранной доверительной вероятности $P = 0,95$ (принимая наиболее часто задаваемое значение доверительной вероятности в химии и химической технологии). При вероятности 0,95 для данной выборки $Q_{\text{табл.}} = 0,48$. Так как $Q_{\text{эксп}} > Q_{\text{табл.}}$ ($0,5 > 0,48$), то проверяемый результат (5,8) можно считать грубой ошибкой измерения с доверительной вероятностью 0,95.

Принимаем результат 5,8 за грубую ошибку и исключаем его из выборки. После исключения этого результата возрастающий вариационный ряд примет следующий вид: 5,2; 5,3; 5,4; 5,4; 5,5; 5,5. Проверим на грубую ошибку крайние члены этого ряда (k_1 и k_6).

Для обоих проверяемых результатов $Q_{\text{эксп}} = 0,1/0,3 = 0,33$, а $Q_{\text{табл.}} = 0,56$ ($P = 0,95$; $n = 6$). Так как $Q_{\text{эксп}} < Q_{\text{табл.}}$ ($0,33 < 0,56$), то проверяемые результаты (5,5 и 5,2) можно не считать грубыми ошибками измерения с доверительной вероятностью 0,95. Оставляем результаты 5,5 и 5,2 в выборке, как достоверные.

Абсолютная ошибка единичного результата измерения (A_y) определяется как разность следующих величин:

$$A_y = y_i - y_{\text{ист.}} \approx y_i - \bar{y},$$

где: y_i – единичный результат измерения; $y_{\text{ист.}}$ – истинный результат измерения; $\bar{y}$ – среднее арифметическое значение результата измерения (далее среднее).

Относительная ошибка единичного результата измерения (B_y) рассчитывается как отношение следующих величин:

$$B_y = \frac{y_i - y_{\text{ист.}}}{y_{\text{ист.}}} \approx \frac{y_i - \bar{y}}{\bar{y}} \approx \frac{A_y}{\bar{y}}.$$

Из этой формулы следует, что величина относительной ошибки зависит не только от величины абсолютной ошибки, но и от значения измеряемой величины. При неизменности измеряемой величины ($y \approx \bar{y}$) относительную ошибку измерения можно уменьшить только за счёт снижения величины абсолютной ошибки (A_y). При постоянстве абсолютной ошибки измерения для уменьшения относительной ошибки измерения можно использовать приём увеличения значения измеряемой величины.

Знак ошибки (положительный или отрицательный) определяется разницей между единичным и полученным (средним арифметическим) результатом измерения:

$$y_i - \bar{y} > 0 \text{ (ошибка положительная);}$$

$$y_i - \bar{y} < 0 \text{ (ошибка отрицательная).}$$

Пример 2.3

При определении прочности при статическом изгибе древесностружечной плиты были получены следующие единичные результаты измерений (МПа): 20,3; 20,5; 20,5; 20,1; 20,1. Результаты классификации и определения ошибок этих измерений приведены в табл. 2.2.

Таблица 2.2

Результаты измерений

Названия результатов измерений	Значения результатов измерений	Абсолютная ошибка измерений	Относительная ошибка измерений	Классификация по знаку ошибки
Единичные	20,3 МПа	0 МПа	0,00	-
	20,5 МПа	0,2 МПа	0,01	Положительная
	20,5 МПа	0,2 МПа	0,01	Положительная
	20,1 МПа	-0,2 МПа	-0,01	Отрицательная
	20,1 МПа	-0,2 МПа	-0,01	Отрицательная
Среднее арифметическое	20,3 МПа	-	-	-

Постоянной называется абсолютная ошибка, которая не зависит от значения измеряемой величины.

Ошибка **пропорциональная**, если названная зависимость существует. Характер ошибки измерения (постоянная или пропорциональная) определяется после проведения специальных исследований.

К **случайным ошибкам** относят ошибки, которые не имеют постоянной величины и (или) знака. Такие ошибки возникают под действием следующих факторов:

- неизвестных исследователю;
- известных, но нерегулируемых;
- постоянно изменяющихся.

Случайные ошибки можно оценить только после проведения измерений.

Количественной оценкой модуля величины случайной ошибки измерения могут являться следующие параметры:

выборочная дисперсия единичных значений (S_y^2) и среднего значения ($S_{\bar{y}}^2$);

выборочные абсолютные стандартные отклонения единичных значений (S_y) и среднего значения ($S_{\bar{y}}$);

выборочные относительные стандартные отклонения единичных значений ($S_{R,y}$) и среднего значения ($S_{R,\bar{y}}$);

генеральная дисперсия единичных значений (σ_y), и др.

Случайные ошибки измерения невозможно исключить, их *можно только уменьшить*. Основной способ уменьшения величины случайной ошибки измерения – это увеличение числа единичных измерений (увеличение объёма выборки, n). С увеличением n при постоянстве выборочной дисперсии единичных значений (S_y^2) случайная ошибка среднего будет уменьшаться в соответствии с формулами их расчёта, например:

$$S_{\bar{y}}^2 = S_y^2/n; \quad S_{\bar{y}} = \sqrt{S_{\bar{y}}^2}.$$

Систематические ошибки – это ошибки с неизменными величиной и знаком или изменяющиеся по известному закону. Эти ошибки вызываются постоянными факторами. *Систематические ошибки можно* количественно оценивать, *уменьшать* и даже *исключать*.

Систематические ошибки классифицируют на ошибки I, II и III типов [20].

К *систематическим ошибкам I типа* относят ошибки известного происхождения, которые могут быть до проведения измерения оценены путём расчёта. Эти ошибки можно исключить, вводя их в результат измерения в виде поправок. Примером ошибки такого типа является ошибка при титриметрическом определении объёмной концентрации раствора, если титрант был приготовлен при одной температуре, а измерение концентрации проводилось при другой. Зная зависимость плотности титранта от температуры, можно до проведения измерения рассчитать изменение объёмной концентрации титранта, связанное с изменением его температуры, и эту разницу учесть в виде поправки в результате измерения.

Систематические ошибки II типа – это ошибки известного происхождения, которые можно оценить только в ходе эксперимента или в результате проведения специальных исследований. К этому типу ошибок относят инструментальные (приборные), реактивные, эталонные и др. ошибки. Познакомьтесь с особенностями таких ошибок самостоятельно в книге [20].

Любой прибор при его применении в процедуре измерения вносит в результат измерения свои приборные ошибки. При этом часть

этих ошибок случайная, а другая часть – систематическая. Случайные ошибки приборов отдельно не оценивают, их оценивают в общей совокупности со всеми другими случайными ошибками измерения.

Каждый экземпляр любого прибора имеет свою персональную систематическую ошибку. Для того чтобы оценить эту ошибку, необходимо проводить специальные исследования.

Наиболее надёжный способ оценки приборной систематической ошибки II типа – это сверка работы приборов по эталонам. Для мерной посуды (пипетка, бюретка, цилиндры и др.) проводят специальную процедуру – калибровку.

На практике наиболее часто требуется не оценить, а уменьшить или исключить систематическую ошибку II типа. Самыми распространёнными методами уменьшения систематических ошибок являются *методы релятивизации и рандомизации*. Познакомиться с этими методами можно самостоятельно в книге [20].

К *ошибкам III типа* относят ошибки неизвестного происхождения. Эти ошибки можно обнаружить только после устранения всех систематических ошибок I и II типов.

К *прочим ошибкам* отнесём все другие виды ошибок, не рассмотренные выше (допускаемые, возможные предельные ошибки и др.).

Понятие возможных предельных ошибок применяется в случаях использования средств измерения и предполагает максимально возможную по величине инструментальную ошибку измерения (реальное же значение ошибки может быть меньше величины возможной предельной ошибки).

При использовании средств измерения можно рассчитать возможную предельную абсолютную ($\Pi_{\bar{y}, пр.}$) или относительную ($E_{\bar{y}, пр.}$) погрешность измерения. Так, например, возможная предельная абсолютная погрешность измерения находится как сумма возможных предельных случайных ($\xi_{\bar{y}, случ, пр.}$) и неисклѐнных систематических ($\delta_{\bar{y}, пр.}$) ошибок:

$$\Pi_{\bar{y}, пр.} = \xi_{\bar{y}, случ, пр.} + \delta_{\bar{y}, пр.}$$

При выборках малого объёма ($n \leq 20$) неизвестной генеральной совокупности, подчиняющейся нормальному закону распределения, случайные возможные предельные ошибки измерений (доверительный интервал) можно оценить следующим образом:

$$\xi_{\bar{y}, случ, пр.} = \Delta_{\bar{y}} = S_{\bar{y}} |t_{P, n}|,$$

где: $\Delta_{\bar{y}}$ – доверительный интервал для соответствующей вероятности P ; $t_{P,n}$ – квантиль распределения Стьюдента для вероятности P и выборки объемом n или при числе степеней свободы $f = n - 1$.

Абсолютная возможная предельная погрешность измерения в этом случае будет равна:

$$\Pi_{\bar{y}, пр.} = S_{\bar{y}} |t_{P,n}| + \delta_{\bar{y}, пр.}.$$

Если результаты измерений не подчиняются нормальному закону распределения, то оценка погрешностей проводится по другим формулам.

Определение величины $\delta_{\bar{y}, пр.}$ зависит от наличия у средства измерения класса точности. Если средство измерения не имеет класса точности, то за величину $\delta_{\bar{y}, пр.}$ можно принять минимальную цену деления шкалы средства измерения [20] или единицу последнего разряда числа на электронном табло средства измерения.

Для средства измерения с известным классом точности за величину $\delta_{\bar{y}, пр.}$ можно принять абсолютную допускаемую систематическую ошибку средства измерения ($\delta_{\bar{y}, доп.}$):

$$\delta_{\bar{y}, пр.} \approx |\delta_{\bar{y}, доп.}|.$$

Условные обозначения классов точности средств измерений, включающие числа, прописные буквы латинского алфавита или римские цифры, приводятся в эксплуатационной документации, а также могут наноситься на их циферблаты, щитки и корпусы [21].

Величина $\delta_{\bar{y}, доп.}$ рассчитывается исходя из формул, соответствующих обозначению класса точности средства измерений, например, приведённых в табл. 2.3.

Если известны составляющие абсолютной систематической ошибки среднего арифметического результата измерения (например, приборная ошибка, ошибка метода и др.), то её можно оценить по формуле

$$\delta_{\bar{y}, пр.} = k \sqrt{\sum_{j=1}^m (\delta_{\bar{y}, пр.}^j)^2},$$

где m – число составляющих систематическую ошибку среднего результата измерения; k – коэффициент, определяемый вероятностью P и числом m ; $\delta_{\bar{y}, пр.}^j$ – абсолютная систематическая ошибка отдельной составляющей.

Отдельными составляющими погрешности можно пренебрегать при выполнении соответствующих условий.

Таблица 2.3

Примеры обозначения классов точности средств измерения

Обозначение класса точности		Формула расчёта и значение предельной допускаемой систематической ошибки	Характеристика систематической ошибки
в документации	на средстве измерения		
1,5	1,5	$E_{y, \text{дон.}} = \pm \left(\frac{\delta_{y, \text{дон.}}}{y_N} \right) 100\% = \pm 1,5$	Приведённая допускаемая систематическая ошибка в процентах от номинального значения измеряемой величины, которое определяется типом шкалы средства измерения
1		$E_{y, \text{дон.}} = \pm \left(\frac{\delta_{y, \text{дон.}}}{A} \right) 100\% = \pm 1$	Приведённая допускаемая систематическая ошибка в процентах от длины использованной шкалы средства измерения (A) при получении единичных значений измеряемой величины
0,5		$E_{y, \text{дон.}} = \pm \left(\frac{\delta_{y, \text{дон.}}}{y_i} \right) 100\% = \pm 0,5$	Постоянная относительная допускаемая систематическая ошибка в процентах от полученного единичного значения измеряемой величины
0,02/ 0,01	0,02/ 0,01	$E_{y, \text{дон.}} = \pm \left(\frac{\delta_{y, \text{дон.}}}{y_i} \right) 100\% =$ $\pm \left[c + d \left(\left \frac{y_k}{y_i} \right - 1 \right) \right];$ $c = 0,02; d = 0,01$	Пропорциональная относительная допускаемая систематическая ошибка в долях от полученного единичного значения измеряемой величины, которая возрастает при увеличении конечного значения диапазона измерения данным средством измерения (y_k) или уменьшении единичного значения измеряемой величины (y_i)

Систематическими ошибками можно пренебрегать, если выполняется неравенство

$$\frac{\delta_{\bar{y}, пр.}}{S_{\bar{y}}} < 0,8.$$

В этом случае принимают

$$\Pi_{\bar{y}, пр.} \approx \xi_{\bar{y}, случ, пр.} \approx \Delta_{\bar{y}} \approx S_{\bar{y}} |t_{P, n}|.$$

Случайными ошибками можно пренебречь при условии

$$\frac{\delta_{\bar{y}, пр.}}{S_{\bar{y}}} > 8.$$

Для этого случая $\Pi_{\bar{y}, пр.} \approx \delta_{\bar{y}, пр.}$.

Чтобы общая погрешность измерения определялась только систематическими ошибками, увеличивают число повторных измерений. Минимально необходимое для этого число повторных измерений (n_{min}) можно рассчитать только при известном значении генеральной совокупности единичных результатов по формуле

$$n_{min} = 64 \frac{\sigma_y^2}{(\delta_{\bar{y}, пр.})^2}.$$

Оценка погрешностей измерения зависит не только от условий измерения, но и от типа измерения (прямое или косвенное).

Деление измерений на прямые [22] и косвенные [23] достаточно условно. В дальнейшем под *прямыми измерениями* будем понимать измерения, значения которых берут непосредственно из опытных данных, например, считывают со шкалы прибора (широко известный пример прямого измерения – измерение температуры термометром). К *косвенным измерениям* будем относить такие, результат которых получают на основании известной зависимости между искомой величиной и величинами, определяемыми в результате прямых измерений. При этом *результат* косвенного измерения *получают расчётным путём* как значение функции φ , аргументами которой являются результаты прямых измерений ($x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_k$).

Необходимо знать, что ошибки косвенных измерений всегда больше, чем ошибки отдельных прямых измерений.

Ошибки косвенных измерений оцениваются по соответствующим законам накопления ошибок (при $k \geq 2$).

Закон накопления случайных ошибок косвенных измерений выглядит следующим образом [19]:

$$S_y^2 = \sum_{j=1}^k \left(\frac{d\varphi}{dx_j} \right)^2 S_{x_j}^2; \quad S_{\bar{y}}^2 = \sum_{j=1}^k \left(\frac{d\varphi}{d\bar{x}_j} \right)^2 S_{\bar{x}_j}^2.$$

Закон накопления возможных предельных абсолютных систематических ошибок косвенных измерений представляется следующими зависимостями:

$$\delta_{y, пр.} = \sum_{j=1}^k \left| \frac{d\varphi}{dx_j} \right| \delta_{x_j, пр.}; \quad \delta_{\bar{y}, пр.} = \sum_{j=1}^k \left| \frac{d\varphi}{d\bar{x}_j} \right| \delta_{\bar{x}_j, пр.}.$$

Закон накопления возможных предельных относительных систематических ошибок косвенных измерений имеет следующий вид:

$$E_{y, сист, пр.} = \frac{\delta_{y, пр.}}{\bar{y}} = \sum_{j=1}^k \left| \frac{d \ln \varphi}{dx_j} \right| \delta_{x_j, пр.};$$

$$E_{\bar{y}, сист, пр.} = \frac{\delta_{\bar{y}, пр.}}{\bar{y}} = \sum_{j=1}^k \left| \frac{d \ln \varphi}{d\bar{x}_j} \right| \delta_{\bar{x}_j, пр.}.$$

В случаях, когда искомая величина (y) рассчитывается как функция результатов нескольких независимых прямых измерений вида $y = f \left(\frac{x_1 x_2 \dots x_j}{x_{j+1} \dots x_k} \right)$, закон накопления предельных относительных систематических ошибок косвенных измерений принимает более простой вид:

$$E_{y, сист, пр.} = \sum_{j=1}^k E_{x_j, сист, пр.}; \quad E_{\bar{y}, сист, пр.} = \sum_{j=1}^k E_{\bar{x}_j, сист, пр.}.$$

Ошибки и погрешности измерений определяют их точность, воспроизводимость и правильность.

Точность тем выше, чем меньше величина погрешности измерения.

Воспроизводимость результатов измерений улучшается при уменьшении случайных ошибок измерений.

Правильность результата измерений увеличивается с уменьшением остаточных систематических ошибок измерений.

Более подробно с теорией ошибок измерений и их особенностями можно познакомиться самостоятельно [19, 20].

Современные формы представления конечных результатов измерений обязательно требуют представления в них ошибок или погрешностей измерения (вторичных данных). При этом погрешности и ошибки измерений должны представляться *числами*, которые содержат не более *двух значащих цифр* [18].

2.2.3. Формы представления конечных результатов измерений

Для представления количественных результатов измерений (при неизвестных параметрах генеральной совокупности) можно использовать следующие формы [22]:

форма 1 – при одном единичном значении результата измерений ($n = 1$):

$$y = y_1 \pm \delta_{\bar{y}, пр.};$$

форма 2 – при наличии нескольких единичных результатов измерений ($n \geq 2$) и отсутствии сведений о функции их распределения:

$$y = \bar{y}; S_{\bar{y}}; n; \delta_{\bar{y}, пр.};$$

форма 3 – при наличии нескольких единичных результатов измерений ($n \geq 2$) и знании функции их распределения:

а) $y = \bar{y} \pm \Pi_{\bar{y}}; P$ (при симметричной погрешности);

б) $y = \bar{y}; \Pi_{\bar{y}}$ от $\Pi_{\bar{y}, н}$ до $\Pi_{\bar{y}, в}; P$ (для несимметричной погрешности, где $\Pi_{\bar{y}}$ – общая абсолютная погрешность; $\Pi_{\bar{y}, н}$ – нижняя граница общей абсолютной погрешности, а $\Pi_{\bar{y}, в}$ – верхняя граница общей абсолютной погрешности).

При окончательном представлении фактического результата измерения число значащих цифр и разрядов после десятичной запятой должно быть скорректировано исходя из точности математических вычислений и погрешности измерения.

2.3. Примеры статистической оценки и анализа количественных результатов наблюдений и экспериментов

К результатам измерений как к случайным величинам при их оценке и анализе необходимо подходить с позиций теории вероятностей и математической статистики. Приведём некоторые из наиболее распространённых процедур статистической оценки и анализа результатов количественных измерений в прикладных научных исследованиях.

2.3.1. Получение и представление окончательного результата количественных многократных измерений

Рассмотрим пример статистической обработки и представления окончательного результата количественных многократных измерений.

Пример 2.4

При трехкратном взвешивании образца на аналитических весах (класс точности $(0,01)$) были считаны с табло весов следующие единичные результаты измерения массы образца (неисправленные результаты единичных измерений, m'_i): 1,2348; 1,2356; 1,2345; 1,2356 г. Результаты метрологической поверки весов свидетельствуют об их отрицательной постоянной абсолютной систематической ошибке λ_m , равной минус 0,0003 г.

Значения исправленных единичных результатов измерений (m_i) рассчитаем по формуле

$$m = m' - \lambda_m.$$

Тогда ряд исправленных единичных результатов измерения массы образца будет иметь вид: 1,2351; 1,2359; 1,2348; 1,2359 г.

Первоначально проведём поиск грубых ошибок измерения (промахов). Так как для данной выборки $n < 8$ ($n = 4$), то согласно [18] для обнаружения промахов можно использовать критерий Q .

Единичные результаты измерений представим в виде нового ряда с возрастающими величинами массы образца: 1,2348; 1,2351; 1,2359; 1,2359 г. Проверим на промахи крайние члены этого нового ряда m_1 и m_4 , которые кажутся сомнительными.

Для членов ряда, m_1 и m_4 , определим соответствующие им экспериментальные значения критерия ($Q_{\text{экс.}}^i$) по формулам

$$Q_{\text{экс.}}^1 = \frac{|m_1 - m_2|}{R}; \quad Q_{\text{экс.}}^4 = \frac{|m_4 - m_2|}{R}.$$

Вычисленные значения $Q_{\text{экс.}}^i$ будут равны:

$$Q_{\text{экс.}}^1 = \frac{|m_1 - m_2|}{m_4 - m_1} = \frac{|1,2348 - 1,2351|}{1,2359 - 1,2348} = 0,27273 \approx 0,27.$$

$$Q_{\text{экс.}}^4 = \frac{|m_1 - m_2|}{m_4 - m_1} = \frac{|1,2359 - 1,2351|}{1,2359 - 1,2348} = 0,72727 \approx 0,73.$$

Из табл. 2.4 выбираем табличное значение критерия Q ($Q_{\text{табл.}} = 0,77$) для объёма выборки $n = 4$ и доверительной вероятности $P = 0,95$ (принимая наиболее часто задаваемое значение доверительной вероятности во многих отраслях науки и техники).

Так как в обоих случаях $Q_{\text{табл.}} (0,77) > Q_{\text{экс.}}$, то проверяемые результаты с вероятностью 0,95 не являются грубыми ошибками измерения и поэтому оставляем их в выборке для дальнейшей статистической обработки.

Таблица 2.4

Значения критерия Q для различных значений
доверительной вероятности [18]

Объем выборки n	P		
	0,90	0,95	0,99
3	0,89	0,94	0,99
4	0,68	0,77	0,89
5	0,56	0,64	0,76
6	0,48	0,56	0,70
7	0,43	0,51	0,64
8	0,40	0,48	0,58

Поскольку истинный закон распределения результатов измерений массы образца неизвестен, то для представления окончательного результата измерения выберем вышеприведённую форму 2:

$$m = \bar{m}; S_{\bar{m}}; n; \delta_{\bar{m}, пр.}$$

Выполним следующие расчёты с учётом точности математических вычислений со случайными числами и правил округления [18].

Определим среднее арифметическое значение массы образца ($\bar{m}$):

$$\bar{m} = \frac{\sum_{i=1}^n m_i}{n} = \frac{1,2359 + 1,2359 + 1,2348 + 1,2351}{4} = 1,235425 \approx 1,2354 \text{ г}$$

(оставляем в результате вычисления пять значащих цифр с учётом точности сложения случайных чисел).

Рассчитаем выборочное абсолютное стандартное отклонение среднего арифметического значения ($S_{\bar{m}}$), оценивающее случайную ошибку измерения:

$$S_m^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (m_i - \bar{m})^2}{n-1} = \frac{2(1,2359 - 1,2354)^2 + (1,2348 - 1,2354)^2 + (1,2351 - 1,2354)^2}{4-1} =$$

$$= 3,15833 \cdot 10^{-7} \approx 3,1583 \cdot 10^{-7} (\text{г})^2;$$

$$S_m = \sqrt{S_m^2} = \sqrt{31,583 \cdot 10^{-8}} = 5,61991 \cdot 10^{-4} \approx 5,6199 \cdot 10^{-4} \text{ г};$$

$$S_{\bar{m}} = \frac{S_m}{\sqrt{n}} = \frac{5,6199 \cdot 10^{-4}}{\sqrt{4}} = 2,80995 \cdot 10^{-4} \approx 2,8100 \cdot 10^{-4} \text{ г} \approx 3 \cdot 10^{-4}$$

(в случайной ошибке оставляем только первую значащую цифру с учётом округления).

Делаем допущение, что систематические ошибки весов превосходят прочие неисключённые систематические ошибки, которыми пренебрегаем. По классу точности весов рассчитаем возможную предельную абсолютную систематическую ошибку измерений ($\delta_{\bar{m}, пр.}$) по допускаемой систематической ошибке весов.

Исходя из величины (0,01) и обозначения (замкнутый контур) класса точности весов, допускаемая относительная систематическая ошибка весов ($E_{\bar{m}, доп.}$) равна 0,01%, а формула для её расчёта выглядит следующим образом:

$$E_{\bar{m}, доп.} = \pm \left(\frac{\delta_{\bar{m}, доп.}}{\bar{y}} \right) 100 \% = \pm 0,01 \%$$

Тогда возможная предельная систематическая ошибка среднего арифметического значения без учёта знака будет равна:

$\delta_{\bar{m}, пр.} = \delta_{\bar{m}, доп.} = E_{\bar{m}, доп.} \cdot \bar{m} / 100 = 0,01 \cdot 1,2354 / 100 = 1,2354 \cdot 10^{-4} \approx \approx 1 \cdot 10^{-4} \text{ г} \approx 1 \cdot 10^{-7} \text{ кг}$ (в систематической ошибке оставляем только первую значащую цифру с учётом округления).

Сделаем допущение, что результаты измерения массы образца подчиняются нормальному закону распределения и рассчитаем возможную абсолютную предельную погрешность среднего арифметического значения ($\Pi_{\bar{m}, пр.}$) по формуле

$$\Pi_{\bar{m}, пр.} = \delta_{\bar{m}, пр.} + |t_{P, n}| S_{\bar{m}},$$

где $t_{P, n}$ – квантиль распределения Стьюдента для вероятности P при объёме выборки n .

Из распределения Стьюдента для доверительной вероятности $P = 0,95$ (уровне значимости 0,05) при объёме выборки $n = 4$ (число степеней свободы $f = n - 1 = 3$) находим квантиль двухстороннего распределения Стьюдента в среде программы Excel с помощью функции «СТЮДРАСПРОБР» [24]: $|t_{P, n}| \approx 3,18$.

Тогда:

$\Pi_{\bar{m}, пр.} = 1,2354 \cdot 10^{-4} + 3,18 \cdot 2,8100 \cdot 10^{-4} = 1,01712 \cdot 10^{-3} \approx 0,001 \text{ г} \approx \approx 1 \cdot 10^{-6} \text{ кг}$ (в погрешности оставляем только первую значащую цифру с учётом округления).

Средний арифметический результат измерения скорректируем по разряду первой значащей цифры в возможной абсолютной предельной погрешности измерения, т. е. до третьего знака после запятой:

$$\bar{m} = 1,2354 \approx 1,235 \text{ г} \approx 1,235 \cdot 10^{-3} \text{ кг}.$$

Таким образом, по форме 2 при применении принципа приведения одной первой значащей цифры в погрешности и ошибках измерения, окончательный результат измерения массы образца в системе СИ будет выглядеть следующим образом:

$$m = 1,235 \cdot 10^{-3} \text{ кг}; \quad S_{\bar{m}} = 3 \cdot 10^{-7} \text{ кг}; \quad n = 4; \quad \delta_{\bar{m}, \text{пр.}} = 1 \cdot 10^{-7} \text{ кг}.$$

При применении принципа приведения двух первых значащих цифр в погрешности и ошибках измерения окончательный результат измерения массы образца будет следующим:

$$m = 1,2354 \cdot 10^{-3} \text{ кг}; \quad S_{\bar{m}} = 2,8 \cdot 10^{-7} \text{ кг}; \quad n = 4; \quad \delta_{\bar{m}, \text{пр.}} = 1,2 \cdot 10^{-7} \text{ кг}.$$

2.3.2. Оценка и сравнение случайных ошибок измерений

На практике может возникнуть необходимость сравнения случайных ошибок методов измерения, средств измерения, исследователей, лабораторий. Для этих целей применяется статистическая процедура сравнения дисперсий результатов измерений различных выборок. Основная статистическая гипотеза, которая при этом проверяется, – можно ли считать сравниваемые дисперсии равными друг другу (однородными). Если сравниваемые дисперсии однородны, то можно делать вывод о равенстве случайных ошибок в выборках и об одинаковой воспроизводимости измерений в них.

Сравнение двух дисперсий

Рассмотрим две выборки:

$$a_1, a_2, a_3, \dots, a_i, \dots, a_{n_1};$$

$$b_1, b_2, b_3, \dots, b_i, \dots, b_{n_2}.$$

Выборочные дисперсии единичных значений для них рассчитываются по формулам

$$S_a^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n_1} (a_i - \bar{a})^2}{n_1 - 1}; \quad S_b^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n_2} (b_i - \bar{b})^2}{n_2 - 1}.$$

Данные дисперсии определяются со степенями свободы f , которые являются знаменателями в формулах для расчёта соответствующих дисперсий:

$$f_a = n_1 - 1 \text{ и } f_b = n_2 - 1.$$

Для статистической проверки равенства двух дисперсий выбирают из них по величине максимальную S_{max}^2 и минимальную S_{min}^2 дисперсию и рассчитывают F -соотношение (F_p) по следующей формуле

$$F_p = \frac{S_{max}^2}{S_{min}^2}.$$

Затем по закону распределения Фишера в зависимости от значений F_p , степеней свободы f_a и f_b рассчитывают соответствующую им вероятность P вывода о равенстве дисперсий, либо для заданной доверительной вероятности определяют критическое значение квантиля распределения Фишера ($F_{кр.}$). При определении $F_{кр.}$ в качестве f_1 используют степень свободы максимальной по величине дисперсии, а в качестве f_2 – степень свободы минимальной дисперсии.

Если рассчитанное значение F_p превосходит определённое $F_{кр.}$ ($F_p > F_{кр.}$), то с доверительной вероятностью P можно считать дисперсии различными (неоднородными). В противном случае ($F_p \leq F_{кр.}$) для заданной доверительной вероятности P можно предположить, что дисперсии равны (однородны).

Пример 2.5

Два лаборанта определяли прочность на сжатие грунта ($\sigma_{сж.}$, МПа) одной и той же пробы и получили следующие единичные результаты измерений (a_i и b_i):

первый лаборант – 20,3; 20,5; 20,5; 20,1; 20,1 МПа (a_i);

второй лаборант – 20,1; 20,1; 20,1; 20,3; 20,1 МПа (b_i).

Для сравнения случайных ошибок измерений рассчитаем и проведём статистическое сравнение дисперсий единичных значений выборок a и b :

$$S_a^2 = \sum_1^5 (a_i - \bar{a})^2 / (n_a - 1) = 0,04 \text{ МПа}^2,$$

$$S_b^2 = \sum_1^5 (b_i - \bar{b})^2 / (n_b - 1) = 0,008 \text{ МПа}^2.$$

Составим F -отношение максимальной дисперсии к минимальной:

$$F_p = \frac{S_{max}^2}{S_{min}^2} = \frac{S_a^2}{S_b^2} = \frac{0,04}{0,008} = 5.$$

Из закона распределения Фишера для доверительной вероятности $P = 0,95$ (уровне значимости 0,05) для $f_a = f_b = 5 - 1 = 4$ находим критический квантиль одностороннего распределения Фишера ($F_{кр.}$) в среде программы Excel с помощью функции «FРАСПРОБР» [24]: $F_{кр.} \approx 6,39$.

Так как $F_p < F_{кр.}$ ($5 < 6,39$), то следует считать сравниваемые дисперсии равными (однородными), то есть случайные ошибки измерений прочности на сжатие грунта у лаборантов одинаковыми, а результаты измерений воспроизводимыми.

Для проверки однородности двух дисперсий можно использовать инструмент анализа «Двухвыборочный F-тест для дисперсии» надстройки «Анализ данных» программы Excel [24, с. 287]. Полученные результаты проверки статистической гипотезы $S_a^2 = S_b^2$ для уровня значимости 0,05 приведены в табл. 2.5.

Таблица 2.5

Результаты проверки статистической гипотезы $S_a^2 = S_b^2$
в программе Excel

Параметры	Переменная 1 (a)	Переменная 2 (b)
Среднее	20,3	20,14
Дисперсия	0,04	0,008
Наблюдения	5	5
df	4	4
F	5	
$P(F \leq f)$ одностороннее*	0,074074074	
F критическое одностороннее	6,388232909	

* - вероятность неравенства дисперсий.

Сравнение нескольких дисперсий выборок одинакового объёма

Пример 2.6

В лабораториях трёх организаций провели измерение влажности одного образца древесностружечной плиты (ДСтП) тремя различными методами. Получены следующие результаты:

Номер организации	Результаты единичных измерений влажности образца ДСтП, %
1	5,8; 5,2; 5,4; 5,3; 5,5
2	5,5; 5,1; 5,0; 5,3; 5,0
3	5,4; 5,1; 5,0; 5,7; 5,0

Необходимо сопоставить случайные ошибки измерений тремя методами.

Сделаем допущение, что результаты измерений влажности образца ДСтП имеют нормальное распределение в каждой из трёх выборок ($k=3$). Так как объёмы выборок одинаковы $n_1 = n_2 = n_3 = n_j = 5$, то для сравнения дисперсий S_1^2, S_2^2, S_3^2 можно использовать критерий Кохрена G [19, 24]. С этой целью сначала вычислим расчётное значение G_p :

$$G_p = \frac{S_{\max}^2}{\sum_{j=1}^k S_j^2} = \frac{0,093}{0,053 + 0,047 + 0,093} \approx 0,4819,$$

где $S_{\max}^2$ – максимальная дисперсия.

Затем по закону бета-распределения для доверительной вероятности $P = 0,95$ (уровне значимости $\alpha = 0,05$) и степени свободы $\nu = n-1$ находим критическое значение квантиля правостороннего распределения Кохрена ($G_{кр.}$) в среде программы Excel с помощью функции «БЕТАОБР» [24, с. 294]: $G_{кр.} \approx 0,7457$.

Так как $G_p < G_{кр.}$ ($0,4819 < 0,7457$), то с доверительной вероятностью $0,95$ следует считать сравниваемые дисперсии равными (однородными), т. е. случайные ошибки измерений влажности образца ДСтП одинаковыми у всех трёх организаций.

Сравнение двух средних

Сравнение средних – это довольно часто возникающая необходимость при арбитраже результатов измерений (например, при спорах о показателях качества продукции между производителем и потребителем).

Пример 2.7

В заводской лаборатории были проанализированы пробы воздуха рабочей зоны одного из цехов и выявлены следующие концентрации формальдегида в воздухе (мг/м^3 воздуха), a_i : 0,35; 0,40; 0,33.

В Роспотребнадзоре при контрольной проверке предприятия был получен другой ряд значений концентрации формальдегида (мг/м^3 воздуха), b_i : 0,41; 0,37; 0,43; 0,45; 0,39.

Рассчитаем и проведём сравнение дисперсий единичных результатов измерений концентраций формальдегида в воздухе рабочей зоны, проведённых на заводе ($S_{зав}^2$) и контролирующим органом ($S_{контр}^2$). Сделаем допущение, что результаты измерений в обеих выборках подчиняются нормальному закону распределения. Для проверки одно-

родности дисперсий используем инструмент анализа «Двухвыборочный F-тест для дисперсии» надстройки «Анализ данных» программы Excel. Полученные результаты проверки статистической гипотезы $S_{зав.}^2 = S_{контр.}^2$ для уровня значимости 0,05 приведены в табл. 2.6.

Таблица 2.6

Результаты проверки статистической гипотезы $S_{зав.}^2 = S_{контр.}^2$ в программе Excel

Параметры	Переменная 1 (a)	Переменная 2 (b)
Среднее	0,36	0,41
Дисперсия	0,0013	0,001
Наблюдения	3	5
df	2	4
F	1,3	
$P(F \leq f)$ одностороннее	0,367309458	
F критическое одностороннее	6,94427191	

Из данных табл. 2.6 следует, что проверяемая статистическая гипотеза с доверительной вероятностью 0,95 не выполняется, так как $F < F_{кр}$ ($1,3 < 6,94$). Следовательно, сравниваемые дисперсии равны (однородны).

Для сравнения между собой средних арифметических значений (средних) двух нормально распределённых выборок с однородными дисперсиями можно использовать распределение Стьюдента.

Для статистической проверки равенства двух средних ($\bar{a}$ и $\bar{b}$ из вышеприведённых выборок a_i и b_i) рассчитаем параметр t^* по следующим формулам [20]:

$$t^* = \frac{|\bar{b} - \bar{a}|}{S_{ab} \sqrt{\frac{n_a + n_b}{n_a n_b}}}; \quad S_{ab} = \sqrt{\frac{S_a^2(n_a - 1) + S_b^2(n_b - 1)}{n_a + n_b - 2}}.$$

Значение выборочного средневзвешенного абсолютного стандартного отклонения S_{ab} будет равно:

$$S_{ab} = \sqrt{\frac{0,0013(3-1) + 0,001(5-1)}{3+5-2}} \approx 0,033 \text{ мг/м}^3$$

Вычислим параметр t^* :

$$t^* = \frac{0,41 - 0,36}{0,033} \sqrt{\frac{3 \cdot 5}{3 + 5}} \approx 2,06.$$

Из распределения Стьюдента для доверительной вероятности $P = 0,95$ (уровне значимости $0,05$) при числе степеней свободы $f = n_a + n_b - 2 = 6$ находим квантиль одностороннего распределения Стьюдента ($t_{кр.}$) в среде программы Excel с помощью функции «СТЮДРАСПРОБР» [24]: $t_{кр.} \approx 1,94$.

Так как $t^* > t_{кр.}$ ($2,06 > 1,94$) следует отвергнуть статистическую гипотезу равенства средних результатов измерения содержания формальдегида в воздухе рабочей зоны, полученных на заводе и в Рособрнадзоре. С доверительной вероятностью $0,95$ эти результаты следует считать различными.

В программе Excel в надстройке «Анализ данных» есть несколько инструментов анализа для сравнения средних, в том числе инструмент «Двухвыборочный t-тест с одинаковыми дисперсиями» [24, с. 272]. Результаты расчётов с помощью данного инструмента анализа представлены в табл. 2.7.

Таблица 2.7

Результаты проверки статистической гипотезы равенства двух средних с одинаковыми дисперсиями в программе Excel

Параметры	Переменная 1 (b)	Переменная 2 (a)
Среднее	0,41	0,36
Дисперсия	0,001	0,0013
Наблюдения	5	3
Объединённая дисперсия	0,0011	
Гипотетическая разность средних	0	
df	6	
t-статистика	2,06430706	
$P(T \leq t)$ одностороннее	0,042275466*	
t критическое одностороннее	1,943180281	
$P(T \leq t)$ двухстороннее	0,084550933	
t критическое двухстороннее	2,446911851	

* - вероятность равенства средних.

В заключение данной главы отметим, что в прикладных научных исследованиях во многих случаях невозможно обойтись без применения таких эмпирических методов, как наблюдение и эксперимент. При наблюдении и эксперименте наиболее часто проводят количественные измерения параметров и свойств изучаемого объекта. Так как любые результаты измерений являются случайными величинами (из-за невозможности исключения ошибок измерения), то подход к ним должен основываться на методах математической статистики и теории вероятностей. Современные знания, умения и навыки в области метрологии (науки об измерениях) определяют уровень профессиональной компетенции и технической культуры специалиста с высшим образованием.

2.4. Контрольные вопросы и задания

1. Какие эмпирические методы познания наиболее часто используют в прикладных научных исследованиях?
2. В чём заключается принципиальное отличие наблюдения от эксперимента?
3. Почему результаты количественных измерений относятся к случайным числам?
4. Что является наиболее полной характеристикой результата измерения?
5. Как можно обнаружить наличие грубых ошибок в результатах измерения?
6. Какими методами можно уменьшить случайные и систематические ошибки?
7. Какова величина возможной предельной абсолютной систематической ошибки ваших часов?
8. Проведите измерение роста Вашего тела и приведите конечный результат измерения в современной форме.
9. Сравните случайные ошибки измерений роста Вашего тела, проведённые Вашими близкими.
10. Определите абсолютную допускаемую систематическую ошибку электросчётчика для Вашей квартиры.

СОСТАВ ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

В состав прикладных научных исследований входят различные виды работ – от разработки теоретической гипотезы до организации серийного производства новой продукции (веществ, материалов, конструкций, оборудования, компьютерных программ и др.).

При выполнении прикладных научных исследований (часто называемых НИОКР) могут проводиться научно-исследовательские (НИР), опытно-технологические (ОТР) и опытно-конструкторские (ОКР) работы [25]. Конкретный состав работ при выполнении прикладных научных исследований обычно определяет их заказчик. Возможно выполнение работ по инициативе разработчика.

Заказчиком может выступать юридическое или физическое лицо, обеспечивающее финансирование работ, по договору с которым производится создание научно-технической продукции.

Полная схема последовательности выполнения частей и разделов прикладных НИР представлена на рис. 3.1.

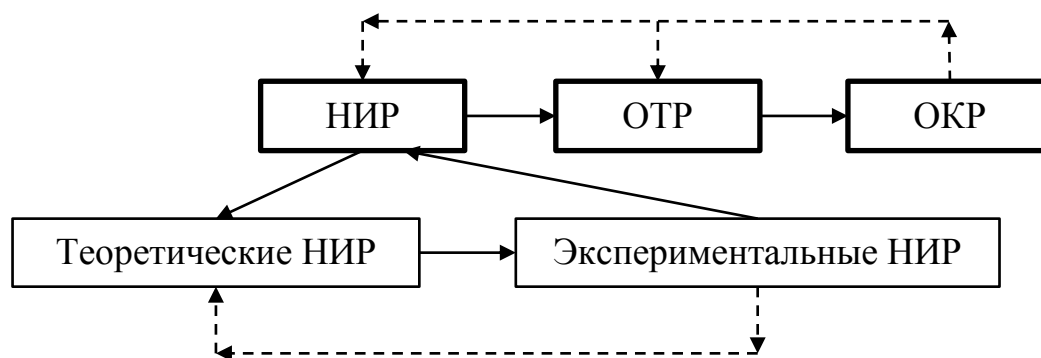


Рис. 3.1. Последовательность выполнения прикладных научных исследований

Пунктирные линии на рис. 3.1 показывают возможную цикличность выполнения работ при не достижении поставленных целей соответствующей части (раздела) прикладных НИР. Так, например, от ОКР возможен возврат к НИР и (или) ОКР для проведения дополнительных исследований. Предлагаются и другие схемы выполнения

НИОКР, например, при планировании научных исследований по созданию новой техники [26, 27].

В большинстве случаев выполнение прикладных научных исследований начинается с выполнения научно-исследовательских работ.

3.1. Прикладные научно-исследовательские работы

В рамках прикладных НИР могут выполняться теоретические и экспериментальные НИР.

Теоретические НИР направлены на разработку рабочих гипотез и теоретических моделей объектов исследования.

Экспериментальные НИР связаны с выбором объекта, направлений и методов исследований, проверкой рабочих гипотез и теоретических моделей объектов исследований, разработкой экспериментальных образцов.

Научно-исследовательские работы (по определению в ГОСТ 15.101-98 [28]) – это комплекс теоретических и (или) экспериментальных исследований, проводимых с целью получения обоснованных исходных данных, изыскания принципов и путей создания (модернизации) продукции. Одна из отличительных особенностей этих работ – их творческий характер.

Целями прикладных НИР могут быть исследование и разработка (модернизация) методов, отдельных технических (конструкторских, программных, технологических) решений, ориентированных на создание новых видов продукции и технологий.

Научно-техническими задачами прикладных НИР могут являться: разработка новых принципов, методических подходов, методов, алгоритмов в исследуемой области, а также прототипов различных технических решений прикладных научно-технических проблем;

создание научно-методических и нормативно-технических документов (методик исследований, стандартов, алгоритмов, программ, лабораторных регламентов и т.п.);

разработка, моделирование, макетирование и экспериментальные исследования отдельных технических (конструкторских, программных, технологических) решений, изготовление моделей, макетов, экспериментальных образцов, прототипов новых типов (видов) продукции, технологических процессов, оборудования;

разработка (формулировка) технических требований для выполнения работ (ОКР, ОТР) по созданию новых (усовершенствованных) видов продукции, технологий.

Результатами прикладных НИР могут быть:

научно-технический задел для создания новых (модернизации существующих) видов продукции и технологий;

отдельные технические (конструкторские, программные, технологические) решения в различных прикладных областях.

проекты технических требований на выполнение ОКР, ОТР.

Одним из основных признаков выполнения прикладных НИР является новизна получаемых результатов и возможность создания новых объектов интеллектуальной собственности (изобретений, полезных моделей и промышленных образцов).

Конкретное содержание целей и задач, разделов работы, объёмы и сроки их выполнения, предполагаемые результаты прикладных НИР указываются в техническом задании и календарном плане выполнения НИР, юридически оформленных со стороны заказчика и исполнителя (разработчика) НИР.

Основными видами работ, характеризующими НИР, и позволяющими отнести их к признакам НИР, являются:

подготовка обзора научно-технических достижений в исследуемой области;

проведение патентных исследований;

проведение теоретических исследований;

проведение моделирования, макетирования;

проведение экспериментальных исследований.

Существуют разные подходы к выделению и характеристике *этапов НИР*.

Так, например, межгосударственный стандарт ГОСТ 15.101-98 [28] устанавливает следующие этапы НИР, предшествующих разработке новой народнохозяйственной продукции (кроме продукции, разрабатываемой и изготавливаемой для нужд обороны страны):

выбор направления исследований;

теоретические и экспериментальные исследования;

обобщение и оценка результатов исследований;

предъявление НИР к приемке и её приемка.

Часто на практике выделение этапов и подэтапов НИР определяется традициями научных коллективов. Так, например, на кафедре технологий целлюлозно-бумажных производств и переработки полимеров Уральского государственного лесотехнического университета при планировании прикладных НИР предусматривают следующие виды работ и их последовательность:

1. Уточнение целей и задач НИР;

2. Подготовка аналитического обзора по теме исследований;
3. Выбор и обоснование направления исследований;
4. Подготовка к проведению НИР;
5. Выполнение НИР;
6. Обобщение и оценка результатов НИР,
7. Оформление и экспертиза результатов НИР.

Рекомендуем начинать НИР с уточнения целей и задач всего научного исследования и отдельных частей, в том числе и его первой части НИР. После этого переходить к поиску информации, составлению аналитического обзора по теме исследования и выбору направления исследования.

Пример 3.1

*У Вас появилась идея получить новое лекарственное средство из древесины дуба, которое может обладать антимикробным действием. Очевидно, что объем, содержание, сроки проведения и затраты на выполнение НИР будут существенно зависеть от масштабности и конечной цели научного исследования (что Вы собираетесь получить после завершения научного исследования: опытно-промышленное производство нового лекарственного средства или только способ его получения, защищенный патентом на изобретение?). Уточнив цели и задачи всего научного исследования и НИР необходимо **обязательно** составить аналитический обзор по теме исследований.*

Аналитический обзор является одним из видов информационных документов.

Основными *целями аналитического обзора* являются:

определение уровня достижения целей и задач научного исследования;

установление степени новизны идей;

определение или уточнение возможных направлений практической реализации этих идей.

К *задачам аналитического обзора* относится критическое осмысление и авторский анализ научно-технической информации, а не простое перечисление всех известных фактов.

Так как создаваемая новая продукция не должна уступать лучшим мировым образцам и быть конкурентоспособной, то при составлении аналитического обзора нужно опираться не только на отечественную, но и на зарубежную научно-техническую (**НТИ**) и конъюнктурно-экономическую (**КЭИ**) информации.

К НТИ относят информацию, касающуюся вопросов создания новых объектов, а к КЭИ – вопросов их продажи. В состав НТИ входит и патентная информация (ПИ) - информация о правовой защите интеллектуальной собственности.

Поток информации огромен и продолжает быстро расти. С изучением проблем информации связана отрасль науки - **информатика**. К задачам информатики относят разработку и передачу информационных продуктов, ресурсов, систем, технологий и др. Структурной единицей информационных продуктов является **документ**.

В зависимости от способа представления информации документы делят на *текстовые* (книги, журналы, отчеты и др.), *графические* (чертежи, схемы, диаграммы и др.), *аудиовизуальные* (звукозаписи, кино- и видеофильмы), *машиночитаемые* (электронные книги, журналы, базы данных, информация на микрофотоносителях и др.) и др.

Кроме того, документы подразделяют на *первичные* (содержат непосредственные результаты научных исследований, нового осмысления известных идей и фактов), *вторичные* (содержат результаты переработки первичных документов) и *третичные* (содержат результаты переработки вторичных документов).

К первичным документам относят:

- непериодические издания* (книги, брошюры, монографии и др.);
- периодические издания*, выходящие через определенные промежутки времени (газеты, журналы, еженедельники и др.);
- продолжающиеся издания*, выходящие через неопределенные промежутки времени по мере накопления материала или необходимости (сборники научных трудов, ученых записок, известий и др.);
- специальные издания* (отчеты о НИР, тезисы докладов конференций, диссертации, патентная документация, стандарты, каталоги, рекламные проспекты фирм, товарно-фирменные справочники и др.).

Вторичные документы подразделяют на справочные, обзорные, реферативные и библиографические.

К третичным документам относят каталоги, указатели, оглавления и др.

От знаний и умений поиска информации зависит не только личный успех, но, зачастую, и будущее организации, предприятия, фирмы, страны. Ещё в IX веке появилась фраза Натана Ротшильда, ставшая крылатой – «Кто владеет информацией, тот владеет миром». Поэтому любое государство уделяет огромное внимание проблемам информации, её сбору и анализу.

В нашей стране существует Государственная система научно-технической информации (ГСНТИ). В ее структуру входят федеральные органы научно-технической информации (НТИ) и научно-технические библиотеки; отраслевые органы НТИ и научно-технические библиотеки, региональные центры НТИ.

Органы НТИ, научно-технические библиотеки и центры НТИ обеспечивают сбор, хранение и обработку отечественных и зарубежных источников НТИ, формирование, ведение и организацию использования федеральных, отраслевых и региональных информационных фондов, баз и банков данных, составляющих федеральные ресурсы НТИ. Сведения о некоторых функциях федеральных органов, оказывающих помощь исследователям в поиске информации, приведены в табл. 3.1.

Таблица 3.1

Функции некоторых ведущих информационных государственных органов России

Название организации		Функции
сокращённое	полное	
ВИНИТИ РАН	Всероссийский институт научной и технической информации Российской академии наук	Обрабатывает опубликованные отечественные и зарубежные первичные документы в области естественных и технических наук. Издает вторичные и третичные документы в виде периодических реферативных журналов (реферативные журналы «Химия», «Биология», «Охрана окружающей среды», «Машиностроение», «Транспорт», «Экономика промышленности» и др.) и других информационных изданий. Поддерживает и обновляет электронную базу данных рефератов
РКП	Российская книжная палата	Собирает и хранит все отечественные издания (книги, журналы, газеты и др.)
ГПНТБ	Государственная публичная научно-техническая библиотека России	Собирает и хранит зарубежные книги и журналы

Окончание табл. 3.1

Название организации		Функции
сокращённое	полное	
ФИПС	Федеральный институт промышленной собственности	Проводит приём и экспертизу заявок на объекты патентного права, государственную регистрацию средств индивидуализации, государственную регистрацию программ для электронных вычислительных машин, баз данных и топологий интегральных микросхем. Выпуск официальных бюллетеней о зарегистрированных объектах патентных прав, поданных заявках и выданных по ним патентах, зарегистрированных средствах индивидуализации, зарегистрированных свидетельствах. Библиотечное, библиографическое, справочно-информационное, научно-методическое обслуживание на базе государственного патентного фонда и единой системы автоматизированных банков данных. Поддерживает и обновляет электронные базы данных российских патентов и свидетельств на объекты интеллектуальной собственности
ВНТИЦ	Всероссийский научно-технический информационный центр	Собирает и обрабатывает отечественные первичные документы о научных исследованиях во всех областях науки и техники в виде отчетов о НИР и ОКР, диссертаций, описаний алгоритмов и программ. Издает вторичные документы в виде периодического издания «Сборник рефератов НИР и ОКР», обзоров, библиографических указателей отчетов и диссертаций по различным проблемам

В зарубежных странах существуют свои сети информационных служб, собирающие и обрабатывающие первичные документы и издающие вторичные и третичные документы. Так, например, из зарубежных изданий вторичных документов у химиков всего мира наибольшей популярностью пользуется реферативный журнал «Chemical Abstracts».

Доля документов, издаваемых в электронном виде, постоянно увеличивается. Поэтому возрастает количество электронных изданий и баз данных, доступных в Интернете.

Популярными среди учёных стали электронные базы данных ScienceDirect, SCOPUS и др.

База данных ScienceDirect (<http://www.sciencedirect.com>) обеспечивает охват литературы из всех областей науки, предоставляя доступ к более чем 2500 наименований журналов и более 30000 книг из коллекции издательства «Elsevier», а также огромному числу журналов, опубликованных престижными научными сообществами.

SCOPUS (<http://www.scopus.com>) представляет собой крупнейшую в мире единую реферативную и наукометрическую базу данных, которая индексирует более 21 000 наименований научно-технических и медицинских журналов и 5 000 международных издательств. Ежедневно обновляемая база данных SCOPUS включает записи вплоть до первого тома, первого выпуска журналов ведущих научных издательств. Она обеспечивает мощную поддержку в поиске научных публикаций и предлагает ссылки на все вышедшие цитаты из обширного объема доступных статей.

В России популярна база данных научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU (<http://elibrary.ru>). Это крупнейший российский информационный портал в области науки, технологии, медицины и образования, содержащий рефераты и полные тексты более 18 млн научных статей и публикаций. На платформе eLIBRARY.RU доступны электронные версии более 3200 российских научно-технических журналов, в том числе более 2000 журналов в открытом доступе. Патенты (рефераты и полные тексты патентных документов с 1924 г.).

Федеральный институт промышленной собственности (<http://www.fips.ru>) предоставляет доступ к электронным базам данных рефератов и полных текстов национальных патентов на изобретения, полезные модели и промышленные образцы и ссылки для баз данных международных патентных ведомств и организаций.

Для *составления аналитического обзора* обычно выполняют следующие операции:

- поиск информации по теме исследования;
- организация хранения информации;
- подготовка аналитического обзора.

Поиск информации

Для поиска информации не существует общепризнанных правил. Исключение составляет патентная информация, поиск которой регла-

ментируется российским стандартом [29]. Рекомендации по проведению поиска патентной информации приведены в [1]. Разработаны специальные компьютерные программы для поиска и анализа патентной информации.

Информационно-поисковая работа – это своего рода искусство. Как и в любом виде искусства, здесь тоже есть стандартные приёмы, которые исследователю не мешает знать.

Рекомендуется при поиске информации выполнять следующие операции:

- определить предмет поиска (ключевые слова, «лидеров» в данной области, химические формулы и др.);
- составить карту поиска (конкретизировать, уточнить все аспекты предмета поиска);
- здать глубину (ретроспективу) поиска;
- выбрать источники информации;
- провести поиск информации;
- организовать отбор и хранение найденной информации.

Определение предмета поиска информации зачастую зависит от источников информации и особенностей третичных документов, облегчающих поиск первичных и вторичных документов.

Для поиска информации наиболее часто создаются предметные или алфавитно-предметные указатели. При наличии таких указателей предмет поиска формулируется ключевыми словами.

Ключевые слова – это существительные в именительном падеже в сочетании с другими существительными или прилагательными или без них. Рекомендуется для полноты поиска информации составлять различные наборы ключевых слов.

Для примера 3.1 первым вариантом ключевых слов может быть следующий: ДУБ, ВЕЩЕСТВА, АНТИМИКРОБНОЕ СРЕДСТВО, ПОЛУЧЕНИЕ.

Ряд вторичных документов имеет и другие типы указателей: авторские (по фамилии авторов документа), формульные (по химическим формулам, упоминающимся в документе), фирменные (по названиям фирм, организаций, создавших документ) и др. В этом случае предмет поиска может быть сформулирован в виде фамилии и имени; химической формулы; названия фирмы и др.

При поиске информации в электронных базах данных нужно следовать указаниям разработчиков этих баз по предметам поиска и использованию специальных операторов. Для поиска информации

в Интернете существуют специальные компьютерные программы (поисковые системы). Предметом поиска информации в Интернете являются поисковые слова. Желательно учитывать рекомендации разработчиков поисковых систем и специальной литературы, например [29], при составлении вариантов поисковых слов и использованию специальных операторов.

Карта поиска информации может быть одинаковой или индивидуальной для всех предметов поиска. Её содержание определяется целями и задачами научного исследования. Карта поиска уточняет, детализирует предмет поиска.

Одна из возможных карт поиска информации по примеру 3.1 может выглядеть следующим образом:

Цель научного исследования: разработать способ получения антимикробного лекарственного средства на основе сырья из биомассы дуба и защитить его патентом на изобретение.

Предмет поиска: вещества биомассы дуба.

Вопросы для поиска:

способы получения веществ из биомассы дуба;

биологическая активность продуктов, полученных из биомассы дуба;

применение продуктов, полученных из биомассы дуба, в качестве лекарственных веществ;

объёмы ресурсов биомассы дуба;

продукты и объёмы переработки биомассы дуба.

Глубина (ретроспектива) поиска информации также во многих случаях определяется целями и задачами научного исследования. Единых подходов к глубине поиска информации не существует. На выбор допустимого "возраста" собираемой информации оказывают влияние многие факторы: масштаб научных исследований (исследования большого коллектива или маленькой группы исследователей); область науки; характер НИР (теоретические или поисковые); дефицит источников информации, времени и средств у исследователя и др.

Считается, что выбор глубины поиска информации важен лишь на начальных стадиях исследования, а в дальнейшем исследователь должен знать информацию по изучаемому вопросу за многие годы.

При создании новых объектов техники глубину поиска информации можно определить в 15 лет (средний возраст обновления техники).

Для планирования научных исследований большому коллективу рекомендуется поиск информации проводить за 50 и более последних лет.

Выбор источников информации во многом зависит от «возраста» информации в этих источниках (табл. 3.2).

Таблица 3.2

Источники информации и ее примерный «возраст»

Источник информации	«Возраст» информации (не менее)
Средства оперативной массовой (Интернет, радио, телевидение) и индивидуальной (телефон, факс, электронная почта) информации	1 минута
Ежедневные, еженедельные газеты и др.	1 сутки
Периодические ежемесячные, ежеквартальные и ежегодные издания (газеты, журналы, бюллетени, сборники и др.)	1 месяц
Реферативные журналы	3 месяца
Непериодические издания (книги, сборники и др.)	1 год

Зависит выбор источников информации также от целей и задач научного исследования. Так, например, если при выполнении научных исследований планируется создать новый объект техники и осуществить его правовую защиту, то необходимо использовать и специальные источники патентной информации. Если в цели научных исследований входит организация промышленного производства нового объекта, то трудно обойтись без специальных источников конъюнктурно-экономической информации.

При выборе электронных источников информации необходимо учитывать их характер (бытовой или профессиональный). При выполнении прикладных НИР приоритет следует отдавать профессиональным источникам информации.

Для проведения поиска информации при изучении нового объекта рекомендуется поиск информации начинать с изданий энциклопедического характера (универсальных и специальных энциклопедий, учебников, монографий, обзоров, справочников, словарей и др.).

Значительно ускоряет поиск информации найденный обзор по теме исследования по следующим обстоятельствам:

в обзоре достаточно полно анализируется информация на дату его публикации (за исключением 1-2 последних лет);

обзор позволяет выявить «лидеров» по теме исследований (исследователей, лаборатории, фирмы);

материалы обзора знакомят со спецификой темы исследования (сопутствующими проблемами, терминологией и др.).

В качестве отправного пункта для дальнейшего поиска информации можно использовать термины (как ключевые слова или определители рубрик библиографических указателей), фамилии или названия «лидеров».

Поиск информации за несколько последних лет можно проводить по реферативным журналам.

Полезно пользоваться специальными библиографическими изданиями.

При поиске информации в Интернете необходимо учитывать эффективность работы поисковых систем для различных языков текстовой информации [30]. Как и любая компьютерная программа каждая поисковая система имеет свои достоинства и недостатки. Рекомендуется поиск информации в Интернет проводить несколькими поисковыми системами.

Эффективность поиска информации оценивается по двум основным критериям: скорости поиска и релевантности (соответствие документа информационному запросу) найденной информации.

При проведении поиска информации желательно стремиться к идеальному варианту – получению первичных документов. Начинаящему исследователю по вопросам поиска информации рекомендуется обращаться за консультацией к работникам библиотек и специальных информационных служб.

Организация хранения информации

Отбор найденной информации можно проводить в соответствии с картой её поиска. Всю найденную информацию нужно сохранять, так как она может пригодиться не только для данного, но и последующих исследований.

Система хранения информации у каждого исследователя может быть индивидуальной и оригинальной, но она должна обеспечивать минимальное время обращения к конкретной информации. Если Вы ищите у себя один нужный документ более 5 минут, то Ваша система хранения информации никуда не годится!

Наиболее современным является хранение информации в электронном виде, так как позволяет не только значительно увеличить скорость обращения к ней, но и обеспечить значительную экономию затрат при организации её хранения и дублирования. В качестве компьютерных программ для хранения информации можно использовать

системы управления базами данных (СУБД). Существуют специализированные компьютерные программы для хранения информации и работы с ней.

Рекомендуем создавать, совершенствовать и обновлять свою собственную картотеку электронной информации по интересующим темам, в которой для каждого найденного документа должны содержаться следующие данные:

- сведения об источнике информации;
- название работы на языке оригинала;
- данные об авторах и выходные данные работы;
- краткое содержание работы (реферат) и свое отношение к ней;
- специальные отметки (наличие первичного документа, перевода и их местонахождение, шифр книги, библиотеки и др.).

Составление аналитического обзора

Обзор – это текст, содержащий обобщенную информацию по одной теме, извлеченную из множества отобранных документов.

До написания обзора вся собранная информация должна быть предварительно систематизирована. *Принципы систематизации информации* могут быть различными: по году публикации, странам, авторам, фирмам, способам решения проблемы и др.

Обзор должен быть продуктом творческого труда и поэтому содержать личностное отношение его автора к приводимой информации, её анализ и сопоставление.

Обязательным элементом аналитического обзора является заключение. В заключении должно быть отражено достижение целей аналитического обзора.

Получение и распространение информации является одним из самых прибыльных видов бизнеса. Информационные исследования проводятся систематически во всех видах профессиональной деятельности и во всех отраслях народного хозяйства.

Современный работодатель учитывает при приёме на работу следующие характеристики и компетенции претендента с высшим образованием:

- уровень его информированности в области производственной деятельности предприятия (организации);
- наличие современных компетенций по получению, хранению и анализу информации;
- знание специальной научно-технической литературы в области производственной деятельности предприятия (организации).

3.2. Опытнo-технологические и опытнo-конструкторские работы

Необходимость увеличения масштабов экспериментальных исследований и перехода от лабораторных к промышленным исследованиям связана с тем, что в лабораторных условиях по объективным причинам трудно изучить ряд важных промышленных факторов и некоторые свойства объекта (например, такие, как способы транспортирования и дозирования сырья, промышленные условия хранения готовой продукции, состав воздуха рабочей зоны и др.).

Опытнo-технологические и опытнo-конструкторские работы тесно связаны между собой и могут выполняться одновременно.

Опытнo-технологическая работа – это комплекс работ по созданию новых веществ, материалов, полуфабрикатов и(или) технологии по их производству, а также комплекта технической (конструкторской, программной, технологической) документации, достаточной для постановки и освоения вновь разрабатываемой (модернизируемой) технологии в опытнo-промышленном масштабе.

Опытнo-конструкторская работа – это комплекс работ по разработке комплекта технической (конструкторской, программной, технологической) документации, достаточного для постановки и освоения промышленного производства вновь разрабатываемого (модернизированного) вида продукции, а также по изготовлению опытного образца и проведению испытаний с ним для проверки его соответствия установленным требованиям.

В химической технологии масштабный переход к промышленным условиям осуществляют обычно в одну или две ступени. Ступенями масштабирования являются опытные установки, которые служат для моделирования изучаемых объектов.

Опытные установки в химической промышленности подразделяют на три вида: лабораторные, пилотные (модельные, стендовые) и опытнo-промышленные.

Лабораторные установки, как правило, создаются ещё в процессе лабораторных исследований. Такие установки обычно работают периодически или полунепрерывно. Транспортировка сырья и готовой продукции при этом осуществляется вручную. Состояние окружающей среды не исследуется. Количество изучаемых факторов на лабораторных установках часто ограничено. Оборудование для них выбирается в основном типовое. На лабораторных установках решают, главным образом, задачи ОТР.

Например, при создании новых полимеров решают задачи кинетики химических процессов, термодинамики, теплофизики, тепло- и массопереноса, технологического контроля, оценки свойств и перспектив применения полимера и материалов на его основе, инженерного оформления процессов, прогноза экономической эффективности производства, состояния и требований к технике безопасности и др.

Пилотные установки более крупные, чем лабораторные. При создании пилотных установок начинается инженерный поиск в области аппаратурного оформления процессов. На пилотных установках проводится работа по следующим основным направлениям:

уточняются задачи ОТР, нарабатывается продукция для широких испытаний;

конструируются и подбираются наиболее подходящее аппаратурное оформление процессов, средства контроля и автоматизации;

отрабатываются мероприятия по охране окружающей среды.

Работа по первому направлению относится к ОТР, а по остальным к ОКР.

Опытно-промышленные установки обычно не должны уступать по масштабу промышленным установкам более чем в 10 раз. В этих установках все должно быть аналогично будущему промышленному производству. В опытно-промышленных установках должна быть реализована полная технологическая схема будущего производства. Аппаратурное оформление опытно-промышленных установок должно включать головные образцы технологического оборудования, средств контроля и управления процессами, которые создаются по результатам выполнения ОКР на пилотных установках. В результате эксплуатации образцы оборудования, средств контроля и управления должны пройти доводку, вырабатываемая продукция и отходы найти своих потребителей, должны быть окончательно решены вопросы транспортировки сырья и продукции, её расфасовки и упаковки и др. Как правило, создание опытно-промышленных установок требует капитального строительства и полного объёма проектно-сметной документации. Поэтому в создании опытно-промышленных установок принимают участие и технологи, и проектировщики.

Прохождение всех трёх ступеней масштабного перехода требует значительного отрезка времени (например, при создании новых процессов получения полимеров этот отрезок времени иногда составляет 5-7 лет). Поэтому исследователю всегда приходится делать выбор между продолжительностью и качеством масштабного перехода,

значительно определяющим степень риска при организации промышленного производства нового объекта.

Обычно все три ступени масштабного перехода реализуют при создании сложных, многостадийных, экологически опасных процессов. В более простых случаях, когда можно использовать достаточно дешёвое стандартное оборудование, можно переходить от лабораторных установок сразу к опытно-промышленным установкам.

Проведение ОТР в машиностроении и приборостроении регламентируется российским ГОСТ Р 50995.0.1-96 [31]. Структура технологического обеспечения основана на целевом комплексном охвате технологических работ, проводимых на стадиях разработки и постановки продукции на производство, и состоит из следующих взаимосвязанных подсистем:

- прогнозирование и оценка технологической реализуемости;
- технологическое обеспечение проектирования;
- технологическая подготовка производства;
- технологическое перевооружение производственной базы;
- технологическое обеспечение установившегося производства.

Приёмка результатов завершённых прикладных научных исследований для продукции производственно-технического назначения проводится в соответствии с российским ГОСТ 15.001-88 [32]. По этому стандарту результаты разработки, как вид научно-технической продукции, передаются заказчику или, по его указанию, изготовителю для серийного (массового) производства промышленной продукции.

Разработка и постановка продукции на производство в общем случае предусматривает:

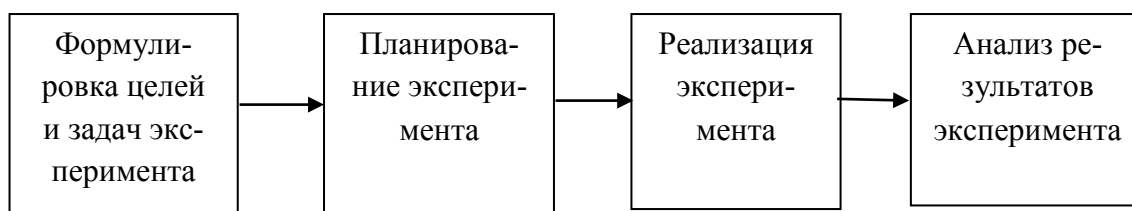
- разработку технического задания;
- разработку технической и нормативно-технической документации;
- изготовление и испытания образцов продукции;
- приёмку результатов разработки;
- подготовку и освоение производства.

Отдельные из указанных работ можно совмещать, а также изменять их последовательность и дополнять другими работами в зависимости от специфики продукции и организации её производства.

ПЛАНИРОВАНИЕ И СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТА

В прикладных научных исследованиях в различных отраслях науки и техники широко применяется эксперимент.

Рекомендуется все работы, связанные с экспериментом, проводить в следующем порядке:



Целями эксперимента могут быть:

исследование процессов, происходящих в исследуемом объекте;
определение характеристик объекта;
проверка результатов теоретического исследования;
получение исходных данных для теоретических исследований;
и другие.

Планирование эксперимента подразделяют на две части: методическую и организационную.

В методической части составляют, анализируют план и методики проведения эксперимента, выбирают средства измерения, экспериментальные образцы, материалы, установки, исследователей.

В организационной части решают вопросы материально-технического обеспечения эксперимента (подготовку к работе средств измерения, установок, исследователей и др.).

Выбор плана эксперимента зависит:

от целей и задач НИР и эксперимента;
методов статистического анализа результатов эксперимента, которые планируется применить;

объёма имеющихся ресурсов (финансовых, человеческих, временных и др.);

и др.

Для различных отраслей науки и техники могут быть свои особенности проведения эксперимента.

Рассмотрим более детально планирование и статистический анализ результатов эксперимента на примере создания новых веществ, материалов, разработки новых технологий.

Часто при выполнении прикладных НИР одной из целей эксперимента является получение математической модели объекта.

Детерминированные математические модели объектов разрабатывают при проведении теоретических НИР на базе известных законов фундаментальных наук (физики, механики, химии, биологии и др.).

Экспериментально-статистические модели объектов получают по данным статистического анализа результатов эксперимента.

Экспериментально-статистические модели объекта обычно представляют в виде математической зависимости (φ) свойства изучаемого объекта Y (отклик объекта) от значений входных факторов X_j , контролируемых исследователем и влияющих на эти свойства:

$$Y_z = \varphi(X_1, X_2, \dots, X_j, \dots, X_k) + \varepsilon,$$

где ε – величина, не зависящая от X_j (назовём её случайной величиной).

Зависимость φ является *качественной*, если она выражается словами, например: « X влияет на Y », «увеличение X уменьшает значение Y » и др.

Зависимость φ является *количественной*, если она представляет собой математическое выражение, связывающее значения Y и X .

Выбор плана эксперимента зависит от того, какой вид зависимости φ планируется получить (качественный или количественный).

Так как результаты измерений значений X_j и Y_z являются случайными величинами, то для установления зависимости φ необходимо использовать соответствующие методы математической статистики.

Для получения качественной зависимости φ наиболее часто используют методы корреляционного и дисперсионного анализов, для получения количественной зависимости – методы регрессионного анализа.

Существуют и другие статистические методы анализа данных: канонический, дискриминантный, кластерный, факторный и др. [33, 35]. Выбор методов и критериев для анализа результатов экспериментальных исследований зависит от таких статистических характеристик X и Y , как:

- закон их распределения;
- тип (количественные или качественные);

- вид (непрерывные или дискретные);
- существования корреляции между входными факторами X_j .

Следует понимать, что при анализе данных методами математической статистики, исследуя связи между случайными числами, оперируют только их изменчивостью. Поэтому выводы статистического анализа данных в прикладных научных исследованиях необходимо корректировать с учётом возможных фундаментальных связей (физических, химических, биологических и др.) между свойствами изучаемого объекта и факторами.

Стадии формулировки целей и задач и реализации эксперимента во многих случаях являются оригинальными и определяются объектом и предметом исследования, а также традициями научных школ. Для стадий планирования и анализа результатов эксперимента есть общие подходы.

Влияние выбранных методов статистического анализа результатов эксперимента на его план связано с ограничениями, заложенных в математическом аппарате конкретного метода анализа к таким параметрам как число уровней и количество исследуемых факторов, кратность повторения опытов, число опытов в эксперименте и др.

Рассмотрим основы наиболее популярных статистических методов анализа данных и их влияние на составление плана эксперимента.

4.1. Планирование и корреляционный анализ результатов эксперимента

Корреляционный анализ – это раздел математической статистики, позволяющий *качественно* устанавливать связь между случайными величинами и её силу (тесноту).

Если при изменении значения X значение Y изменяется строго в соответствии с функцией, связывающей эти величины $Y = \varphi(X)$, то считают, что между ними существует функциональная связь. При наличии и знании такой связи можно точно предсказывать величину Y , задавая конкретное значение X .

Однако на практике функциональные связи обнаруживаются очень редко, поскольку на результаты измерений оказывают влияние различные случайные факторы и ошибки измерений. В большинстве случаев, задавая значения X , можно предсказать лишь тенденцию изменения Y . Эта тенденция обнаруживается при достаточно большом числе m различных значений (уровней) изменяемого

фактора X , а при малых величинах m данная тенденция может не проявляться (рис. 4.1).

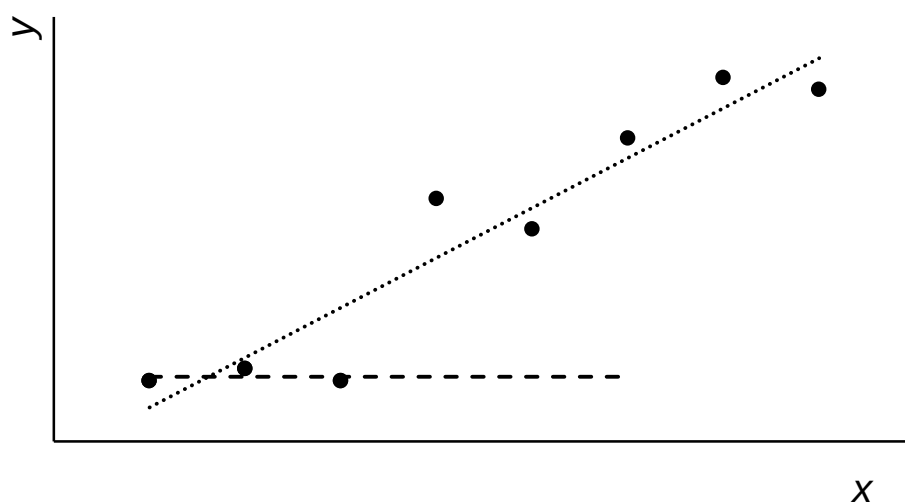


Рис. 4.1. Влияние числа значений x (m)
на тенденцию изменения y :
..... - линейная изменчивость y при $m = 8$,
— — - линейная изменчивость y при $m = 3$

Связь между Y и X (зависимость Y от X), представленную на рис. 4.1, можно считать линейной *корреляционной* (стохастической, вероятностной), так как не все значения y совпадают с графиком линейной функции $y = a + bx$ (*функциональной* связи).

Чем больше корреляционная связь соответствует функциональной связи, тем более тесной (сильной) она считается.

Корреляционная связь имеет два крайних предельных случая: функциональная связь (самая тесная корреляционная зависимость y от x) и полное отсутствие связи (отсутствие зависимости y от x).

Наличие между y и x корреляционной или функциональной связи устанавливается в результате проведения корреляционного анализа.

При корреляционном анализе отражают следующие выводы в форме слов:

наличие или отсутствие связи между y и x («связь между y и x есть» или «связи между y и x нет», «связь между y и x существует» или «связь между y и x не существует», « x влияет на y » или « x не влияет на y », « y зависит от x » или « y не зависит от x »);

тип связи («линейная» или «нелинейная») и её характер («функциональная» или «корреляционная»);

знак связи: «положительный» – если с увеличением величины значений X растёт величина значений Y ; «отрицательный» – если с уменьшением величины значений X снижается величина значений Y ; «переменный» – если тенденция изменения Y имеет экстремум;

теснота (сила) корреляционной связи («очень тесная», «тесная», «не очень тесная», «очень сильная», «сильная», «слабая» и др.).

Таким образом, корреляционный анализ случайных величин оценивает наличие, тип, характер, знак и силу их корреляционной связи.

Проведение корреляционного анализа экспериментальных данных состоит из следующих операций:

при анализе связи двух случайных величин построение поля корреляции и формулирование предварительных выводов корреляционного анализа;

вычисление коэффициентов корреляции и корреляционных отношений случайных величин;

проверка статистических гипотез о значимости корреляционной связи случайных величин и формулирование окончательных выводов корреляционного анализа.

Конкретные алгоритмы проведения корреляционного анализа зависят от характера исследуемых случайных величин (количественные или качественные, непрерывные или дискретные) и их числа. *Количественные* величины представляются числами, а *качественные* – словами.

4.1.1. Составление планов эксперимента и корреляционный анализ его результатов

Корреляционный анализ к результатам эксперимента можно применить только при выполнении одного *обязательного условия*: для количества уровней каждого фактора X_j должно выполняться соотношение $m_j \geq 3$.

Желательно, чтобы план эксперимента предусматривал:

широкую область изменения значений факторов X_j ;

большое число значений m_j (уровней) факторов X_j , при этом разница между уровнями должна быть больше абсолютной погрешности их измерения;

повторные опыты для каждого значения (уровня) факторов X_j ;

большое общее число опытов (N).

4.1.2. Корреляционный анализ результатов эксперимента

4.1.2.1. Корреляционный анализ двух случайных величин

Для корреляционного анализа *двух количественных* случайных величин применяют анализ поля корреляции и анализ коэффициента парной линейной корреляции.

Анализ поля корреляции

Поле корреляции (корреляционным полем) двух количественных случайных величин Y и X называют выполненный рисунок на плоскости в системе прямоугольных координат (рис. 4.1), на котором приведены точки (i – номер точки) с соответствующим им координатами Y_i и X_i .

Анализ поля корреляции проводится визуально. Расположение точек на рисунке может дать наглядное представление о типе, характере, знаке и силе зависимости между Y и X .

Анализ поля корреляции не является достаточно точным методом корреляционного анализа из-за влияния на вид поля корреляции выбранного масштаба координатных осей Y и X .

Более точными, по сравнению с анализом поля корреляции, являются методы анализа коэффициентов корреляции и корреляционных отношений случайных величин, так как они основаны не на визуальном восприятии графического представления случайных чисел, а на математических расчётах и постулатах.

Анализ коэффициента выборочной парной линейной корреляции

Для выборок двух количественных случайных величин (X и Y) можно рассчитать выборочный коэффициент парной линейной корреляции r_{yx} (коэффициент корреляции Пирсона [24,33]) по следующей формуле

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

где x_i и y_i – единичные значения случайных величин; $\bar{y}$ – общее среднее арифметическое значение y ; $\bar{x}$ – общее среднее арифметическое

значение x ; S_x и S_y – соответственно выборочные абсолютные стандартные отклонения единичных значений x и y , N – общее число точек на поле корреляции ($N \geq 3$).

Общие средние арифметические значения находят по формулам

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^N x_i}{N}; \quad \bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^N y_i}{N}.$$

Выборочные абсолютные стандартные отклонения единичных значений x и y рассчитывают следующим образом:

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

Выборочный коэффициент парной линейной корреляции имеет следующие свойства [24]:

коэффициент парной линейной корреляции симметричен относительно X и Y , т. е. $r_{yx} = r_{xy}$;

абсолютная величина коэффициента парной линейной корреляции не превышает единицу, $-1 \leq r_{yx} \leq 1$;

равенство $|r_{yx}| = 1$ имеет место тогда, когда Y и X связаны линейной функциональной зависимостью $Y = a + bX$;

при равенстве $r_{yx} = 0$ возможно не только отсутствие связи Y с X , но и наличие их нелинейной связи (точный ответ можно получить при анализе корреляционных отношений);

коэффициент r_{yx} характеризует только линейную зависимость между двумя переменными и не может характеризовать нелинейные зависимости.

В величине r_{yx} одновременно присутствуют доли случайности и нелинейности связи между Y и X .

До проведения анализа для рассчитанного значения r_{yx} необходимо с использованием метода математической статистики выполнить проверку его значимости, т. е. нуль-гипотезы $r_{yx} = 0$ (с методами проверки нуль-гипотезы для r_{yx} можно познакомиться в [18,19,24]). После завершения проверки нуль-гипотезы по величине и знаку принятого значения r_{yx} (табл. 4.1), с учётом предварительных выводов по полю корреляции, можно сделать выводы линейного корреляционного анализа.

Таблица 4.1

Выводы корреляционного анализа в зависимости от значения r_{yx}

Выводы корреляционного анализа	Значения r_{yx}
1. Наличие связи между Y и X : <i>есть линейная</i> связь между Y и X с вероятностью P <i>нет линейной</i> связи между Y и X с вероятностью P	$0 < r_{yx} \leq 1$ $r_{yx} = 0$
2. Тип и характер связи: <i>линейная функциональная</i> <i>линейная корреляционная</i>	$ r_{yx} = 1$ $0 < r_{yx} < 1$
3. Знак связи: <i>положительный</i> <i>отрицательный</i>	$r_{yx} > 0$ $r_{yx} < 0$
4. Теснота (сила) линейной корреляционной связи	Определяется* близостью к единице модуля r_{yx}

* Примечание: по субъективной оценке аналитика.

Для оценки тесноты линейной корреляционной связи по величине r_{yx} нет общепринятых рекомендаций. Можно воспользоваться следующими градациями [24]:

r_{yx}	$0 < r_{yx} < 0,2$	$0,2 \leq r_{yx} < 0,4$	$0,4 \leq r_{yx} < 0,7$	$0,7 \leq r_{yx} < 0,9$	$0,9 \leq r_{yx} < 1$
Теснота (сила) связи	Очень слабая	Слабая	Средняя	Сильная	Очень сильная

Нулевое значение r_{yx} доказывает отсутствие только линейной связи Y и X , но ни в коем случае не опровергает влияния X на Y .

Оценка нелинейной корреляционной связи Y и X осуществляется с помощью безразмерных числовых характеристик, называемых *корреляционными отношениями*.

Значения корреляционных отношений зависят только от силы корреляционной связи и не зависят от того, линейная или нелинейная эта связь. В этом важное преимущество корреляционных отношений перед коэффициентом линейной корреляции.

Корреляционные отношения (η_{yx} и η_{xy}) можно рассчитать только по сгруппированным данным [24]. Группировку данных обычно проводят для выборок с объёмом $n \geq 20$.

Корреляционные отношения имеют следующие свойства [24]:
 корреляционные отношения несимметричны относительно X и Y ,
 т. е. $\eta_{yx} \neq \eta_{xy}$;

корреляционные отношения неотрицательны и не превосходят единицу и находятся в диапазоне $0 \leq |r_{yx}| \leq \eta_{yx} \leq 1$, $0 \leq |r_{yx}| \leq \eta_{xy} \leq 1$;

равенство $\eta_{yx} = 0$ означает, что случайная величина Y не коррелирована со случайной величиной X , однако некоррелированность Y с X не влечёт за собой некоррелированность X с Y ;

равенство $\eta_{yx} = \eta_{xy} = 1$ справедливы только тогда, когда случайные величины Y и X связаны функциональной связью, при этом если $|r_{yx}| = \eta_{yx} = \eta_{xy} = 1$, то функциональная связь линейна, а если $|r_{yx}| < \eta_{yx} = \eta_{xy} = 1$, то функциональная связь нелинейная;

соотношение $|r_{yx}| = \eta_{yx} = \eta_{xy} < 1$ является необходимым и достаточным условием наличия линейной корреляции между X и Y ;

если корреляция между Y и X нелинейная, то $|r_{yx}| < \min(\eta_{yx}, \eta_{xy})$, при этом чем меньше разность $(\eta^2 - r^2)$, тем ближе к линейной корреляционной зависимости между исследуемыми случайными величинами.

С примерами расчёта и анализа корреляционных отношений можно познакомиться в [24, с. 369].

Для корреляционного анализа двух *качественных* случайных величин применяют анализ коэффициентов ранговой корреляции.

Анализ коэффициентов ранговой корреляции

Во многих отраслях науки и техники используются порядковые (ранжированные) величины (переменные). Для выявления и оценки силы корреляционной связи между двумя порядковыми случайными количественными и (или) качественными величинами используются коэффициенты ранговой корреляции: коэффициент Спирмена, коэффициент тау Кенделла, коэффициент гамма.

Коэффициент Спирмена рекомендуется использовать, если переменные – количественные (закон распределения которых не известен или не является нормальным) и (или) качественные (порядковые).

Коэффициент тау Кенделла рекомендуется использовать, если хотя бы одна переменная – качественная (порядковая).

Коэффициент гамма рекомендуется использовать, если переменные содержат много повторяющихся значений [33].

С алгоритмами расчётов и анализа коэффициентов ранговой парной корреляции, а также примерами можно познакомиться в [24, 32].

Пример 4.1

Задачами прикладного научного исследования являлось экспериментальное подтверждение наличия и определение силы связи остаточного содержания лигнина в технической целлюлозе (свойство Y) с продолжительностью сульфитной варки берёзовой щепы (фактор X). Для анализа результатов эксперимента с получением качественных выводов возможно применение корреляционного анализа, так как содержание лигнина в технической целлюлозе и продолжительность варки являются количественными случайными величинами. Для выполнения обязательного условия корреляционного анализа (число уровней фактора X должно быть не менее трёх) был составлен и реализован классический план однофакторного шестиуровневого эксперимента ($m = 6$) с трёхкратным повторением опытов и были получены результаты однократных измерений y в 18 опытах ($N = 18$), которые приведены в табл. 4.2.

Таблица 4.2

Номер повторного опыта	Содержание лигнина в технической целлюлозе (y , %) при времени сульфитной варки (x , ч)					
	4 ч	5 ч	6 ч	7 ч	8 ч	9 ч
1	15,8	9,6	5,5	2,0	1,6	1,5
2	15,3	9,6	6,0	1,9	1,6	1,4
3	15,5	9,1	5,9	1,8	1,7	1,3

По результатам эксперимента построим поле корреляции (рис. 4.2).

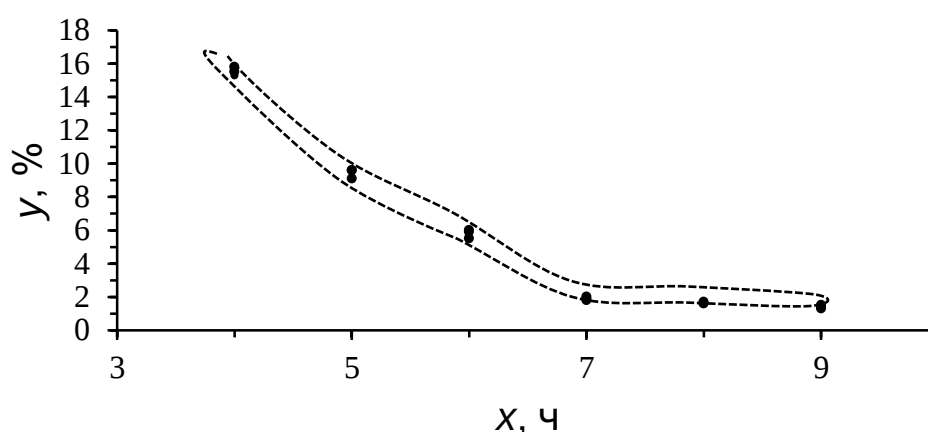


Рис. 4.2 . Поле корреляции

Для облегчения анализа все точки на поле корреляции обведём замкнутым контуром. Этот контур не является окружностью, его ориентация параллельна оси ординат не во всём диапазоне изменения X и, следовательно, можно предположить наличие связи между Y и X . Расположение точек на поле корреляции говорит о возможной отрицательной нелинейной связи.

Рассчитаем коэффициент выборочной парной линейной корреляции r_{yx} для значений Y (массив 1) и X (массив 2) во всех опытах эксперимента, $N = 18$ (табл. 4.2), используя в программе Excel функцию CORREL (массив 1; массив 2) или PEARSON : $r_{yx} = -0,926$. Выборочные корреляционные отношения вычислять не будем, так как объёмы выборок небольшие, $n < 20$.

Делаем допущение о нормальном распределении случайных величин Y и X и для проверки статистической гипотезы о значимости их линейной корреляционной связи используем статистику T [24]:

$$T = \frac{r_{yx} \sqrt{N-2}}{\sqrt{1-r_{yx}^2}}.$$

Вычислим расчётное значение статистики T (t_p) для результатов эксперимента:

$$t_p = \frac{r_{yx} \sqrt{N-2}}{\sqrt{1-r_{yx}^2}} = \frac{-0,926 \sqrt{18-2}}{\sqrt{1-(-0,926)^2}} = -9,81.$$

Для проверки некоррелируемости величин Y и X определим критическое значение $t_{кр.}$ статистики T как квантиль одностороннего распределения Стьюдента для доверительной вероятности $P = 0,95$ (уровень значимости $\alpha = 0,05$) и числа степеней свободы $f = N - 2 = 18 - 2 = 16$, используя в программе Excel функцию СТЬЮДРАСПОБР (0,05; 16): $t_{кр.} = 2,12$.

Так как модуль расчётного значения t_p больше критического значения статистики T ($|t_p| > t_{кр.}$; $9,81 > 2,12$) то гипотезу о линейной некоррелированности величин Y и X (т. е. $r_{yx} = 0$) с доверительной вероятностью 0,95 следует отвергнуть и принять альтернативную гипотезу о наличии корреляционной связи между величинами Y и X ($r_{yx} \neq 0$).

Проведём анализ окончательного значения $r_{yx} = -0,926$. Исходя из величины и знака r_{yx} делаем следующие выводы:

- 1) с доверительной вероятностью 0,95 считаем, что Y зависит от X (так как $r_{yx} \neq 0$);
- 2) зависимость Y от X линейная, корреляционная (так как $|r_{yx}| \neq 1$);

3) линейная зависимость Y от X отрицательная (так как значение r_{yx} отрицательное);

4) линейная зависимость Y от X очень сильная (так как $|r_{yx}| > 0,9$ [24]).

Анализ поля корреляции предполагает существование отрицательной нелинейной зависимости между Y и X . Окончательное подтверждение линейной зависимости между Y и X мог бы дать анализ корреляционных отношений η_{yx} и η_{xy} [24].

4.1.2.2. Корреляционный анализ трёх и более случайных величин

При изучении корреляционных связей трёх и более случайных величин используют следующие коэффициенты корреляции:

коэффициенты частной линейной корреляции;

коэффициент множественной линейной корреляции;

коэффициент конкордации (согласованности).

Анализ частных и множественных коэффициентов линейной корреляции позволяет разобраться в ситуации, когда один из *количественных* факторов X_j не оказывает непосредственного влияния на Y , хотя их парный коэффициент корреляции отличен от нуля.

Коэффициенты частной и множественной линейной корреляции могут быть определены только для *количественных* факторов. Коэффициент конкордации можно рассчитать для количественных и (или) *качественных* (порядковых) факторов.

Коэффициенты частной линейной корреляции

При исследовании зависимости величины Y от двух количественных факторов $Y = \varphi(X_1, X_2)$ при оценке корреляции между Y и X_1 наличие корреляции между Y и X_2 , а также корреляции X_1 и X_2 будет влиять на величину и знак коэффициента корреляции Пирсона r_{yx_1} . Чтобы оценить точное влияние X_1 на Y , необходимо измерить корреляцию между Y и X_1 , когда X_2 постоянно (исключено его влияние). Для этой цели в статистике применяют частные коэффициенты корреляции. В обозначении частного коэффициента корреляции исключённый фактор в подстрочном индексе указывается через точку. Для расчёта частных коэффициентов корреляции $r_{yx_1 \cdot x_2}$ и $r_{yx_2 \cdot x_1}$ необходимо

знать значения парных коэффициентов линейной корреляции r_{yx_1} , r_{yx_2} и $r_{x_1x_2}$ [19]:

$$r_{yx_1 \cdot x_2} = \frac{r_{yx_1} - r_{yx_2} r_{x_1x_2}}{(1 - r_{yx_2}^2)^{1/2} (1 - r_{x_1x_2}^2)^{1/2}} \quad r_{yx_2 \cdot x_1} = \frac{r_{yx_2} - r_{yx_1} r_{x_1x_2}}{(1 - r_{yx_1}^2)^{1/2} (1 - r_{x_1x_2}^2)^{1/2}}.$$

При изучении зависимости Y от трёх факторов X_1 , X_2 и X_3 частный коэффициент корреляции между Y и X_1 при условии, что X_2 и X_3 будут постоянными, можно вычислить по формуле [19]:

$$r_{yx_1 \cdot x_2 x_3} = \frac{r_{yx_1 \cdot x_3} - r_{yx_2 \cdot x_3} r_{x_1x_2 \cdot x_3}}{(1 - r_{yx_2 \cdot x_3}^2)^{1/2} (1 - r_{x_1x_2 \cdot x_3}^2)^{1/2}}.$$

При изучении зависимости Y от трёх и более факторов X_j удобнее пользоваться матричными вычислениями для определения частных коэффициентов корреляции [19].

Проверка нуль-гипотезы (значимости) частного коэффициента линейной корреляции проводится аналогично проверке коэффициента парной корреляции [19].

Коэффициенты частной линейной корреляции, как и коэффициенты парной линейной корреляции, имеют значения в диапазоне от - 1 до 1. Чем ближе значение модуля коэффициента частной корреляции фактора к единице, тем сильнее его влияние на свойство объекта.

С примерами расчёта и анализа коэффициентов частной линейной корреляции можно познакомиться в [19, 32 с. 160].

Коэффициент множественной корреляции

Коэффициент множественной корреляции (R) служит показателем силы одновременного влияния на свойство Y нескольких входных факторов X_j . Если требуется изучить корреляционную связь между свойством объекта Y и несколькими факторами X_j , то применяют алгоритмы регрессионного анализа, с которыми можно познакомиться в [19, 24].

Значения коэффициента R находятся в диапазоне от 0 до 1. Для одного фактора коэффициент множественной корреляции равен модулю коэффициента парной линейной корреляции ($R = |r_{yx}|$).

Квадрат коэффициента множественной корреляции (R^2) называют коэффициентом детерминации (R -квадрат). Он характеризует долю влияния на Y факторов X_j при одновременном изменении и других (случайных) факторов. Чем ближе значение R^2 к 1, тем более сильное влияние на Y оказывают факторы X_j на фоне случайных факторов.

Для проверки значимости коэффициента детерминации R^2 используют статистику F [24, с. 406]. Следует иметь в виду, что R^2 является значимым ($R^2 \neq 0$), если хотя бы один фактор из всех X_j с заданной доверительной вероятностью влияет на Y .

Коэффициент детерминации используется также в регрессионном анализе как один из критериев адекватности регрессионной математической модели объекта исследования экспериментальным данным.

Коэффициент конкордации

Для изучения ранговой корреляции между несколькими количественными и (или) качественными свойствами объекта Y и факторами X_j можно использовать коэффициент конкордации (W). Для расчёта W значения всех свойств и факторов представляются в порядковой форме (ранжируют) и каждому значению случайной величины присваивается соответствующий ранг в виде целых арабских чисел.

С алгоритмами расчётов и анализа коэффициента конкордации, а также примерами можно познакомиться в [24].

4.1.3. Контрольные вопросы и задания

1. Для каких целей применяют корреляционный анализ в прикладных научных исследованиях?
2. Укажите единственное обязательное условие и рекомендации математической статистики при планировании эксперимента для последующей обработки его результатов методами корреляционного анализа.
3. Приведите названия и последовательность операций при проведении корреляционного анализа.
4. В какой форме (качественной или количественной) представляют выводы корреляционного анализа?
5. Какие выводы делают при корреляционном анализе?
6. Приведите названия предельных случаев корреляционной связи между свойством объекта Y и фактором X .
7. Почему при корреляционном анализе двух случайных чисел недостаточно проведения только анализа поля корреляции?
8. Назовите основные свойства выборочного коэффициента парной линейной корреляции.

9. Какие выводы можно сделать при равенстве нулю коэффициента выборочной парной линейной корреляции случайных величин?

10. Проведите измерения роста своего тела в различное время суток, проведите анализ наличия и силы корреляционной связи между этими переменными.

11. В каких случаях при корреляционном анализе применяют коэффициенты ранговой корреляции?

12. Каким методом можно оценить корреляцию между свойством объекта и несколькими качественными входными факторами?

4.2. Планирование и дисперсионный анализ результатов эксперимента

Дисперсионный анализ – это раздел математической статистики, который так же, как и корреляционный анализ, позволяет *качественно* устанавливать связь между случайными величинами и её силу.

В основу дисперсионного анализа положено сравнение между собой средних арифметических значений $\bar{Y}$ для двух и более уровней факторов X_j . Эта задача решается путём сравнения выборочной дисперсии Y , вызванной влиянием факторов X_j , с выборочной дисперсией, обусловленной случайными факторами (неизвестными или неконтролируемыми в данном эксперименте). Если различие между этими дисперсиями значимо (не равно нулю), то считают, что фактор X оказывает существенное влияние на свойство Y .

При дисперсионном анализе зависимости Y от X (изменчивости Y при изменении X), сравнивая средние $\bar{Y}$ для всех уровней X , исходят из следующих соображений.

В эксперименте изменения свойства объекта Y зависят не только от изменяемых факторов X_j (при переходе на их новые уровни), но и от случайных факторов. Поэтому рассеивание (разброс) Y относительно общего среднего арифметического значения $\bar{Y}^*$, характеризующее общей дисперсией ($S_{об}^2$), разделяется на составляющие:

- рассеивание, обусловленное случайными факторами ($S_{ош}^2$, дисперсия случайных ошибок, выборочная дисперсия, дисперсия воспроизводимости);
- рассеивание, обусловленное изменениями факторов X_j при переходе с одного уровня на другие (S_x^2 , факторная дисперсия).

На рис. 4.3 приведены единичные и средние значения Y для восьми опытов эксперимента ($N = 8$) и диапазоны рассеивания Y для уровней ($v = 1...m$) фактора X ($m = 4$) при двукратном повторении опытов ($n = 2$), характеризуемые соответствующими дисперсиями единичных значений S_v^2 .

Сравнение факторной дисперсии (S_x^2) с дисперсией, характеризующей действие случайных факторов ($S_{ос}^2$), позволяет на основании закона распределения Фишера сделать основной вывод дисперсионного анализа - установить или опровергнуть влияние X на Y с заданной доверительной вероятностью.

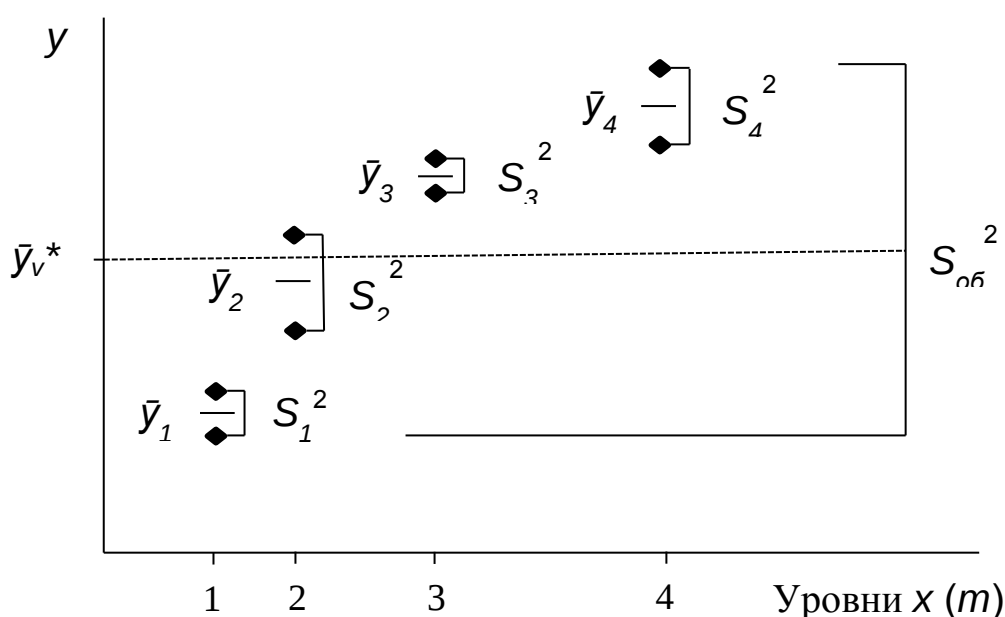


Рис. 4.3. Изменчивость и рассеивание Y при изменении X :
единичные результаты измерений y ($\blacklozenge$);
среднее $\bar{y}_v$ для соответствующего уровня фактора x_v (—)

Можно по закону распределения Фишера дополнительно оценить вероятность влияния X на Y .

Статистическое парное сравнение средних арифметических значений Y для отдельных уровней входного фактора X позволяет определить те его уровни, при которых есть статистические различия в отклике объекта Y . Возможность сделать эти дополнительные выводы при дисперсионном анализе является его преимуществом по сравнению с корреляционным анализом.

Дисперсионный анализ проводят следующим образом. После реализации эксперимента и математической обработки результатов измерений вычисляют F -отношение (F_p) по следующей формуле

$$F_p = \frac{S_x^2}{S_{ош}^2}.$$

Задав доверительную вероятность P и вычислив по известным формулам числа степеней свободы для факторной дисперсии ($f_{факт}$) и дисперсии случайных факторов ($f_{ош}$), находят критическое значение квантиля распределения Фишера ($F_{кр}$). Сравнивая F_p и $F_{кр}$ с заданной доверительной вероятностью, подтверждают или отвергают нуль-гипотезу $S_x^2 - S_{ош}^2 = 0$. Если выполняется неравенство $F_p \geq F_{кр}$, то с доверительной вероятностью P нуль-гипотеза отвергается и можно сделать вывод, что на фоне действия случайных факторов фактор X влияет на свойство Y . При подтверждении нуль-гипотезы ($F_p < F_{кр}$) с доверительной вероятностью P делается вывод об отсутствии влияния фактора X на свойство Y , т. е. это влияние соизмеримо со случайными ошибками эксперимента ($S_x^2 \approx S_{ош}^2$). Для вычисленной величины F_p по распределению Фишера может быть рассчитана вероятность альтернативных гипотез.

При дисперсионном анализе отклонение гипотезы $S_x^2 \approx S_{ош}^2$ означает только то, что есть хотя бы одна пара средних $\bar{y}_v$, неравных друг другу. Поэтому часто возникает задача определения средних $\bar{y}_v$, значимо различающихся между собой. Эту задачу решают в дисперсионном анализе различными методами [19, 24, 33-35].

Конкретные алгоритмы расчётов и проведения дисперсионного анализа зависят от числа одновременно изменяемых факторов X_j в эксперименте, однородности дисперсий единичных значений Y для различных уровней фактора X_j , повторений опытов. Познакомиться с этими алгоритмами можно в книгах [19, 24, 33-35].

Таким образом, дисперсионный анализ, по сравнению с корреляционным анализом, позволяет:

оценивать влияние на Y отдельных уровней фактора X и благодаря этому дифференцировать области влияния (невлияния) X на Y ;

определить влияние на свойство Y любых качественных факторов X без их преобразования в порядковую форму (ранжирования).

Общим требованием к планированию любого эксперимента для проведения дисперсионного анализа является выполнение следующего условия для числа уровней фактора X_j : $m_j \geq 2$.

Желательно, чтобы план эксперимента для проведения дисперсионного анализа, как и для проведения корреляционного анализа, предусматривал:

- широкую область изменения значений факторов X_j ,
- большое число m_j значений (уровней) факторов X_j , при этом разница между уровнями должна быть больше абсолютной погрешности их измерения;
- повторные опыты для каждого значения (уровня) факторов X_j ;
- большое общее число опытов (N).

Выбор конкретного плана эксперимента определяется заданными количеством исследуемых факторов и числом опытов. Различают планы экспериментов для проведения одно-, двух- и многофакторного (трех- и более) дисперсионного анализа.

Для составления планов эксперимента и применения к его результатам дисперсионного анализа можно использовать прикладные компьютерные программы, например, программу STATGRAPHICS [34].

4.2.1. Однофакторный дисперсионный анализ

Эксперимент, в котором исследуется влияние на свойство объекта Y изменения только одного фактора X , называется однофакторным.

Введем следующие обозначения:

- A – исследуемый фактор;
- m – число уровней фактора A ;
- v – номер уровня фактора A ;
- a_v – обозначение уровня фактора A ($v = 1 \dots m$);
- n_v – число повторений опыта при одном уровне фактора A ;
- i – номер повторного опыта при одном уровне фактора A ;
- N – общее число опытов в эксперименте.

При одинаковом числе повторений опытов для каждого уровня фактора ($n_1 = n_2 = \dots = n_v = \dots = n_m = n$) общее число опытов в эксперименте будет равно: $N = mn$.

Классической формой (матрицей) плана однофакторного эксперимента, для результатов которого возможно проведение однофакторного дисперсионного анализа, является табл. 4.3. Условные обозначения уровней фактора часто называют «кодированными», а реальные значения (качественные или количественные) – натуральными значениями.

Таблица 4.3

Матрица классического плана однофакторного эксперимента
с кодированными значениями уровней фактора A

Номер повторного опыта, i	Значения y при уровне фактора A (a_v):						
	a_1	a_2	...	a_v	...	a_{m-1}	a_m
1							
2							
...							
i							
...							
$n-1$							
n							

Число ячеек в табл. 4.3 соответствует общему числу опытов в эксперименте (N). В эти ячейки после проведения соответствующего опыта заносят измеренное единичное значение свойства объекта y_{vi} .

При однофакторном дисперсионном анализе для расчёта F_p вычисляют следующие параметры [19, 24, 34]:

$$S_{об}^2 = S_A^2 + S_{воспр.}^2; \quad S_{об}^2 = \frac{\sum_{v=1}^m \sum_{i=1}^n (y_{vi} - \bar{y})^2}{N-1};$$

$$S_{ош}^2 = \frac{1}{m(n-1)} \sum_{i=1}^n (y_{vi} - \bar{y}_v)^2; \quad S_A^2 = S_{об}^2 - S_{ош}^2; \quad F_p = \frac{S_A^2}{S_{ош}^2}.$$

Для удобства «ручных» расчётов вычисляют и другие параметры:

$$SS_A(SS^*) = \frac{1}{n} \sum_{v=1}^m (\sum_{i=1}^n y_{vi})^2 - \frac{1}{mn} (\sum_{v=1}^m \sum_{i=1}^n y_{vi})^2; \quad f_A(df^*) = m-1;$$

$$SS_{ош}(SS^{**}) = SS - SS_A; \quad f_{ош}(df^{**}) = m(n-1);$$

$$S_A^2(MS^*) = \frac{SS_A}{m-1}; \quad S_{ош}^2(MS^{**}) = S_{ош}^2 = \frac{SS_{ош}}{m-1};$$

$$SS^{***} = \sum_{v=1}^m \sum_{i=1}^n y_{vi}^2 - \frac{1}{mn} (\sum_{v=1}^m \sum_{i=1}^n y_{vi})^2; \quad f_{SS}(df^{***}) = mn-1.$$

Примечание. Принятые в выходных данных программы Excel обозначения и место нахождения параметров: * – для фактора A как источника вариации (находятся в строке «Между группами»); ** – для случайных факторов (в строке «Внутри групп»); *** – для всех источников вариации (в строке «Итого»).

Пример 4.2

Задачей прикладного научного исследования являлось экспериментальное качественное подтверждение наличия и определение силы связи прочности бетона на сжатие (свойство Y) с формой зёрен щебня (фактор X). Для анализа результатов эксперимента с получением качественных выводов возможно применение дисперсионного анализа. Для выполнения обязательного условия дисперсионного анализа (число уровней фактора X должно быть не менее двух) был составлен и реализован классический план однофакторного трёхуровневого эксперимента ($m = 3$) с двухкратным повторением опытов ($n = 2$) и были получены средние арифметические результаты измерений y для 6 опытов эксперимента ($N = 6$), которые приведены в табл. 4.4.

Таблица 4.4

Классический план и результаты однофакторного эксперимента

Номер повторного опыта, i	Прочность бетона на сжатие (y , МПа) с формой зёрен щебня (X_v)		
	Кубовидная ($v = 1$)	Пластинчатая ($v = 2$)	Игольчатая ($v = 3$)
1	26	10	8
2	22	12	6

Для выполнения расчётов параметров, необходимых для проведения однофакторного дисперсионного анализа, воспользуемся статистическими процедурами программы Excel. В надстройке «Анализ данных» из предлагаемых инструментов анализа выбираем «Однофакторный дисперсионный анализ». Результаты полученных расчётов для доверительной вероятности 0,95 (уровень значимости «Альфа» - 0,05) выводятся на экран монитора компьютера в виде двух таблиц (табл. 4.5).

Таблица 4.5

Однофакторный дисперсионный анализ

ИТОГИ				
Группы	Счет	Сумма	Среднее	Дисперсия
Кубовидная	2	48	24	8
Пластинчатая	2	22	11	2
Игольчатая	2	14	7	2

Дисперсионный анализ

<i>Источник вариации</i>	<i>SS</i>	<i>df</i>	<i>MS</i>	<i>F</i>	<i>P-Значение</i>	<i>F критиче- ское</i>
<i>Между группами</i>	316	2	158	39,5	0,006997793	9,552094496
<i>Внутри групп</i>	12	3	4			
<i>Итого</i>	328	5				

Из данных таблицы «Дисперсионный анализ» (табл. 4.5) следует, что форма зёрен использованного в эксперименте щебня влияет на прочность бетона при сжатии с вероятностью не менее 0,95, так как $F (F_p) > F_{\text{критическое}} (F_{\text{кр}})$. Вероятность, что этот вывод ошибочный (P -Значение), очень мала и равна 0,007.

Для сравнения средних для каждого уровня (группы) фактора X ($\bar{Y}_v$) определим однородность их дисперсий по критерию Кохрена, так как число повторений опытов для каждого уровня фактора X одинаково ($n_1 = n_2 = n_3 = n = 2$). По данным таблицы «ИТОГИ» (табл. 4.5) вычислим расчётное значение G_p :

$$G_p = \frac{S_{\max}^2}{\sum_{j=1}^k S_j^2} = \frac{8}{8+2+2} \approx 0,667.$$

По закону бета-распределения для доверительной вероятности $P = 0,95$ (уровне значимости $\alpha = 0,05$) и степени свободы $f = n - 1 = 1$ находим критическое значение квантиля правостороннего распределения Кохрена ($G_{\text{кр}}$) в среде программы Excel с помощью функции «БЕТАОБР» [24, с. 294]: $G_{\text{кр}} \approx 0,967$.

Так как $G_p < G_{\text{кр}}$ ($0,667 < 0,967$), то с доверительной вероятностью 0,95 следует считать сравниваемые дисперсии одинаковыми.

Для определения средних $\bar{Y}_v$, значимо отличающихся друг от друга, проведём их попарное сравнение. Воспользуемся инструментом анализа «Двухвыборочный t-тест с одинаковыми дисперсиями» в надстройке «Анализ данных» программы Excel. Результаты расчётов с помощью данного инструмента анализа сведём в табл. 4.6.

Таблица 4.6

Результаты расчётов при двухвыборочном t -тесте
с одинаковыми дисперсиями

Параметр	Сравниваемые две формы щебня					
	$\nu = 1$ и $\nu = 3$		$\nu = 1$ и $\nu = 2$		$\nu = 2$ и $\nu = 3$	
	Кубовидная	Игольчатая	Кубовидная	Пластинчатая	Пластинчатая	Игольчатая
Среднее ($\bar{y}_v$), МПа	24	7	24	11	11	7
Дисперсия (S_v^2), МПа ²	8	2	8	2	2	2
Наблюдения (n)	2	2	2	2	2	2
Объединенная дисперсия, МПа ²	5		5		2	
Гипотетическая разность средних, МПа	0		0		0	
df	2		2		2	
t -статистика	7,602631123		5,813777		2,828427	
P ($T \leq t$) одностороннее	0,008432308		0,014167		0,052786	
t критическое одностороннее	2,91998558		2,919986		2,919986	
P ($T \leq t$) двухстороннее	0,016864616		0,028334		0,105573	
t критическое двухстороннее	4,30265273		4,302653		4,302653	

Из данных табл. 4.6 следует, что гипотеза равенства средних (t -статистика $< t$ критическое двухстороннее) с доверительной вероятностью 0,95 не выполняется только для щебня с кубовидной формой зёрен. Бетон с таким щебнем имеет самую высокую прочность при сжатии. Бетоны с другими по форме зёрен щебнями (пластинчатая и игольчатая) по прочности на сжатие не отличаются друг от друга на фоне случайных ошибок эксперимента.

4.2.2. Двухфакторный дисперсионный анализ

Для качественной оценки влияния на свойство Y изменений двух факторов (A и B) можно воспользоваться двумя видами двухфакторного дисперсионного анализа: дисперсионным анализом без повторений опытов и дисперсионным анализом с повторениями опытов.

Обнаружить эффект взаимодействия факторов, т. е. эффект их неаддитивного влияния на Y , можно только при реализации плана с повторениями опытов. Этот эффект может быть усиливающим (синергетическим) или ослабляющим (антогонистическим) по сравнению с влиянием на Y изменения только одного фактора (A или B).

4.2.2.1. Двухфакторный дисперсионный анализ без повторений опытов

Если обозначить для второго фактора B максимальное число его уровней w и номер уровня q , то общее число опытов в плане эксперимента без повторения опытов будет равно:

$$N = mw.$$

Классический план такого эксперимента (табл. 4.7) является *планом полного факторного эксперимента (ПФЭ)*, так как в нем предусмотрены опыты со всеми возможными сочетаниями различных уровней всех факторов.

Более понятным для выполнения является развернутый план эксперимента. Развернутый план получают из классического плана, присвоив в случайном порядке по принципу рандомизации номера опытов p ($p = 1...mw$) каждой ячейке табл. 4.7. Условия проведения каждого опыта (табл. 4.8) определяются, исходя из того, какие столбец и строка (уровни фактора A и B) пересекаются в ячейке с данным номером опыта.

Таблица 4.7

План эксперимента без повторения опытов с кодированными значениями уровней факторов для применения к его результатам двухфакторного дисперсионного анализа

Уровень фактора B (b_q)	Значения y при уровне фактора A (a_v)						
	a_1	a_2	...	a_v	...	a_{m-1}	a_m
b_1	№ 8	№ 3	...	№ 1	...	...	...
b_2	...	№ 5	...	...	...	...	№ 7
...	...	...	...	...	...	...	...
b_q	№ 4	...	...	...	...	№ p	...
...	...	...	...	...	...	...	...
b_{w-1}	№ 2	№ mw	...	...	...	...	...
b_w	...	№ 6	...	...	...	...	...

Таблица 4.8

Развернутый план эксперимента с кодированными значениями уровней факторов без повторения опытов для применения к его результатам двухфакторного дисперсионного анализа

Номер опыта	Кодированные значения уровня фактора		Значение y
	A	B	
1	a_z	b_1	
2	a_1	b_{w-1}	
3	a_2	b_1	
4	a_1	b_q	
5	a_2	b_2	
6	a_2	b_w	
7	a_m	b_2	
8	a_1	b_1	
...	...	...	
p	a_{m-1}	b_q	
...	...	...	
mw	a_2	b_{w-1}	

Алгоритмы расчётов и примеры проведения двухфакторного дисперсионного анализа без повторений опытов приведены в книгах [19, 24, 33, 34].

4.2.2.2. Двухфакторный дисперсионный анализ с повторениями опытов

При одинаковом числе повторений опытов n с каждым сочетанием всех уровней факторов A и B общее число опытов в плане полного факторного эксперимента будет равно: $N = nmw$.

Матрица классического плана такого эксперимента с двухкратным повторением опытов ($n = 2$) представлена в табл. 4.9.

Алгоритмы расчётов и примеры проведения двухфакторного дисперсионного анализа с повторениями опытов приведены в книгах [19, 24, 33, 34].

Таблица 4.9

**Матрица плана двухфакторного эксперимента
с двухкратным повторением опытов**

Уровень фактора B (b_q)	Номер повторного опыта, i	Значения у при уровне фактора A (a_v)						
		a_1	a_2	...	a_v	...	a_{m-1}	a_m
b_1	1							
	2							
b_2	1							
	2							
...	1							
	2							
b_q	1							
	2							
...	1							
	2							
b_{w-1}	1							
	2							
b_w	1							
	2							

Пример 4.3

Задачей прикладного научного исследования являлось экспериментальное качественное подтверждение наличия и определение силы связи прироста по высоте липы мелколистной в городе (свойство Y) с двумя факторами: количеством (фактор **A**) и видом (фактор **B**) вносимого удобрения.

Предполагалось, что может иметь место различное влияние на Y количества вносимого удобрения для разных его видов, т. е. на Y может наблюдаться эффект взаимодействия факторов **A** и **B**. Для обнаружения эффекта взаимодействия факторов из двух методов качественного анализа (корреляционный и дисперсионный) возможно применение только двухфакторного дисперсионного анализа результатов эксперимента при условии повторения его опытов.

Был спланирован и реализован полный двухфакторный эксперимент с трёхкратным повторением опытов, результаты которого приведены в табл. 4.10. Для исследований были взяты 36 деревьев ($N = 32$), по 12 деревьев на трёх улицах города ($n = 3$). Весной под полог одного из 12 деревьев на каждой улице разбрасывалось одно из четырёх количеств ($m = 4$) одного из трёх видов удобрений ($w = 3$). Через год измерялся прирост высоты для каждого дерева.

Таблица 4.10

План и результаты двухфакторного эксперимента
с трёхкратным повторением опытов

Вид удобрения (В)	Номер улицы, i	Значения прироста по высоте липы (y , см) при количестве вносимого удобрения (A , кг):			
		200 кг	300 кг	400 кг	500 кг
Мочевина	1	15	20	25	18
	2	17	18	25	20
	3	14	21	28	22
Суперфосфат	1	12	15	14	13
	2	10	10	15	12
	3	14	11	10	11
Хлористый калий	1	18	25	22	23
	2	20	21	22	25
	3	22	25	20	28

К полученным результатам эксперимента (табл. 4.10) применим инструмент «Двухфакторный дисперсионный анализ с повторениями» в надстройке «Анализ данных» программы Excel [24, с. 366] для доверительной вероятности 0,95 (уровень значимости «Альфа» 0,05). Таблица «Дисперсионный анализ», появляющаяся на экране монитора, представлена в виде табл. 4.11.

Таблица 4.11

Источник вариации	SS	df	MS	F	P-Значение	F критическое
Выборка*	704,8889	2	352,4444	88,72727	$8,17354 \cdot 10^{-12}$	3,402826105
Столбцы**	92,75	3	30,91667	7,783217	0,000844798	3,00878657
Взаимодействие***	133,3333	6	22,22222	5,594406	0,000951769	2,508188823
Внутри****	95,33333	24	3,972222			
Итого	1026,306	35				

* Влияние фактора В.

** Влияние фактора А.

*** Влияние взаимодействия факторов А и В.

**** Влияние случайных факторов.

Из данных табл. 4.11 следует, что с доверительной вероятностью 0,95 на годовой прирост липы влияют оба фактора со значимым эффектом их взаимодействия, так как соответствующие значения F -статистики (F) $> F_{кр}$ и вероятность ошибки этих выводов

(P -значение) $< 0,05$. Наибольшее влияние на Y оказывает вид вносимого удобрения, так как для этого фактора, по сравнению с фактором A и эффектом взаимодействия AB , значительно большее значение F и меньшее P -значение. Определение знака (положительный или отрицательный) влияния на Y взаимодействия факторов AB возможно только при проведении регрессионного анализа.

Для большей наглядности для анализа представим в графическом виде вычисленные средние $\bar{y}_v$ (рис. 4.4).

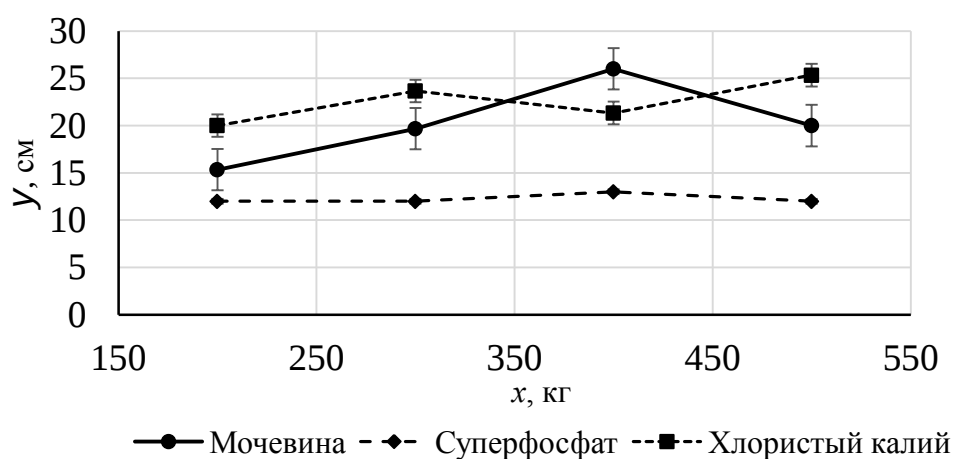


Рис. 4.4. Вычисленные средние значения $\bar{y}$

Из данных рис. 4.4. следует, что с учётом погрешностей измерений наименьшее влияние на прирост высоты липы, практически не зависящее от вносимого количества удобрения, оказывает суперфосфат. Наибольшее влияние на прирост липы при небольших дозировках (200-300 кг) и дозировке 500 кг даёт хлористый калий. При дозировке 400 кг максимальный прирост липы (сопоставимый с калийным удобрением в дозировках 300 и 500 кг) обеспечивает применение мочевины.

4.2.3. Многофакторный дисперсионный анализ

При многофакторном эксперименте одновременно изменяются три и более факторов. Общее число опытов (без их повторения) для полного факторного эксперимента с k изменяемыми факторами (если каждый из них имеет одно и то же число уровней m) будет равно:

$$N_{\text{пфэ}} = m^k.$$

Проведение расчётов, необходимых для проведения многофакторного дисперсионного анализа результатов полных факторных экспериментов, предусмотрено в программе STATISTICA [33].

Очевидно, что с увеличением числа исследуемых факторов общее число опытов в эксперименте будет резко возрастать. Поэтому при многофакторных экспериментах часто применяют *планы дробных факторных экспериментов* (ДФЭ), которые предусматривают выполнение опытов только с частью всех возможных сочетаний различных уровней всех факторов (дробные реплики ПФЭ). Долю общего числа опытов ДФЭ ($N_{ДФЭ}$) от $N_{ПФЭ}$ называют степенью дробности ДФЭ.

Планы ДФЭ широко применяются в промышленных экспериментах, а также при отсеивающих лабораторных экспериментах, когда необходимо изучить достаточно большое число факторов при небольшом числе опытов и определить те факторы, которые оказывают наиболее сильное влияние на свойство y .

Необходимо помнить, что *сокращение числа опытов* в эксперименте, т. е. переход от ПФЭ к ДФЭ, всегда приводит к *снижению точности* дисперсионного анализа результатов эксперимента.

Существуют различные принципы составления и типы планов ДФЭ: составление планов по принципу дробных реплик, латинских квадратов и кубов, планы Плэкетта–Бермана и др. Эти планы относятся к *планам математического планирования эксперимента*, так как при их построении сочетание уровней факторов в опытах (выбор части опытов из планов ПФЭ) происходит не произвольно, а по определенным принципам математической комбинаторики.

Число опытов в плане дробного факторного эксперимента ($N_{ДФЭ}$) может быть значительно меньше числа опытов в полном факторном эксперименте. Так, например, для планов эксперимента, составленных по принципу дробных реплик, число их опытов (без повторений) с одинаковым числом уровней для всех факторов будет в несколько раз меньше числа опытов ПФЭ:

$$N_{ДФЭ} = \frac{N_{ПФЭ}}{m^a} = m^{k-a},$$

где a равно 1, 2, 3, и т.д.

Одними из самых экономичных по числу опытов и эффективных для дисперсионного анализа из известных планов ДФЭ являются планы Плэкетта–Бермана, удовлетворяющие двум критериям оптимальности: ортогональности и D -оптимальности [34].

Из других планов ДФЭ, к результатам которых можно применять многофакторный дисперсионный анализ, используют планы, составленные по принципу латинских (для $k = 3$), греко-латинских ($k = 4$) и гипер-греко-латинских квадратов и кубов ($k > 4$) и др.

Рассмотрим построение планов эксперимента по принципу латинских квадратов. Для построения планов по принципу латинских квадратов все факторы X_j должны иметь одинаковое число уровней: $m_j = m$.

Латинский квадрат – это таблица с числом ячеек равным $m \times m$, составленная таким образом, что каждый элемент таблицы повторяется в каждой ее строке и столбце только один раз.

Число латинских квадратов зависит от числа входных факторов и для $k > 3$ оно достаточно велико. Так, например, для $k = 4$ можно построить 576 латинских квадратов и 161280 латинских квадратов для $k = 5$ [19].

Стандартными (каноническими) латинскими квадратами называются такие квадраты, у которых первая строка и первый столбец соответствующей таблицы построены в алфавитном порядке для элементов квадрата, обозначаемых буквами или цифрами в порядке натурального ряда для элементов квадрата.

Существуют различные методы построения стандартных латинских квадратов. Один из самых простых методов построения стандартных латинских квадратов – метод одношаговой циклической перестановки. Суть этого метода заключается в следующем:

в первой строке слева-направо по алфавиту или по возрастанию приводятся элементы квадрата;

в начале второй строки ставится последний член первой строки, а остальные её члены сдвигаются слева-направо;

в начале третьей строки ставится последний член второй строки, а остальные её члены сдвигаются слева-направо;

и т.д.

Например, методом одношаговой циклической перестановки построены следующие латинские квадраты размером 3×3 (элементы обозначены буквами) и 4×4 (элементы обозначены цифрами):

A	B	C	1	2	3	4
C	A	B	4	1	2	3
B	C	A	3	4	1	2
			2	3	4	1

В данных квадратах их элементы не повторяются больше одного раза в каждой строке и в каждом столбце.

Для трехфакторного эксперимента ($k = 3$) применяют планирование эксперимента по схеме латинского квадрата. Число опытов без их повторения ($N_{ЛК}$) для такого плана определяется по формуле:

$$N_{ЛК} = 1/m \cdot km = km - 1 = 3m - 1.$$

Такой план является $1/m$ частью плана полного факторного эксперимента. При применении такого плана исходят из предположения, что эффекты взаимодействия между факторами незначимы.

Значение эффекта фактора может получиться со знаком «+» или «-» в зависимости от того уменьшает или увеличивает рассматриваемый уровень фактора свойство объекта y по сравнению с общим средним $\bar{y}$.

Рассчитанные значения эффектов факторов на разных уровнях можно представлять и анализировать в графическом виде.

Математическое планирование эксперимента – это постоянно совершенствующийся раздел математики. Теоретические вопросы оценки оптимальности составленных планов ДФЭ, в том числе с помощью программы STATGRAPHICS, примеры проведения многофакторного дисперсионного анализа результатов ДФЭ приведены в книге [34].

Пример 4.4

Необходимо составить план эксперимента с минимальным числом опытов без их повторений для изучения методом дисперсионного анализа качественной зависимости свойства объекта Y от изменений десяти факторов ($k = 10$), каждый из которых имеет два уровня ($m = 2$).

Выполним расчёты необходимого числа опытов для различных видов планов эксперимента.

Для проведения ПФЭ необходимо будет выполнить следующее число опытов:

$$N_{ПФЭ} = m^k = 2^{10} = 1024.$$

Из известных ортогональных и D-оптимальных планов ДФЭ рассмотрим возможное число опытов в двухуровневом эксперименте по планам, составленным по принципу дробных реплик ($N_{ДР}$) и планам Плэккетта–Бермана ($N_{ПБ}$):

$$N_{ДР} = 2^{k-a} = 2^{10-a}; \quad N_{ПБ} = 4b,$$

где $a = 1, 2, 3, \dots, 10$ (соответственно $N_{ДР} = 512, 256, 128, 64, 32, 16, 8, 4, 2$, соответственно), а b равно $1, 2, 3, 4$ (соответственно $N_{ПБ} = 4, 8, 12, 16$).

Из таких 2-уровневых планов можно выбирать только «насыщенные» планы, т. е. те, для которых выполняется соотношение:

$$N \geq k+1 \geq 10+1 \geq 11.$$

Требованиям этого соотношения и минимального числа опытов лучше всех удовлетворяет план Плэкетта–Бермана с $N_{ПБ} = 12$.

Построим такой план с кодированными значениями факторов, обозначая знаком «+» максимальное значение фактора, а знаком «-» его минимальное значение.

При построении данного плана (табл. 4.12) в соответствии с одним из вариантов математической комбинаторики в ячейки последнего опыта (№ 12) внесём кодированное значение «-» для всех факторов [19].

Затем в столбце плана для X_1 в одиннадцати незаполненных ячейках расположим в рекомендуемой последовательности [19, с. 238] шесть ($N/2$) знаков «+» и пять ($N/2-1$) знаков «-». При заполнении ячеек следующего столбца для X_2 воспользуемся комбинацией значений в левом соседнем столбце X_1 : поместим в первую ячейку столбца X_2 значение X_1 в предпоследней (одиннадцатой) ячейке, а в оставшиеся пустые ячейки столбца X_2 – значения X_1 в десяти верхних ячейках. Аналогичным способом математической комбинаторики заполним столбцы для всех факторов.

Таблица 4.12

План Плэкетта-Бермана с 12 опытами без их повторений

Но- мер опы- та, i	Кодированные значения факторов:												у
	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7	X_8	X_9	X_{10}	$X_{11}(*)$	$X_{12}(*)$	
1	+	-	+	-	-	-	+	+	+	-	+	+	
2	+	+	-	+	-	-	-	+	+	+	-	+	
3	-	+	+	-	+	-	-	-	+	+	+	-	
4	+	-	+	+	-	+	-	-	-	+	+	+	
5	+	+	-	+	+	-	+	-	-	-	+	+	
6	+	+	+	-	+	+	-	+	-	-	-	+	
7	-	+	+	+	-	+	+	-	+	-	-	-	
8	-	-	+	+	+	-	+	+	-	+	-	-	
9	-	-	-	+	+	+	-	+	+	-	+	-	
10	+	-	-	-	+	+	+	-	+	+	-	+	
11	-	+	-	-	-	+	+	+	-	+	+	-	
12	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	

* Фиктивные факторы, которые можно использовать для расчета случайных ошибок эксперимента.

Правильность построенного плана Плэкетта–Бермана подтверждается двумя признаками:

*диагональное расположение одинаковых знаков в ячейках плана;
равенство количества знаков «+» знаков «-» (по шесть) в каждом столбце плана.*

План с натуральными значениями факторов получим из плана с кодированными значениями путем замены знаков «+» и «-» на соответствующие им максимальные и минимальные натуральные значения для каждого фактора.

С примерами составления и оценки оптимальности планов многофакторных экспериментов, применения к их результатам дисперсионного анализа, в том числе с помощью компьютерных программ, можно познакомиться в книгах [33,34].

Следует иметь в виду, что применение дисперсионного анализа даёт более точные выводы, если величины Y и X имеют нормальное распределение. В противном случае для качественной оценки влияния X на Y лучше использовать *непараметрические методы факторного анализа* [33-35].

4.2.4. Контрольные вопросы и задания

1. Для каких целей применяют дисперсионный анализ в прикладных научных исследованиях?
2. Какой вид зависимости (качественная или количественная) свойства объекта Y от значений фактора X можно определить с помощью дисперсионного анализа?
3. Приведите названия методов дисперсионного анализа.
4. Что положено в основу дисперсионного анализа?
5. Укажите единственное обязательное условие при планировании эксперимента для последующей обработки его результатов методами дисперсионного анализа.
6. Какие планы эксперимента дают наиболее точные оценки при дисперсионном анализе его результатов?
7. Приведите достоинства дисперсионного анализа по сравнению с корреляционным анализом.
8. В чём отличие плана полного факторного эксперимента от плана дробного факторного эксперимента?
9. Какие основные выводы делают при дисперсионном анализе?
10. Составьте план эксперимента по изучению влияния времени года (весна, лето, осень, зима) на массу своего тела методом дисперсионного анализа.

4.3. Планирование и регрессионный анализ результатов эксперимента

Регрессионный анализ – это раздел математической статистики, позволяющий определить форму корреляционной зависимости свойства объекта Y от значений входных факторов X , оказывающих влияние на это свойство.

В основу проведения регрессионного анализа свойств объекта с малоизученным механизмом его поведения положен принцип "черного ящика". Суть этого принципа заключается в том, что исследователь, не зная об истинных закономерностях поведения объекта, описывает его с помощью статистических математических моделей.

Образно говоря, "ударяя" по исследуемому объекту изменением входных факторов X в ходе эксперимента (рис. 4.5) и измеряя его отклики Y на эти "удары" на фоне действия случайных факторов (W), можно получить статистическую математическую зависимость, пригодную для описания и прогноза поведения объекта.

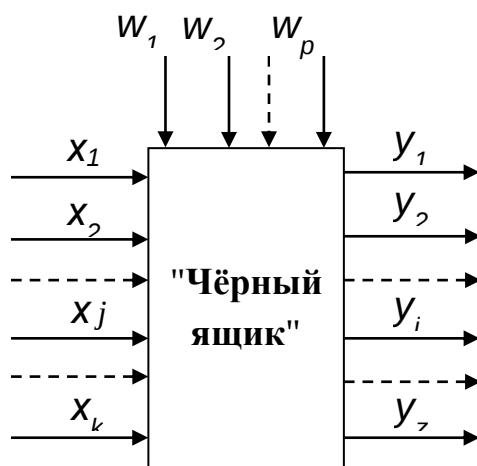


Рис. 4.5. Схема изучения объекта по принципу "чёрного ящика"

Форма корреляционной зависимости Y от значений входных факторов X_j , выраженная в виде конкретной математической функции, называется уравнением регрессии (регрессионной моделью объекта) и имеет следующий общий вид:

$$\hat{y} = f(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_k) = f(x_j).$$

Во многих случаях полученное по результатам эксперимента уравнение регрессии используется как статистическая (экспериментально-статистическая) математическая модель объекта.

Следует понимать, что статистические математические модели объекта принципиально отличаются от детерминированных математических моделей объекта.

Детерминированные математические модели объекта, строят на основе фундаментальных законов физики, механики, химии и других естественных наук и предполагают знание закономерностей его поведения. *Статистические математические модели* получают, описывая зависимости свойств (откликов) объекта от изменения входных параметров x_j (факторов) с помощью различных функций.

При использовании статистических моделей объекта необходимо учитывать следующие *важные обстоятельства* [19]:

1. С познавательной точки зрения статистическая (регрессионная) модель объекта не представляет большого интереса. Зная коэффициенты регрессии, нельзя определить истинную зависимость φ , а, следовательно, невозможно получить информацию об истинных закономерностях поведения исследуемого объекта.

2. Экспериментально-статистические модели применимы для прогноза только в тех условиях (той области факторного пространства), в которых проводился эксперимент.

3. Статистические модели очень полезны с практической точки зрения, так как позволяют управлять поведением объекта и решать для него задачи оптимизации.

Одно из основных требований к математической модели объекта - это точность описания (предсказывания) поведения реального объекта при изменении условий.

Проводить регрессионный анализ можно только для *количественных значений* y и x_j . Выполнение регрессионного анализа состоит из следующих этапов:

1. Выбор модели уравнения регрессии;
2. Расчёт и оценка параметров уравнения регрессии;
3. Проверка статистических гипотез для параметров уравнения регрессии.

При регрессионном анализе решают две основные задачи. Сначала по результатам измерения свойства объекта при различных значениях факторов ищут с помощью метода приближения выборочные коэффициенты уравнения регрессии, которое наиболее точно описывает истинную зависимость φ влияния факторов на свойства объекта:

$$y = \varphi(x_j) + \varepsilon \approx f(x_j) + \theta + \varepsilon,$$

где ε – случайные ошибки эксперимента, θ – ошибки, связанные с несовпадением уравнения регрессии с истинной зависимостью φ ;

Затем оценивают суммарные ошибки ($\theta + \varepsilon$).

Порядок проведения регрессионного анализа (его тип) зависит от плана эксперимента. Различают классический регрессионный анализ (КРА) и регрессионный анализ при математическом планировании эксперимента (РАМПЭ).

Классический регрессионный анализ применяют в том случае, когда главной целью исследования является получение уравнения регрессии, описывающее поведение объекта с наилучшей точностью или матрица плана эксперимента не удовлетворяет требованиям метода РАМПЭ.

Математическое планирование эксперимента и метод РАМПЭ используют тогда, когда основной целью исследования является получение параметров уравнения регрессии, описывающее с наилучшей точностью влияние входных факторов на свойство объекта.

4.3.1. Классический регрессионный анализ

Общим требованием к планированию любого эксперимента для проведения *классического* регрессионного анализа его результатов является выполнение условия $m_j \geq 3$. Другие рекомендации аналогичны планированию эксперимента для проведения корреляционного анализа.

После планирования и завершения эксперимента проведение классического регрессионного анализа результатов эксперимента проводят в следующем порядке:

1. *Выбирают* математическую функцию в качестве модели уравнения регрессии.
2. *Выбирают* математический метод приближения.
3. Для выбранных функций методом приближения *рассчитывают* параметры функции (коэффициенты уравнения регрессии).
4. *Проверяют* рассчитанные параметры уравнения регрессии на значимость (равенство нулю) для заданной доверительной вероятности.
5. *Корректируют* вид исходной функции, исключая из неё члены с незначимыми параметрами.
6. *Рассчитывают* параметры скорректированной функции (скорректированные коэффициенты уравнения регрессии) и возвращаются к выполнению пп. 4-6 (п. 6 выполняют до тех пор, пока в уравнении регрессии не останутся только значимые параметры).
7. Для оценки суммарных ошибок ($\theta + \varepsilon$) вычисляют статистические характеристики: коэффициент детерминации R^2 , нормированный

коэффициент детерминации R^2 , значение статистики F и уровень его значимости и др.

8. Выбирают другую математическую функцию и снова последовательно выполняют пп. 2-7 (число и вид «перебираемых» функций определяется исследователем).

9. Из группы найденных уравнений регрессии в ряду разных функций выбирают окончательное уравнение регрессии по следующим критериям:

вид уравнения регрессии совпадает с теоретическими законами поведения объекта;

уравнение регрессии описывает поведение объекта с наилучшими статистическими характеристиками.

При выборе функций (пп. 1 и 8), если нет сведений или теоретических предположений о типе зависимости φ , обычно действуют по принципу «от простого к сложному». При этом начинают с функций, линейных относительно своих аргументов и параметров.

Наиболее часто для однофакторной линейной регрессии используют следующие линейные регрессионные модели

$$\hat{y} = f(x) = b_0 + b_1x \text{ и } \hat{y} = b_1x,$$

где b_0 – выборочная постоянная регрессии (свободный член), b_1 – выборочный коэффициент регрессии (выборочный коэффициент влияния на y фактора x).

Одними из распространённых нелинейных моделей однофакторной регрессии являются полиномы вида:

$$\hat{y} = f(x) = b_0 + b_1x + b_2x^2 + \dots + b_cx^c;$$

$$\hat{y} = f(x) = b_1x + b_2x^2 + \dots + b_cx^c,$$

где c – целое число (степень полинома).

Следует отметить, что если в регрессионной модели присутствует свободный член (b_0), то число её параметров (p) на единицу больше, чем число коэффициентов регрессии.

В случае множественной линейной регрессии в качестве регрессионной модели часто используются следующие функции:

$$\hat{y} = f(x) = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_jx_j + \dots + b_kx_k;$$

$$\hat{y} = b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_jx_j + \dots + b_kx_k,$$

где $b_1, b_2, \dots, b_j, \dots, b_k$ – выборочные коэффициенты регрессии (выборочные коэффициенты влияния на y факторов $x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_k$), k – число входных факторов, изменяемых в эксперименте.

В качестве математического метода приближения при выполнении регрессионного анализа обычно используют метод наименьших

квадратов (МНК). Однако применение МНК является корректным при выполнении следующих требований:

единичные результаты измерения свойств Y должны быть независимыми случайными величинами;

результаты измерений Y должны иметь одинаковую точность при всех значениях входных факторов.

При невыполнении этих условий рекомендуется использовать непараметрические методы регрессии [35].

До проведения классического однофакторного регрессионного анализа рекомендуется для заданной доверительной вероятности проведение статистической оценки различий средних арифметических значений Y для минимального и максимального значений уровней фактора X . Если различия средних значений Y для минимального и максимального значений уровней фактора X статистически незначимы, то и нет необходимости искать количественную зависимость Y от X .

После вычислений выбранным методом приближения всех выборочных коэффициентов регрессии проводят их проверку на значимость, т. е. на выполнение для них нуль-гипотезы с помощью T -статистики [24]:

$$T = b_j / SE_j,$$

где b_j – выборочный коэффициент уравнения регрессии, SE_j – выборочное стандартное отклонение (стандартная ошибка) рассчитанного значения b_j .

По результатам эксперимента вычисляют значение T -статистики (t_j) и для заданной доверительной вероятности по распределению Стьюдента определяют критическое значение T -статистики ($t_{кр}$). Если нуль-гипотеза выполняется ($t_j \leq t_{кр}$), то коэффициент b_j следует считать равным нулю для заданной вероятности. В противном случае нужно признать эффект влияния фактора X_j и правомерность присутствия в регрессионной модели элемента с коэффициентом b_j .

После исключения из первоначальной регрессионной модели членов, содержащих незначимые коэффициенты, получают новую модель со скорректированными коэффициентами, значение которых нужно заново рассчитать и проверить их значимость. Эти циклические операции выполняют до тех пор, пока для заданной доверительной вероятности в регрессионной модели останутся только значимые коэффициенты.

Вычисленное значение коэффициента детерминации R^2 рекомендуется проверить на значимость с помощью F -статистики [24, с. 404]:

$$F = \frac{R^2 (N - p)}{(1 - R^2) (p - 1)},$$

где p - число параметров (членов) уравнения регрессии; N - общее число опытов в эксперименте.

По результатам эксперимента вычисляют значение F -статистики (F_p) и для заданной доверительной вероятности по правостороннему распределению Фишера определяют критическое значение F -статистики ($F_{кр}$) для выбранной доверительной вероятности и степеней свободы $f_1 = (p-1)$ и $f_2 = (N-p)$. Если $F_p < F_{кр}$, то ни один входной фактор x_j с заданной вероятностью не влияет на отклик объекта. В противном случае хотя бы один фактор оказывает это влияние.

После получения линейного уравнения регрессии можно переходить к полиномам с постепенным увеличением их степени (полиномы второго, третьего и других порядков) до тех пор, пока не начнет уменьшаться рассчитанное значение F -статистики.

В прикладных научных исследованиях крайне редко известны теоретические законы поведения объекта, поэтому для оценки точности оценки изменений y с помощью найденных уравнений регрессии используют статистические критерии.

Учитывая зависимость коэффициента детерминации от числа факторов x_j рекомендуется для оценки точности уравнения регрессии использовать не только коэффициент детерминации, но и *нормированный* коэффициент детерминации (скорректированный коэффициент детерминации), рассчитываемый по формуле [24]:

$$\bar{R}^2 = 1 - (1 - R^2) \frac{N - 1}{N - p - 1},$$

где $\bar{R}^2$ - нормированный коэффициент детерминации, N - общее число опытов в эксперименте, p - число параметров, включенных в регрессионную модель.

Если при исключении входного фактора из уравнения регрессии нормированный коэффициент детерминации уменьшается незначительно и R^2 имеет приемлемое значение (решается субъективно), то данный фактор можно отнести к второстепенным.

Различные уравнения регрессии одного вида (с постоянной регрессии или без неё) можно сравнивать по нормированному коэф-

фициенту детерминации и принимать тот вариант регрессионной модели, для которой нормированный коэффициент детерминации максимален.

Алгоритмы всех необходимых при классическом регрессионном анализе расчётов (пп. 3, 4, 6, 7) зависят от выбранной функции, метода приближения, наличия повторных опытов, количества исследуемых факторов. Многие из этих алгоритмов реализованы в статистических программных продуктах (STATGRAPHICS [34], STATISTICA [33] и др.), математических пакетах (MathCAD, MathLAB и др.), электронной таблице Excel [24].

В программе Excel инструмент анализа «Регрессия» в надстройке «Анализ данных» и функция «ЛИНЕЙН» могут применяться для регрессионных функций, линейных относительно своих аргументов X_j , а также и для нелинейных функций относительно X_j , но линейных относительно входящих в них параметров (b_j). Примерами нелинейных функций относительно X_j , но линейных относительно входящих в них параметров (b_j) являются полиномиальные функции [24, с. 401] и другие:

$$y = b_0 + b_1 e^x; \quad y = b_0 + b_1 \sin(x); \quad y = b_0 + b_1 \ln(x); \quad y = b_0 + b_1/x.$$

Нелинейными относительно входящих в них параметров являются следующие функции:

$$y = b_0 + e^{b_1 x}; \quad y = b_0 + \sin(b_1 x); \quad y = b_0 + \ln(b_1 x).$$

При многофакторном регрессионном анализе в программе STATISTICA 6 [33, с. 159] предусмотрен расчёт стандартизованных коэффициентов уравнения регрессии (коэффициенты $Beta$), которые позволяют сравнивать вклад каждого фактора X_j в изменение y . Коэффициент $Beta$ показывает, во сколько раз изменяется y (в единицах абсолютного стандартного отклонения) при изменении фактора X_j на одну единицу его абсолютного стандартного отклонения.

Пример 4.5

Для результатов однофакторного эксперимента с трёхкратным повторением опытов (пример 4.1) возможно получение количественной зависимости остаточного содержания лигнина в технической целлюлозе (свойство Y) от продолжительности сульфитной варки берёзовой щепы (фактор X) методом классического регрессионного анализа с выполнением всех его требований:

содержание лигнина в технической целлюлозе и продолжительность варки щепы являются количественными величинами;

число уровней фактора X в эксперименте не менее трёх ($m = 6$); единичные результаты измерения Y являются независимыми случайными величинами и имеют одинаковую точность (сравнение дисперсий единичных значений Y для всех уровней фактора показало их однородность по критерию Кохрена X при доверительной вероятности 0,95).

Для оценки целесообразности регрессионного анализа было проведено сравнение средних арифметических значений Y при различных уровнях фактора X . Применение к результатам в программе Excel инструмента анализа «Двухвыборочный t -тест с одинаковыми дисперсиями» показало, что для доверительной вероятности 0,95 статистически значимо различие между остаточным содержанием лигнина в технической целлюлозе при продолжительности варки щепы в течение 4 и 9 часов и применение регрессионного анализа к результатам эксперимента является целесообразным.

К полученным результатам эксперимента применим классический однофакторный регрессионный анализ.

Так как в исходной берёзовой щепе всегда содержится лигнин, то в регрессионной модели объекта может присутствовать коэффициент регрессии b_0 – выборочная постоянная регрессии (свободный член).

Исходя из расположения точек на поле корреляции (рис. 4.2) нельзя отвергнуть наличие линейной зависимости между Y и X , поэтому первоначально для анализа выберем следующую выборочную линейную регрессионную модель вида

$$\hat{y}(x) = b_0 + b_1x,$$

где b_1 – выборочный коэффициент регрессии (выборочный коэффициент влияния на Y фактора X).

Воспользуемся в программе Excel инструментом анализа «Регрессия» в надстройке «Анализ данных» [24, с. 410], преобразовав классический план эксперимента (табл. 4.2) в развёрнутый (табл. 4.13). Результаты выполнения данной процедуры (без анализа остатков) выводятся на экран монитора в виде трёх таблиц (4.14-4.16).

Таблица 4.13

Развернутый план эксперимента

Номер опыта	x, ч	y, %	Номер опыта	x, ч	y, %	Номер опыта	x, ч	y, %
1	4	15,8	7	6	5,5	13	8	1,6
2	4	15,3	8	6	6,0	14	8	1,6
3	4	15,5	9	6	5,9	15	8	1,7
4	5	9,6	10	7	2,0	16	9	1,5
5	5	9,6	11	7	1,9	17	9	1,4
6	5	9,1	12	7	1,8	18	9	1,3

Таблица 4.14

Вывод итогов

Регрессионная статистика	
Множественный R	0,926001883
R-квадрат	0,857479487
Нормированный R-квадрат	0,848571955
Стандартная ошибка*	2,067077532
Наблюдения**	18

* Выборочное стандартное отклонение остатков;

** Количество анализируемых опытов эксперимента (пар значений y_i и x_i).

Таблица 4.15

Дисперсионный анализ

	df	SS	MS	F	Значимость F	
Регрессия	1	411,3200476	411,3200476	96,26454101	3,57746E-08	
Остаток	16	68,36495238	4,272809524			
Итого	17	479,685				

	Коэффициенты	Стандартная ошибка	t-статистика	P-Значение	Нижнее 95%	Верхнее 95%
Y-пересечение	24,1438	1,9173	12,59	1,020E-09	20,0794	28,2083
x	-2,7990	0,2853	-9,81	3,577E-08	-3,4038	-2,1943

Примечание. В строке «Y-пересечение» приведены статистические параметры, характеризующие постоянную регрессии b_0 , а в строке «x» - коэффициент b_1 .

Для доверительной вероятности $P = 0,95$ и числа степеней свободы $f = N - p = 18 - 2 = 16$ значение $t_{кр}$ двусторонней критической области для нуль-гипотезы $b_0 \neq 0$ [24, с. 405] при вероятности альтернативной гипотезы $0,025$, $((1-P)/2)$, определённое в программе Excel с помощью функции СТЬЮДЕНТ.ОБР.2Х ($0,025$; 16), будет равно $2,47$.

Из данных строки «Y-пересечение» табл. 4.15 следует, что модуль значения t -статистики для коэффициента b_0 (t_0) больше значения $t_{кр}$ ($12,59 > 2,47$). Для коэффициента $b_0 = -24,14380952$ («Стандартная ошибка» = $SE_0 = 1,92$) очень небольшая величина вероятности её равенства нулю (P -значение = $1 \cdot 10^{-9} < 0,05$). Значение коэффициента $b_0 = 0$ не входит в его доверительный интервал (от «Нижние 95%» = $20,08$ до «Верхние 95%» = $28,21$). Следовательно, постоянная регрессии с вероятностью не менее $0,95$ значимо отличается от нуля и её не следует исключать из уравнения регрессии.

Аналогичные выводы делаем и для коэффициента b_1 , исходя из данных строки «х» табл. 4.15. Модуль значения t -статистики для коэффициента b_1 (t_1) больше значения $t_{кр}$ ($|-9,81| > 2,47$). Для постоянной регрессии $b_1 = -2,80$ («Стандартная ошибка» = $SE_1 = 0,29$) очень небольшая величина вероятности его равенства нулю (P -значение = $4 \cdot 10^{-8} < 0,05$). Значение коэффициента $b_1 = 0$ не входит в его доверительный интервал (от «Нижние 95%» = $-3,40$ до «Верхние 95 %» = $-2,19$). Поэтому с вероятностью не менее $0,95$ эффект влияния фактора X на Y значимо отличается от нуля и его не следует исключать из уравнения регрессии.

Таким образом, выборочное уравнение регрессии имеет следующий вид (значение коэффициентов b_0 и b_1 округлены с точностью до десятых для соответствия результатов вычислений значений $\hat{y}$ погрешности измерений свойства объекта в эксперименте):

$$\hat{y} = 24,1 - 2,8 x.$$

Для анализа адекватности полученного выборочного уравнения регрессии экспериментальным данным по значению коэффициента детерминации выполним проверку значимости параметра «R-квадрат» (табл. 4.14). Вычисленное значение F -статистики (F_p) для коэффициента детерминации $96,265$ приведено в строке «Регрессия» в столбце «F» табл. 4.15. Для уровня значимости $0,05$ с помощью функции F.ОБР.ПХ($0,05$; $2-1$; $18-2$) вычислим $F_{кр}$, которое равно $4,494$. Так как $F_p > F_{кр}$ ($96,265 > 4,494$), то коэффициент детерминации значим (не равен нулю) с доверительной вероятностью $0,95$.

Свидетельством очень хорошей адекватности линейного уравнения регрессии является очень низкое значение вероятности равенства нулю R^2 , так как в строке «Регрессия» табл. 4.15 параметр «Значимость F» = $4 \cdot 10^{-8}$. Исходя из значения этого параметра следует, что фактические изменения Y при изменениях X описываются найденным линейным уравнением регрессии с доверительной вероятностью, равной $1 - \text{«Значимость F»} = 1 - 4 \cdot 10^{-8} = 0,999999996 \approx 1$.

Подтверждает тесную корреляцию расчётных значений $\hat{y}_i$ с экспериментальными значениями y_i близкое к единице значение коэффициента множественной корреляции $R = 0,926$ (параметр «Множественный R» в табл. 4.14). Достаточно близкое к единице значение коэффициента детерминации R^2 (табл. 4.14) также свидетельствует о хорошей адекватности полученного выборочного уравнения регрессии.

При проведении анализа поля корреляции (рис. 4.2) было высказано предположение о наличии нелинейной зависимости между Y и X , поэтому рассмотрим следующую выборочную нелинейную (параболическую) регрессионную модель в виде полинома второй степени:

$$\hat{y}(x) = b_0 + b_1x + b_2x^2,$$

где b_2 – выборочный коэффициент нелинейного влияния на Y фактора X .

Добавим в развёрнутый план эксперимента (табл. 4.13) предиктор X^2 (табл. 4.16) и применим в программе Excel инструмент анализа «Регрессия» в надстройке «Анализ данных» [24, с. 414]. Результаты выполнения данной процедуры для доверительной вероятности 0,95 (без анализа остатков) выводятся на экран монитора в виде трёх таблиц (4.17-4.19).

Таблица 4.16

Развернутый план эксперимента

Номер опыта	x , ч	x^2 , ч ²	y , %	Номер опыта	x , ч	x^2 , ч ²	y , %	Номер опыта	x , ч	x^2 , ч ²	y , %
1	4	16	15,8	7	6	36	5,5	13	8	64	1,6
2	4	16	15,3	8	6	36	6,0	14	8	64	1,6
3	4	16	15,5	9	6	36	5,9	15	8	64	1,7
4	5	25	9,6	10	7	49	2,0	16	9	81	1,5
5	5	25	9,6	11	7	49	1,9	17	9	81	1,4
6	5	25	9,1	12	7	49	1,8	18	9	81	1,3

Таблица 4.17

Вывод итогов

<i>Регрессионная статистика</i>	
<i>Множественный R</i>	0,996928588
<i>R-квадрат</i>	0,99386661
<i>Нормированный R-квадрат</i>	0,993048825
<i>Стандартная ошибка</i>	0,4428766
<i>Наблюдения</i>	18

Таблица 4.18

Дисперсионный анализ

	<i>df</i>	<i>SS</i>	<i>MS</i>	<i>F</i>	<i>Значимость F</i>
<i>Регрессия</i>	2	476,7429048	238,3714524	1215,314766	2,557E-17
<i>Остаток</i>	15	2,942095238	0,196139683		
<i>Итого</i>	17	479,685			

Таблица 4.19

	<i>Коэффициенты</i>	<i>Стандартная ошибка</i>	<i>t-статистика</i>	<i>P-Значение</i>	<i>Нижние 95%</i>	<i>Верхние 95%</i>
<i>Y-пересечение</i>	54,2057	1,6965	31,952	3,28E-15	50,5897	57,8217
<i>x</i>	-12,7348	0,5474	-23,262	3,50E-13	-13,9016	-11,5679
<i>x²</i>	0,7643	0,0418	18,263	1,17E-11	0,6751	0,8535

Из данных табл. 4.19 следует, что для доверительной вероятности 0,95 все три параметра параболической модели регрессии (b_0 , b_1 и b_2) значимы (по величине модуля значения *t*-статистики, «*P*-значение» и доверительному интервалу) и их необходимо оставить в уравнении регрессии.

Полученное выборочное параболическое уравнение регрессии имеет следующий вид:

$$\hat{y} = 54,2 - 12,7 x + 0,76 x^2.$$

Свидетельством очень хорошей адекватности параболического уравнения регрессии является очень низкое значение вероятности равенства R^2 нулю, так как в строке «Регрессия» табл. 4.18 параметр «Значимость F» = $3 \cdot 10^{-17}$ ничтожно мал по сравнению с уровнем значимости 0,05.

С помощью функции $F.ОБР.ПХ(0,05;3-1;18-3)$ вычислим $F_{кр}$, которое равно 3,682. Так как $F_p > F_{кр}$ ($1215,315 > 3,682$), то коэффициент детерминации значим (не равен нулю). Очень близкий к единице коэффициент множественной корреляции $R = 0,997$ (параметр «Множественный R» в табл. 4.17) говорит об очень тесной корреляции расчётных значений $\hat{y}_i$ с экспериментальными значениями y_i . Очень близкое к единице значение коэффициента детерминации R^2 (табл. 4.17) тоже свидетельствует об очень хорошей адекватности полученного уравнения регрессии.

По величине статистических параметров адекватности выборочное параболическое уравнение регрессии лучше описывает экспериментальные данные по сравнению с линейным уравнением регрессии. Это подтверждается следующим:

существенное увеличение значения параметра «Нормированный R-квадрат» от 0,849 (табл. 4.14) до 0,993 (табл. 4.17);

более близкие к единице значения R^2 и R ;

значительное уменьшение параметра «Стандартное отклонение остатков» («стандартная ошибка») с 2,067 до 0,443 (соответственно табл. 4.14 и 4.17), характеризующего разброс фактических значений y_i относительно выборочной линии регрессии $\hat{y} = f(x)$ [24].

Для визуализации сравнения линейной и параболической моделей регрессии воспользуемся в программе Excel командой «Добавить линию тренда» во вкладке меню «Диаграмма» [24, с. 420] для поля корреляции (рис. 4.2). Полученные графики функций выборочных линейной и параболической регрессий, аналитическое выражение уравнений регрессий и соответствующие им значения коэффициентов детерминации приведены на рис. 4.6.

Из рис. 4.6 видно, что линейное уравнение регрессии, по сравнению с параболическим, не только хуже описывает экспериментальные данные, но и даёт нереальный прогноз остаточного содержания лигнина в технической целлюлозе (отрицательные значения) при продолжительности сульфитной варки более 8,6 ч.

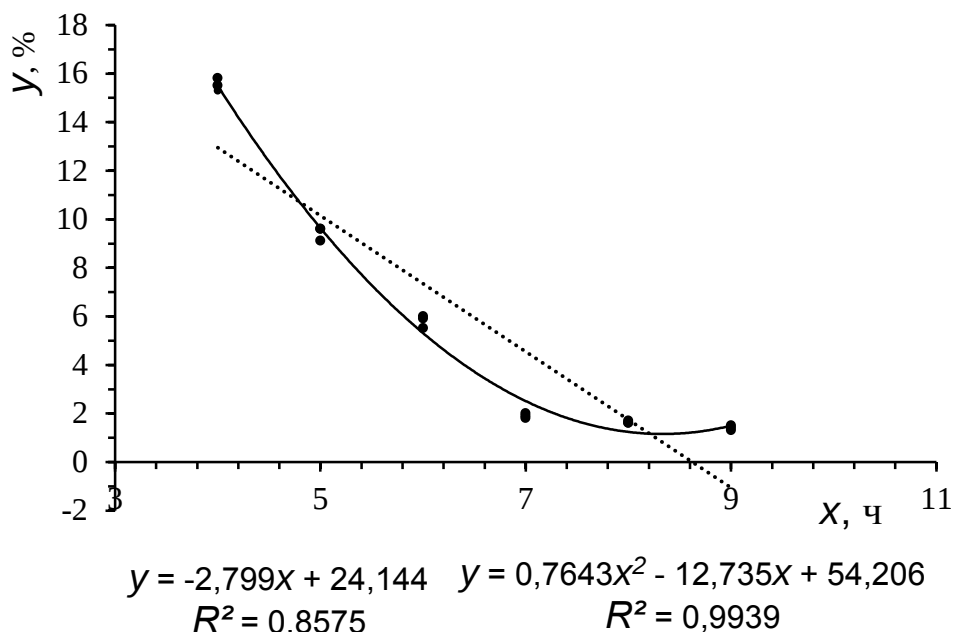


Рис. 4.6. Графики выборочных функций регрессии:
 ... - линейная; — - параболическая

Повышение степени полинома до трёх в выборочной полиномиальной модели регрессии не приводит к улучшению статистических параметров адекватности по сравнению с параболической моделью регрессии. Поэтому за окончательную регрессионную модель объекта примем выборочное уравнение параболической регрессии.

Пример 4.6

Задачами прикладного научного исследования являлось экспериментальное подтверждение наличия связи содержания технического масла в шпоне древесины сосны (свойство Y) с продолжительностью (фактор A) и температурой (фактор B) пропитки шпона маслом в автоклаве, определение формы и силы этой связи. Для получения качественных выводов были применены двухфакторный дисперсионный анализ с оценкой взаимодействия факторов (AB), а для получения математической формы зависимости – классический регрессионный анализ.

Для решения поставленных задач был составлен и реализован классический план двухфакторного эксперимента с двукратным повторением всех опытов ($n = 2$) при шести уровнях фактора A ($m = 6$) и трёх уровнях фактора B ($q = 3$). Полученные результаты эксперимента представлены в виде классического (табл. 4.20) и развёрнутого (табл. 4.21) плана эксперимента. В развёрнутый план эксперимента

дополнительно введён предиктор **AB**, значения которого являются результатом перемножения значений **A** и **B** в соответствующем опыте.

Таблица 4.20

Классический план двухфакторного эксперимента
с двукратным повторением опытов

Темпе- ратура про- питки шпона (B , °C)	Номер повтор- ного опыта	Содержание технического масла в шпоне (у, мас.%) при продолжительности пропитки шпона (A , мин):					
		1 мин	3 мин	5 мин	10 мин	20 мин	40 мин
180 °C	1	39,80	46,10	48,70	51,20	59,70	62,90
	2	39,75	46,05	48,68	51,17	59,64	62,58
200 °C	1	48,60	43,30	51,80	60,10	60,50	60,30
	2	48,58	43,27	51,78	60,08	60,49	60,30
240 °C	1	31,20	34,30	38,20	37,10	38,90	35,80
	2	31,19	34,45	38,12	37,10	38,47	35,84

К полученным результатам эксперимента (табл. 4.20) применим в программе Excel инструмент анализа «Двухфакторный дисперсионный анализ с повторениями» в надстройке «Анализ данных» для доверительной вероятности 0,95 (уровень значимости «Альфа» 0,05). Таблица «Дисперсионный анализ», появляющаяся на экране монитора, представлена в виде табл. 4.22.

Из данных табл. 4.22 следует, что с доверительной вероятностью 0,95 на содержание технического масла в шпоне древесины сосны очень сильное влияние оказывают оба фактора со значимым эффектом их взаимодействия, так как соответствующие и очень большие значения **F**-статистики (**F**) намного больше значения «**F** критическое» и вероятности ошибки этих выводов («**P**-значение») намного меньше уровня значимости 0,05.

В исследованном факторном пространстве наибольшее влияние на **Y** оказывает температура пропитки, так как для этого фактора, по сравнению с фактором **A** и эффектом взаимодействия **AB**, значительно большее значение **F** и меньшее **P**-значение. По сравнению с температурой и продолжительностью пропитки шпона на содержание технического масла в нём наименьшее влияние имеет эффект

парного взаимодействия этих двух факторов, но сила этого эффекта значительная (значение F большое).

Так как данные двухфакторного дисперсионного анализа свидетельствуют о значимом влиянии на y эффекта парного взаимодействия факторов A и B , то в линейную регрессионную модель объекта введём соответствующий член и представим её в виде нелинейной (относительно аргументов A и B) функции без постоянной регрессии:

$$\hat{y}(A, B) = b_1A + b_2B + b_3AB,$$

где b_3 – выборочный коэффициент линейного совместного влияния на y факторов A и B (эффект парного взаимодействия факторов). Отсутствие в регрессионной модели постоянной регрессии b_0 обосновываем тем, что при очень малой продолжительности пропитки шпона, близкой к $A = 0$ ч, шпон не успеет впитать техническое масло.

Считаем, что единичные результаты измерения свойства y являются независимыми случайными величинами, и сделаем допущение, что эти результаты имеют одинаковую точность во всех опытах. Тогда к полученным результатам эксперимента применим классический двухфакторный регрессионный анализ, так как число уровней входных факторов не менее трёх ($m_A = 6$, $m_B = 3$) и значения свойства объекта и входного фактора являются количественными.

Таблица 4.21

Развёрнутый план двухфакторного эксперимента
с двукратным повторением опытов

№ опы- та	A , мин	B , °C	AB , мин·°C	y , %	№ опы- та	A , мин	B , °C	AB , мин·°C	y , %
1	1	180	180	39,80	19	10	180	1800	51,20
2	1	180	180	39,75	20	10	180	1800	51,17
3	1	200	200	48,60	21	10	200	2000	60,10
4	1	200	200	48,58	22	10	200	2000	60,08
5	1	240	240	31,20	23	10	240	2400	37,10
6	1	240	240	31,19	24	10	240	2400	37,10
7	3	180	540	46,10	25	20	180	3600	59,70
8	3	180	540	46,05	26	20	180	3600	59,64
9	3	200	600	43,30	27	20	200	4000	60,50
10	3	200	600	43,27	28	20	200	4000	60,49
11	3	240	720	34,30	29	20	240	4800	38,90

Окончание табл. 4.21

№ опы-та	A, мин	B, °C	AB, мин·°C	y, %	№ опы-та	A, мин	B, °C	AB, мин·°C	y, %
12	3	240	720	34,45	30	20	240	4800	38,47
13	5	180	900	48,70	31	40	180	7200	62,90
14	5	180	900	48,68	32	40	180	7200	62,58
15	5	200	1000	51,80	33	40	200	8000	60,30
16	5	200	1000	51,78	34	40	200	8000	60,30
17	5	240	1200	38,20	35	40	240	9600	35,80
18	5	240	1200	38,12	36	40	240	9600	35,84

Таблица 4.22

Источник вариации	SS	df	MS	F	P-значение	F критическое
Выборка*	2312,134	2	1156,067	126116,4	4,8E-38	3,554
Столбцы**	969,7574	5	193,9515	21158,3	2,9E-33	2,773
Взаимодействие***	379,266	10	37,9266	4137,45	4,0E-28	2,412
Внутри****	0,165	18	0,009167			
Итого	3661,323	35				

* Влияние фактора B;

** Влияние фактора A;

*** Влияние взаимодействия факторов A и B;

**** Влияние случайных факторов.

Применим процедуру в программе Excel инструмент анализа «Регрессия» в надстройке «Анализ данных» для результатов эксперимента с добавленным в развёрнутый план эксперимента предиктором AB (табл. 4.21). Результаты выполнения данной процедуры для доверительной вероятности 0,95 (без анализа остатков) выводятся на экран монитора в виде трёх таблиц (4.23-4.25).

Таблица 4.23

Вывод итогов

<i>Регрессионная статистика</i>	
<i>Множественный R</i>	0,983851
<i>R-квадрат</i>	0,967963
<i>Нормированный R-квадрат</i>	0,935718
<i>Стандартная ошибка</i>	9,007103
<i>Наблюдения</i>	36

Таблица 4.24

Дисперсионный анализ

	<i>df</i>	<i>SS</i>	<i>MS</i>	<i>F</i>	<i>Значимость F</i>
<i>Регрессия</i>	3	80888,32	26962,77	332,349	3,48E-24
<i>Остаток</i>	33	2677,221	81,1279		
<i>Итого</i>	36	83565,54			

Таблица 4.25

	<i>Коэффициенты</i>	<i>Стандартная ошибка</i>	<i>t-статистика</i>	<i>P-Значение</i>	<i>Нижнее 95%</i>	<i>Верхнее 95%</i>
<i>У-пересечение</i>	0	#Н/Д	#Н/Д	#Н/Д	#Н/Д	#Н/Д
<i>A</i>	4,910	0,664	7,393	1,72E-08	3,558	6,261
<i>B</i>	0,2023	0,010	20,087	4,48E-20	0,182	0,223
<i>AB</i>	-0,0220	0,003	-6,857	7,93E-08	-0,029	-0,015

Из данных табл. 4.25 следует, что для доверительной вероятности 0,95 все четыре параметра выборочной параболической модели регрессии (b_0 , b_1 , b_3 и b_4) значимы (по величине модуля значения t -статистики, « P -значение» и доверительному интервалу) и их необходимо оставить в уравнении регрессии. Выборочное уравнение двухфакторной нелинейной регрессии имеет следующий вид:

$$\hat{y} = 4,91 A - 0,2023 B - 0,0220 AB.$$

Адекватность полученного нелинейного уравнения регрессии оцениваем по статистическим критериям.

Свидетельством очень хорошей адекватности нелинейного уравнения регрессии является низкое значение вероятности равенства нулю R^2 , так как в строке «Регрессия» табл. 4.24 параметр «Значимость F» = $3 \cdot 10^{-24}$ очень мал по сравнению с уровнем значимости 0,05.

Очень близкие к единице значения коэффициента детерминации $R^2 = 0,936$ и коэффициента множественной корреляции $R = 0,984$ (табл. 4.23) подтверждают хорошее соответствие расчётных значений $\hat{y}_i$ экспериментальным значениям y_i .

Для того, чтобы оценить роль одновременного изменения обоих факторов на свойство объекта y проведём статистическую оценку уравнения регрессии без предиктора АВ:

$$\hat{y}(A,B) = b_1A + b_2B.$$

Результаты расчётов в программе Excel с инструментом анализа «Регрессия» в надстройке «Анализ данных» без предиктора АВ для доверительной вероятности 0,95 приведены в табл. 4.26-4.28.

Таблица 4.26

Вывод итогов

Регрессионная статистика	
Множественный R	0,960372
R-квадрат	0,922314
Нормированный R-квадрат	0,890617
Стандартная ошибка	13,81805
Наблюдения	36

Таблица 4.27

Дисперсионный анализ

	df	SS	MS	F	Значимость F
Регрессия	2	77073,63	38536,81	201,8285	3,11E-19
Остаток	34	6491,906	190,9384		
Итого	36	83565,54			

Таблица 4.28

	Коэффици- енты	Стан- дартная ошибка	t- стати- стика	P- Значе- ние	Нижние 95%	Верх- ние 95%
Y- пересече- ние	0	#Н/Д	#Н/Д	#Н/Д	#Н/Д	#Н/Д
A	0,4190	0,1693	2,474	0,018	0,0749	0,763
B	0,194272	0,0153	12,660	2,01E- 14	0,1631	0,225

По величине всех статистических параметров адекватности выборочное нелинейное уравнение регрессии (табл. 4.23 и 4.24) лучше описывает экспериментальные данные по сравнению с линейным уравнением регрессии без эффекта парного взаимодействия факторов (табл. 4.26 и 4.27):

$$\hat{y} = 0,42 \cdot A - 0,1942 \cdot B.$$

Это подтверждает не только меньшее значение параметра «Значимость F» ($3 \cdot 10^{-24} < 3 \cdot 10^{-19}$), но и существенное уменьшение параметра «Нормированный R-квадрат» от 0,936 (табл. 4.23) до 0,891 (табл. 4.26), а также увеличение параметра «Стандартная ошибка» с 9,0071 до 13,8181 при переходе от нелинейного к линейному уравнению регрессии.

Поскольку найденное при регрессионном анализе уравнение регрессии с заданной доверительной вероятностью описывает поведение объекта только в области изменения факторов, в которой проводился эксперимент, то для этой области возможно наилучшее описание экспериментальных данных регрессионным уравнением со свободным членом (что не противоречит физическому смыслу):

$$\hat{y}(A, B) = b_0 + b_1 A + b_2 B + b_3 AB,$$

где b_0 – постоянная регрессии.

Результаты выполненных расчётов в процедуре программы Excel «Регрессия» для доверительной вероятности 0,95 для линейных и нелинейных уравнений регрессии с постоянной регрессии приведены табл. 4.29-4.34.

Таблица 4.29

Вывод итогов

<i>Регрессионная статистика</i>	
<i>Множественный R</i>	0,862837
<i>R-квадрат</i>	0,744488
<i>Нормированный R-квадрат</i>	0,720533
<i>Стандартная ошибка</i>	5,406919
<i>Наблюдения</i>	36

Таблица 4.30

Дисперсионный анализ

	<i>df</i>	<i>SS</i>	<i>MS</i>	<i>F</i>	<i>Значимость F</i>
<i>Регрессия</i>	3	2725,81	908,6033	31,07954	1,33E-09
<i>Остаток</i>	32	935,5127	29,23477		
<i>Итого</i>	35	3661,323			

Из полученных результатов расчётов с доверительной вероятностью 0,95 следует, что исходя из величины параметра «Значимость F » наиболее точно описывает изменение свойства Y при изменениях входных факторов A и B следующее уравнение регрессии:

$$\hat{y} = 4,910 \cdot A - 0,2023 \cdot B - 0,02203 \cdot AB.$$

Положительный знак коэффициента при A в этом уравнении регрессии свидетельствует, что увеличение продолжительности пропитки шпона увеличивает содержание в нём технического масла. Отрицательное значение коэффициента при B свидетельствует о негативном влиянии повышения температуры пропитки от 180 до 240 °С на содержание технического масла в шпоне. Этот негативный эффект усиливается при увеличении продолжительности пропитки из-за взаимодействия факторов, за счёт того, что коэффициент b_3 имеет отрицательное значение.

Таблица 4.31

	Коэффици- енты	Стан- дартная ошибка	t- стати- стика	P- Значе- ние	Ниж- нее 95%	Верх- нее 95%
Y- пересече- ние	81,0587	10,502	7,719	8,4E-09	59,667	102,450
A	1,9103	0,557	3,431	0,0017	0,776	3,044
B	-0,1843	0,050	-3,653	0,0009	-0,287	-0,082
AB	-0,00772	0,003	-2,887	0,0069	-0,013	-0,002

Таблица 4.32

Вывод итогов

Регрессионная статистика	
Множественный R	0,823372
R-квадрат	0,677941
Нормированный R-квадрат	0,658422
Стандартная ошибка	5,977643
Наблюдения	36

Таблица 4.33

Дисперсионный анализ

	df	SS	MS	F	Значимость F
Регрессия	2	2482,16	1241,08	34,7328	7,6E-09
Остаток	33	1179,163	35,73222		
Итого	35	3661,323			

Таблица 4.34

	Коэффици- енты	Стан- дартная ошибка	t- стати- стика	P- Значе- ние	Ниж- нее 95%	Верх- нее 95%
Y- пересече- ние	102,068	8,371	12,194	9,1E-14	85,038	119,098
A	0,3147	0,074	4,266	0,0002	0,165	0,465
B	-0,2860	0,040	-7,160	3,3E-08	-0,367	-0,205

Для сравнения эффектов влияния факторов на изменение Y применим команду «Множественная регрессия» в программе STATISTICA 6 [33, с. 157], используя результаты эксперимента в форме развёрнутого плана эксперимента (табл. 4.21). Результаты выполнения команды «Сводка регрессионных результатов», появляющиеся на экране монитора, представлены в табл. 4.35

Таблица 4.35

N=36	Regression Summary for Dependent Variable: y (Spreadsheet) R= ,98385092 R ² = ,96796262 Adjusted R ² = ,96505013 F(3,33)=332,35 p<0,0000 Std.Error of estimate: 9,0071					
	Beta*	Std.Err. of Beta**	B***	Std.Err. of B	t(33)	p-level
A	1,92226	0,260022	4,909655	0,664123	7,39268	0,000000
B	0,87399	0,043511	0,202283	0,010070	20,08687	0,000000
AB	-1,79513	0,261789	-0,022025	0,003212	-6,85716	0,000000

* Стандартизованные коэффициенты регрессии Beta;

** Стандартные отклонения коэффициентов Beta;

*** Коэффициенты регрессии b_j (нестандартизованные коэффициенты регрессии).

Исходя из величины модуля коэффициентов Beta следует, что в исследованной факторной области наибольший вклад в изменение Y вносит продолжительность пропитки шпона техническим маслом ($|Beta_A| = 1,92226$), а наименьший – температура пропитки ($|Beta_B| = 0,87399$). Доля эффекта парного взаимодействия значительна ($|Beta_{AB}| = 1,79513$) и сопоставима с эффектом влияния фактора А, но противоположна ему по знаку. Разные знаки у линейных эффектов влияния на Y факторов А и В и эффекта их взаимодействия (нелинейного влияния факторов) требуют решения оптимизационной задачи для выбора их сочетания, обеспечивающего необходимую степень пропитки шпона.

Пример 4.7

Основной задачей прикладного научного исследования являлось получение наиболее точных оценок влияния на прочность при статическом изгибе древесностружечных плит OSB (σ , МПа) двух технологических факторов:

Z_1 - расхода фенолформальдегидных смол, мас. % смолы от древесной стружки (по сухим веществам);

Z_2 – доля карданола в фенолах смолы, мас. %.

В качестве регрессионной модели был выбран полином второй степени следующего вида:

$$\hat{y} = b_0 + b_1Z_1 + b_2Z_2 + b_{12}Z_1Z_2 + b_{11}Z_1^2 + b_{22}Z_2^2,$$

где b_0 – свободный член (постоянная регрессии), b_1 , b_2 , – коэффициенты, оценивающие линейный эффект влияния входных факторов, b_{12} – коэффициент, оценивающий линейный эффект парного (совместного) влияния входных факторов, b_{11} и b_{22} – коэффициенты, оценивающие эффекты квадратичного влияния входных факторов.

Для решения этой задачи был спланирован и реализован математический план полного факторного эксперимента Ко-2 [33] с трёхкратным повторением опытов. Для регрессионного анализа результатов эксперимента планировалось применение метода РАМПЭ. Однако образцы плиты OSB, полученные в одном из девяти опытов эксперимента, разрушались при подготовке к измерениям их прочности при статическом изгибе. Это сделало невозможным проведение регрессионного анализа методом РАМПЭ, так как матрица плана эксперимента из 8 опытов не обладает свойствами ортогональности и D-оптимальности [34]. Было принято решение провести классический регрессионный анализ по результатам восьми опытов (табл. 4.36).

Для применения в программе Excel инструмента анализа «Регрессия» с целью получения нелинейного уравнения регрессии в виде полинома второй степени были использованы дополнительные переменные Z_1Z_2 , Z_1^2 и Z_2^2 (табл. 4.37).

Таблица 4.36

План и результаты эксперимента

№ опыта	Z_1 , %	Z_2 , %	σ , МПа
1	16	15	23,8
2	12	15	11,4
3	16	0	14,3
4	12	0	23,6
5	16	7,5	20,2
6	12	7,5	22,2
7	14	15	15,2
8	14	0	18,3

Таблица 4.37

План и результаты эксперимента с дополнительными переменными

<i>№ опыта</i>	$Z_1, \%$	$Z_2, \%$	$Z_1 Z_2, (\%)^2$	$Z_1^2, (\%)^2$	$Z_2^2, (\%)^2$	$\sigma, \text{МПа}$
1	16,00	15	240	256	225	23,8
2	12,00	15	180	144	225	11,4
3	16,00	0	0	256	0	14,3
4	12,00	0	0	144	0	23,6
5	16,00	7,5	120	256	56,25	20,2
6	12,00	7,5	90	144	56,25	22,2
7	14,00	15	210	196	225	15,2
8	14,00	0	0	196	0	18,3

Результаты расчётов в программе Excel с инструментом анализа «Регрессия» при доверительной вероятности 0,95 для пяти переменных с постоянной регрессии приведены в табл. 4.38-4.40, а без постоянной регрессии – в табл. 4.41-4.43.

Таблица 4.38

Вывод итогов

<i>Регрессионная статистика</i>	
<i>Множественный R</i>	0,981962
<i>R-квадрат</i>	0,96425
<i>Нормированный R-квадрат</i>	0,874873
<i>Стандартная ошибка</i>	1,632042
<i>Наблюдения</i>	8

Таблица 4.39

Дисперсионный анализ

	<i>df</i>	<i>SS</i>	<i>MS</i>	<i>F</i>	<i>Значимость F</i>
<i>Регрессия</i>	5	143,6812	28,73624	10,78865675	0,086994
<i>Остаток</i>	2	5,327121	2,66356		
<i>Итого</i>	7	149,0083			

Таблица 4.40

	Коэффици- енты	Стандарт- ная ошибка	t- стати- стика	P- Значе- ние	Ниж- нее 95%	Верх- нее 95%
Y- пересече- ние	129,17	68,717	1,880	0,201	-166,50	424,83
Z ₁	-13,31	9,908	-1,344	0,311	-55,94	29,32
Z ₂	-4,41	0,854	-5,160	0,036	-8,08	-0,73
Z ₁ Z ₂	0,3610	0,054	6,636	0,022	0,13	0,60
Z ₁ ²	0,3824	0,353	1,082	0,392	-1,14	1,90
Z ₂ ²	-0,0516	0,025	-2,055	0,176	-0,160	0,06

Таблица 4.41

Вывод итогов

Регрессионная статистика	
Множественный R	0,997477
R-квадрат	0,99496
Нормированный R-квадрат	0,654906
Стандартная ошибка	2,216473
Наблюдения	8

Таблица 4.42

Дисперсионный анализ

	df	SS	MS	F	Значимость F
Регрессия	5	2909,47	581,8939	118,4456208	0,008393
Остаток	3	14,73825	4,912752		
Итого	8	2924,208			

Таблица 4.43

	Коэффици- енты	Стан- дартная ошибка	t- стати- стика	P- Значение	Ниж- нее 95%	Верх- нее 95%
Y- пересе- чение	0	#Н/Д	#Н/Д	#Н/Д	#Н/Д	#Н/Д
Z ₁	5,28	0,754	7,005	0,006	2,88	7,68
Z ₂	-4,05	1,13	-3,580	0,037	-7,65	-0,45
Z ₁ Z ₂	0,35	0,17	4,79	0,017	0,12	0,59
Z ₁ ²	-0,28	0,05	-5,35	0,013	-0,44	-0,11
Z ₂ ²	-0,07	0,03	-2,10	0,127	-0,17	0,03

Анализ табл. 4.38-4.43 показывает, что уравнение регрессии со свободным членом, в отличие от уравнения регрессии без свободного члена, является неадекватным для доверительной вероятности 0,95 («Значимость F » больше 0,05). При этом только два параметра из шести являются значимыми (« P -Значение» меньше 0,05).

В адекватном уравнении регрессии без свободного члена один параметр - коэффициент b_{22} незначим (« P -Значение» больше 0,05). Исключим из регрессионной модели член с этим незначимым коэффициентом и выполним расчёты классического регрессионного анализа для четырёх переменных: Z_1 , Z_2 , Z_1Z_2 , Z_1^2 . Результаты расчётов приведены в табл. 4.44-4.46.

Таблица 4.44

Вывод итогов

Регрессионная статистика	
Множественный R	0,993755
R -квадрат	0,98755
Нормированный R -квадрат	0,728212
Стандартная ошибка	3,016914
Наблюдения	8

Исключение из регрессионной модели члена с коэффициентом b_{22} привело к улучшению следующих статистических характеристик уравнения регрессии:

все параметры уравнения регрессии значимы для доверительной вероятности 0,95 и, следовательно, они достоверны;

значение «Нормированный R -квадрат» увеличилось с 0,665 до 0,728;

Таблица 4.45

Дисперсионный анализ

	df	SS	MS	F	Значимость F
Регрессия	4	2887,801	721,9502	79,31978115	0,002254
Остаток	4	36,40707	9,101767		
Итого	8	2924,208			

Таблица 4.46

	Коэффици- енты	Стан- дартная ошибка	t- стати- стика	P- Значение	Ниж- ние 95%	Верх- ние 95%
Y- пересе- чение	0	#Н/Д	#Н/Д	#Н/Д	#Н/Д	#Н/Д
Z ₁	5,36	1,02	5,228	0,006	2,51	8,20
Z ₂	-5,00	1,41	-3,539	0,024	-8,92	-1,08
Z ₁ Z ₂	0,35	0,10	3,473	0,026	0,07	0,63
Z ₁ ²	-0,28	0,07	-3,943	0,017	-0,47	-0,08

Несколько ухудшилось значение «Стандартная ошибка» - возросло с 2,216 до 3,017.

Проведённые операции последовательного исключения из регрессионной модели с постоянной регрессии членов с коэффициентами, имеющими наибольшую величину «Р-Значение», превышающую величину 0,05, не привели к получению адекватного уравнения регрессии для доверительной вероятности 0,095.

Учитывая главные статистические характеристики (значимость всех параметров уравнения регрессии и его адекватность по величине «Значимость F»), за окончательное было принято следующее уравнение регрессии:

$$\sigma = 5,36Z_1 - 5,00Z_2 + 0,3479Z_1Z_2 - 0,2786Z_1^2.$$

Для сравнения эффектов влияния факторов на изменение у применим команду «Multiple Regression» в программе STATISTICA 6, используя пошаговый метод с исключением членов регрессионной модели с незначимыми коэффициентами («Baskward stepwise» [33, с. 158]). Результаты выполнения команды «Сводка регрессионных результатов», появляющиеся на экране монитора, представлены в табл. 4.47.

Таблица 4.47

N=8	Regression Summary for Dependent Variable: y (Spreadsheet) R= ,99375539 R ² = ,98754977 Adjusted R ² = ,97509953 F(4,4)=79,320 p<,00046 Std.Error of estimate: 3,0169					
	Beta	Std.Err. of Beta	B	Std.Err. of B	t(4)	p-level
Z ₁	3,95245	0,756073	5,35672	1,024700	5,22760	0,006394
Z ₂	-2,59292	0,732663	4,99652	1,411832	-3,53903	0,024034
Z ₁ Z ₂	2,54617	0,733053	0,34793	0,100171	3,47337	0,025505
Z ₁ ²	-2,98486	0,757073	-0,27860	0,070664	-3,94263	0,016922

Примечание. Вычисленные в программе STATISTICA 6 значения «Adjusted R²» и «p» отличаются от аналогичных статистических характеристик уравнения регрессии «Нормированный R-квадрат» и «Значимость F», рассчитанных в программе Excel (табл. 4.43 и 4.44).

В программе STATGRAPHICS Centurion XV по команде «Multiple Regression» рассчитаны соответствующие значения: R-squared (adjusted for d.f.) = 0,978 и P-Value = 0,0005. Алгоритмы дисперсионного и регрессионного анализа результатов многофакторных экспериментов в программе STATGRAPHICS описаны профессором Р.З.Пеном [34] и проверены им «ручными» расчётами. Вероятно, в программе Excel допущена ошибка в алгоритмах расчёта этих статистических характеристик для регрессионных моделей без постоянной регрессии.

Исходя из модуля величин коэффициентов Beta (табл. 4.47) следует, что в исследованной факторной области наибольшее влияние на изменение y оказывает расход смолы ($Beta_{Z_1} = 3,95245$). Увеличение расхода смолы приводит к росту значений прочности плиты OSB при статическом изгибе. Однако квадратичный эффект влияния этого фактора носит достаточно существенный отрицательный характер ($Beta_{Z_1^2} = -2,98486$).

Совместное увеличение обоих факторов приводит к синергетическому эффекту ($Beta_{Z_1Z_2} = 2,54617$).

Увеличение только доли карданола в фенолах смолы сопоставимо с синергетическим эффектом по величине, но противоположно ему по знаку ($Beta_{Z_2} = -2,59292$).

Для визуального анализа разнонаправленного действия входных факторов на прочность плит OSB при статическом изгибе по полученному уравнению регрессии средствами программы Excel была построена поверхность функции отклика Y (рис. 4.7).

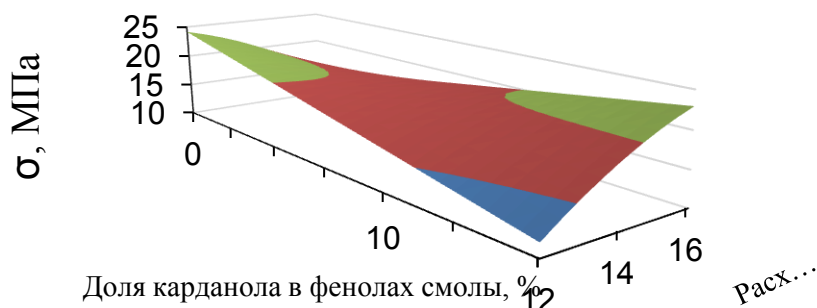


Рис. 4.7. Зависимость прочности плиты OSB при статическом изгибе от значений технологических факторов

Анализ поверхности функции отклика Y показывает сложный характер влияния входных факторов на прочность плит OSB при статическом изгибе. Так, при использовании смолы, не содержащей карданола, с увеличением расхода смолы прочность плиты при изгибе снижается, а для смолы с заменой 15 % фенола на карданол, наоборот – увеличивается. При расходе смолы 12 % с ростом доли карданола в смоле прочность плит при изгибе уменьшается, а при расходе смолы 16 % - увеличивается.

Разнонаправленные эффекты влияния входных факторов и их совместного действия на Y требуют решения оптимизационной задачи для выбора их сочетания, обеспечивающего необходимую прочность плиты OSB при статическом изгибе.

Пример 4.8

Задачами прикладного научного исследования являлось экспериментальное подтверждение наличия и определение формы связи показателя прочности при скалывании трёхслойной фанеры марки ФСФ ($\sigma_{ск}$, МПа) со значениями трёх технологических факторов ($k = 3$):

расход клея на одну сторону берёзового шпона, $г/м^2$ (Z_1);

температура горячего прессования фанеры, $^{\circ}C$ (Z_2);

общая продолжительность горячего прессования фанеры, мин. (Z_3).

Для выполнения данной задачи было решено провести эксперимент (табл. 4.48) с 15 опытами по плану Бокса-Уилсона [19] с целью получения нелинейных уравнений регрессии со свободным членом (b_0) и без него в виде

$$\hat{\sigma}_{\text{ск}} = b_0 + b_1 Z_1 + b_2 Z_2 + b_3 Z_3 + b_{12} Z_1 Z_2 + b_{13} Z_1 Z_3 + b_{23} Z_2 Z_3 + b_{11} Z_1^2 + b_{22} Z_2^2 + b_{33} Z_3^2 \text{ (p = 10);}$$

$$\hat{\sigma}_{\text{ск}} = b_1 Z_1 + b_2 Z_2 + b_3 Z_3 + b_{12} Z_1 Z_2 + b_{13} Z_1 Z_3 + b_{23} Z_2 Z_3 + b_{11} Z_1^2 + b_{22} Z_2^2 + b_{33} Z_3^2 \text{ (p = 9).}$$

Таблица 4.48

План и результаты эксперимента

Но- мер опы- та, i	$Z_1,$ $г/м^2$	$Z_2,$ $^{\circ}C$	$Z_3,$ мин	$Z_1 Z_2,$ $г/м^2 \cdot ^{\circ}C$	$Z_1 Z_3,$ $г/м^2 \cdot$ мин	$Z_2 Z_3,$ $^{\circ}C \cdot \text{мин.}$	$Z_1^2,$ $(г/м^2)^2$	$Z_2^2,$ $(^{\circ}C)^2$	$Z_3^2,$ $(\text{мин})^2$	$\sigma_{\text{ск}},$ МПа
1	115	157	15,3	18046	1754	2406	13154	24758	234,09	3,66
2	65	157	8,7	10276	569	1370	4265	24758	75,69	2,17
3	115	133	8,7	15214	999	1155	13154	17597	75,69	0,00
4	65	133	15,3	8663	999	2028	4265	17597	234,09	0,00
5	115	157	8,7	18046	999	1370	13154	24758	75,69	3,51
6	65	157	15,3	10276	999	2406	4265	24758	234,09	2,59
7	115	133	15,3	15214	1754	2028	13154	17597	234,09	0,00
8	65	133	8,7	8663	569	1155	4265	17597	75,69	0,00
9	120	145	12,0	17400	1440	1740	14400	21025	144	3,34
10	60	145	12,0	8700	720	1740	3600	21025	144	1,69
11	90	160	12,0	14400	1080	1920	8100	25600	144	2,82
12	90	130	12,0	11700	1080	1560	8100	16900	144	1,49
13	90	145	16,0	13050	1440	2320	8100	21025	256	3,48
14	90	145	8,0	13050	720	1160	8100	21025	64	2,42
15	90	145	12,0	13050	1080	1740	8100	21025	144	2,22

С физической точки зрения регрессионная модель не должна содержать постоянную регрессии b_0 , так как при полном отсутствии клея ($Z_1 = 0$) пакет из древесного шпона будет иметь нулевое значение $\sigma_{\text{ск}}$. Присутствие же в модели постоянной регрессии b_0 предполагает возможность того, что в исследованной факторной области тренд зависимости показателя $\sigma_{\text{ск}}$ может быть направлен не в начало координат входных факторов.

Применим метод последовательного (пошагового) исключения из уравнения регрессии параметров с незначимыми коэффициентами регрессии для доверительной вероятности 0,95, имеющих наибольшую величину «Р-Значение». Получаемые по этому методу статистические характеристики уравнений регрессии приведены в табл. 4.49.

Таблица 4.49

Статистические характеристики уравнений регрессии, полученных по результатам эксперимента

Но- мер шага	Регрессионная модель с $p = 10$					Регрессионная модель с $p = 9$				
	Ис- ключе- мый p	F	Зна- чи- мо- сть F	R^2	Нор- миро- ван- ный R^2	Ис- ключе- мый p	F	Зна- чи- мость F	R^2	Нор- миро- ван- ный R^2
0	-	3,43	0,094	0,860	0,609	-	8,73	0,014	0,929	0,668
1	Z_1Z_3	4,61	0,039	0,860	0,673	Z_1Z_3	11,45	0,004	0,929	0,715
2	Z_1	6,14	0,014	0,860	0,720	Z_2	14,94	0,001	0,929	0,751
3	Z_3	8,13	0,005	0,859	0,753	Z_3^2	19,39	$2 \cdot 10^{-4}$	0,928	0,777
4	Z_3^2	10,38	0,002	0,852	0,770	Z_1	25,26	$5 \cdot 10^{-5}$	0,927	0,797
5	Z_2Z_3	13,11	$5 \cdot 10^{-4}$	0,840	0,776	Z_2^2	26,26	$3 \cdot 10^{-5}$	0,905	0,788
6	Z_1^2	12,72	$7 \cdot 10^{-4}$	0,776	0,715	Z_1^2	37,32	$5 \cdot 10^{-6}$	0,903	0,804
7	Z_1Z_2	14,26	$7 \cdot 10^{-4}$	0,704	0,655					
8	Z_2^2	21,57	$5 \cdot 10^{-4}$	0,624	0,595					

Адекватными уравнениями регрессии со значимыми параметрами для доверительной вероятности являются линейное со свободным членом и нелинейное без свободного члена:

$$\hat{\sigma}_{\text{ск}} = -12,81 + 0,1019Z_2 \text{ («Стандартная ошибка» } 0,878);$$

$$\hat{\sigma}_{\text{ск}} = -1,004Z_3 + 0,000111Z_1Z_2 + 0,00722Z_2Z_3 \text{ («Стандартная ошибка» } 0,825).$$

В качестве окончательного выбираем нелинейное уравнение регрессии без свободного члена.

У этого уравнения значение коэффициента детерминации ($R^2 = 0,903$) говорит о том, что 90,3 % изменчивости $\sigma_{\text{ск}}$ объясняется изменениями всех или одного из трёх факторов и только 9,8 % связано с ошибками эксперимента и выбора регрессионной модели.

При применении инструмента анализа программы Excel «Регрессия» с отмеченным флажком для команды «График остатков» были получены статистические графики, которые приведены на рис. 4.8.

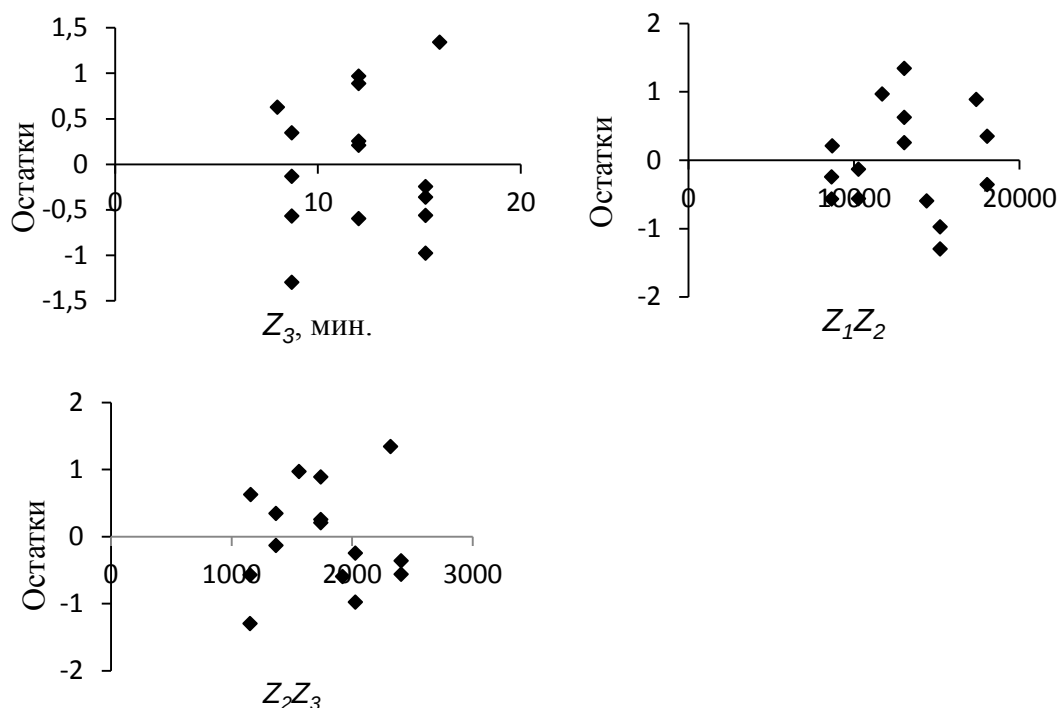


Рис. 4.8. Графики остатков

Визуальный анализ графиков остатков (разности между значением $\sigma_{ск}$, полученным в опыте эксперимента и предсказанным по уравнению регрессии) для всех факторов показывает примерно одинаковое количество положительных и отрицательных значений остатков, что косвенно свидетельствует о правильности регрессионной модели. Остатки на всех графиках находятся в пределах полосы, приблизительно одинаковой ширины на всём её протяжении, что говорит об их нормальном распределении. Коэффициенты парной линейной корреляции между регрессионными остатками и значениями факторов (r) равны нулю с доверительной вероятностью 0,95. При установке флажка для команды «Остатки» на экран монитора выводится таблица, в состав которой входит столбец «Остатки», что позволило построить график связи опытных и предсказанных по уравнению регрессии значений $\sigma_{ск}$ (рис. 4.9).

По данным рис. 4.9 следует, что для некоторых областей факторного пространства существует заметное различие некоторых опытных значений $\sigma_{ск}$ от предсказанных по уравнению регрессии.

Аналогичные результаты со статистическим анализом были получены и при использовании в программе STATGRAPHICS Centurion XV команды «Multiple Regression» с опцией «Backward Selection» с установками по умолчанию [34].

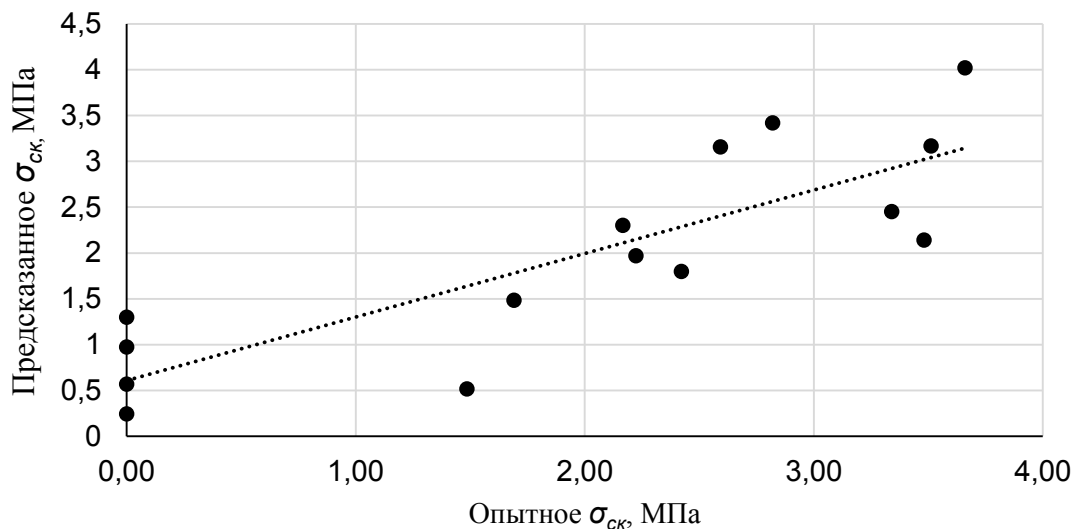


Рис. 4.9. Связь между предсказанными и опытными значениями $\sigma_{ск}$

4.3.2 Математическое планирование эксперимента для проведения регрессионного анализа его результатов

Применение регрессионного анализа к результатам экспериментов, реализованных по планам, построенным по математическим планам экспериментов (метод РАМПЭ), может помочь получить уравнения регрессии с *коэффициентами, более точно отражающими влияние входных факторов на свойства объекта*, по сравнению с классическим регрессионным анализом (КРА).

Разработаны российские рекомендации по стандартизации, устанавливающие термины и определения понятий в области математической статистики по планированию экспериментов [36]. Эти рекомендации в основной своей части соответствуют международному стандарту ИСО 3534-3-99 «Статистика. Словарь и условные обозначения. Часть 3. Планирование экспериментов.»

При регрессионном анализе результатов математически спланированного эксперимента (РАМПЭ), в отличие от КРА, используют только один класс регрессионных функций – полиномы из наборов различных членов ряда Тейлора.

Бесконечный ряд Тейлора (функция Тейлора) может быть представлен в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 y &= \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_j + \dots + \sum_{u,j=1 \atop u \neq j}^k \beta_{uj} x_u x_j + \dots + \sum_{j=1}^k \beta_{jj} x_j^2 + \\
 &+ \sum_{g,u,j=1 \atop g \neq u \neq j}^k \beta_{guj} x_g x_u x_j \dots \\
 \hat{y} &= b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{u,j=1 \atop u \neq j}^k b_{uj} x_u x_j + \sum_{j=1}^k b_{jj} x_j^2 + \\
 &+ \sum_{g,u,j=1 \atop g \neq u \neq j}^k b_{guj} x_g x_u x_j + \dots,
 \end{aligned}$$

где β и b – соответственно генеральные и выборочные коэффициенты ряда Тейлора.

Известно, что любую функцию (в том числе φ) можно разложить в бесконечный ряд Тейлора и представить в виде конкретного полинома определённой степени с конечным числом членов (отрезков) ряда Тейлора различного вида:

$$\varphi = a + \ln a_1 x_1 + \ln a_2 x_2 + \dots; \varphi = a \cdot e^{(c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots)}; \varphi = a / (d_1 x_1 + d_2 x_2 + \dots)$$



$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_j + \sum_{u,j=1 \atop u \neq j}^k \beta_{uj} x_u x_j + \sum_{j=1}^k \beta_{jj} x_j^2 + \dots$$

По результатам эксперимента можно определить вид полинома только с выборочными коэффициентами функции Тейлора, которые характеризуют:

b_0 – величину y при нулевом значении всех входных факторов (свободный член, постоянная регрессии);

$b_1, b_2, \dots, b_j, \dots, b_k$ – линейные эффекты влияния соответствующих входных факторов x_j на величину y ;

$b_{12}, b_{13}, \dots, b_{1j}, \dots, b_{1k}, b_{23}, b_{34}, \dots, b_{2j}, \dots, b_{(k-1)j}, \dots, b_{(k-1)k}$ – парные эффекты влияния соответствующих факторов на величину y (эффекты взаимодействия двух соответствующих факторов);

$b_{11}, b_{22}, \dots, b_{jj}, \dots, b_{kk}$ – квадратичные эффекты влияния соответствующих факторов на величину y ;

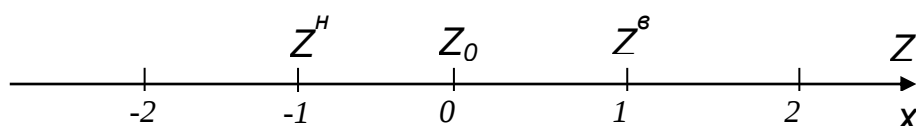
$b_{123}, b_{124}, \dots, b_{1uj}, \dots, b_{234}, b_{235}, \dots, b_{2uj}, \dots, b_{(k-2)(k-1)k}$ – тройные эффекты влияния соответствующих факторов на величину y (эффекты взаимодействия трёх соответствующих факторов) и т.д.

Наиболее удобно планировать эксперимент математическими методами для безразмерных нормализованных (кодированных) значений факторов (x_j), получаемых из натуральных значений (Z_j) по следующим формулам:

$$x_j = \frac{Z_j - Z_j^0}{\Delta Z_j}; \quad Z_j^0 = \frac{Z_j^B + Z_j^H}{2}; \quad \Delta Z_j = \frac{Z_j^B - Z_j^H}{2},$$

где Z_j^0 – натуральное значение фактора в центре (середине) выбранной (заданной) области изменения (варьирования) фактора, Z_j^B и Z_j^H – соответственно верхняя и нижняя граница факторной области, которой будут соответствовать нормализованные значения факторов равные соответственно +1 и –1; ΔZ_j – шаг варьирования фактора.

В соответствии с этими формулами натуральному значению Z_j^0 соответствует $x_j = 0$ на числовой оси нормализованных значений:



Переход от нормализованных значений факторов к натуральным осуществляют по формуле [19]

$$Z_j = Z_j^0 + x_j \Delta Z_j.$$

При математическом планировании эксперимента, целью которого является получение регрессионной модели объекта, стремятся составить оптимальный план эксперимента, соответствующий определённым статистическим критериям оптимальности:

- ортогональность;
- D – оптимальность;
- A – оптимальность;
- G – оптимальность;
- E – оптимальность;
- рототабельность плана.

Выбор критерия оптимальности плана эксперимента зависит от приоритетности требования наилучших оценок коэффициентов регрессии, либо наилучших оценок уравнения регрессии в целом [34].

Выбор плана эксперимента для проведения РАМПЭ, в отличие от классического плана экспериментов для проведения КРА, зависит от вида выбранной функции (состава полинома).

При математическом планировании для экономии ресурсов можно составлять оптимальный план эксперимента с числом опытов, минимально превышающим число опытов в насыщенном плане эксперимента ($N \geq k+1$).

После реализации ортогонального плана эксперимента для проведения РАМПЭ выполняют следующие действия:

выбирают полином;

для выбранного полинома с помощью МНК *рассчитывают* выборочные параметры регрессии;

проверяют рассчитанные выборочные параметры регрессии на значимость (равенство нулю);

корректируют вид исходной функции, исключая из неё члены с незначимыми параметрами регрессии;

оценивают ошибки, допускаемые при описании истинной зависимости φ с помощью найденного уравнения регрессии;

оценивают адекватность полученного уравнения регрессии.

Оценить адекватность уравнения регрессии с параметрами, полученными методом РАМПЭ, можно только зная генеральную или выборочную дисперсии свойства объекта y для условий эксперимента ($S_{воспр}^2$). В этом случае адекватность уравнения регрессии оценивают по алгоритмам дисперсионного анализа для F -статистик, подчиняющихся распределению Фишера [19,34]:

$$F = \frac{S_{ост}^2}{S_{воспр}^2} = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{(N - p) S_{воспр}^2},$$

где $S_{ост}^2$ – дисперсия, характеризующая разброс результатов эксперимента относительно линии регрессии, N – число опытов в матрице математического плана эксперимента, p – число параметров уравнения регрессии.

В случаях, когда $S_{воспр}^2$ неизвестна, то для её оценки можно провести повторение каждого или некоторых опытов эксперимента или выполнить специальные опыты.

В качестве $S_{воспр}^2$ может быть использована дисперсия единичных (S_y^2) или средних арифметических ($S_{\bar{y}}^2$) значений отклика объекта y .

Если точность оценок полученных коэффициентов регрессии и (или) уравнения регрессии не удовлетворяет, то *выбирают*, планируют и реализуют другой план эксперимента для поиска уравнения

регрессии в виде полинома другого состава (например, полинома более высокого порядка).

Проведение РАМПЭ в отличие от КРА имеет следующие особенности:

число уровней для каждого фактора должно быть не менее двух ($m_j \geq 2$);

выбирается только один класс функций – полиномы из отрезков ряда Тэйлора;

для ортогональных планов эксперимента все параметры регрессии рассчитываются по одной формуле и после корректировки уравнения регрессии оставшиеся (значимые) коэффициенты не пересчитываются.

Обычно поиск уравнения регрессии начинают среди самых простых полиномов первого порядка. По названиям степеней полиномов называют и планы эксперимента для применения РАМПЭ.

4.3.2.1. Планы первого порядка

Планы первого порядка позволяют находить линейные уравнения регрессии и нелинейные уравнения с членами, учитывающими эффекты взаимодействия факторов [19,34]:

$$\begin{aligned}\hat{y} &= b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_j x_j + \dots + b_k x_k; \\ \hat{y} &= b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{\substack{u,j=1 \\ u \neq j}}^k b_{uj} x_u x_j + \sum_{\substack{g,u,j=1 \\ g \neq u \neq j}}^k b_{guj} x_g x_u x_j + \dots = \\ &= b_0 + b_1 x_1 + \dots + b_k x_k + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + \dots + b_{(k-1)k} x_{k-1} x_k + \\ &\quad + b_{123} x_1 x_2 x_3 + b_{124} x_1 x_2 x_4 + \dots + b_{(k-2)(k-1)k} x_{k-2} x_{k-1} x_k.\end{aligned}$$

Для РАМПЭ наибольшее распространение получили *двухуровневые* ($m_j = m = 2$) *планы первого порядка* $2^{(k-a)}$. В этих планах все факторы в нормализованном виде могут иметь только два значения ($x_j = +1$ и $x_j = -1$).

Наименование плана $2^{(k-a)}$ обозначает формулу для расчёта числа опытов в эксперименте без их повторения (N):

$$N = m^{(k-a)} = 2^{(k-a)},$$

где $k > a$ ($k = 2, 3, 4, \dots$; $a = 0, 1, 2, 3, \dots$).

При $a = 0$ план $2^{(k-a)}$ является планом полного факторного эксперимента 2^k , а при $a > 0$ – планом дробного факторного эксперимента.

Факторное пространство в плане полного факторного эксперимента для двух нормализованных входных факторов (план 2^2) представляет собой квадрат, в углах которого находятся значения входных факторов (рис. 4.10).

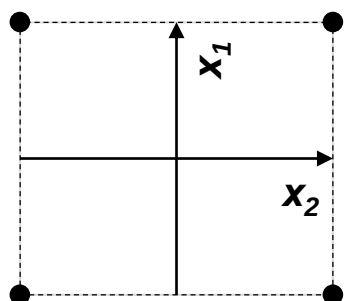


Рис. 4.10. Факторное пространство эксперимента для плана 2^2

Для трёх нормализованных факторов факторное пространство полного факторного эксперимента 2^3 представляет собой куб, в вершинах которого находятся значения входных факторов (рис. 4.11).

При составлении плана полного факторного эксперимента 2^k применяют различные принципы математической комбинаторики.

Так, например, такой план для трёх факторов ($k = 3$) без повторений опытов можно составить следующим образом.

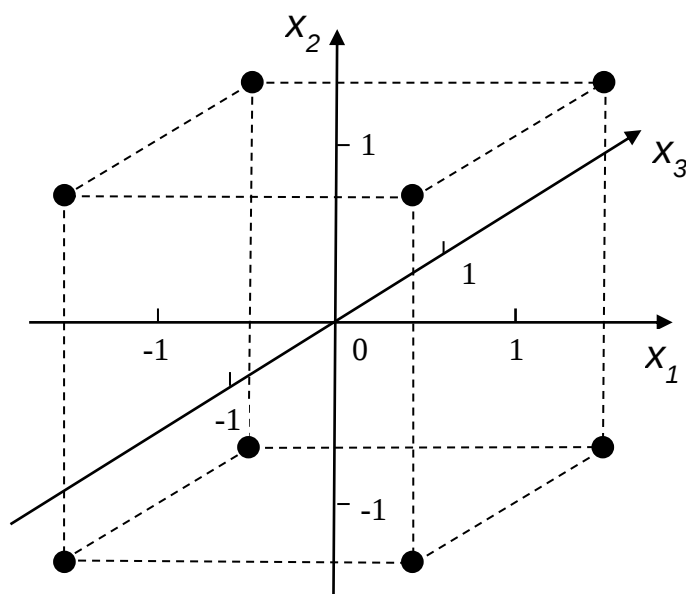


Рис. 4.11. Факторное пространство эксперимента для плана 2^3

Число опытов в плане эксперимента 2^k будет равно: $N = 2^k = 2^3 = 8$. Составим матрицу плана эксперимента 2^3 из трёх столбцов для нормированных значений факторов x_j и восьми строк для каждого опыта (табл. 4.50).

Таблица 4.50

План полного факторного эксперимента 2^3

Номер опыта, i	Нормированные значения факторов x_j			y
	x_1	x_2	x_3	
1	+1	+1	+1	
2	-1	+1	+1	
3	+1	-1	+1	
4	-1	-1	+1	
5	+1	+1	-1	
6	-1	+1	-1	
7	+1	-1	-1	
8	-1	-1	-1	

При заполнении значений в столбце для фактора x_1 во всех восьми опытах матрицы плана эксперимента используем комбинацию чередования в строках матрицы +1 и -1. В столбце для фактора x_2 используем удвоение чередования в строках матрицы плана +1 и -1 по сравнению с комбинацией в соседнем слева столбце x_1 . Аналогичный принцип удвоения используем для заполнения столбца x_3 по сравнению с комбинацией в соседнем слева столбце x_2 .

Анализ характеристик матрицы составленного плана эксперимента (табл. 4.50) показывает, что этот план является ортогональным, D -оптимальным и рототабельным [34]. Так, например, для этого плана для всех трёх столбцов x_j выполняется следующее условие ортогональности матрицы плана эксперимента:

$$\sum_{i=1}^N x_{ui} x_{ji} = 0 \text{ при } u \neq j \text{ и } u, j \text{ равных } 1, 2, 3.$$

Также выполняются и условия для D -оптимальных планов:

$$\sum_{i=1}^N x_{ji} = 0 \text{ при } j \text{ равном } 1, 2, 3;$$

$$\sum_{i=1}^N x_{ji}^2 = N = 8 \text{ при } j \text{ равном } 1, 2, 3.$$

Планы, отвечающие критерию *ортогональности*, позволяют рассчитывать коэффициенты регрессии (независимые друг от друга) с одинаковыми дисперсиями по одной формуле [19, 34]

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^N x_{ji} y_i}{N},$$

где i – номер опыта в плане эксперимента; b_j – коэффициент, учитывающий эффект фактора x_j ; y_i – свойство объекта, измеренное при проведении соответствующего опыта i ; N – число опытов в эксперименте.

Постоянную регрессии b_0 вычисляют по формуле

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^N y_i}{N}.$$

D-оптимальные планы обеспечивают минимальную и одинаковую дисперсию всех коэффициентов регрессии (S_b^2), которую можно вычислить по формуле

$$S_b^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2}{N}.$$

При ротатабельных планах эксперимента обеспечиваются одинаковые дисперсии всех коэффициентов регрессии на равных расстояниях от центра факторной области.

Выбор плана эксперимента начинается с расчёта необходимого числа опытов ($N_{\text{необх}}$). При этом при расчёте выбранного числа опытов в эксперименте (N) для *двухуровневых планов первого порядка* должны выполняться следующие соотношения:

$$N \geq N_{\text{необх}}; \quad (4.1)$$

$$N_{\text{необх}} \geq k + 1; \quad (4.2)$$

$$N_{\text{необх}} \geq p + 1; \quad (4.3)$$

где p – общее число параметров регрессии в выбранном полиноме.

При задании максимально возможного числа опытов ($N_{\text{зад}}$) можно определить максимальное число факторов (k_{max}) и параметров (p_{max}), которые могут быть включены в состав уравнения регрессии в виде полинома, по формулам:

$$k_{\text{max}} = N_{\text{зад}} - 1; \quad (4.4)$$

$$p_{\text{max}} = N_{\text{зад}} - 1. \quad (4.5)$$

В качестве планов первого порядка для проведения РАМПЭ для экономии ресурсов (количества реализуемых опытов) составляют планы дробных факторных экспериментов. Для РАМПЭ из планов ДФЭ наиболее популярны планы, составленные по принципу дробных реплик.

Использование планов ДФЭ по сравнению с планами ПФЭ для РАМПЭ, как и в дисперсионном анализе, имеет следующие недостатки:

уменьшение числа опытов ведёт к пропорциональному увеличению дисперсии параметров регрессии и снижению точности их оценки;

найденные коэффициенты регрессии могут быть «смешанными» оценками эффектов влияния на Y отдельных факторов и их взаимодействия;

полученное уравнение регрессии имеет пониженную адекватность;

при составлении планов ДФЭ по принципу дробных реплик с помощью различных генерирующих соотношений и определяющих контрастов (соотношений) необходимо оценивать допускаемую при этом потерю точности в определении эффектов влияния факторов на свойство объекта.

Для проведения РАМПЭ применяют не только дробные реплики ПФЭ, но и некоторые другие планы ДФЭ, например, планы Плэккетта–Бермана [19, 34].

Уравнение регрессии с натуральными значениями факторов можно получить из уравнения регрессии с нормализованными значениями факторов x_j , заменив в них нормализованные значения на натуральные по формуле кодирования, например,

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 = b_0 + b_1 (Z_1 - Z_1^0) / \Delta Z_1 + b_2 (Z_2 - Z_2^0) / \Delta Z_2 = \\ = b'_0 + b'_1 \cdot Z_1 + b'_2 \cdot Z_2,$$

где $b'_0 = b_0 - b_1 \cdot Z_1^0 / \Delta Z_1 - b_2 \cdot Z_2^0 / \Delta Z_2$; $b'_1 = b_1 / \Delta Z_1$; $b'_2 = b_2 / \Delta Z_2$.

Рассмотрим примеры составления планов первого порядка при математическом планировании эксперимента.

Пример 4.9

Целью прикладного научного исследования являлось экспериментальное определение наиболее точных эффектов влияния четырёх входных факторов Z_j ($k = 4$) на свойства объекта Y и математической зависимости этого свойства от значений Z_j в форме уравнения регрессии.

Для достижения этой цели необходимо было составить экономный по числу опытов и эффективный план эксперимента.

Было решено провести математическое планирование эксперимента для применения к его результатам регрессионного анализа. В качестве исходной регрессионной модели был выбран нелинейный

полином с нормализованными входными факторами с одиннадцатью параметрами ($p = 11$) следующего вида:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_4 x_4 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{14} x_1 x_4 + b_{23} x_2 x_3 + b_{24} x_2 x_4 + b_{34} x_3 x_4,$$

где b_0 – постоянная регрессии (свободный член), b_1, b_2, b_3, b_4 – линейные эффекты влияния нормализованных входных факторов соответственно x_1, x_2, x_3, x_4 ; $b_{12}, b_{13}, b_{14}, b_{23}, b_{24}, b_{34}$ – эффекты влияния парного взаимодействия входных факторов (эффекты взаимодействия первого порядка).

Для выбора плана эксперимента проведем оценку необходимого количества опытов ($N_{\text{необх}}$) в соответствии с соотношениями (4.1) и (4.2):

$$N_{\text{необх}} \geq k + 1 \geq 4 + 1 \geq 5;$$

$$N_{\text{необх}} \geq p + 1 \geq 11 + 1 \geq 12;$$

Исходя из поставленной задачи выбираем число опытов в эксперименте N :

$$N \geq N_{\text{необх}} \geq 12.$$

Первоначально рассмотрим планы эксперимента из группы планов первого порядка 2^{k-a} . Для четырёх факторов ($k = 4$) возможна реализация плана полного факторного эксперимента 2^4 ($N = 2^4 = 16$) и двух планов дробного факторного эксперимента типа 2^{4-a} : полуреплика ПФЭ 2^{4-1} ($N = 2^{4-1} = 2^4 \cdot 1/2 = 8$) и четверть реплики ПФЭ типа 2^{4-2} ($N = 2^{4-2} = 2^4 \cdot 1/4 = 4$).

Нашему условию ($N \geq 12$) отвечает только план полного факторного эксперимента первого порядка 2^4 с числом опытов $N = 16$. План ПФЭ 2^4 по сравнению с планами ДФЭ позволит получить более точные оценки коэффициентов регрессии и лучшую адекватность уравнения регрессии из-за большего числа опытов в нём. Все выборочные коэффициенты регрессии b_j , полученные по этому плану ПФЭ, будут "несмешанными" оценками соответствующих генеральных коэффициентов β_j [19,34].

Для построения плана ПФЭ 2^4 сделаем заготовку в виде таблицы (матрица плана эксперимента), в которой предусмотрим 16 строк для опытов эксперимента ($N = 16$) и десять столбцов ($p - 1 = 11 - 1 = 10$) для аргументов функции регрессии (табл. 4.51).

В первый столбец для аргументов регрессионной функции табл. 4.51 вносим нормализованные значения фактора x_1 в виде последовательного чередования чисел $(+1)$ и (-1) . Во второй столбец для x_2 – удвоенную комбинацию чередований чисел $(+1)$ и (-1) по сравнению с соседним слева столбцом для x_1 . По аналогичному принципу удвоения комбинации чередования чисел $(+1)$ и (-1) по сравнению с соседним слева столбцом, заполняем и последующие столбцы для x_3 и x_4 .

Таблица 4.51

План эксперимента 2^4 с нормализованными значениями факторов

Номер опыта, i	Аргументы регрессионной функции										y
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_1x_2	x_1x_3	x_1x_4	x_2x_3	x_2x_4	x_3x_4	
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	
2	-1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	
3	+1	-1	+1	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	
4	-1	-1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	
5	+1	+1	-1	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	
6	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	
7	+1	-1	-1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	
8	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	
9	+1	+1	+1	-1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	
10	-1	+1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	
11	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	
12	-1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	
13	+1	+1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	
14	-1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	
15	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	
16	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	

Столбцы для оценки эффектов парного взаимодействия факторов (x_1x_2 , x_1x_3 , x_1x_4 и др.) заполняем числами, полученными путём перемножения чисел в столбцах для соответствующих факторов в соответствующих строках таблицы.

Проверим составленную матрицу плана эксперимента на соответствие критериям оптимальности. Из табл. 4.51 следует, что для всех столбцов с аргументами регрессионной функции выполняется условие ортогональности матрицы

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

Выполняются также оба условия для D-оптимальности:

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

$$\sum_{i=1}^N x_{ji}^2 = N = 16.$$

Таким образом, составленный план полного факторного эксперимента 2^4 (табл. 4.51) является ортогональным и D-оптимальным.

Пример 4.10

Целью прикладного научного исследования являлось экспериментальное определение наиболее точных эффектов влияния четырёх входных факторов Z_j ($k = 4$) на свойства объекта Y и математической зависимости этого свойства от значений Z_j в форме уравнения регрессии. Из-за дефицита ресурсов для проведения эксперимента (времени, средств и др.) принято решение, что число опытов в эксперименте должно быть не более десяти ($N_{\text{зад}} = 10$).

Для достижения этой цели необходимо было составить эффективный план эксперимента с числом опытов не более десяти.

Было решено провести математическое планирование эксперимента для применения к его результатам регрессионного анализа. В качестве исходной регрессионной модели был выбран нелинейный полином с нормализованными входными факторами с одиннадцатью параметрами ($p = 11$) следующего вида:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_4 x_4 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{14} x_1 x_4 + b_{23} x_2 x_3 + b_{24} x_2 x_4 + b_{34} x_3 x_4.$$

Оценим возможности двухуровневого плана первого порядка с $N = 10$ исходя из соотношений (4.4) и (4.5):

$$k_{\text{max}} = N_{\text{зад}} - 1 = 10 - 1 = 9;$$

$$p_{\text{max}} = N_{\text{зад}} - 1 = 10 - 1 = 9.$$

Из данных соотношений следует, что план первого порядка с десятью опытами позволяет получить уравнение регрессии для четырёх факторов ($k < 9$) с числом параметров не более 9 ($p \leq 9$).

Приведённая в примере 4.9 регрессионная функция содержит одиннадцать параметров и её нельзя применить для поиска уравнения регрессии для эксперимента с десятью опытами.

При $N_{\text{зад}} = 10$ из планов первого порядка возможна реализация только плана ДФЭ, так как план ПФЭ для четырех факторов состоит из 16 опытов.

Для построения плана ДФЭ воспользуемся методом дробных реплик. Наиболее близкой по числу опытов к заданному числу опытов является полуреплика плана ПФЭ, т. е. план первого порядка 2^{4-1} с числом опытов $N = 8$.

Исходя из теоретических представлений об изучаемом объекте примем допущения: постоянная регрессии имеет нулевое значение ($b_0 = 0$) и наибольшее влияние на свойство объекта Y имеют линейные эффекты всех факторов и эффекты парного взаимодействия фактора x_1 с остальными факторами (x_2, x_3, x_4). Регрессионную модель возьмём с семью параметрами ($p = 7$), для которой план является

«ненасыщенным» ($p < N$), что позволит оценить адекватность полученного уравнения регрессии следующего вида:

$$\hat{y} = b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_4 x_4 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{14} x_1 x_4.$$

Поскольку план ДФЭ представляет собой часть опытов плана ПФЭ, то необходимо решить, какой именно набор опытов из плана ПФЭ будем использовать при составлении плана ДФЭ по принципу дробных реплик. От этого набора будет зависеть точность определения эффектов влияния факторов на свойство y («смешиваемость» коэффициентов).

Построим матрицу плана ДФЭ 2^{4-1} , предусмотрев в нем 6 столбцов для аргументов регрессионной функции и восемь строк для опытов эксперимента (табл. 4.52).

Построение планов ДФЭ начинаем с построения плана ПФЭ по использованному в примере 4.8 принципу математической комбинаторики для числа факторов, равных разности $(k-a)$. В нашем случае $k-a = 4-1 = 3$.

Таблица 4.52

План эксперимента 2^{4-1} с нормализованными значениями факторов

Номер опыта, i	Аргументы регрессионной функции							y
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_{12}	x_{13}	x_{14}	
1	+1	+1	+1	+1				
2	-1	+1	+1	-1				
3	+1	-1	+1	-1				
4	-1	-1	+1	+1				
5	+1	+1	-1	-1				
6	-1	+1	-1	+1				
7	+1	-1	-1	+1				
8	-1	-1	-1	-1				

При заполнении столбца для фактора x_4 принцип удвоения чередований уровней, применяемый для построения планов ПФЭ, не подходит, так как его использование в данном столбце даст только знаки (+1) и такой план не будет являться ортогональным и D-оптимальным. Если же для заполнения столбца x_4 воспользоваться произведением двух и более других факторов в одной строке плана (так называемым генерирующим соотношением [19, 34]), то тогда план будет ортогональным, D-оптимальным и ротатабельным.

К выбору генерирующего соотношения нужно подходить осознанно, так как оно определяет «смешиваемость» (точность) коэффициентов регрессии, полученных по составленному плану.

Составим и проанализируем все возможные варианты генерирующего соотношения для получения значений столбца X_4 :

$$X_4 = X_1X_2 \text{ (I); } X_4 = X_1X_3 \text{ (II); } X_4 = X_2X_3 \text{ (III); } X_4 = X_1X_2X_3 \text{ (IV).}$$

Для данных генерирующих соотношений рассчитаем определяющие контрасты (соотношения) умножением левой и правой частей соответствующего генерирующего соотношения на X_4 :

$$X_4^2 = X_1X_2X_4; \quad X_4^2 = X_1X_3X_4; \quad X_4^2 = X_2X_3X_4; \quad X_4^2 = X_1X_2X_3X_4.$$

Так как $X_4 = \pm 1$, то $X_4^2=1$ и определяющие контрасты соответствующих генерирующих соотношений можно выразить равенствами

$$1 = X_1X_2X_4; \quad 1 = X_1X_3X_4; \quad 1 = X_2X_3X_4; \quad 1 = X_1X_2X_3X_4.$$

Перемножив левые и правые части определяющих контрастов на каждый фактор, можно определить в плане столбцы с одинаковым порядком чередования знаков (+1) и (-1), например, для фактора X_1 :

$$X_1 = X_1^2X_2X_4 = X_2X_4;$$

$$X_1 = X_1^2X_3X_4 = X_3X_4;$$

$$X_1 = X_1X_2X_3X_4;$$

$$X_1 = X_1^2X_2X_3X_4 = X_2X_3X_4.$$

Таким образом, для генерирующего соотношения I комбинация знаков в плане эксперимента в столбце для фактора X_1 будет совпадать со столбцом X_2X_4 , для генерирующего соотношения II - со столбцом $X_1X_2X_3X_4$, для генерирующего соотношения IV - со столбцом $X_2X_3X_4$.

Эти равенства показывают, что при генерирующих соотношениях I-IV выборочный коэффициент b_1 будет «смешанным», т. е. будет служить оценкой влияния на Y не только фактора X_1 , но и других:

$$b_1 \approx \beta_1 + \beta_{24}; \quad b_1 \approx \beta_1 + \beta_{34}; \quad b_1 \approx \beta_1 + \beta_{1234}; \quad b_1 \approx \beta_1 + \beta_{234}.$$

Эффекты взаимодействия трёх и более факторов обычно близки к нулю и ими можно пренебречь [19,33], тогда:

$$b_1 \approx \beta_1 + \beta_{24}; \quad b_1 \approx \beta_1 + \beta_{34}; \quad b_1 \approx \beta_1; \quad b_1 \approx \beta_1.$$

Поэтому можно считать, что несмешанные оценки эффекта влияния фактора X_1 на свойство Y могут быть получены при реализации плана ДФЭ с генерирующими соотношениями III и IV для фактора X_4 . Результаты проверки на «смешиваемость» (разрешающей силы дробной реплики) остальных эффектов приведены в табл. 4.53.

Таблица 4.53

Параметры проверки разрешающей силы дробной реплики 2^{4-1}

Параметр	Выражение для определения параметра			
Генерирующее соотношение	$X_4 = X_1X_2$	$X_4 = X_1X_3$	$X_4 = X_2X_3$	$X_4 = X_1X_2X_3$
Определяющий контраст	$1 = X_1X_2X_4$	$1 = X_1X_3X_4$	$1 = X_2X_3X_4$	$1 = X_1X_2X_3X_4$
Оценки «смешанности»* коэффициентов регрессии	$b_0 \approx \beta_0 + \beta_{124}$ $b_1 \approx \beta_1 + \beta_{24}$ $b_2 \approx \beta_2 + \beta_{14}$ $b_3 \approx \beta_3 + \beta_{1234}$ $b_4 \approx \beta_4 + \beta_{12}$ $b_{12} \approx \beta_{12} + \beta_4$ $b_{13} \approx \beta_{13} + \beta_{234}$ $b_{14} \approx \beta_{14} + \beta_2$ $b_{23} \approx \beta_{23} + \beta_{134}$ $b_{24} \approx \beta_{24} + \beta_1$ $b_{34} \approx \beta_{34} + \beta_{123}$	$b_0 \approx \beta_0 + \beta_{134}$ $b_1 \approx \beta_1 + \beta_{34}$ $b_2 \approx \beta_2 + \beta_{1234}$ $b_3 \approx \beta_3 + \beta_{14}$ $b_4 \approx \beta_4 + \beta_{13}$ $b_{12} \approx \beta_{12} + \beta_{234}$ $b_{13} \approx \beta_{13} + \beta_4$ $b_{14} \approx \beta_{14} + \beta_3$ $b_{23} \approx \beta_{23} + \beta_{124}$ $b_{24} \approx \beta_{24} + \beta_{123}$ $b_{34} \approx \beta_{34} + \beta_1$	$b_0 \approx \beta_0 + \beta_{234}$ $b_1 \approx \beta_1 + \beta_{1234}$ $b_2 \approx \beta_2 + \beta_{34}$ $b_3 \approx \beta_3 + \beta_{24}$ $b_4 \approx \beta_4 + \beta_{23}$ $b_{12} \approx \beta_{12} + \beta_{134}$ $b_{13} \approx \beta_{13} + \beta_{124}$ $b_{14} \approx \beta_{14} + \beta_{123}$ $b_{23} \approx \beta_{23} + \beta_4$ $b_{24} \approx \beta_{24} + \beta_3$ $b_{34} \approx \beta_{34} + \beta_2$	$b_0 \approx \beta_0 + \beta_{1234}$ $b_1 \approx \beta_1 + \beta_{234}$ $b_2 \approx \beta_2 + \beta_{134}$ $b_3 \approx \beta_3 + \beta_{124}$ $b_4 \approx \beta_4 + \beta_{123}$ $b_{12} \approx \beta_{12} + \beta_{34}$ $b_{13} \approx \beta_{13} + \beta_{24}$ $b_{14} \approx \beta_{14} + \beta_{23}$ $b_{23} \approx \beta_{23} + \beta_{14}$ $b_{24} \approx \beta_{24} + \beta_{13}$ $b_{34} \approx \beta_{34} + \beta_{12}$

* Жирным шрифтом выделены несмешанные коэффициенты.

Данные табл. 4.53 показывают, что при любом генерирующем соотношении «несмешанными» будут пять коэффициентов. Для генерирующего соотношения I точными будут все коэффициенты, оценивающие эффект фактора X_3 , при II – эффект фактора X_2 , при III – эффект фактора X_1 , а при IV – линейные эффекты всех факторов.

Из табл. 4.53 следует, что ни одно генерирующее соотношение для X_4 не обеспечивает «несмешиваемость» всех семи параметров регрессионной модели. Точную оценку линейных эффектов влияния всех четырёх факторов обеспечивает только генерирующее соотношение IV, которое и выбираем для заполнения столбца X_4 в плане эксперимента (табл. 4.52). Оценивать коэффициенты парного взаимодействия факторов при выбранном плане эксперимента не будем, так как все эти коэффициенты «смешанные» при генерирующем соотношении IV (табл. 4.53). Определять уравнение регрессии по составленному плану ДФЭ (табл. 4.52) будем по регрессионной модели вида

$$\hat{y} = b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_3 X_3 + b_4 X_4.$$

В программе STATGRAPHICS имеется возможность составления планов полного и дробного факторного эксперимента первого порядка с компьютерной оценкой параметров их оптимальности [34].

После реализации плана эксперимента первого порядка довольно часто полученное уравнение регрессии оказывается неадекватным. В этом случае обычно составляют и реализуют математические планы эксперимента второго порядка и применяют к их результатам метод РАМПЭ.

4.3.2.2. Планы второго порядка

Существуют различные виды планов второго порядка: Кифера, Коно, Бокса, Хартли, Дрейпера-Лина и др. [19,34]. В отличие от линейных планов, планы второго порядка имеют ряд особенностей:

каждый из входных факторов должен иметь не менее трёх уровней ($m_j \geq 3$);

требуется большее число опытов;

не удовлетворяются одновременно несколько критериев оптимальности плана, что вынуждает исследователя выбирать план со статистическими характеристиками, отвечающими задачам исследования.

Планы второго порядка позволяют получить нелинейное уравнение регрессии для следующей регрессионной модели:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{\substack{u,j=1 \\ u \neq j}}^k b_{uj} x_u x_j + \sum_{\substack{g,u,j=1 \\ g \neq u \neq j}}^k b_{guj} x_g x_u x_j + \\ + \sum_{j=1}^k b_{jj} x_j^2 + \dots$$

Достоинства и недостатки планов второго порядка приведены в книге Р.З. Пена [34].

В прикладных научных исследованиях популярностью пользуются композиционные планы второго порядка, которые включают в качестве ядра планирования планы первого порядка. Эта популярность связана с тем, что если после реализации плана первого порядка выявлена неадекватность линейного уравнения регрессии, то можно по композиционным планам продолжить эксперимент, сохранив в них в качестве ядра все опыты уже реализованного плана первого порядка, и по совокупности ранее полученных результатов эксперимента по плану первого порядка и результатов дополнительных опытов получить уравнение регрессии второго порядка.

Хорошими статистическими характеристиками обладают D -оптимальные композиционные планы Кифера, но они имеют большое число опытов. Факторное пространство планов Кифера включает вершины k -мерного гиперкуба, середины его рёбер и центры двухмерных граней. Их применяют в тех случаях, когда применяются повышенные требования к оценкам параметров регрессионной функции.

При числе входных факторов менее четырёх ($k < 4$) одними из лучших планов с точки зрения близости к критерию D -оптимальности и наименьшего количества числа опытов являются планы Бокса на кубе (планы B [34]). В этих планах к плану полного факторного эксперимента 2^k добавляются $2k$ опытов в центре двухмерных граней k -мерного гиперкуба. Общее число опытов в плане B (N_B) определяется по формуле

$$N_B = 2^k + 2k.$$

В композиционных планах Коно к плану полного факторного эксперимента 2^k добавляются $2k$ опытов в центре двухмерных граней k -мерного гиперкуба и один опыт в центре факторной области планирования эксперимента. Общее число опытов в плане Коно (N_K) определяется по формуле

$$N_K = 2^k + 2k + 1.$$

Планы Коно для исследований двух и четырёх входных факторов (планы $Ko-2$ и $Ko-4$ [34]) очень экономны по числу опытов и имеют хорошие статистические характеристики.

Экономными по числу опытов являются ортогональные композиционные планы Бокса-Уилсона [19]. Ядром этих планов служат планы ПФЭ первого порядка 2^k (при $k < 5$) и планы ДФЭ 2^{k-1} (при $k \geq 5$) для нормированных значений факторов при единичном шаге их варьирования ($\Delta x_j = 1$).

Общее число опытов плана Бокса-Уилсона ($N_{БУ}$) рассчитывается по следующим формулам:

$$N_{БУ} = N_{ПФЭ}(n_j) + N^* + n_0 = 2^k + 2k + n_0 \text{ (при } k < 5);$$

$$N_{БУ} = N_{ДФЭ}(n_j) + N^* + n_0 = 2^{k-1} + 2k + n_0 \text{ (при } k \geq 5),$$

где $N_{ПФЭ}$ и $N_{ДФЭ}$ – число опытов плана первого порядка; n_j – число опытов в ядре плана; N^* – число опытов в "звездных" точках; n_0 – число опытов при нулевых нормализованных значениях всех исследуемых факторов (задается исследователем!).

Составить ортогональные планы Бокса-Уилсона можно, определив «звёздное плечо» λ (разность нормализованных значений факто-

ров X_j в «звёздных» точках плана и значений факторов в центре плана) в зависимости от k и n_0 .

Звёздные точки располагаются на координатных осях соответствующих факторов на расстоянии $\lambda \geq 1$ от начала координат (рис. 4.12).

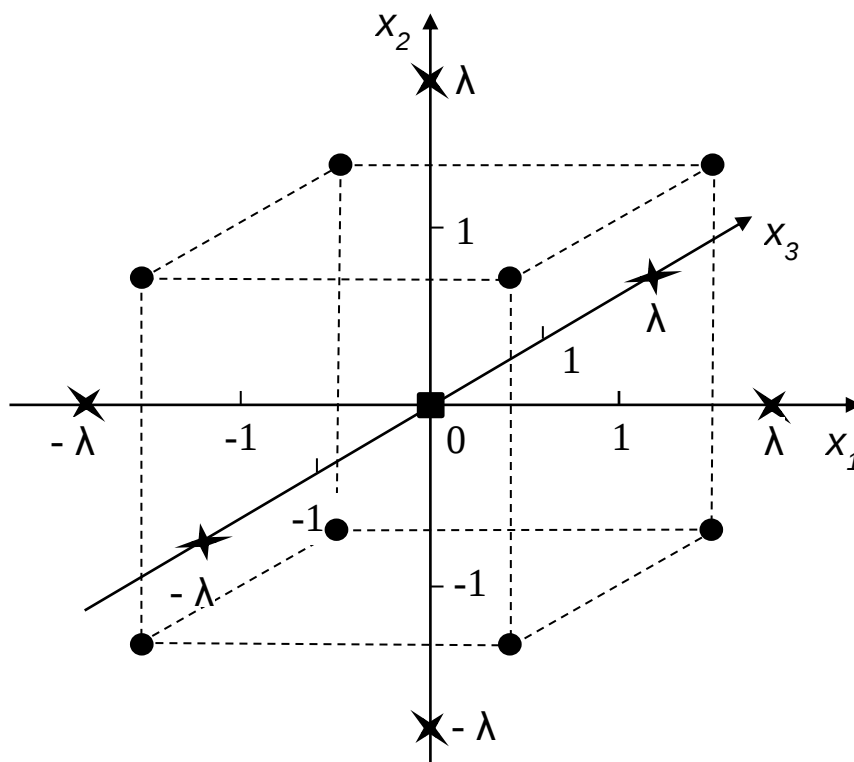


Рис. 4.12. Факторное пространство для композиционного плана Бокса-Уилсона трёхфакторного эксперимента с нормализованными значениями факторов

Для получения ортогонального плана величина λ (величина "звездного плеча") рассчитывается из соотношений

$$\lambda^4 + 2^k \lambda^2 - 2^{(k-1)} (k + 0,5n_0) = 0 \text{ (при } k < 5);$$

$$\lambda^4 + 2^{(k-1)} \lambda^2 - 2^{(k-2)} (k + 0,5n_0) = 0 \text{ (при } k \geq 5).$$

На основании этих соотношений рассчитываются значения λ^2 при различных величинах k и n_0 . Так, например, $\lambda^2 = 1$ (при $k = 2$ и $n_0 = 1$), и $\lambda^2 = 2$ (при $k = 5$ и $n_0 = 2$).

Построение плана Бокса-Уилсона начинается с построения входящего в его состав плана первого порядка для нормализованных значений входных факторов (табл. 4.54).

После заполнения всех строк плана первого порядка ($N_{ПФЭ}$ или $N_{ДФЭ}$) заполняют $2k$ строк для "звездных точек" плана так, чтобы в

каждой паре строк для одного фактора $x_j = \lambda$ и $-\lambda$, а для остальных факторов были нулевые нормализованные значения.

Таблица 4.54

Композиционный план Бокса-Уилсона
с нормализованными значениями факторов

Номер опыта, i	x_1	x_2	x_3	...	x_j	...	x_k
1	+1	+1	+1	...	...	...	...
2	-1	+1	+1	...	...	...	...
3	+1	-1	+1	...	...	...	...
4	-1	-1	+1	...	...	...	...
5	+1	+1	-1	...	...	...	...
...	...	...	...	...	...	...	...
$n_{\text{я}}^*$	-1	-1	-1				
$n_{\text{я}} + 1$	$+\lambda$	0	0	0	0	0	0
$n_{\text{я}} + 2$	$-\lambda$	0	0	0	0	0	0
$n_{\text{я}} + 3$	0	$+\lambda$	0	0	0	0	0
$n_{\text{я}} + 4$	0	$-\lambda$	0	0	0	0	0
...	0	...	...	...	...	...	...
$n_{\text{я}} + 2k - 1$	0	0	0	0	0	0	$+\lambda$
$n_{\text{я}} + 2k$	0	0	0	0	0	0	$-\lambda$
$n_{\text{я}} + 2k + 1$	0	0	0	0	0	0	0
...	0	0	0	0	0	0	0
$n_{\text{я}} + 2k + n_0$	0	0	0	0	0	0	0

* Число опытов в ядре плана (плане первого порядка).

После заполнения строк для "звездных точек" плана Бокса–Уилсона заполняют строки с нулевыми нормализованными значениями всех исследуемых факторов (число строк равно n_0). Факторное пространство для композиционного плана Бокса-Уилсона трёхфакторного эксперимента с нормализованными значениями факторов приведено на рис. 4.12.

Для составления ортогональной матрицы плана эксперимента в план (табл. 4.54) добавляется k столбцов для преобразованных значений $x_j^2(x_j')$, в случае проведения расчётов при РАМПЭ «вручную»

(без применения известных статистических компьютерных программ). Эти столбцы заполняются значениями, рассчитанными по формуле [19]

$$x'_{ji} = x_{ji}^2 - \bar{x}_{ji}^2 = x_{ji}^2 - \frac{\sum_{i=1}^N x_{ji}^2}{N}.$$

В результате расчётов по матрице плана со столбцами x'_j получают уравнение регрессии вида

$$\begin{aligned} \hat{y} = & b'_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_j x_j + \dots + b_k x_k + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + \dots + \\ & + b_{(j-1)j} x_{(j-1)} x_j + \dots + b_{(k-1)k} x_{(k-1)} x_k + b_{11} (x_1^2 - \bar{x}_1^2) + b_{22} (x_2^2 - \bar{x}_2^2) + \\ & + \dots + b_{jj} (x_j^2 - \bar{x}_j^2) + \dots + b_{kk} (x_k^2 - \bar{x}_k^2). \end{aligned}$$

Преобразованием данного уравнения можно получить уравнение регрессии с нормализованными значениями входных факторов в традиционном виде

$$\begin{aligned} \hat{y} = & b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_j x_j + \dots + b_k x_k + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + \dots + \\ & + b_{(j-1)j} x_{(j-1)} x_j + \dots + b_{(k-1)k} x_{(k-1)} x_k + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + \dots + b_{kk} x_k^2, \end{aligned}$$

где $b_0 = b'_0 - b_{11} \bar{x}_1^2 - b_{22} \bar{x}_2^2 - \dots - b_{jj} \bar{x}_j^2 - \dots - b_{kk} \bar{x}_k^2$.

При разработке планов Бокса-Уилсона необходимо учитывать технические возможности выполнения эксперимента при максимальных (Z_j^{max}) и минимальных (Z_j^{min}) натуральных значениях входных факторов. Поэтому при составлении планов Бокса-Уилсона первоначально задают эти максимально и минимально допустимые значения входных факторов, а затем рассчитывают остальные параметры факторного пространства, необходимые для планирования эксперимента.

Расчёт натуральных значений шага варьирования входных факторов можно выполнить для нормализованного значения факторов $x_j = \lambda$ по формуле

$$\Delta Z_j = \frac{Z_j^{max} - Z_j^0}{x_j} = \frac{Z_j^{max} - Z_j^0}{\lambda}.$$

Примеры планов Бокса-Уилсона и алгоритмы вычислений по ним коэффициентов регрессии, их дисперсий, проверки значимости коэффициентов и адекватности уравнения регрессии приведены в книге [19].

Популярными композиционными планами второго порядка являются униформ-рототабельные планы Бокса-Хантера [19,34]. Эти планы, по сравнению с ортогональными планами Бокса-Уилсона, более затратные по числу опытов, но они позволяют получить одинаковые и минимальные значения дисперсий оценок регрессионной

функции на равных расстояниях от центра факторного пространства эксперимента.

Ядром планов Бокса-Хантера, так же как в планах Бокса-Уилсона, являются планы ПФЭ первого порядка типа 2^k (при $k < 5$) и планы ДФЭ 2^{k-1} (при $k \geq 5$). Аналогично для планов Бокса-Хантера рассчитывается и общее число опытов в эксперименте ($N_{БХ}$):

$$N_{БХ} = N_{ПФЭ} + N^* + n_0 = 2^k + 2k + n_0 \text{ (при } k < 5\text{);}$$

$$N_{БХ} = N_{ДФЭ} + N^* + n_0 = 2^{k-1} + 2k + n_0 \text{ (при } k \geq 5\text{).}$$

Если при составлении планов Бокса-Уилсона число опытов в центре плана n_0 задаётся исследователем, то для планов Бокса-Хантера это число, как и величина «звёздного плеча» $\lambda_{БХ}$, рассчитывается в соответствии с требованиями униформ-рототабельного планирования [19]. Значения $\lambda_{БХ}$ и n_0 для некоторых униформ-рототабельных планов [19,34] приведены в табл. 4.55.

Планы Бокса-Хантера, по сравнению с планами Бокса-Уилсона, обладают свойством рототабельности, но являются более затратными по числу опытов эксперимента из-за большего числа опытов в центре области планирования.

Примеры планов Бокса-Хантера и алгоритмы РАМПЭ для результатов эксперимента, полученных при реализации этих планов, приведены в книгах [19, 34].

Таблица 4.55

Характеристики планов Бокса-Хантера

Характеристики	Число факторов, k						
	2	3	4	5	5	6	6
Ядро плана (план первого порядка)	2^2	2^3	2^4	2^5	2^{5-1}	2^6	2^{6-1}
$\lambda_{БХ}$	1,414	1,682	2,000	2,378	2,000	2,828	2,378
n_0	5	6	7	10	6	15	9

Как уже отмечалось ранее, регрессионный анализ проводят для факторов только с количественными значениями. Для решения задач по оценке влияния на свойства объекта одновременного действия количественных и качественных факторов можно применять принципы регрессионного и дисперсионного анализов, используя сложные планы эксперимента типа 2^{2k} . Например, сложный план типа $2^{2 \cdot 2}$ позволяет исследовать влияние на свойство Y одновременно 3 качественных факторов на 4 уровнях и до 12 количественных факторов на 2 уровнях.

С построением таких планов и их применением можно познакомиться в книге [19].

Выбор того или иного плана эксперимента определяется его целью и решаемыми задачами с учётом имеющихся у исследователя ресурсов. Построение планов, удовлетворяющих определённым критериям оптимальности, иногда бывает невозможным или приводит к слишком большим затратам ресурсов. Поэтому на практике при ограниченности ресурсов часто применяют математические планы экспериментов, близкие по свойствам к оптимальным и соответствующие следующим требованиям [34]:

число опытов, ненамного превышающее число опытов в «насыщенном» плане эксперимента, у которого $k = p$;

композиционность плана, т. е. наличие ядра и дополнительных к нему опытов;

возможность разбиения плана на ортогональные блоки (для изучения влияния временного дрейфа);

небольшое число уровней варьирования факторов.

Рассмотрим примеры использования метода РАМПЭ в прикладных научных исследованиях.

Пример 4.11

Рассмотрим пример применения метода РАМПЭ для математического описания химико-технологического процесса по результатам полного трёхфакторного эксперимента ($k = 3$), представленный в книге [37].

В данном примере выход целевого продукта обозначен y (%). На ход процесса влияют следующие факторы (Z_j):

Z_1 – температура реакционной смеси в аппарате, $^{\circ}\text{C}$;

Z_2 – объёмная скорость подачи реагента, $\text{м}^3/\text{с}$;

Z_3 – концентрация реагента на входе в аппарат, $\text{кмоль}/\text{м}^3$.

Условия проведения опытов, матрица плана 2^3 и результаты экспериментов приведены в табл. 4.56 и 4.57.

Таблица 4.56

Факторное пространство полного трёхфакторного эксперимента 2^3

Параметры	Z_1 , $^{\circ}\text{C}$	Z_2 , $\text{м}^3/\text{с}$	Z_3 , $\text{кмоль}/\text{м}^3$
Основной уровень входных факторов	250	0,3	0,5
Интервал варьирования входных факторов	15	0,05	0,1
Верхний уровень входных факторов	265	0,35	0,6
Нижний уровень входных факторов	235	0,25	0,4

Максимальное число параметров уравнения регрессии (p), которое можно определить для плана эксперимента с числом опытов $N = 8$, равно семи ($p = N - 1 = 8 - 1 = 7$). В качестве регрессионной модели с семью параметрами выбрали следующую:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3.$$

Выполним «вручную» необходимые расчёты по методу РАМПЭ.

Таблица 4.57

Матрица плана и результаты экспериментов

Номер опыта, i	Значения входных факторов									y, %
	Нормализованные (X _i)						Натуральные (Z _j)			
	X ₁	X ₂	X ₃	X ₁ X ₂	X ₁ X ₃	X ₂ X ₃	Z ₁ , °C	Z ₂ , м ³ /с	Z ₃ , кмоль/м ³	
1	-1	-1	-1	1	1	1	235	0,25	0,4	14,55
2	1	-1	-1	-1	-1	1	265	0,25	0,4	45,30
3	-1	1	-1	-1	1	-1	235	0,35	0,4	12,40
4	1	1	-1	1	-1	-1	265	0,35	0,4	50,12
5	-1	-1	1	1	-1	-1	235	0,25	0,6	7,38
6	1	-1	1	-1	1	-1	265	0,25	0,6	27,52
7	-1	1	1	-1	-1	1	235	0,35	0,6	8,12
8	1	1	1	1	1	1	265	0,35	0,6	26,20

План 2^3 отвечает критерию ортогональности, поэтому рассчитаем линейные и парные коэффициенты влияния входных нормализованных факторов по одним формулам [19, 34, 37]

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^N x_{ji} y_i}{N}, \quad b_{uj} = \frac{\sum_{i=1}^N x_{ui} x_{ji} y_i}{N}.$$

Линейные эффекты влияния входных нормализованных факторов будут равны:

$$b_1 = \frac{\sum_{i=1}^N x_{1i} y_i}{N} = \frac{1}{8} (-14,55 + 45,30 - 12,40 + 50,12 - 7,38 + 27,52 - 8,12 + 26,20) = 13,33625 \approx 13,34;$$

$$b_2 = \frac{\sum_{i=1}^N x_{2i} y_i}{N} = \frac{1}{8} (-14,55 - 45,30 + 12,40 + 50,12 - 7,38 - 27,52 + 8,12 + 26,20) = 0,26125 \approx 0,26;$$

$$b_3 = \frac{\sum_{i=1}^N x_{1i} y_i}{N} = \frac{1}{8} (-14,55 - 45,30 - 12,40 - 50,12 + 7,38 + 27,52 + 8,12 + 26,20) = -6,64375 \approx -6,64;$$

$$b_{12} = \frac{\sum_{i=1}^N x_{1i} x_{2i} y_i}{N} = \frac{1}{8} (+14,55 - 45,30 - 12,40 + 50,12 + 7,38 - 27,52 - 8,12 + 26,20) = 0,61375 \approx 0,61;$$

$$b_{13} = \frac{\sum_{i=1}^N x_{1i} x_{3i} y_i}{N} = \frac{1}{8} (+14,55 - 45,30 + 12,40 - 50,12 - 7,38 + 27,52 - 8,12 + 26,20) = -3,78125 \approx -3,78;$$

$$b_{23} = \frac{\sum_{i=1}^N x_{2i} x_{3i} y_i}{N} = \frac{1}{8} (+14,55 + 45,30 - 12,40 - 50,12 - 7,38 - 27,52 + 8,12 + 26,20) = -0,40625 \approx -0,41.$$

Постоянную регрессии b_0 вычислим по формуле [19, 34, 37]

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^N y_i}{N} = \frac{1}{8} (+14,55 + 45,30 + 12,40 + 50,12 + 7,38 + 27,52 + 8,12 + 26,20) = 23,94875 \approx 23,95.$$

План 2³ отвечает критерию D-оптимальности, поэтому рассчитаем дисперсию всех коэффициентов регрессии (S_b^2) по одной формуле [19, 34, 37]

$$S_b^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2}{N},$$

где $S_{\text{воспр}}^2$ – дисперсия воспроизводимости, характеризующая случайные ошибки измерений отклика объекта y .

Дисперсия воспроизводимости была определена по результатам предварительного эксперимента и составила 1,1 (%)² с числом степеней свободы, равным двум ($f_{\text{воспр}} = 2$). Тогда

$$S_b^2 = \frac{1,1}{8} = 0,1375 \text{ и } S_b = \sqrt{S_b^2} = \sqrt{0,1375} = 0,3708.$$

Проверку значимости рассчитанных параметров уравнения регрессии выполним для доверительной вероятности 0,95 (уровня значимости 0,05), используя распределение Стьюдента. Критическое значение квантиля распределения Стьюдента ($t_{\text{кр}}$) для $P = 0,95$ и $f_{\text{воспр}} = 2$ равно 4,3. Рассчитаем значение выражения

$$S_b t_{\text{кр}} = 0,37081 \cdot 4,3 = 1,594483 \approx 1,59.$$

Проверка для рассчитанных параметров уравнения регрессии выполнения неравенства $|b| > S_b t_{\text{кр}}$ показала, что параметры b_2 , b_{12} и b_{23} для заданной доверительной вероятности являются незначимыми, т. е. равными нулю. Следовательно, члены уравнения регрессии с этими коэффициентами из него нужно исключить. Тогда окончательный вид найденного уравнения регрессии с нормализованными

значениями входных факторов с четырьмя параметрами ($p = 4$) будет следующим:

$$\hat{y} = 23,95 + 13,34x_1 - 6,64x_3 - 3,78x_1x_3.$$

Для проверки адекватности полученного уравнения регрессии найдём по нему расчётные значения отклика объекта y (табл. 4.58).

Таблица 4.58

Значения выхода продукта, рассчитанные по уравнению регрессии с нормализованными значениями входных факторов (y_p)

Номер опыта	1	2	3	4	5	6	7	8
$y_p, \%$	13,475	47,71	13,475	47,71	7,75	26,86	7,75	26,86

Рассчитаем дисперсию адекватности уравнения регрессии ($S_{ад}^2$) по следующей формуле [19, 37]

$$S_{ад}^2 = \frac{1}{N-p} \sum_{i=1}^N (y_i - y_p)^2 = \frac{1}{8-4} ((14,55-13,475)^2 + (45,30-47,31)^2 + (12,40-13,475)^2 + (50,12-47,71)^2 + (7,38-7,75)^2 + (27,52-26,86)^2 + (8,12-7,75)^2 + (26,20-26,86)^2) = 3,768113 \approx 3,77 (\%)^2.$$

Вычислим расчётное значение F -статистики (F_p) по формуле

$$F_p = \frac{S_{ад}^2}{S_{воспр}^2} = \frac{3,77}{1,1} = 3,4.$$

Проверку адекватности уравнения регрессии выполним для доверительной вероятности 0,95 (уровня значимости 0,05), используя распределение Фишера. Критическое значение квантиля распределения Фишера ($F_{кр}$) для $P = 0,95$, $f_{ад} = N-p = 8-4 = 4$ и $f_{воспр} = 2$ равно 19,2.

Полученное нелинейное уравнение регрессии с четырьмя параметрами для нормализованных значений входных факторов является адекватным для доверительной вероятности 0,95, так как для него выполняется соотношение [19, 37]

$$F_p \leq F_{кр} (3,4 < 19,2).$$

Для удобства применения на практике преобразуем полученное уравнение регрессии с нормализованными значениями входных факторов в уравнение регрессии с натуральными значениями этих факторов, используя формулы их кодирования [19, 37]

$$x_1 = \frac{Z_1 - 250}{15}, \quad x_3 = \frac{Z_3 - 0,5}{0,1}.$$

Подставив эти выражения в уравнение регрессии с нормализованными значениями входных факторов, получим уравнение регрессии с натуральными значениями этих факторов (в книге [37] ошибка в расчёте постоянной регрессии)

$$\hat{y} = -480,18 + 2,1493Z_1 + 563,6Z_2 - 2,520Z_1Z_3.$$

В программах Excel и STATGRAPHICS не предусмотрены процедуры для реализации метода РАМПЭ с использованием экспериментально определённых оценок дисперсии воспроизводимости. Используемые в этих программах алгоритмы классического регрессионного анализа при оценке адекватности уравнения регрессии вместо «пользовательской» дисперсии воспроизводимости применяют дисперсию S^{2*} [34], вычисляемую при дисперсионном анализе по формуле

$$S^{2*} = SS_{\text{оцм}}/(N-p).$$

Проведём проверку применимости классического регрессионного анализа, реализованного в программах Excel, STATGRAPHICS Centurion XV, Statistica 6 и сравним полученные результаты с результатами, полученными методами РАМПЭ с «пользовательской» дисперсией воспроизводимости.

Результаты расчётов в программе Excel с инструментом анализа «Регрессия» для плана эксперимента с нормализованными значениями входных факторов (табл. 4.57) приведены в табл.4.59-4.64, а с натуральными значениями входных факторов – в табл. 4.65-4.67.

Таблица 4.59

	Коэффициенты	Стандартная ошибка	t- статистика	P- Значение	Нижние 95 %	Верхние 95 %
Y- пересечение	23,94875	1,12875	21,21705	0,029983	9,606621	38,29088
X ₁	13,33625	1,12875	11,81506	0,053754	-1,00588	27,67838
X ₂	0,26125	1,12875	0,231451	0,855204	-14,0809	14,60338
X ₃	-6,64375	1,12875	-5,88594	0,107136	-20,9859	7,698379
X ₁ X ₂	0,61375	1,12875	0,543743	0,682946	-13,7284	14,95588
X ₁ X ₃	-3,78125	1,12875	-3,34994	0,184678	-18,1234	10,56088
X ₂ X ₃	-0,40625	1,12875	-0,35991	0,780062	-14,7484	13,93588

Из данных табл. 4.59 следует, что только постоянная регрессии является значимой для доверительной вероятности 0,95 и, если следовать логике метода РАМПЭ, все остальные члены должны быть исключены из уравнения регрессии. Однако при классическом регрессионном анализе расчёт параметров уравнения регрессии отличается от их расчёта по методу РАМПЭ [19, 34, 35] и они не являются

независимыми друг от друга. Поэтому выполним процедуру последовательного исключения из регрессионной модели членов с максимальным значением «Р-значение» до тех пор, пока в уравнении регрессии не останутся только значимые параметры.

Сначала исключим из регрессионной модели член с коэффициентом b_2 (табл. 4.60).

Таблица 4.60

	Коэффициенты	Стандартная ошибка	t-статистика	P-Значение	Нижние 95%	Верхние 95%
Y-пересечение	23,94875	0,819246	29,23267	0,001168	20,42382	27,47368
X_1	13,33625	0,819246	16,27869	0,003752	9,811319	16,86118
X_3	-6,64375	0,819246	-8,10959	0,014867	-10,1687	-3,11882
X_1X_2	0,61375	0,819246	0,749164	0,531886	-2,91118	4,138681
X_1X_3	-3,78125	0,819246	-4,61552	0,043875	-7,30618	-0,25632
X_2X_3	-0,40625	0,819246	-0,49588	0,66911	-3,93118	3,118681

Затем исключаем член с коэффициентом X_2X_3 (табл. 4.61).

Таблица 4.61

	Коэффициенты	Стандартная ошибка	t-статистика	P-Значение	Нижние 95%	Верхние 95%
Y-пересечение	23,94875	0,708841	33,78578	5,7E-05	21,6929	26,2046
X_1	13,33625	0,708841	18,81416	0,000328	11,0804	15,5921
X_3	-6,64375	0,708841	-9,37269	0,002573	-8,8996	-4,3879
X_1X_2	0,61375	0,708841	0,86585	0,450267	-1,6421	2,869599
X_1X_3	-3,78125	0,708841	-5,33441	0,012877	-6,0371	-1,5254

Исключив член с коэффициентом X_1X_2 , получаем адекватное уравнение регрессии (табл. 4.62-4.64).

Таблица 4.62

Вывод итогов

Регрессионная статистика	
Множественный R	0,996037
R-квадрат	0,99209
Нормированный R-квадрат	0,986157
Стандартная ошибка	1,941163
Наблюдения	8

Таблица 4.63

Дисперсионный анализ

	<i>df</i>	<i>SS</i>	<i>MS</i>	<i>F</i>	<i>Значимость F</i>
<i>Регрессия</i>	3	1890,343	630,1142	167,2228	0,000117
<i>Остаток</i>	4	15,07245	3,768113		
<i>Итого</i>	7	1905,415			

Таблица 4.64

	<i>Коэффициенты</i>	<i>Стандартная ошибка</i>	<i>t-статистика</i>	<i>P-Значение</i>	<i>Нижние 95%</i>	<i>Верхние 95%</i>
<i>Y-пересечение</i>	23,94875	0,686305	34,89522	4,02E-06	22,04326	25,85424
<i>x₁</i>	13,33625	0,686305	19,43197	4,13E-05	11,43076	15,24174
<i>x₃</i>	-6,64375	0,686305	-9,68047	0,000637	-8,54924	-4,73826
<i>x₁x₃</i>	-3,78125	0,686305	-5,50958	0,005295	-5,68674	-1,87576

Из данных табл. 4.64 видно, параметры уравнения регрессии с нормализованными значениями входных факторов и его вид совпадают с результатами «ручных» расчётов, полученных по методу РАМПЭ.

Получение в программе Excel расчётов с инструментом анализа «Регрессии» для плана эксперимента с натуральными значениями входных факторов с последовательным исключением из регрессионной модели членов с максимальным значением «P-значение», превышающим величину 0,05, также привело к совпадению с результатами «ручных» расчётов (табл. 4.65-4.67).

Таблица 4.65

Вывод итогов

<i>Регрессионная статистика</i>	
<i>Множественный R</i>	0,996037
<i>R-квадрат</i>	0,99209
<i>Нормированный R-квадрат</i>	0,986157
<i>Стандартная ошибка</i>	1,941163
<i>Наблюдения</i>	8

Таблица 4.66

Дисперсионный анализ

	<i>df</i>	<i>SS</i>	<i>MS</i>	<i>F</i>	<i>Значимость F</i>
<i>Регрессия</i>	3	1890,343	630,1142	167,2228	0,000117
<i>Остаток</i>	4	15,07245	3,768112		
<i>Итого</i>	7	1905,415			

Таблица 4.67

	<i>Коэффициенты</i>	<i>Стандартная ошибка</i>	<i>t-статистика</i>	<i>P-Значение</i>	<i>Нижние 95%</i>	<i>Верхние 95%</i>
<i>Y-пересечение</i>	-480,208	58,42957	-8,21857	0,001195	-642,434	-317,981
<i>Z₁</i>	2,1495	0,233299	9,21351	0,000771	1,501759	2,797241
<i>Z₃</i>	563,7708	114,5898	4,919904	0,00793	245,6185	881,9232
<i>Z₁Z₃</i>	-2,52083	0,457536	-5,50958	0,005295	-3,79116	-1,25051

Аналогичные результаты получены в программах STATGRAPHICS Centurion XV (табл. 4.68) и STATISTICA 6 (табл. 4.69).

Таблица 4.68

Результаты расчётов в программе STATGRAPHICS Centurion XV по команде «Multiple Regression» с использованием метода «Baskward Selection»

		<i>Standard</i>	<i>T</i>	
<i>Parameter</i>	<i>Estimate</i>	<i>Error</i>	<i>Statistic</i>	<i>P-Value</i>
CONSTANT	-480,207	58,4296	-8,21857	0,0012
<i>Z₁</i>	2,1495	0,233299	9,21351	0,0008
<i>Z₃</i>	563,771	114,59	4,9199	0,0079
<i>Z₁Z₃</i>	-2,52083	0,457536	-5,50958	0,0053

Analysis of Variance

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
<i>Model</i>	1890,34	3	630,114	167,22	0,0001
<i>Residual</i>	15,0725	4	3,76811		
<i>Total (Corr.)</i>	1905,42	7			

R-squared = 99,209 percent

R-squared (adjusted for d.f.) = 98,6157 percent

Standard Error of Est. = 1,94116

Mean absolute error = 1,12875

Durbin-Watson statistic = 2,38893 (*P*=0,9496)

Lag 1 residual autocorrelation = -0,247249

Таблица 4.69

Результаты расчётов в программе STATISTICA 6
по команде «Multiple Regression» с использованием метода
«Baskward stepwise»

Regression Summary for Dependent Variable: y (Spreadsheet) R= ,99603699 R?= ,99208968 Adjusted R?= ,98615693 F(3,4)=167,22 p<,00012 Std.Error of estimate: 1,9412						
N=8	Beta	Std.Err. of Beta	B	Std.Err. of B	t(4)	p-level
Inter- cept			-480,207	58,4296	-8,21857	0,001195
Z ₁	2,08919	0,226753	2,149	0,2333	9,21351	0,000771
Z ₃	3,65303	0,742500	563,771	114,5898	4,91990	0,007930
Z ₁ Z ₃	4,27035	0,775078	-2,521	0,4575	-5,50958	0,005295

Пример 4.12

В прикладном научном исследовании решалась задача получения математического описания влияния на прочность древесностружечных плит при растяжении перпендикулярно их пласти (σ_p , МПа) трёх технологических факторов ($k = 3$):

D_m - доля модификатора в клеевом составе, мас.ч.;

$P_{св}$ - расход связующего, %;

T - температура прессования, °C.

Для математического описания использовалась регрессионная модель с десятью параметрами ($p = 10$) для нормализованных значений входных факторов (X_j) в виде следующего полинома второй степени:

$$\hat{\sigma}_p = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_3 X_3 + b_{12} X_1 X_2 + b_{13} X_1 X_3 + b_{23} X_2 X_3 + b_{11} X_1^2 + b_{22} X_2^2 + b_{33} X_3^2.$$

Для решения поставленной задачи исследователем был выбран математический план Бокса [34,38] двухуровневого трёхфакторного эксперимента (план В-3 [34]) с пятикратным повторением ($n = 5$) каждого из четырнадцати опытов ($N = 14$).

Условия проведения опытов, матрица плана В-3 и результаты экспериментов приведены в табл. 4.70 и 4.71.

Таблица 4.70

Факторное пространство эксперимента для плана В-3

Параметры	D_m , мас.ч.	$P_{св}$, %	T , °C
Основной уровень входных факторов	5	10	170
Интервал варьирования входных факторов	5	2	10
Верхний уровень входных факторов	10	12	180
Нижний уровень входных факторов	0	8	160

Таблица 4.71

Матрица плана В-3 и результаты эксперимента

Номер опыта, i	Значения входных факторов						Средние ариф- метические значения σ_p , МПа
	нормированные			натуральные			
	X_1	X_2	X_3	D_m , мас.ч	$P_{св}$, %	T , °C	
1	-1	-1	-1	0	8	160	0,47
2	+1	-1	-1	10	8	160	0,58
3	-1	+1	-1	0	12	160	0,48
4	+1	+1	-1	10	12	160	0,54
5	-1	-1	+1	0	8	180	0,58
6	+1	-1	+1	10	8	180	0,67
7	-1	+1	+1	0	12	180	0,62
8	+1	+1	+1	10	12	180	0,68
9	-1	0	0	0	10	170	0,57
10	+1	0	0	10	10	170	0,66
11	0	-1	0	5	8	170	0,55
12	0	+1	0	5	12	170	0,61
13	0	0	-1	5	10	160	0,52
14	0	0	+1	5	10	180	0,58

Результаты определения выборочных дисперсий единичных значений σ_p (S_i^2) и абсолютных стандартных отклонений единичных значений S_i (среднеквадратических отклонений) для всех опытов плана В-3 представлены в табл. 4.72.

Таблица 4.72

Параметры случайных ошибок измерений σ_p

Номер опыта, i	S_i^2	S_i	Номер опыта, i	S_i^2	S_i
1	0,014	0,119	8	0,012	0,109
2	0,017	0,133	9	0,017	0,133
3	0,014	0,120	10	0,014	0,120
4	0,007	0,088	11	0,017	0,132
5	0,011	0,109	12	0,010	0,100
6	0,020	0,141	13	0,014	0,119
7	0,013	0,114	14	0,017	0,132

Проверка четырнадцати дисперсий единичных значений σ_p на однородность по критерию Кохрена для доверительной вероятности 0,95 показала их равенство. Исходя из этого было рассчитано среднее арифметическое значение этих дисперсий ($S^2\{y\}$) по формуле

$$S^2\{y\} = \frac{\sum_{i=1}^{14} S_i^2}{14} = \frac{0,203}{14} = 0,0145 \text{ (МПа)}^2.$$

Параметры уравнения регрессии рассчитывали по формулам [38]:

$$\begin{aligned} b_0 &= T_1(Oy) - T_2 \sum_{j=1}^k (jy); \\ b_j &= T_3(jy); \\ b_{uj} &= T_6(uyj); \\ b_{jj} &= T_4(jjy) - T_5 \sum_{j=1}^k (jjy) - T_2(Oy); \\ (Oy) &= \sum_{i=1}^N y_{ji}; \\ (jy) &= \sum_{i=1}^N x_{ji} y_{ji}; \\ (ujy) &= \sum_{i=1}^N x_{ji} x_{ui} y_{ji}; \\ (jjy) &= \sum_{i=1}^N x_{ji}^2 y_{ji}, \end{aligned}$$

где b_0 - свободный член;

b_j - коэффициенты линейного влияния входных факторов ($j = 1, 2, \dots, k$);

b_{jj} - коэффициенты квадратичного влияния входных факторов;

b_{uj} - коэффициенты совместного (парного) влияния входных факторов, $u \neq j$;

T_1 - постоянные коэффициенты.

Для плана В-3 постоянные коэффициенты T_1 следующие [38]:

$$T_1 = 0,40624, T_2 = 0,15624, T_3 = 0,1, T_4 = 0,5, T_5 = -0,09375, T_6 = 0,125.$$

В результате математической обработки результатов эксперимента получено следующее уравнение регрессии с нормализованными значениями входных факторов:

$$\hat{\sigma}_p = 0,584 + 0,041X_1 + 0,008X_2 + 0,054X_3 + 0,0031X_1^2 - 0,0037X_2^2 - 0,0337X_3^2 - 0,01X_1X_2 - 0,0025X_1X_3 + 0,01X_2X_3.$$

Проверка значимости рассчитанных параметров уравнения регрессии, выполненная для доверительной вероятности 0,95 с использованием распределения Стьюдента, показала следующее. Критическое значение квантиля распределения Стьюдента ($t_{кр}$) для $P = 0,95$ и $f_{воспр} = 4$ равно 2,78.

Вычислим дисперсии, оценивающие ошибки в определении параметров уравнения регрессии, по формулам [38]

$$S^2\{b_0\} = T_1 \cdot S^2\{y\}/n = 0,40624 \cdot 0,0145/5 = 0,001178 \text{ (МПа)}^2;$$

$$S^2\{b_j\} = T_3 \cdot S^2\{y\}/n = 0,1 \cdot 0,0145/5 = 0,00029 \text{ (МПа)}^2;$$

$$S^2\{b_{jj}\} = (T_4 + T_5) \cdot S^2\{y\}/n = 0,001178 \text{ (МПа)}^2;$$

$$S^2\{b_{ju}\} = T_6 \cdot S^2\{y\}/n = 0,000363.$$

Тогда:

$$t \cdot S\{b_0\} = 0,095; t \cdot S\{b_j\} = 0,047; t \cdot S\{b_{jj}\} = 0,095; t \cdot S\{b_{ju}\} = 0,053.$$

Проверка для рассчитанных параметров уравнения регрессии выполнения неравенства $|b| > t \cdot S\{b\}$ показала, что для доверительной вероятности 0,95 из всех параметров уравнения регрессии значимыми являются только b_0 и b_3 .

Таким образом, только один технологический фактор из трёх значимо влияет на прочность древесностружечных плит (ДСтП) при растяжении перпендикулярно их пласти. Линейный эффект этого влияния показывает, что увеличение нормированного значения температуры прессования на единицу (например, от 170 до 180 °C) приведёт к росту σ_p на величину 0,054 МПа.

Окончательный вид полученного уравнения регрессии с нормализованным значением температуры прессования ДСтП будет иметь следующий вид:

$$\hat{\sigma}_p = 0,58 + 0,0540X_3.$$

Для проверки адекватности данного уравнения регрессии выполним по нему расчёт отклика объекта σ_p для каждого опыта (табл. 4.73) и определим значение дисперсии адекватности статистики F . За оценку дисперсии воспроизводимости возьмём дисперсию средних арифметических значений σ_p ($S_{воспр}^2$), рассчитанную по формуле

$$S_{воспр}^2 = \frac{S^2\{y\}}{n} = \frac{0,145}{5} 0,047 \text{ (МПа)}^2.$$

Расчётные значения отклика объекта представлены в табл. 4.73, а параметры адекватности уравнения регрессии - в табл. 4.74.

Таблица 4.73

Расчётные значения σ_p

№ опыта	1	2	3	4	5	6	7
$\hat{\sigma}_p$, МПа	0,530	0,530	0,530	0,530	0,638	0,638	0,638
№ опыта	8	9	10	11	12	13	14
$\hat{\sigma}_p$, МПа	0,638	0,584	0,584	0,584	0,584	0,530	0,638

Таблица 4.74

Показатели	Значения показателей
Дисперсия адекватности, $S^2_{ад}, (МПа)^2$	0,002202
Дисперсия воспроизводимости, $S^2\{y\}, (МПа)^2$	0,000223
Расчетное значение критерия Фишера, F_p	9,87
Критическое значение квантиля распределения Фишера ($F_{кр}$) при доверительной вероятности 0,95 и числе степеней свободы: дисперсии адекватности $f_{ад} = N-p = 14-2 = 12$ дисперсии воспроизводимости $f_{воспр} = N(n-1) = 14(5-1) = 56$	1,93

Из данных табл. 4.74 следует, что полученное уравнение регрессии неадекватно, так как $F_p > F_{кр}$ ($9,87 > 1,93$).

Рассчитаем значение нормированного коэффициента детерминации $R^2_{норм}$ по формуле [34, с. 105]

$$R^2_{норм} = 1 - \frac{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\frac{1}{N-p} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2} = 0,579 \text{ МПа},$$

где $\bar{y} = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2$ – общее среднее значение σ_p .

Невысокое значение нормированного коэффициента детерминации подтверждает невысокую значимость полученного уравнения регрессии и показывает, что изменение отклика объекта только на 57,9 % зависит от изменения температуры прессования древесностружечных плит, а остальная часть изменчивости σ_p связана с другими факторами.

Поэтому данное уравнение регрессии малоприспособно для практического применения и прогнозирования изменений σ_p .

Проверим возможность получения адекватного уравнения регрессии классическим регрессионным анализом, пусть и с менее точными оценками влияния на σ_p входных факторов.

В программе Excel с инструментом анализа «Регрессия» были получены следующие результаты расчётов для нормализованных значений факторов с доверительной вероятностью 0,95 с пошаговым исключением незначимых параметров уравнения регрессии (табл. 4.75-4.77)

Таблица 4.75

Вывод итогов

Регрессионная статистика	
Множественный R	0,911807
R-квадрат	0,831391
Нормированный R-квадрат	0,800735
Стандартная ошибка	0,029112
Наблюдения	14

Таблица 4.76

Дисперсионный анализ

	df	SS	MS	F	Значимость F
Регрессия	2	0,04597	0,022985	27,1199	5,6E-05
Остаток	11	0,009323	0,000848		
Итого	13	0,055293			

Таблица 4.77

	Коэффициенты	Стандартная ошибка	t-статистика	P-Значение	Нижнее 95%	Верхнее 95%
Y-пересечение	0,579286	0,007781	74,45239	3,19E-16	0,562161	0,596411
X ₁	0,041	0,009206	4,453543	0,000973	0,020737	0,061263
X ₃	0,054	0,009206	5,865642	0,000108	0,033737	0,074263

Такие же результаты были получены в программах STATGRAPHICS Centurion XV (табл. 4.78) и STATISTICA 6 (табл. 4.79).

Таблица 4.78

Результаты расчётов в программе STATGRAPHICS Centurion XV
по команде «Multiple Regression» с использованием метода
«Baskward Selection»

		<i>Standard</i>	<i>T</i>	
<i>Parameter</i>	<i>Estimate</i>	<i>Error</i>	<i>Statistic</i>	<i>P-Value</i>
CONSTANT	0,579286	0,00778062	74,4524	0,0000
X_1	0,041	0,00920615	4,45354	0,0010
X_3	0,054	0,00920615	5,86564	0,0001

Analysis of Variance

<i>Source</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Df</i>	<i>Mean Square</i>	<i>F-Ratio</i>	<i>P-Value</i>
<i>Model</i>	0,04597	2	0,022985	27,12	0,0001
<i>Residual</i>	0,00932286	11	0,000847532		
<i>Total (Corr.)</i>	0,0552929	13			

R -squared = 83,1391 percent

R -squared (adjusted for d.f.) = 80,0735 percent

Standard Error of Est. = 0,0291124

Mean absolute error = 0,0213265

Durbin-Watson statistic = 1,72276 ($P=0,3356$)

Lag 1 residual autocorrelation = -0,0246027

Таблица 4.79

Результаты расчётов в программе STATISTICA 6
по команде «Multiple Regression» с использованием метода
«Baskward stepwise»

<i>N=14</i>	Regression Summary for Dependent Variable: y (Spreadsheet1) $R = ,91180661$ $R^2 = ,83139129$ Adjusted $R^2 = ,80073516$ $F(2,11) = 27,120$ $p < ,00006$ Std.Error of estimate: ,02911					
	<i>Beta</i>	<i>Std.Err. of Beta</i>	<i>B</i>	<i>Std.Err. of B</i>	<i>t(4)</i>	<i>p-level</i>
<i>Intercept</i>			0,579286	0,007781	74,45239	0,000000
X_1	0,551378	0,123807	0,041000	0,009206	4,45354	0,000973
X_3	0,726205	0,123807	0,054000	0,009206	5,86564	0,000108

Из данных табл. 4.77-4.79 следует, что для результатов данного эксперимента коэффициенты b_0 и b_3 , определённые при классическом регрессионном анализе методом наименьших квадратов, такие же,

как при использовании метода РАМПЭ. Однако окончательное уравнение регрессии, помимо этих коэффициентов, содержит значимый коэффициент линейного влияния b_1 :

$$\hat{\sigma}_p = 0,58 + 0,041X_1 + 0,0540X_3.$$

Это уравнение имеет наилучшие статистические характеристики адекватности, в том числе более высокое значение нормированного коэффициента детерминации (0,801).

Применение классического регрессионного анализа к результатам эксперимента с натуральными значениями технологических факторов приводит к адекватному уравнению регрессии, отличающемуся по составу его параметров от уравнения с нормализованными значениями факторов (табл. 4.80-4.82) и имеющему наилучшие статистические характеристики адекватности экспериментальным данным:

«Нормированный R-квадрат» 0,875;

«Стандартная ошибка» 0,0230;

«F» - 31,42142.

Таблица 4.80

Вывод итогов

Регрессионная статистика	
Множественный R	0,950836
R-квадрат	0,90409
Нормированный R-квадрат	0,875317
Стандартная ошибка	0,023029
Наблюдения	14

Таблица 4.81

Дисперсионный анализ

	df	SS	MS	F	Значимость F
Регрессия	3	0,04999	0,016663	31,42142	2,11E-05
Остаток	10	0,005303	0,00053		
Итого	13	0,055293			

Таблица 4.82

	Коэффициенты	Стандартная ошибка	t-статистика	P-Значение	Нижние 95%	Верхние 95%
Y-пересечение	-9,55131	3,941828	-2,42307	0,035873	-18,3343	-9,55131
Z_3	0,113625	0,046466	2,445318	0,034533	0,010092	0,113625
Z_1^2	0,000844	0,000141	5,981197	0,000135	0,00053	0,000844
Z_3^2	-0,00032	0,000137	-2,32939	0,042094	-0,00062	-0,00032

Таким образом для практического применения в исследованной факторной области выбираем следующее уравнение регрессии с натуральными значениями технологических факторов:

$$\hat{\sigma}_p = -9,55 + 0,1136Z_3 + 0,0008Z_1^2 + 0,000320Z_3^2.$$

Пример 4.13

Задачами прикладного научного исследования являлось экспериментальное подтверждение наличия и определение формы связи показателя прочности при скалывании трёхслойной фанеры марки ФСФ после её вымачивания в воде в течение одного часа ($\sigma_{ск}$, МПа) со значениями трёх технологических факторов ($k = 3$):

расход клея на одну сторону берёзового шпона, г/м² (Z_1);

температура горячего прессования фанеры, °C (Z_2);

общая продолжительность горячего прессования фанеры, мин (Z_3).

Для выполнения данной задачи было решено провести эксперимент при его математическом планировании с целью получения первоначального уравнения регрессии первого порядка со свободным членом (b_0) в виде

$$\hat{\sigma}_{ск} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 \quad (p=7).$$

С физической точки зрения в регрессионных моделях не должна содержаться постоянная регрессии b_0 , так как при полном отсутствии клея ($Z_1 = 0$) пакет из древесного шпона будет иметь нулевое значение $\sigma_{ск}$. Присутствие же в модели постоянной регрессии b_0 предполагает возможность того, что в исследованной факторной области тренд зависимости показателя $\sigma_{ск}$ может быть направлен не в начало координат входных факторов.

С учётом возможности получения неадекватных уравнений регрессии первого порядка, исходя из ограниченности времени и финансовых средств, было решено применить план Бокса-Уилсона с дополнительными шестью опытами в «звёздных точках» ($2k = 2 \cdot 3 = 6$) и одним опытом в центре плана ($n_0 = 1$).

Так как в эксперименте исследуется влияние трёх факторов ($k < 5$), то ядром композиционного плана Бокса-Уилсона будет план полного факторного эксперимента первого порядка 2^3 , а общее число опытов (N) будет равно [19]:

$$N = 2^k + 2k + n_0 = 2^3 + 2 \cdot 3 + 1 = 8 + 6 + 1 = 15.$$

Величину «звёздного плеча» λ для выбранного плана эксперимента вычислим по соотношению [19]

$$\lambda^4 + 2^k \lambda^2 - 2^{(k-1)} (k + 0,5n_0) = \lambda^4 + 2^3 \lambda^2 - 2^{(3-1)} (3 + 0,5 \cdot 1) = 0,$$

получив значение $\lambda^2 = 1,477$ и $\lambda = 1,215$.

Исходя из технологических соображений зададим минимальные значения входных факторов исследуемого факторного пространства, которым соответствуют нормализованные значениями для всех входных факторов $-1,215$ ($-\lambda$), и максимальные значения для нормализованных значений факторов $1,215$ (λ).

Заданные и расчётные параметры факторного пространства сведём в табл. 4.83.

Таблица 4.83

Параметры факторного пространства эксперимента

Параметр	Z_1 , г/м ²	Z_2 , °C	Z_3 , мин
Заданное значение фактора в центре факторного пространства, Z_j^0	90	145	12
Расчётный шаг варьирования фактора, ΔZ_j	24,69	12,34	3,29
Расчётное значение фактора при $x_j = +1$	114,69	157,35	15,29
Расчётное значение фактора при $x_j = -1$	65,31	132,65	8,71
Заданное значение фактора при $\lambda = +1,215$	120	160	16
Заданное значение фактора при $\lambda = -1,215$	60	130	8
* Отклонение от центра плана натурального значения фактора при его единичном нормализованном значении, которое рассчитывается по формуле $\Delta Z_j = (Z_j^\lambda - Z_j^0) / \lambda$.			

Построение плана эксперимента начнём с построения его ядра – плана полного факторного эксперимента первого порядка 2^3 , заполнив по известным принципам математической комбинаторики первые восемь строк в плане-матрице эксперимента с семью столбцами для параметров регрессии (табл. 4.84).

Абсолютная предельная погрешность при изменениях расхода клея по использованной методике его нанесения на берёзовый шпон (намазыванием) составляла 2 г/м², а температуры греющих плит пресса – 5 °C. Поэтому при эксперименте натуральные значения входных факторов Z_1 и Z_2 в некоторых опытах отличались от расчётных. Следовательно, матрица плана реального эксперимента (табл. 4.85) для нормализованных и натуральных значений входных факторов не обладает ортогональностью и D-оптимальностью.

Таблица 4.84

План эксперимента 2^3

Номер опыта, i	Нормализованные значения факторов, x_i					
	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
2	-1	+1	+1	-1	-1	+1
3	+1	-1	+1	-1	+1	-1
4	-1	-1	+1	+1	-1	-1
5	+1	+1	-1	+1	-1	-1
6	-1	+1	-1	-1	+1	-1
7	+1	-1	-1	-1	-1	+1
8	-1	-1	-1	+1	+1	+1

Таблица 4.85

Результаты эксперимента с натуральными значениями факторов

Номер опыта, i	$Z_1,$ $г/м^2$	$Z_2,$ $^{\circ}C$	$Z_3,$ мин	$Z_1Z_3,$ $г/м^2 \cdot ^{\circ}C$	$Z_1Z_2,$ $г/м^2 \cdot мин$	$Z_2Z_3,$ $^{\circ}C \cdot мин$	$\sigma_{ск},$ МПа
1	114	155	15,3	17670	1744,2	2371,5	3,66
2	66	155	15,3	10230	1009,8	2371,5	2,17
3	114	135	15,3	15390	1744,2	2065,5	0,00
4	66	135	15,3	8910	1009,8	2065,5	0,00
5	114	155	8,7	17670	991,8	1348,5	3,51
6	66	155	8,7	10230	574,2	1348,5	2,59
7	114	135	8,7	15390	991,8	1174,5	0,00
8	66	135	8,7	8910	574,2	1174,5	0,00

Поэтому к результатам эксперимента для определения параметров уравнения регрессии был применён не метод РМППЭ, а метод наименьших квадратов, используемый в классическом регрессионном анализе.

Учитывая, что в программе Excel с инструментом анализа «Регрессия» для регрессионных моделей без свободного члена результаты расчётов являются ошибочными, расчёты были выполнены в программах STATGRAPHICS Centurion XV по команде «Multiple Regression» с использованием метода «Baskward Selection» (табл. 4.86) и STATISTICA 6 по команде «Multiple Regression» с использованием метода «Baskward stepwise» (табл. 4.87).

Таблица 4.86

Результаты расчётов в программе STATGRAPHICS Centurion XV по команде «Multiple Regression» с использованием метода «Baskward Selection»

		Standard	T	
Parameter	Estimate	Error	Statistic	P-Value
Z_1	-0,220087	0,0109949	-20,0171	0,0000
Z_1Z_2	0,00163027	0,0000756475	21,5509	0,0000

Analysis of Variance

Source	Sum of Squares	Df	Mean Square	F-Ratio	P-Value
Model	36,8944	2	18,4472	464,44	0,0000
Residual	0,238314	6	0,039719		
Total	37,1327	8			

R-squared = 99,3582 percent

R-squared (adjusted for d.f.) = 99,2512 percent

Standard Error of Est. = 0,199296

Mean absolute error = 0,0900156

Durbin-Watson statistic = 2,75604

Lag 1 residual autocorrelation = -0,38484

Из данных табл. 4.86, 4.87 следует, что результаты экспериментов с доверительной вероятностью 0,95 с наибольшей точностью адекватно описываются уравнением регрессии

$$\hat{\sigma}_{ск} = -0,2201Z_1 - 0,001630Z_1Z_2.$$

С целью получения адекватного уравнения регрессии для более широкой факторной области были проведены дополнительно шесть опытов в «звёздных точках» и один опыт в центре плана (табл. 4.88).

Таблица 4.87

Результаты расчётов в программе STATISTICA 6
по команде «Multiple Regression» с использованием метода
«Baskward stepwise»

N=8	Regression Summary for Dependent Variable: y (Spreadsheet1) R= ,99678588 R?= ,99358210 Adjusted R?= ,99144280 F(2,6)=464,44 p<,00000 Std.Error of estimate: ,19930					
	Beta	Std.Err. of Beta	B	Std.Err. of B	t(4)	p-level
Z ₁	-9,51526	0,475356	-0,220087	0,010995	-20,0171	0,000001
Z ₁ Z ₂	10,24437	0,475356	0,001630	0,000076	21,5509	0,000001

Таблица 4.88

План Бокса-Уилсона с натуральными значениями входных факторов
и результаты эксперимента

Но- мер опы- та, i	Z ₁ , г/м ²	Z ₂ , °C	Z ₃ , мин	Z ₁ Z ₂ , г/м ² · °C	Z ₁ Z ₃ , г/м ² · мин	Z ₂ Z ₃ , °C· мин	Z ₁ ² , (г/м ²) ²	Z ₂ ² , (°C) ²	Z ₃ , (мин) ²	σ _{ск} , (МПа)
1	114	155	15,3	17670	1744,2	2371,5	12996	24025	234,09	3,66
2	66	155	15,3	10230	1009,8	2371,5	4356	24025	234,09	2,17
3	114	135	15,3	15390	1744,2	2065,5	12996	18225	234,09	0,00
4	66	135	15,3	8910	1009,8	2065,5	4356	18225	234,09	0,00
5	114	155	8,7	17670	991,8	1348,5	12996	24025	75,69	3,51
6	66	155	8,7	10230	574,2	1348,5	4356	24025	75,69	2,59
7	114	135	8,7	15390	991,8	1174,5	12996	18225	75,69	0,00
8	66	135	8,7	8910	574,2	1174,5	4356	18225	75,69	0,00
9	120	145	12	17400	1440	1740	14400	21025	144	3,34
10	60	145	12	8700	720	1740	3600	21025	144	1,69
11	90	160	12	14400	1080	1920	8100	25600	144	2,82
12	90	130	12	11700	1080	1560	8100	16900	144	1,49
13	90	145	16	13050	1440	2320	8100	21025	256	3,48
14	90	145	8	13050	720	1160	8100	21025	64	2,42
15	90	145	12	13050	1080	1740	8100	21025	144	2,22

Для данного эксперимента с N = 15 можно получить уравнение
регрессии второго порядка со свободным членом (b₀) в виде

$$\hat{\sigma}_{ск} = b'_0 + b'_1 Z_1 + b'_2 Z_2 + b'_3 Z_3 + b'_{12} Z_1 Z_2 + b'_{13} Z_1 Z_3 + b'_{23} Z_2 Z_3 + \\ + b'_{11} Z_1^2 + b'_{22} Z_2^2 + b'_{33} Z_3^2 \quad (p=10).$$

Расчёты для классического регрессионного анализа были выпол-
нены в программах STATGRAPHICS Centurion XV по команде

«Multiple Regression» с использованием метода «Baskward Selection» (табл. 4.89) и STATISTICA 6 по команде «Multiple Regression» с использованием метода «Baskward stepwise» (табл. 4.90).

Таблица 4.89

Результаты расчётов в программе STATGRAPHICS Centurion XV по команде «Multiple Regression» с использованием метода «Baskward Selection»

		Standard	T	
Parameter	Estimate	Error	Statistic	P-Value
Z_1	-0,158069	0,0366226	-4,31615	0,0008
Z_1Z_2	0,00123854	0,000252074	4,91338	0,0003

Analysis of Variance

Source	Sum of Squares	Df	Mean Square	F-Ratio	P-Value
Model	75,4678	2	37,7339	56,10	0,0000
Residual	8,74428	13	0,672637		
Total	84,2121	15			

R-squared = 89,6164 percent

R-squared (adjusted for d.f.) = 88,8176 percent

Standard Error of Est. = 0,820144

Mean absolute error = 0,649919

Durbin-Watson statistic = 1,43707

Lag 1 residual autocorrelation = 0,27447

Из данных табл. 4.89, 4.90 следует, что в факторной области от $X_j = -\lambda$ до $X_j = \lambda$ с доверительной вероятностью 0,95 с наибольшей точностью адекватно описывает изменения $\sigma_{ск}$ следующее уравнение регрессии:

$$\hat{\sigma}_{ск} = -0,1581Z_1 + 0,001239Z_1Z_2.$$

По статистическим характеристикам адекватности («Нормированный R-квадрат», «Стандартная ошибка», «F») это уравнение регрессии уступает уравнению регрессии, полученному для факторной области от $X_j = -1$ до $X_j = 1$, и поэтому его можно применять, когда $-\lambda \leq X_j < -1$ и $1 < X_j \leq \lambda$.

Таблица 4.90

Результаты расчётов в программе STATISTICA 6
по команде «Multiple Regression» с использованием метода
«Baskward stepwise»

N=15	Regression Summary for Dependent Variable: y (Spreadsheet1) R= ,94665919 R?= ,89616363 Adjusted R?= ,88018880 F(2,13)=56,098 p<,00000 Std.Error of estimate: ,82014					
	Beta	Std.Err. of Beta	B	Std.Err. of B	t(4)	p-level
Z ₁	-6,16039	1,427287	-0,158069	0,036623	-4,31615	0,000838
Z ₁ Z ₂	7,01280	1,427287	0,001239	0,000252	4,91338	0,000283

4.3.4. Планирование эксперимента для изучения регрессионных зависимостей «состав смеси - свойство»

Если долю каждого компонента смеси (относительную, массовую, объёмную, мольную) обозначить x_i , а число компонентов в смеси q , то выполняются следующие соотношения

$$0 \leq x_i \leq 1 \text{ и } \sum_{i=1}^q x_i = 1.$$

При исследовании влияния на свойство смеси не всех компонентов ($i < q$) можно применять описанные методы математического планирования эксперимента в разделе 4.3.3. В противном случае используют специальные планы математического планирования эксперимента для изучения смесей [19,34].

При изучении зависимости свойств смеси только от соотношения её компонентов факторное пространство представляет собой правильный $(q-1)$ – мерный симплекс (геометрическую фигуру со сторонами, равными 1). Для двухкомпонентных систем ($q = 2$) симплекс – это прямая, состоящая из отрезков, равных доле компонентов. При $q = 3$ правильный симплекс – равносторонний треугольник со стороной, равной 1. Каждая точка в площади треугольника отвечает одному определённому составу трёхкомпонентной системы и, наоборот, каждый состав представляется одной определённой точкой. Вершины треугольника соответствуют однокомпонентному составу, стороны треугольника – двухкомпонентному составу.

Поверхности отклика для многокомпонентных смесей во многих случаях имеют очень сложный характер и для их описания пригодны

только полиномы высоких степеней, что требует проведения большого числа опытов в эксперименте.

Для сокращения числа опытов при изучении смесей разработаны специальные приёмы и планы экспериментов, среди которых популярными являются симплекс-решётчатые планы (планы Шеффе), симплекс-центроидные планы и др. Примеры построения таких планов эксперимента и алгоритмы анализа их результатов приведены в [19,34]. В книге Р.С.Пена [34] для исследования смесей продемонстрировано примерами построение планов эксперимента и проведение регрессионного анализа их результатов с использованием программы STATGRAPHICS.

4.3.5. Планирование промышленных экспериментов для получения регрессионных моделей объекта

При переходе от лабораторных условий к промышленным результаты исследований довольно часто плохо воспроизводятся в основном из-за резко увеличивающегося числа случайных факторов. Поэтому приходится продолжать эксперименты и при промышленном производстве продукции.

С целью уменьшения доли выпуска бракованной продукции при промышленных экспериментах применяют небольшие интервалы варьирования факторов по сравнению с лабораторными исследованиями. Планы промышленных экспериментов составляют таким образом, чтобы путём осторожного изменения факторов получить информацию об изменениях отклика объекта и при этом выпустить качественную продукцию.

Такой подход к планированию промышленных экспериментов был предложен Боксом и получил название "Метод эволюционного планирования эксперимента" (ЭВОП) или адаптационной оптимизации. По этому методу факторы варьируют на двух уровнях, реализуя несколько блоков (циклов) опытов, где блок – это обычно дробный факторный эксперимент с включением в него опыта в центре плана. При анализе результатов эксперимента обычно используют алгоритмы дисперсионного анализа. В промышленных экспериментах при большом числе исследуемых факторов эффекты их взаимодействия не учитывают, а находят в основном главные эффекты.

Познакомиться с алгоритмами метода ЭВОП и примерами можно в книгах [19, 39]. В программе STATISTICA 6 в разделе «Промышленная статистика (Industrial Statistic & Six Sigma)» с помощью

процедуры «Experimental Design» можно построить план промышленного эксперимента.

В заключение данной главы приведу мнение Н. Дрейпера и Г. Смита [40] относительно эффективности регрессионного анализа для классических и математических планов эксперимента.

Если регрессионный анализ проводится по данным «пассивного» эксперимента (т. е. по данным, которые получаются при обычном функционировании объекта, а не в результате специально спланированных экспериментов), то могут возникать некоторые проблемы.

Ошибка в модели может быть случайной, а оказаться следствием совместного влияния нескольких факторов, не содержащихся в регрессионном уравнении, а возможно, и неизмеряемых (скрытых) переменных. Ложный эффект некоторого фактора может провоцироваться скрытым фактором. Поскольку эта скрытая переменная (фактор) не измерялась, её изменения не регистрировались, то в дальнейшем они могут привести к тому, что предсказания по регрессионному уравнению станут ненадежными. Другой дефект данных «пассивного» эксперимента зачастую состоит в том, что наиболее существенные факторы изменяются в весьма узких пределах, вследствие чего отклики поддерживаются в определенных границах. Небольшая величина этих изменений может стать причиной того, что некоторые коэффициенты регрессии окажутся статистически незначимыми. Подобный вывод к тому же не удовлетворит и практиков, поскольку они из своего опыта знают, что эти переменные существенны. Другая проблема, возникающая при использовании данных «пассивного» эксперимента, состоит в том, что распространённая на практике стратегия управления объектами (например, если Z_1 повышается, то надо для компенсации снижать Z_2) зачастую вызывает значительные корреляции предикторов. Из-за этого невозможно понять, с Z_1 или Z_2 , или с теми и другими факторами связано изменение Y .

Тщательно спланированный эксперимент может избавить от этих неприятностей. Эффекты скрытых факторов могут быть рандомизированы, можно выбрать эффективные пределы изменения факторов и можно избежать корреляций между предикторами.

В тех случаях, когда планирование экспериментов невозможно, данные результатов классического плана эксперимента можно анализировать с помощью регрессионных методов. Однако надо иметь в виду, что при этом появляются дополнительные обстоятельства, благоприятствующие ошибочным заключениям.

По мнению этих авторов, для выбора «наилучшего» уравнения регрессии нет однозначной статистической процедуры. Субъективные суждения оказываются необходимой составной частью любого из предлагаемых статистических методов. При выборе «наилучшего» уравнения регрессии часто используют следующие статистические методы и критерии:

- метод всех возможных регрессий с использованием трёх критериев: R^2 , S^2 (дисперсия остатков) и критерий Маллоуза C_p ;
- метод наилучшего подмножества регрессий с применением критериев: R^2 , нормированный R^2 и C_p ;
- метод пошагового исключения предикторов;
- шаговый регрессионный метод;
- некоторые вариации предыдущих методов;
- гребневую регрессию и др.

В одной и той же задаче применение различных методов не обязательно приводит к выбору одинакового уравнения регрессии.

4.3.6. Контрольные вопросы и задания

1. Какой принцип положен в основу проведения регрессионного анализа свойств объекта с малоизученным механизмом его поведения?
2. Какие ограничения для факторов применяются при регрессионном анализе?
3. Какова последовательность этапов при выполнении регрессионного анализа?
4. Какие задачи решают при регрессионном анализе?
5. В чём заключается основное преимущество планов математического планирования эксперимента для регрессионного анализа по сравнению с планами для классического регрессионного анализа?
6. В каком случае число параметров уравнения регрессии может быть больше числа его коэффициентов регрессии?
7. По каким статистическим критериям можно выбирать «наилучшее» уравнение регрессии?
8. Приведите название единственного класса функций, который применяют в регрессионном анализе при математическом планировании эксперимента?

9. Рассчитайте натуральное значение продолжительности процесса в эксперименте (в минутах), если его нормализованное значение равно (-1), натуральное значение в центре факторной области продолжительности равно 2 ч, а шаг варьирования продолжительности равен 1 ч.

10. Рассчитайте нормализованное значение температуры процесса в эксперименте, равное 300 К, если минимальное значение температуры в эксперименте было равно 100 К, а максимальное 500 К.

РЕШЕНИЕ ОПТИМИЗАЦИОННЫХ ЗАДАЧ

5.1. Термины и определения

Оптимизационные задачи – это задачи поиска входных факторов (переменных, параметров), обеспечивающих наилучшие или заданные значения отклика (свойств, характеристик) объекта.

Необходимые элементы технического языка в области формулировки и решения оптимизационных задач представлены в табл. 5.1.

Таблица 5.1

Термины и определения

Термины	Определения
Отклик объекта	Свойство (характеристика) объекта
Входные факторы (переменные, параметры)	Факторы, влияющие на отклик объекта
Оптимизация	Поиск наилучшего или заданного отклика объекта
Критерий оптимизации	Целевая функция
Однокритериальная оптимизация	Поиск наилучшего или заданного отклика объекта по одному критерию оптимизации (одной целевой функции)
Многокритериальная оптимизация	Поиск наилучшего или заданного отклика объекта по нескольким критериям оптимизации (нескольким целевым функциям)
Однопараметрическая оптимизация	Поиск наилучшего или заданного отклика объекта, зависящего от изменений одного входного фактора (параметра, переменной)

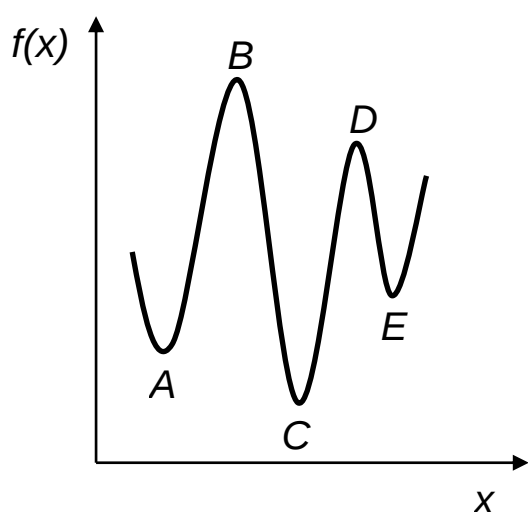
Продолжение табл. 5.1

Термины	Определения
Многопараметрическая оптимизация	Поиск наилучшего или заданного отклика объекта, зависящего от изменений нескольких входных факторов (параметров, переменных)
Оптимальное решение	Значения входных факторов, обеспечивающих получение наилучшего или заданного отклика объекта
Целевая функция (ЦФ)	Критерий оптимизации
Ограничения (ОГР)	Зависимости между входными факторами и их граничные значения
Граничные условия (ГРУ)	Область значений входных факторов (факторная область) при поиске оптимальных решений
Математическая модель задачи оптимизации	Совокупность целевых функций, ограничений и граничных условий
Детерминированные исходные данные	Известные исходные данные, которые в заданных граничных условиях не подчиняются законам случая
Случайные величины	Величины, которые в заданных граничных условиях подчиняются законам случая
Непрерывные величины	Величины, которые в заданных граничных условиях могут принимать любые значения
Дискретные величины	Величины, которые в заданных граничных условиях могут принимать только конкретные значения
Целочисленные величины	Величины, которые в заданных граничных условиях могут принимать только целые значения

Окончание табл. 5.1

Термины	Определения
Линейные зависимости	Зависимости, в которые входные факторы входят в первой степени и с ними выполняются только действия сложения и вычитания
Нелинейные зависимости	Зависимости, в которые входные факторы входят в первой степени и с ними выполняются не только действия сложения и вычитания, а также зависимости, в которые входные факторы входят не в первой степени
Линейная математическая модель задачи оптимизации	Модель, в которую входят только линейные зависимости
Нелинейная математическая модель задачи оптимизации	Модель, в которую входят не только линейные зависимости

Известно [41], что по определению признака экстремума (максимума или минимума) функция $f(x)$ имеет экстремум в точке x^* , если в достаточной близости от этой точки всем значениям x соответствуют значения $f(x)$ меньшие (большие), чем $f(x^*)$. Экстремум может быть как локальным, так и глобальным (рис. 5.1).

Рис. 5.1. Экстремумы функции $f(x)$

На рис. 5.1 видно, что функция $f(x)$ принимает максимальные значения в точках B и D . В указанной области изменения x значение функции в точке B больше значения в точке D . В таком случае говорят, что точка B является глобальным максимумом, а точка D — локальным. Аналогично функция $f(x)$ принимает минимальные значения в точках A , C , E , при этом значение функции в точке C является глобальным минимумом функции $f(x)$, а значения в точках A и E — глобальными минимумами.

При введении граничных условий типа $x \leq b$ наибольшее значение функции может находиться на границе в точке B ($x = b$). При этом величина $f(b)$ может не удовлетворять приведённому выше признаку экстремума (рис. 5.2). На рис. 5.2 часть плоскости, которая удовлетворяет неравенству $x \leq b$, затенена.

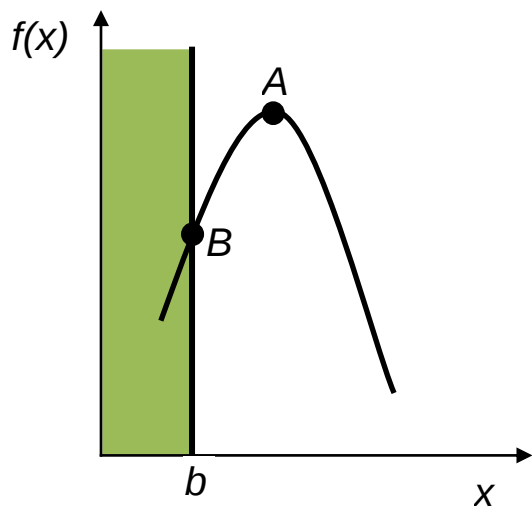


Рис. 5.2. Параметры функции $f(x)$:
 A – экстремум функции,
 B – оптимум функции при $x \leq b$

В таких случаях говорят, что при $x \leq b$ в точке B ($x = b$) находится оптимум (оптимальное значение) функции $f(x)$.

Наибольшее или наименьшее значение функции без учёта того, где находится такое значение, внутри заданного интервала или на его границе, называют оптимумом.

Оптимум – это более широкое понятие, чем экстремум. Если экстремум есть не у всех функций, то в практических задачах оптимум, как правило, есть всегда. Так же как и экстремумы, оптимумы могут быть локальными и глобальными.

Существующие методы решения оптимизационных задач не всегда дают возможность находить глобальные оптимумы. Если есть подозрение, что в заданном интервале $a \leq x \leq b$ целевая функция $f(x)$ может иметь несколько оптимумов, то этот интервал следует разбить на несколько интервалов, в каждом из них определить свои локальные оптимумы, а затем из всех локальных оптимумов выбрать глобальный. В таком случае задача нахождения глобального оптимума сводится к решению ряда задач, в которых ищется локальный оптимум.

Процесс решения оптимизационных задач может быть неформализованным и формализованным. Довольно часто человек принимает неформализованные решения, руководствуясь только своей логикой, опытом и интуицией. Никакой гарантии правильности неформализованных решений нет. Значительно большие гарантии правильности имеют формализованные решения, так как они основаны на научном подходе.

Для формализованных решений оптимизационных задач необходимо иметь критерий оптимизации (целевую функцию), т. е. желательное

значение отклика объекта. При этом возможны три вида критерия оптимизации:

- максимальное значение;
- минимальное значение;
- заданное значение.

Все методы формализованного решения оптимизационных задач можно разделить на три группы: аналитические, численные и экспериментальные.

Наиболее распространёнными оптимизационными задачами в прикладных научных исследованиях являются задачи оптимального планирования, оптимального управления технологическими процессами и оптимального проектирования.

Задачи оптимального планирования в большинстве случаев возникают при распределении ресурсов (сырья, работников, финансов) при оценке экономической эффективности производства. Например, такая задача может быть поставлена с целью оценки максимальной прибыли при производстве нескольких видов готовой продукции, получаемой из одного сырья.

Для управления технологическими процессами требуется знание сочетания значений технологических факторов, обеспечивающих наилучшее качество готовой продукции, минимальную себестоимость её изготовления или экологическое воздействие на окружающую среду. Для этих целей решают задачи оптимального управления технологическими процессами.

Задачи оптимального проектирования решают при разработке конструкций, машин, оборудования, например, при создании оборудования с минимальной массой при заданных технических характеристиках.

5.2. Последовательность работы при поиске и принятии оптимальных решений

При поиске оптимальных решений выполняют следующие этапы:

1. Содержательная постановка и формализация оптимизационной задачи.

2. Получение исходных данных и адекватной математической модели объекта.

3. Решение оптимизационной задачи.

4. Анализ решения и принятие оптимального решения.

5.2.1. Содержательная постановка и формализация оптимизационной задачи

Начинать выполнение данного этапа работы рекомендуется с анализа и формулировки основной цели решения оптимизационной задачи.

При постановке задачи необходимо после завершения работы дать ответ на один из следующих вопросов [41]:

1. Что будет, если ...?
2. Что необходимо сделать для того чтобы ...?

Для ответа на первый вопрос необходимо использовать **вариантный анализ**, а для ответа на второй - **решение по заказу**.

Вариантный анализ бывает следующих видов:

- параметрический;
- структурный;
- многокритериальный;
- анализ при условных исходных данных.

В программе Excel 2013 на вкладке «ДАННЫЕ» в группе «Работа с данными» для вариантного анализа предусмотрена надстройка анализа «Что если».

Параметрическим называется анализ, который заключается в решении задачи при различных значениях переменных. Под структурным анализом понимают решение задачи оптимизации при различной структуре ограничений. Многокритериальный анализ – это решение задачи по нескольким целевым функциям. Если исходные данные зависят от соблюдения дополнительных условий, то такой анализ называется анализом при условных исходных данных.

При **решениях по заказу** задают конкретные значения целевой функции, ограничений и граничных условий.

Успех в поиске оптимальных решений во многом зависит от грамотно (профессионально) проведённой работы по содержательной постановке оптимизационной задачи, заключающейся в удачном выборе и составлении целевой функции, обоснованном выборе и составлении ограничений, задании факторного пространства (граничных условий).

При формализации оптимизационной задачи составляют и анализируют её математическую модель, обязательно содержащую в своём составе хотя бы одну целевую функцию. При этом определяют следующие параметры модели:

- вид оптимизационной задачи (одно- или многокритериальная);
- критерии оптимизации и пределы, в которых могут находиться значения критериев оптимизации, ограничений и граничных условий.
- вид значений переменных x_j (детерминированные или случайные, непрерывные или дискретные величины);
- вид отклика объекта Y (непрерывная или дискретная величина);
- вид математических зависимостей целевой функции и ограничений (линейные или нелинейные).

В математической модели задачи оптимизации назначения целевой функции (F), представляющей собой математическую зависимость отклика объекта от значений входных факторов, записывают символами:

$\max$ (максимизация);
 $\min$ (минимизация);
 $Const$ (заданное значение).

Математическая модель оптимизационной задачи представляется в следующем виде:

$$\left. \begin{array}{l} F(x_j) \rightarrow \max (\min, Const) \\ g_i(x_j) \leq (= ; \geq) b_i \\ d_i \leq x_i \leq D_i \end{array} \right\} ,$$

где $F(x_j)$ – целевая функция; x_j – переменные (входные факторы, параметры); $g_i(x_j)$ – левые части ограничений (математические зависимости); b_i – правые части ограничений (числа); d_j и D_j (числа) – соответственно левая и правая границы области допустимых значений переменных x_j (границы факторной области); $i=1...m, j=1...n$.

Ограничения g_i могут быть в форме равенств или неравенств, переменные x_j – непрерывные или дискретные (в том числе целочисленные).

Для некоторых оптимизационных задач в её математической модели могут отсутствовать ограничения и граничные условия. Такие задачи называют задачами **безусловной оптимизации**. *Задача безусловной оптимизации* представляет собой поиск оптимума целевой функции без всяких дополнительных условий (ограничений и граничных условий). Математическая модель такой задачи представляется только целевой функцией:

$$F(x_i) \rightarrow \max (\min, Const).$$

Для задачи **условной оптимизации** в математической модели обязательно присутствуют условия в виде ограничений и (или) граничных условий, например:

$$\left. \begin{array}{l} F(x_j) \rightarrow \max(\min, \text{Const}) \\ g_i(x_j) \leq (= ; \geq) b_i \\ d_i \leq x_i \leq D_i \end{array} \right\} ,$$

$$\left. \begin{array}{l} F(x_j) \rightarrow \max(\min, \text{Const}) \\ g_i(x_j) \leq (= ; \geq) b_i \end{array} \right\} ,$$

$$\left. \begin{array}{l} F(x_j) \rightarrow \max(\min, \text{Const}) \\ d_i \leq x_i \leq D_i \end{array} \right\} .$$

После составления математической модели оптимизационной задачи необходимо провести её анализ.

Важной характеристикой математической модели задачи оптимизации является её размерность, определяемая числом переменных n и ограничений m . От соотношения чисел n и m зависит существование решения оптимизационной задачи (табл. 5.2).

Таблица 5.2

Наличие решений оптимизационных задач

Соотношение n и m	Вид ограничений	Наличие решения	Примеры [41]
$n < m$	Уравнения	Нет решения	$x_1 + 2 = 5$ $x_1 - 8 = 15$ $n = 1; m = 2$
	Неравенства	Множество решений	$x_1 \leq 5$
$n = m$	Линейно-независимые уравнения	Единственное решение	$x_1 + x_2 = 5$ $x_1 - x_2 = 1$ $n = 2; m = 2$
	Линейно-зависимые уравнения	Нет решения	$x_1 + x_2 = 5$ $2x_1 + 2x_2 = 10$ $n = 2; m = 2$
	Неравенства	Множество решений	$x_1 \leq 5$
$n \geq m$	Уравнения	Множество решений	$x_1 + x_2 = 5$ $n = 2; m = 1$
	Неравенства	Множество решений	$x_1 \leq 5$

Задача оптимизации имеет оптимальное решение, если существует **несколько допустимых решений**. *Допустимым решением* называется решение, удовлетворяющее всем ограничениям и граничным условиям.

Наличие у оптимизационной задачи нескольких допустимых решений *имеется всегда*, если выполняется соотношение $n > m$ или когда все ограничения являются неравенствами.

В зависимости от параметров математической модели оптимизационной задачи проводят её классификацию для выбора метода решения. Сочетание различных элементов модели образует различные классы задач оптимизации (табл. 5.3), которые требуют разных методов решения [27,41-44].

При классификации оптимизационных задач их подразделяют на задачи:

- линейного программирования;
- нелинейного программирования;
- целочисленного программирования;
- стохастического программирования;
- и др.

Таблица 5.3

Общая классификация задач оптимизации

Характеристика исходных данных	Характеристика переменных	Характеристика целевой функции	Характеристика ограничений	Классы задач оптимизации
Детерминированные	Непрерывные	Линейная (одна)	Линейные (все)	Линейное программирование
Детерминированные	Целочисленные	Линейная (одна)	Линейные (все)	Линейное целочисленное программирование
Детерминированные	Непрерывные	Линейная (несколько)	Линейные (все)	Многокритериальное линейное программирование
Детерминированные	Непрерывные	Нелинейная (одна)	Линейные или нелинейные	Нелинейное программирование
Детерминированные	Двоичные (булевы)	Линейная (одна)	Линейные	Булево программирование
Детерминированные	Целочисленные	Нелинейная (одна)	Нелинейные или линейные	Нелинейного целочисленного программирование

Окончание табл. 5.3

Характеристика исходных данных	Характеристика переменных	Характеристика целевой функции	Характеристика ограничений	Классы задач оптимизации
Случайные	Непрерывные	Линейная (одна)	Линейные (все)	Линейное стохастическое программирование

Задачи линейного программирования

Математическая модель задачи линейного программирования (ЛП) записывается следующим образом [41]:

$$\left. \begin{aligned} F(x_j) &= \sum_{j=1}^n c_j x_j \rightarrow \max (\min, \text{Const}) \\ g_i(x_j) &= \sum_{j=1}^n c_{ij} x_j \leq (= ; \geq) b_i \\ d_j &\leq x_j \leq D_j \end{aligned} \right\} .$$

Задачи нелинейного программирования

К задачам нелинейного программирования (НЛП) относят такие оптимизационные задачи, в которых целевая функция или одно из ограничений являются нелинейными.

Задачи дискретного программирования

Под дискретным программированием понимают поиск такого оптимального решения, в котором переменные могут принимать не любые значения, а только те, которые входят в заранее заданный набор допустимых значений, в том числе целочисленных и нецелочисленных.

Задачи оптимизации, в которых все или некоторые (одна) переменные принимают целые значения, называются задачами целочисленного программирования. В том случае, когда ограничения и целевая функция представляют собой линейные зависимости, задачу называют задачей линейного целочисленного программирования. В противном случае задача, в которой хотя бы одна из этих зависимостей будет нелинейной, относится к задачам нелинейного целочисленного программирования.

Математическая модель задачи целочисленного программирования имеет следующий вид:

$$\left. \begin{array}{l} F(x_j) \rightarrow \max (\min, \text{Const}) \\ g_i(x_j) \leq (= ; \geq) b_i \\ d_j \leq x_j \leq D_j \\ x_j - \text{целое} \end{array} \right\} .$$

Задачи стохастического программирования

Достаточно часто точных (детерминированных) значений параметров оптимизационной задачи не существуют, так как эти величины являются случайными. Задача оптимизации, в которую входят случайные величины, называется задачей стохастического программирования.

Задачи динамического программирования

Оптимизационные задачи, в которых не учитываются изменения оптимизируемых параметров во времени, называются статичными. Однако есть задачи оптимизации, в которых необходимо учитывать изменения их параметров во времени (например, возраст оборудования и связанное с ним количество простоев). Эти параметры могут изменяться непрерывно или дискретно, от этапа к этапу. Оптимизационные задачи с такого рода параметрами относятся к задачам динамического программирования. Для их решения разработан специальный пошаговый математический аппарат.

5.2.2. Получение исходных данных и адекватной математической модели объекта

Если исходных данных для решения оптимизационных задач нет, то их получают из результатов наблюдений за объектом или экспериментов. По полученным исходным данным составляется математическая модель объекта.

Математическую модель объекта во многих случаях представляют в виде количественной регрессионной зависимости откликов (свойств) изучаемого объекта от значений входных факторов, влияющих на эти свойства.

Чтобы математическая модель была адекватной и успешно применялась на практике для решения оптимизационных задач необходимо выполнить три правила, которые, по мнению древних, являются признаком мудрости. Эти правила применительно к задачам математического моделирования формулируются так [42]:

- учитывать главные свойства объекта;
- пренебрегать его второстепенными свойствами;
- уметь отделить главные свойства от второстепенных.

Для ранжирования входных факторов на главные и второстепенные широко применяются планы отсеивающих экспериментов [19,38], например, планы Плэккета-Бермана.

Помочь в ранжировании входных факторов могут статистические методы анализа: корреляционный, дисперсионный, регрессионный, факторный и др.

При анализе математической модели оптимизационной задачи для проведения классификации задачи и обоснованного выбора метода её решения определяют существование её решения (табл. 5.2), характеристики исходных данных, входных факторов, целевой функции и ограничений (табл. 5.3).

5.2.3. Решение оптимизационных задач

Оптимизационные задачи можно решать аналитическими, графическими, численными и экспериментальными методами.

К *аналитическим методам* относятся дифференциальное исчисление, метод множителей Лагранжа, вариационное исчисление и методы, основанные на принципе максимума Л.С. Понтрягина. Эти методы имеют ограниченное применение и используются при решении простых задач [27].

Дифференциальное исчисление основано на нахождении частных производных целевой функции по каждой переменной. Эти частные производные приравниваются нулю, а полученная система уравнений решается аналитическими или численными методами. Полученные значения переменных будут соответствовать оптимальным значениям функции. Ограничивают применение этого метода оптимизации условия непрерывности и дифференцируемости функции и использование небольшого числа аргументов. Ограничения при этом методе не учитываются.

Метод множителей Лагранжа применяют для решения оптимизационных задач, в которых целевая функция соответствует тем же

условиям, что и при дифференциальном исчислении, но при использовании ограничений типа равенств.

При вариационном исчислении целевая функция также должна быть непрерывная и дифференцируемая, при этом допускаются ограничения в виде равенств и неравенств [27].

Графические методы обычно применяют для двухпараметрических задач оптимизации ($n = 2$). В этих методах поиск оптимальных решений проводят визуально по графику или поверхности целевой функции с учётом ограничений и граничных условий.

В основе *численных методов* решения задач оптимизации лежат различные алгоритмы математических вычислений оптимальных параметров целевой функции с учётом ограничений и граничных условий.

При *экспериментальных методах* поиска оптимумов отклика объекта применяют специальные методы математического планирования и поэтапного проведения эксперимента.

5.2.3.1. Графические, аналитические и численные методы решения оптимизационных задач

Для каждого класса задач оптимизации существует признанный набор графических, аналитических и численных методов решения оптимизационных задач.

Методы решения оптимизационных задач линейного программирования

Для решения оптимизационных задач линейного программирования можно применять аналитические и графические методы [41] и их сочетание (графоаналитический метод [27, 44]).

Рассмотрим решение двухпараметрической задачи ($n = 2$) линейного программирования, описанной в книге [41], графоаналитическим методом.

Как известно, уравнение прямой с двумя непрерывными переменными x_1 и x_2 можно представить как

$$ax_1 + ax_2 = b. \quad (5.1)$$

Построим прямую

$$2x_1 + x_2 = 2. \quad (5.2)$$

Для удобства построения графика этой прямой запишем это уравнение в виде:

$$x_1 + x_2/2 = 1. \quad (5.3)$$

При такой форме записи в знаменателе показаны отрезки, которые отсекает прямая (5.3) на осях координат, что показано на рис. 5.3.

Если от уравнения (5.1) перейти к выражению

$$2x_1 + x_2 \leq 2, \quad (5.4)$$

то его можно представить графически, как это показано на рис. 5.4.

Из приведённых рисунков видно, что если линейное уравнение с двумя неизвестными представляет собой прямую линию, то линейное неравенство – полуплоскость, не включающая эту линию.

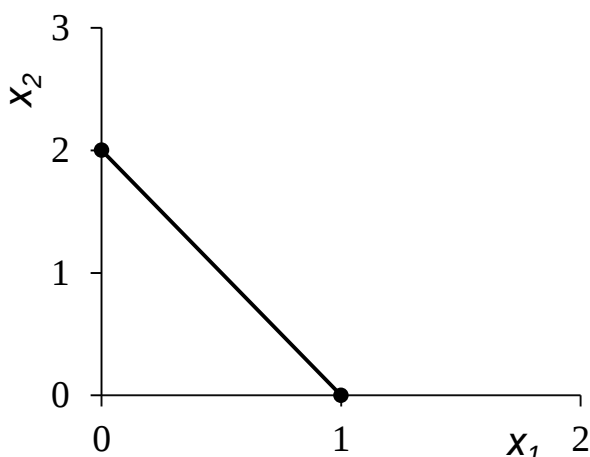


Рис. 5.3

На рис. 5.4 затенена часть плоскости, которая удовлетворяет неравенству $x_1 + x_2/2 < 1$. Координаты всех точек, принадлежащих белой части плоскости, имеют такие значения x_1 и x_2 , которые не удовлетворяют этому неравенству. Затенённая часть плоскости совместно с прямой является областью допустимых решений (ОДР) для выражения $2x_1 + x_2 \leq 2$.

Рассмотрим в качестве ограничений следующую систему математических выражений:

$$\left. \begin{aligned} x_1 + 4x_2 &\leq 14 & (a) \\ 3x_1 + 4x_2 &\leq 18 & (б) \\ 6x_1 + 2x_2 &\leq 27 & (в) \end{aligned} \right\}$$

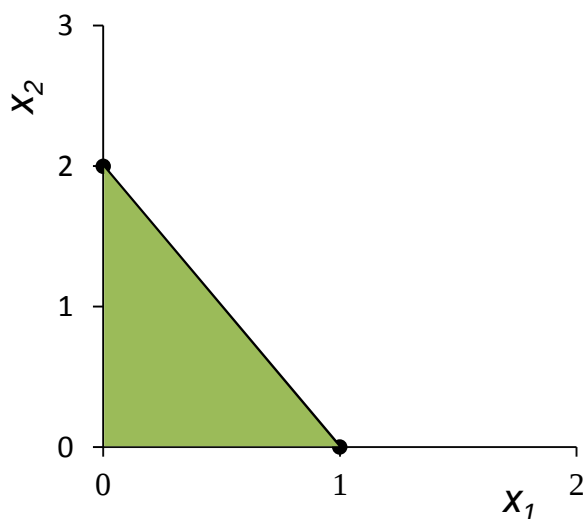


Рис. 5.4

Графики прямых (равенств) этой системы представлены на рис. 5.5, из которых следует, что решением данной системы являются координаты всех точек,

принадлежащих ОДР, т.е. пятиугольнику $ABCDO$. Поскольку в ОДР бесчисленное множество точек, значит, рассматриваемая система имеет бесчисленное множество допустимых решений и среди них может быть найдено оптимальное решение.

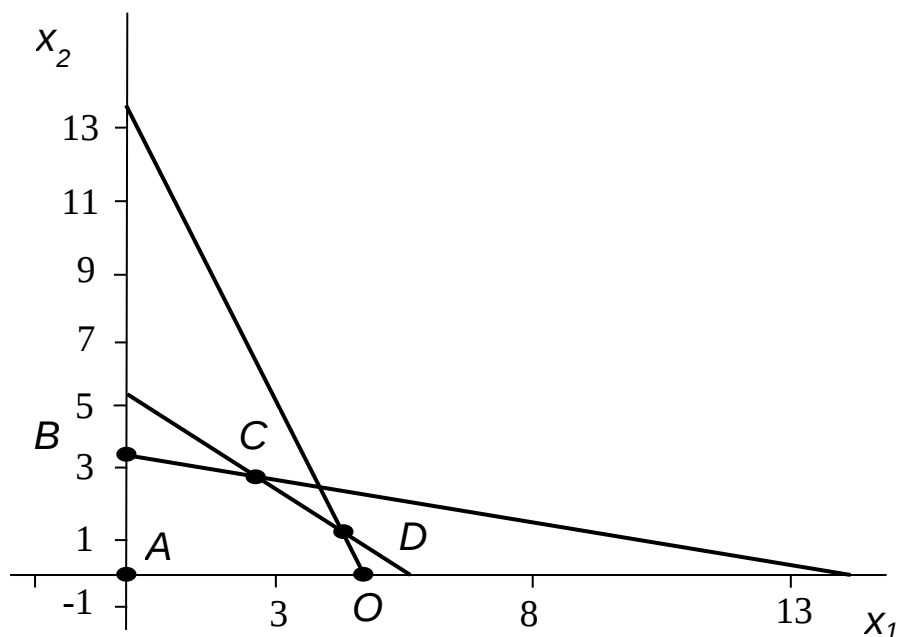


Рис. 5.5

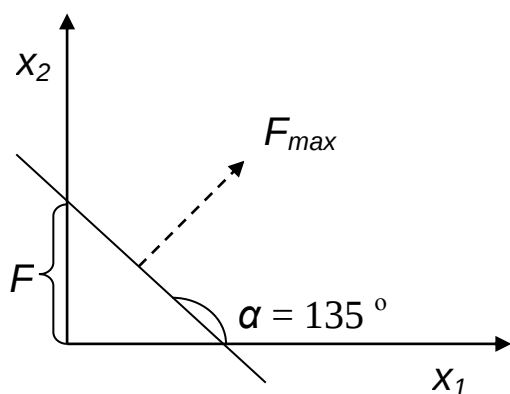


Рис. 5.6

Допустим, нужно найти оптимальное решение при назначении на максимум следующей целевой функции с непрерывными переменными x_1 и x_2 :

$$F = x_1 + x_2 \rightarrow \max. \quad (5.6)$$

График этой целевой функции в форме уравнения прямой $x_2 = F - x_1$ с углом наклона α , равном 135° ($\operatorname{tg} \alpha = -1$), представлен на рис 5.6.

При этом величина F равна отрезку, отсекаемому этой прямой на оси ординат.

В соответствии с целевой функцией (5.6) при увеличении значений x_1 и x_2 величина F будет возрастать. Направление роста целевой функции показано на рис. 5.7 пунктирной стрелкой.

Совместим теперь ОДР, изображённую на рис. 5.5, с линией целевой функции, построенной на рис. 5.6, как это показано на рис. 5.7.

Поскольку требуется найти оптимальное решение, при котором целевая функция стремится к максимуму, будем перемещать график целевой функции в направлении увеличения F . Величина F увеличивается при перемещении линии целевой функции от точки $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow O \rightarrow D$. Следовательно, оптимальным решением задачи будут координаты точки

D , равные x_1^* и x_2^* , так как в этой точке достигается максимальное значение целевой функции F^* .

Координаты вершины D и оптимальное значение F^* можно определить визуально по данным рис. 5.7 (графически), но более точно это можно сделать математическими расчётами (аналитически).

Так, координатами вершины A являются значения $x_1 = 0$ и $x_2 = 0$, а

значение F в этой точке равно нулю ($F = 0 + 0 = 0$).

Координатами вершины B являются значения $x_1 = 0$ и $x_2 = 3,5$ (определённое по уравнению a). Значение F в этой точке равно 3,5 ($F = 0 + 3,5 = 3,5$).

Точка C является общей точкой прямых a и b и её координаты являются решением системы уравнений этих прямых ($x_1 = 2$; $x_2 = 3$). Значение F в этой точке равно 5 ($F = 2 + 3 = 5$). Аналогичным образом были рассчитаны координаты точек D и O и соответствующие им значения целевой функции (табл. 5.4).

Таблица 5.4

Параметры оптимальных машин

Значения	Вершины пятиугольника				
	A	B	C	D	O
x_1	0	0	2	4	0
x_2	0	3,5	3	1,5	4,5
F	0	3,5	5	5,5	4,5

Из данных табл. 5.4 следует, что максимальное значение целевой функции достигается в вершине D (5,5) при оптимальных значениях $x_1 = 4$ и $x_2 = 1,5$.

Рассмотренный пример подтверждает важный вывод [41]: **одним из оптимальных решений оптимизационной задачи линейного программирования являются координаты вершины ОДР.**

На этом выводе базируется и самый популярный численный метод решения оптимизационных задач линейного программирования – *симплексный метод* (симплекс-метод).

В геометрии симплексом называют многогранник, имеющий $k+1$ вершин. Так, при $k = 2$ симплексом будет треугольник, при $k = 3$ – четырёхгранник и т. д. С учётом этого понятия численный метод решения оптимизационной задачи линейного программирования называют симплекс-методом. Идея симплексного метода заключается в последовательном переборе вершин, в одной из которых и находится оптимальное решение. Симплекс-метод позволяет найти оптимальное решение *только в вершинах ОДР*.

В симплекс-методе решения оптимизационных задач линейного программирования разработан специальный алгоритм направленного перебора вершин. Этот алгоритм обеспечивает переход от одной вершины к другой в таком направлении, при котором значение целевой функции от вершины к вершине улучшается. Вычисления, обеспечивающие определение значения целевой функции и переменных в одной вершине, называются итерацией.

Порядок выполнения симплекс-метода заключается в следующем:
найти вершины ОДР, как точки пересечения графиков линейных функций левой части ограничений;

последовательно определить значения целевой функции в вершинах ОДР;

принять за оптимальную вершину координаты вершины ОДР, в которой целевая функция приобретает оптимальное значение.

Принять за оптимальное решение значения переменных (координаты оптимальной вершины), в которых целевая функция достигает оптимальной величины.

Для решения транспортных оптимизационных задач линейного программирования может быть использован *метод потенциалов* [43, 44], с алгоритмами которого и практическими примерами применения программы MS Excel можно познакомиться в книгах [27, 42, 43].

Методы решения оптимизационных задач нелинейного программирования

Моноמודальные одно-, двух и трёхпараметрические задачи нелинейного программирования безусловной оптимизации обычно решают аналитическим методом дифференциального исчисления [27].

Для решения двухпараметрической задачи нелинейного программирования, когда целевая функция (уравнение регрессии) является полиномом второго порядка, с целью определения количества и вида оптимумов и области оптимальных решений можно проводить исследования поверхности ЦФ в пределах граничных условий входных факторов. Для этого переходят от полинома второго порядка к стандартному каноническому уравнению [19, 34].

Первый этап канонического преобразования – перенос начала координат в особую точку поверхности отклика y – центр поверхности. Координаты центра поверхности S определяются решением следующей системы уравнений:

$$\left. \begin{array}{l} dy/dx_1 = 0 \\ dy/dx_2 = 0 \\ \\ dy/dx_k = 0 \end{array} \right\}$$

Если поверхность отклика имеет центр, то в него переносят начало координат. При этом в уравнении поверхности исчезают члены, содержащие линейные эффекты факторов и изменяется величина свободного члена.

Второй этап канонического преобразования – это поворот координатных осей в новом центре таким образом, чтобы в уравнении поверхности исчезли члены с эффектами взаимодействия факторов. После завершения канонических преобразований получают стандартное каноническое уравнение поверхности следующего вида [19]:

$$\hat{y} - y_s = Y = \lambda_{11}G_1^2 + \lambda_{22}G_2^2 + \dots + \lambda_{jj}G_j^2 + \dots + \lambda_{kk}G_k^2,$$

где $\hat{y}$ – значения ЦФ, рассчитанные по уравнению регрессии, y_s – значение ЦФ в новом центре поверхности;

$\lambda_{11}, \lambda_{22}, \dots, \lambda_{jj}, \dots, \lambda_{kk}$ – коэффициенты канонической формы уравнения регрессии;

$G_1, G_2, \dots, G_j, \dots, G_k$ – канонические переменные, являющиеся функциями факторов x_j .

Поверхности полиномов второго порядка классифицируют по их каноническим формам следующим образом [19]:

1. **Эллиптический параболоид** (рис. 5.8 и 5.9), если все коэффициенты λ_{jj} имеют одинаковые знаки: все знаки положительные – поверхность имеет один глобальный минимум; все знаки отрицательные – поверхность имеет один глобальный максимум.

2. **Гиперболический параболоид («седло»)** с «мини-максом» в центре (рис. 5.10 и 5.11), если коэффициенты λ_{jj} имеют разные знаки: поверхность имеет два глобальных максимума и два глобальных минимума.

3. **Возрастающее возвышение («гребень»)** (рис. 5.12), если один или несколько коэффициентов λ_{jj} (*но не все!*) близки к нулю: поверхность может иметь большое число глобальных максимумов и минимумов.

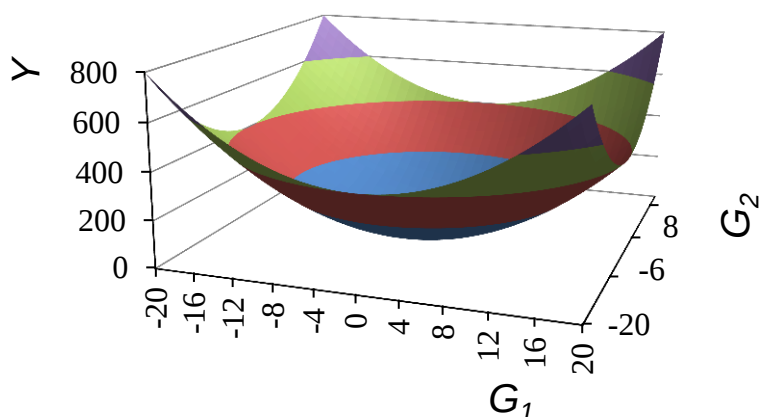


Рис. 5.8. Эллиптический параболоид при всех положительных $\lambda_{jj} = 1$

Для решения задач безусловной однопараметрической оптимизации нелинейного программирования с большим числом параметров применяют различные аналитические и численные методы:

- методы исключения интервалов;
- методы полиномиальной аппроксимации;
- методы с использованием производных;
- и др.

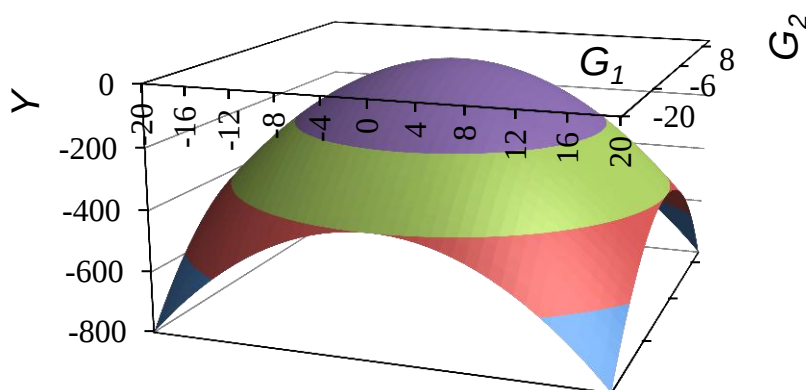


Рис. 5.9. Эллиптический параболоид при всех отрицательных $\lambda_{jj} = -1$

Задачи безусловной нелинейной многопараметрической оптимизации решают:

методами прямого поиска (эвристические и теоретические методы);
градиентными методами (простейший градиентный метод, метод наискорейшего спуска, метод Ньютона).

Для решения оптимизационных задач нелинейной условной многопараметрической оптимизации применяют методы:

штрафных санкций;
прямого поиска;
линеаризации.

Познакомиться с алгоритмами, используемыми в этих методах, и примерами их применения для практических целей можно в книгах [27, 41-44].

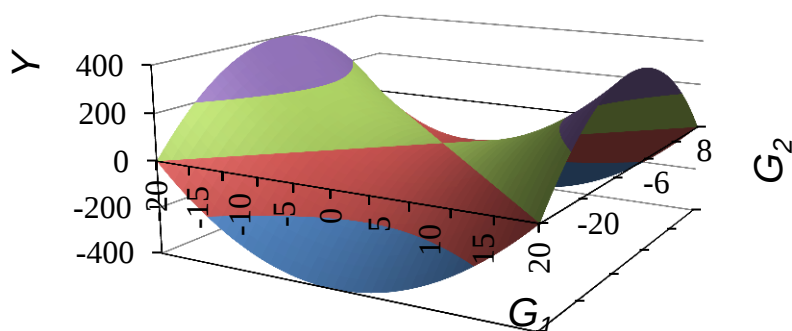


Рис. 5.10. Гиперболический параболоид («седло») при положительном знаке $\lambda_{11} = 1$ и отрицательном знаке $\lambda_{22} = -1$

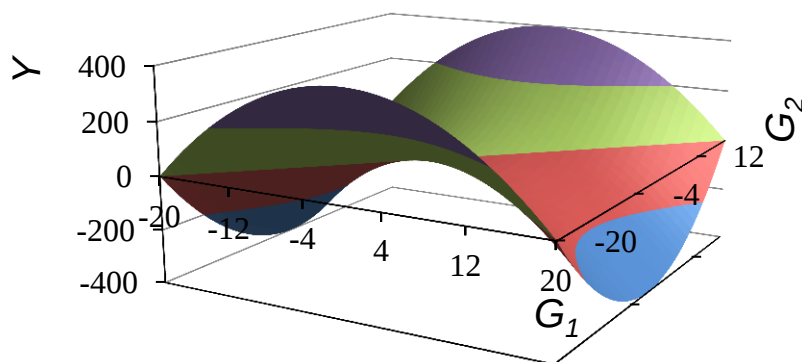


Рис. 5.11. Гиперболический параболоид при отрицательном знаке $\lambda_{11} = -1$ и положительном знаке $\lambda_{22} = 1$

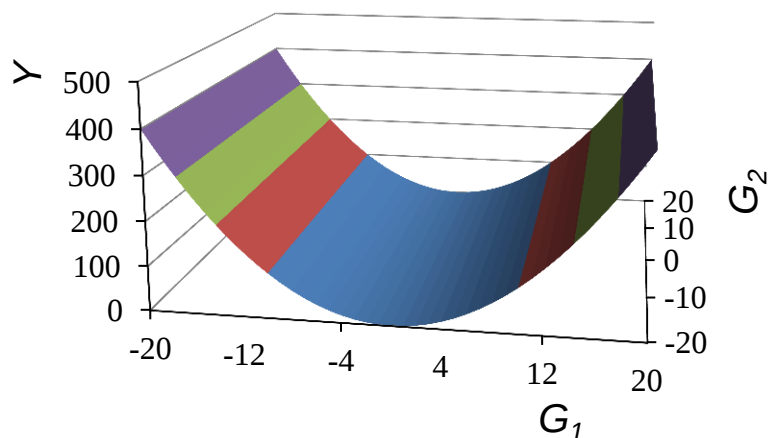


Рис. 5.12. Возрастающее возвышение ("гребень")
при $\lambda_{11} = 1$ и $\lambda_{22} = 0,1$

В программе Microsoft Excel 2013 для решения оптимизационных задач нелинейного программирования в надстройке «Поиск решения» предусмотрено два метода: нелинейный метод обобщённого понижающего градиента (ОПГ) и метод эволюционного поиска решения.

Разработчики программы рекомендуют для гладких нелинейных оптимизационных задач использовать для поиска решения метод ОПГ, а для негладких задач – метод эволюционного поиска решения.

К негладким задачам оптимизации относят задачи, в математической модели которых присутствуют математические выражения для целевых функций в виде недифференцируемых функций.

Для поиска всех локальных и глобальных оптимумов можно использовать методы сканирования и стохастических автоматов [27].

Методы решения оптимизационных задач дискретного программирования

С особенностями задач дискретного программирования, методами их решения и практическими примерами можно познакомиться в книгах [27, 41-44].

Наибольшее распространение из методов решения оптимизационных задач линейного программирования нашёл метод ветвей и границ [42, 43].

Решение целочисленных задач нелинейного программирования производится аналогично решению нелинейных задач с непрерывными переменными, но с наложением дополнительного требования целочисленности переменных [42].

Методы решения оптимизационных задач стохастического программирования

Универсальных методов решения задач стохастического программирования, пригодных для всех классов задач оптимизации, нет. В книгах [41, 42] приводятся примеры постановки, формализации и решения одного распространённого на практике класса стохастических задач – стохастических задач линейного программирования применительно к распределению ресурсов.

Методы решения оптимизационных задач динамического программирования

Для решения оптимизационных задач динамического программирования разработан специальный пошаговый математический аппарат [42, 44], который применяется, например, при распределении ресурсов, строительстве дорог, оптимальном управлении запасами, оптимальной замене оборудования.

Методы решения многокритериальных оптимизационных задач

При выборе наилучшего решения очень часто приходится учитывать требования к нескольким целевым функциям.

Разные цели могут находиться друг с другом в следующих отношениях [42]:

1. Цели взаимно **нейтральны**. Цели характеризуются и рассматриваются независимо друг от друга.
2. Цели **кооперируются**. Рассматривается одна цель, а остальные достигаются одновременно.
3. Цели **конкурируют**. В этом случае одну из целей можно достигнуть в ущерб другой.

Рассмотрение нейтральных или кооперативных целей не представляет особых трудностей, а основная проблема при многокритериальной (многоцелевой, векторной) оптимизации связана с конкурирующими целями.

Существует следующая классификация методов решения многокритериальных задач [42].

Классификация по методу использования информации

1. Априорные

2. Апостериорные
3. Адаптивные

Классификация по характеру использованной информации

1. Детерминированные
2. Вероятностные

Существуют и другие методы решения многокритериальных оптимизационных задач.

5.2.3.2. Экспериментальные методы решения оптимизационных задач

При однопараметрической экспериментальной оптимизации используются методы дихотомии, золотого сечения и др. [27, 44]

Для экспериментального поиска оптимумов отклика объекта, зависящего от влияния двух и более входных факторов, применяют следующие специальные математические методы последовательного планирования эксперимента [19, 27, 35, 37, 38, 44]:

метод крутого восхождения или наискорейшего спуска по поверхности функции отклика объекта;
метод последовательного симплекс-планирования;
и др.

Метод крутого восхождения или наискорейшего спуска по поверхности функции отклика объекта

Применение данного метода требует знания целевой функции отклика объекта в виде исходного уравнения регрессии. Для этого выбирают входные факторы и области изменения их нормализованных значений ($x_j^0, \Delta x_j$), планируют и реализуют математический план эксперимента первого или второго порядка.

После нахождения исходного уравнения регрессии определяют шаг и направление поиска экстремума функции отклика объекта y . Для этого один из факторов, оказывающий наибольшее влияние на y , принимают за базовый и для него выбирают шаг движения, который должен быть не больше шага варьирования этого фактора при получении исходного уравнения регрессии (Δx_j). Например, если за базовый фактор взять x_1 , то для базового шага движения (Δx_1^*) должно выполняться соотношение $\Delta x_1^* \leq \Delta x_1$.

Шаги движения остальных факторов рассчитывают следующим образом:

$$\gamma = \frac{\Delta x_1^*}{b_1 \Delta x_1}; \Delta x_j^* = \gamma b_j \Delta x_j,$$

где b_j – линейные эффекты факторов (с учётом их знаков!) в исходном уравнении регрессии.

Движение к экстремуму функции отклика объекта в направлении градиента увеличения целевой функции можно начинать из центра плана эксперимента ($x_j = x_j^0 = 0$), использованного при получении исходного уравнения регрессии, или от точки факторного пространства, для которой наблюдалось наилучшее значение ЦФ из всех реализованных опытов.

При поиске **максимума** функции отклика объекта (**метод крутого восхождения**) для определения условий проведения последующего опыта к координатам предыдущего опыта в факторном пространстве **прибавляют** шаги движения по каждому фактору. При поиске **минимума** (**метод наискорейшего спуска**) из координат предыдущего опыта **вычитают** шаги движения.

Движение к экстремуму прекращают в следующих случаях:

1. Значения функции отклика объекта или хотя бы одного фактора вышли за пределы допустимых значений.
2. Найден экстремум (возможно, локальный) функции отклика объекта.

В первом случае оптимизацию заканчивают. Во втором случае проводят дополнительные эксперименты по получению нового уравнения регрессии в области обнаруженного экстремума и поиску нового экстремума на основе нового уравнения регрессии.

Графическую интерпретацию метода крутого восхождения рассмотрим на условном примере экспериментального поиска максимального выхода целевого продукта химического процесса (y , %) при изменении двух технологических факторов: x_1 – продолжительности процесса и x_2 – температуры процесса. На рис. 5.13 приведены точки с координатами входных факторов для опытов эксперимента, стороны квадратов, ограничивающих факторное пространство, для которого были получены уравнения регрессии, стрелки, показывающие направление движения в сторону максимума ЦФ и линии равного значения целевой функции y .

Для получения ЦФ в виде уравнения регрессии первоначально был реализован двухуровневый двухфакторный план второго порядка Ко-2 без повторений опытов (точки 1-5 на рис. 5.13).

За базовый был выбран фактор x_1 , для которого был задан шаг движения $\Delta x_1^* \leq \Delta x_1$ и рассчитан шаг движения для фактора x_2 (Δx_2^*) по формуле

$$\Delta x_2^* = \frac{\Delta x_1^*}{\Delta x_1 b_1} b_2 \Delta x_2.$$

Начало движения к максимуму ЦФ было начато от опыта 1, так как в этом опыте получено максимальное значение ЦФ. Для расчёта координат опыта 6 к координатам опыта 1 были прибавлены шаги движения для каждого фактора. Результаты реализации опыта 6 показали, что полученные в нём значения ЦФ больше, чем в опыте 1 (рис. 5.13).

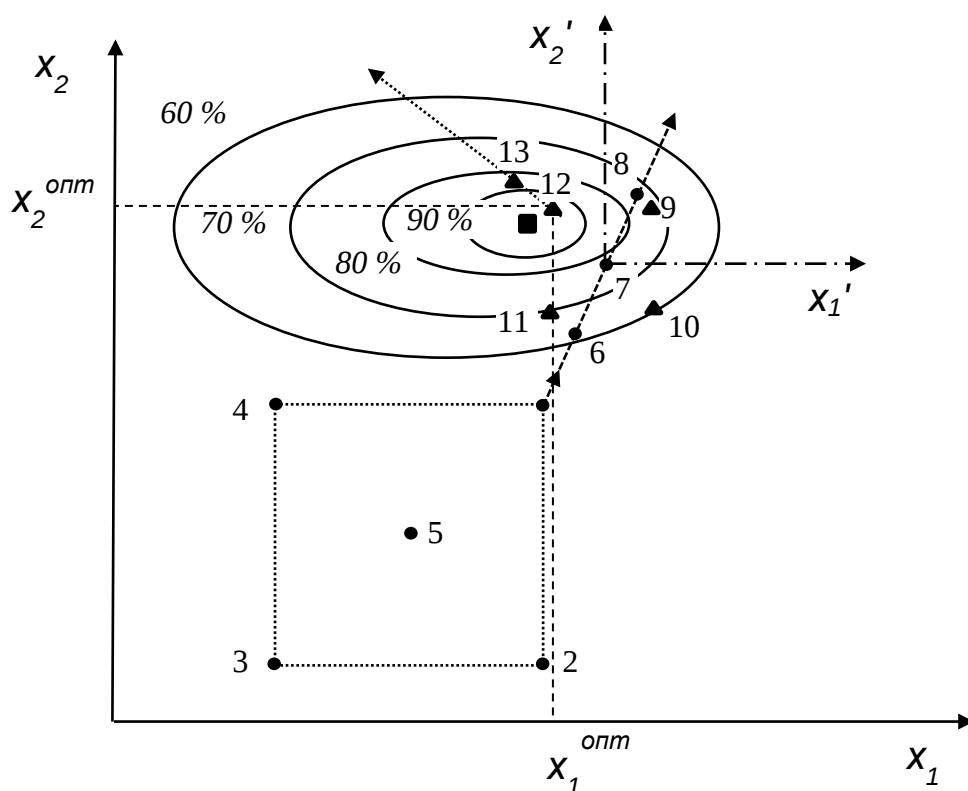


Рис. 5.13. Крутое восхождение по поверхности отклика объекта:

- — опыты 1-8;
- ▲ — опыты 9-13;
- — максимум отклика объекта

Для расчёта координат опыта 7 к координатам опыта 6 были прибавлены шаги движения для каждого фактора. В опыте 7 рост величины ЦФ продолжился. В опыте 8 значение ЦФ уменьшилось по сравнению с предыдущим опытом 7. Было решено уточнить уравнение регрессии в окрестностях координат опыта 7. С этой целью координаты опыта 7 были взяты за центр новой факторной области с нормированными значениями факторов, в которой для этого опыта $x_1' = x_2' = 0$. Для этой новой факторной области по плану Ко-2 были рассчитаны координаты дополнительных к опыту 7 ещё четырёх опытов 9-12, после реализации которых получено новое уравнение регрессии. По новому уравнению регрессии было определено скорректированное направление движения к максимуму, новые шаги движения и реализован опыт 13. Результаты эксперимента показали, что значение ЦФ в опыте 13 оказалось меньше, чем в опыте 12. Оценив значение ЦФ во всех двадцати опытах эксперимента, определили, что оптимальным решением является проведение химического процесса при продолжительности и времени опыта 12 (x_1^{opt} , x_2^{opt}), в котором экспериментально получен максимальный выход целевого продукта.

К недостаткам метода крутого восхождения или наискорейшего спуска следует отнести достаточно большое число экспериментов при его реализации.

С конкретными примерами применения метода крутого восхождения или наискорейшего спуска можно познакомиться в литературе [19, 27, 34, 37, 38, 44].

Метод последовательного симплекс-планирования

Для метода последовательного симплекс-планирования разработаны [19, 34, 37, 38, 44] простые в построении матрицы планов эксперимента с использованием для исследований факторного пространства регулярных симплексов. Центр регулярных симплексов совпадает с центром факторного пространства (координаты центра начального плана эксперимента задаются в нормализованных значениях как $x_j = 0$). Одна из вершин исходного симплекса лежит на одной из координатных осей этого пространства. Для такого случая построение плана эксперимента начинается с составления матрицы E с нормализованными значениями факторов (табл. 5.5).

Таблица 5.5

Исходный симплекс-план эксперимента
с нормализованными значениями факторов

Номер опыта, i	Нормализованные значения факторов								y
	x_1	x_2	x_3	...	x_j	...	x_{k-1}	x_k	
1	e_1	e_2	e_3	...	e_j	...	e_{k-1}	e_k	
2	$-1e_1$	e_2	e_3	...	e_j	...	e_{k-1}	e_k	
3	0	$-2e_2$	e_3	...	e_j	...	e_{k-1}	e_k	
4	0	0	$-3e_3$	...	e_j	...	e_{k-1}	e_k	
...	0	0	0	...	e_j	...	e_{k-1}	e_k	
$j+1$	0	0	0	0	$-je_j$	...	e_{k-1}	e_k	
...	0	0	0	0	0	...	e_{k-1}	e_k	
k	0	0	0	0	0	0	$-(k-1)e_{k-1}$	e_k	
$k+1$	0	0	0	0	0	0	0	$-ke_k$	

При длине стороны симплекса, равной 1, конкретные цифровые значения x_j рассчитываются по формуле:

$$x_j = e_j = \sqrt{\frac{1}{2j(j+1)}}.$$

Высота такого симплекса (h_k), равная расстоянию от вершины до противоположной грани, равна:

$$h_k = \frac{k+1}{\sqrt{2k(k+1)}}.$$

Число опытов в исходном симплекс-плане (N) всегда на единицу больше числа исследуемых входных факторов k : $N = k+1$.

После завершения эксперимента по исходному симплекс-плану оценивают полученные значения отклика объекта и определяют номер опыта с наихудшим для исследователя значением y (минимальным или максимальным в зависимости от цели оптимизации). По координатам наихудшего опыта (h) рассчитывают координаты нового дополнительного ($k+2$) опыта:

$$x_j^{(k+2)} = 2x_j^{(c)} - x_j^{(h)}; \quad ; \quad x_j^{(c)} = \frac{\sum_{i=1}^{k+1} x_j^{(i)}}{k} \quad \text{при } i \neq h.$$

После реализации нового опыта ($k+2$) вновь анализируют значения y и если значение y^{k+2} лучше значения y^h , снова определяют номер наихудшего опыта во всей совокупности проведённых опытов (исключая из рассмотрения опыт h) и рассчитывают координаты

следующего дополнительного $(k+3)$ опыта. Если новый опыт не приводит к получению лучшего значения Y (симплекс «зацикливается»), то эксперименты заканчивают и за оптимальное значение входных факторов принимают координаты опыта, в котором получено наилучшее значение Y .

Визуально процедура поиска экстремума функции отклика объекта методом последовательного симплекс-планирования представлена на рис. 5.14.

Достоинства метода последовательного симплекс-планирования:

1. Экономное число опытов из-за необязательности их повторения.
2. Возможность увеличения числа исследуемых факторов на любом этапе исследований без значительного увеличения числа опытов.
3. Возможность при оптимизации одного свойства объекта учитывать изменения других свойств.
4. Возможность получения уравнения регрессии по симплекс-планам при $k = 4a - 1$, где a равно 1, 2, 3, ... n .

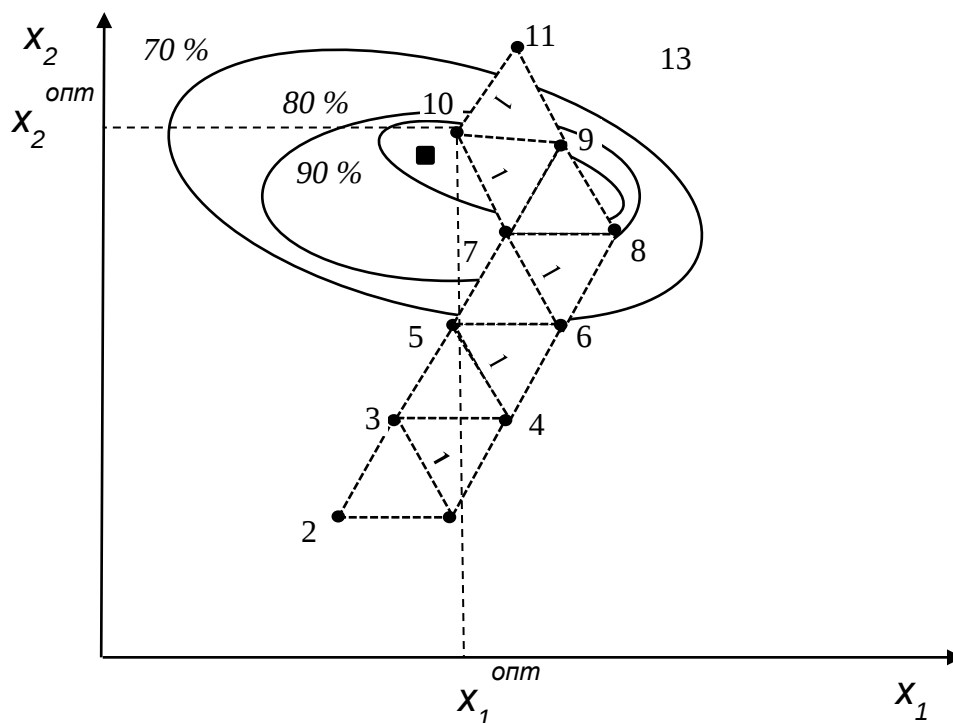


Рис. 5.14. Поиск оптимальных условий методом последовательного симплекс-планирования:

• — опыты 1-11; ■ — максимум отклика объекта

Недостатки метода симплекс-планирования:

1. Позволяет найти только один оптимум функции отклика объекта, а для поиска других оптимумов необходимо повторять

реализацию исходного симплекс-плана в другой области факторного пространства.

2. Эффективность поиска оптимумов функции отклика объекта зависит от величины выбранного интервала варьирования факторов.

С алгоритмами и примерами применения метода последовательного симплекс-планирования для решения оптимизационных задач можно познакомиться в книгах [19, 34, 37, 38, 44].

5.2.4. Анализ решения и принятие оптимального решения

При решении оптимизационных задач возможно получение следующих результатов: решений нет, есть несколько решений и есть одно решение. Если решения задачи есть, то основная цель данного этапа заключается в анализе точности и правильности (верификации) полученных решений оптимизационной задачи. Конкретные рекомендации по анализу полученных решений зависят от класса задач оптимизации и использованного метода их решения.

При анализе результатов расчётов, проведённых при решении оптимизационной задачи, необходимо оценить [43]:

точность и правильность результатов, полученных разными методами и «ручными» расчётами;

потенциальную возможность реализации полученных результатов на практике.

Если анализ полученных результатов показывает их недостаточную точность или потенциальную невозможность их реализации на практике, то следует вернуться к этапу содержательной постановки и формализации оптимизационной задачи для коррекции или разработки её новой математической модели.

Если есть предположения, что в заданном интервале граничных условий целевая функция может иметь несколько оптимумов, то этот интервал следует разбить на несколько интервалов, в каждом из них определить свои локальные оптимумы, а затем из всех локальных оптимумов выбрать глобальный. В таком случае задача нахождения глобального оптимума сводится к решению ряда задач, в которых ищется локальный оптимум.

При применении для расчётов компьютерных программ следует помнить, что может быть несколько решений оптимизационной задачи и поэтому необходимо анализировать не только найденное решение, но и результаты других итераций.

Окончательное решение принимает не компьютер, а человек, который должен отвечать за результаты принятого решения. Оптимальное решение – это не те величины, которые получены при поиске, выполненном с помощью компьютерных программ, а результат всесторонней оценки как решений, полученных с помощью поиска, так и тех выводов, которые были сделаны в ходе проведённого анализа.

5.3. Применение компьютерных программ для решения оптимизационных задач

В настоящее время существуют несколько программных продуктов, в которых реализованы отдельные алгоритмы решения задач оптимизации аналитическими и численными методами. К наиболее доступным и популярным из них относится **Microsoft Excel** (MS Excel, Excel). В программе Excel реализовано несколько алгоритмов численных методов решения оптимизационных задач.

5.3.1. Применение для решения оптимизационных задач табличного процессора Microsoft Excel

Последовательность необходимых работ, выполняемых при решении задач оптимизации с помощью Excel, приведена на блок-схеме (рис. 5.15 [41]).

Рассмотрим описание этих работ для задачи оптимизации, приведённой в книге [41, с. 89-90].

Составление математической модели задачи оптимизации

Составляем математическую модель задачи оптимизации:

$$\left. \begin{array}{l} f(x_j) \rightarrow \max \\ g_i(x_j) \leq (= ; \geq) b_i \\ d_i \leq x_i \leq D_i \end{array} \right\} ;$$

$$\left. \begin{array}{l} x_1 + x_2 \rightarrow \max \\ x_1 + 4x_2 \leq 14 \\ 3x_1 + 4x_2 \leq 18 \\ 6x_1 + 2x_2 \leq 27 \\ x_1 \geq 0 \\ x_2 \geq 0 \end{array} \right\} .$$

В данной математической модели число переменных x_j ($n = 2$) меньше числа ограничений g_i ($m = 3$), но все ограничения имеют вид неравенств и, следовательно (табл. 5.2), оптимизационная задача имеет множество решений и может быть найдено оптимальное решение.

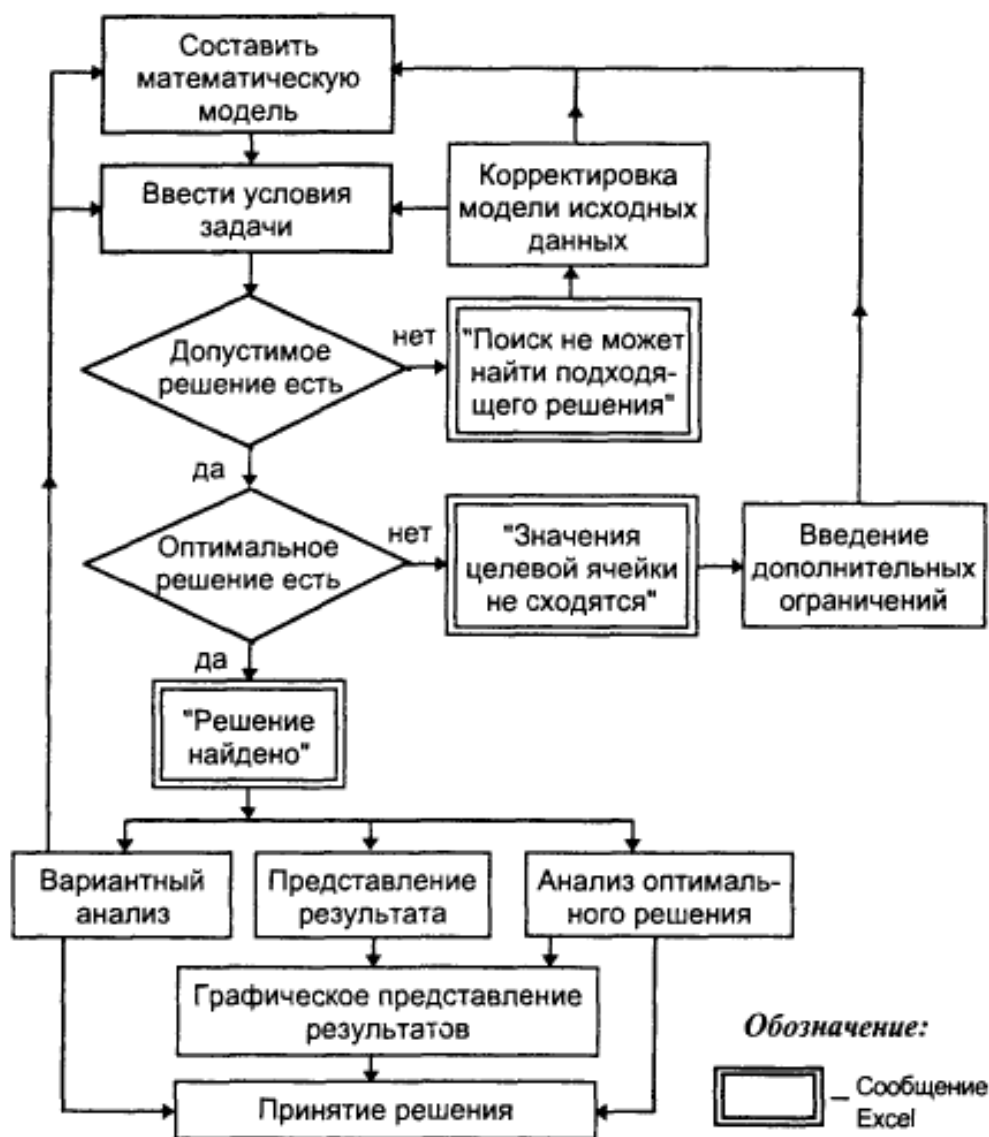


Рис. 5.15. Блок-схема решения задачи оптимизации [41]

Поскольку целевая функция и все ограничения являются линейными величинами, то задача относится к задачам линейного программирования (табл. 5.3).

Ввод условий задачи

Ввод условий задачи состоит из следующих основных шагов:

1. Создание формы для ввода условий задачи.

2. Ввод исходных данных.
3. Ввод зависимостей из математической модели.
4. Назначение целевой функции.
5. Ввод ограничений и граничных условий.

Сделаем форму для ввода условий задачи и введём в ячейки соответствующие формулы из математической модели задачи оптимизации для расчёта значений целевой функции ($B8$) и левой части ограничений ($B13$, $B17$, $B21$). В формате с показом формул результаты выполнения этих действий представлены на рис. 5.16.

	A	B	C
1	ПАРАМЕТРЫ		
2	Переменные x_j:		
3	имя	x_1	x_2
4	значения		
5	Целевая функция:		
6	имя коэффициентов	c_1	c_2
7	значения коэффициентов	1	1
8	значение целевой функции	$=B7*B4+C7*C4$	
9	Ограничения g_i:		
10	g_1		
11	имя коэффициентов	a_{11}	a_{12}
12	значения коэффициентов	1	4
13	значение левой части	$=B12*B4+C12*C4$	
14	g_2		
15	имя коэффициентов	a_{21}	a_{22}
16	значения коэффициентов	3	4
17	значение левой части	$=B16*B4+C16*C4$	
18	g_3		
19	имя коэффициентов	a_{31}	a_{32}
20	значения коэффициентов	6	2
21	значение левой части	$=B20*B4+C20*C4$	

Рис. 5.16

Поиск решения

На вкладке «ДАННЫЕ» в группе «Анализ» выберем надстройку «Поиск решения» и введём необходимые исходные данные задачи оптимизации.

В появившемся окне «Параметры поиска решения» (рис. 5.17) в поле «Оптимизировать целевую функцию:» укажем адрес ячейки, в которой находится рассчитываемое значение целевой функции ($B8$). В поле «До» установим переключатель на «Максимум». В поле «Изменяя ячейки переменных:» укажем диапазон ячеек входных факторов ($B4:C4$).

Поскольку оптимизационная задача относится к задачам линейного программирования, то для её решения оставляем в поле «Выберите метод решения» установленный по умолчанию симплексный метод («Поиск решения лин. задач симплекс-методом»).

Рис. 5.17

Нажав кнопку «Добавить» в появившемся диалоговом окне «Добавление ограничения» (рис. 5.18) выбираем вид ограничений « $\leq$ » и вводим в поле «Ссылка на ячейки:» адрес ячейки, в которой находится рассчитываемое значение левой части первого ограничения (*B13*).

В поле «Ограничение:» вводим с клавиатуры значение правой части первого ограничения (14). Нажимаем кнопку «Добавить» и вводим все данные для второго ограничения. После введения третьего ограничения и граничных условий для обоих входных факторов нажатием кнопки «ОК» выходим из диалогового окна «Добавление ограничения» и возвращаемся в окно «Поиск решения», в котором в поле «В соответствии с ограничениями:» приведены математические выражения введенных ограничений и граничных условий.

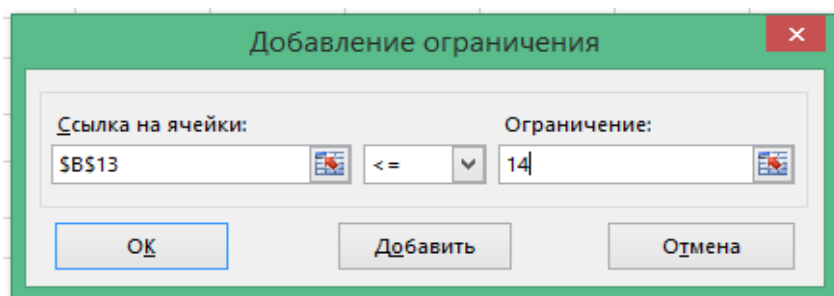


Рис. 5.18

Для того чтобы просмотреть результаты вычислений для всех итераций, нажимаем кнопку «Параметры» и в появившемся диалоговом окне «Параметры» (рис. 5.19) устанавливаем флажок «Показывать результаты итераций» и нажимаем кнопку «ОК». В появившемся диалоговом окне «Параметры поиска решения» (рис. 5.17) нажимаем кнопку «Найти решение».

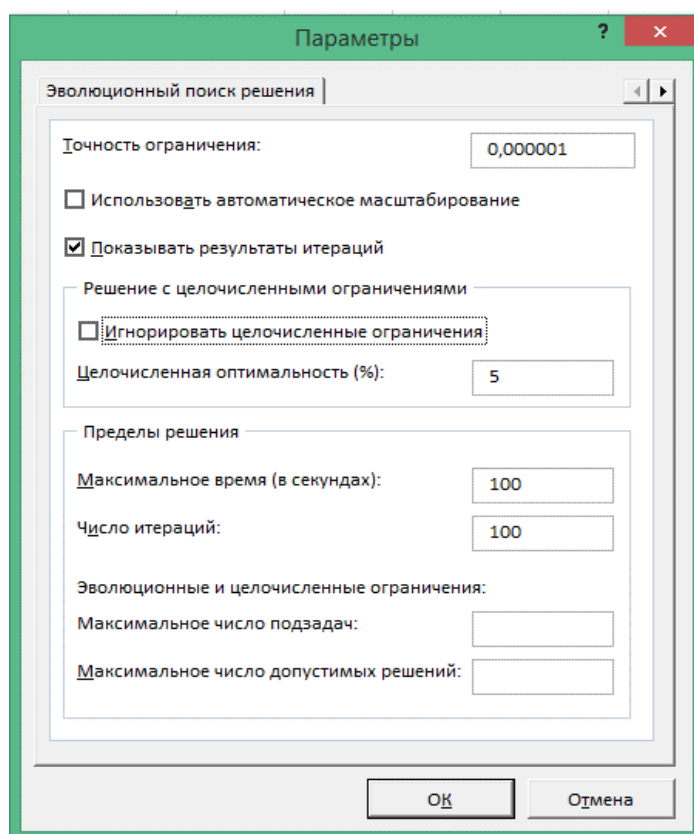


Рис. 5.19

Результаты вычислений для первой итерации приведены на рис. 5.20, диалоговое окно «Показать предварительное решение» – на рис. 5.21. Нажимая на кнопку «Продолжить» (рис. 5.20), получаем результаты второй и окончательной итерации (рис. 5.22, 5.23).

	A	B	C
1	ПАРАМЕТРЫ		
2	<i>Переменные x_j:</i>		
3	имя	x_1	x_2
4	значения	4,5	0
5	<i>Целевая функция:</i>		
6	имя коэффициентов	c_1	c_2
7	значения коэффициентов	1	1
8	<i>значение целевой функции</i>	4,5	
9	<i>Ограничения g_i:</i>		
10	g_1		
11	имя коэффициентов	a_{11}	a_{12}
12	значения коэффициентов	1	4
13	значение левой части	4,5	
14	g_2		
15	имя коэффициентов	a_{21}	a_{22}
16	значения коэффициентов	3	4
17	значение левой части	13,5	
18	g_3		
19	имя коэффициентов	a_{31}	a_{32}
20	значения коэффициентов	6	2
21	значение левой части	27	

Рис. 5.20

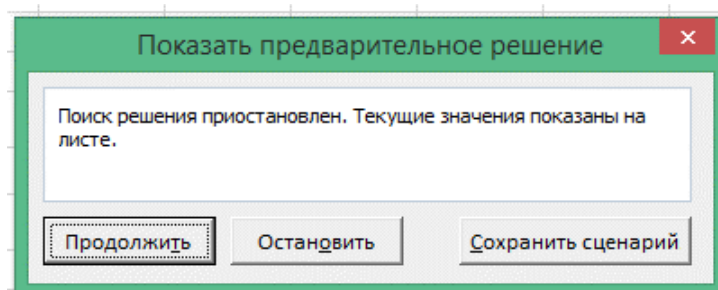


Рис. 5.21

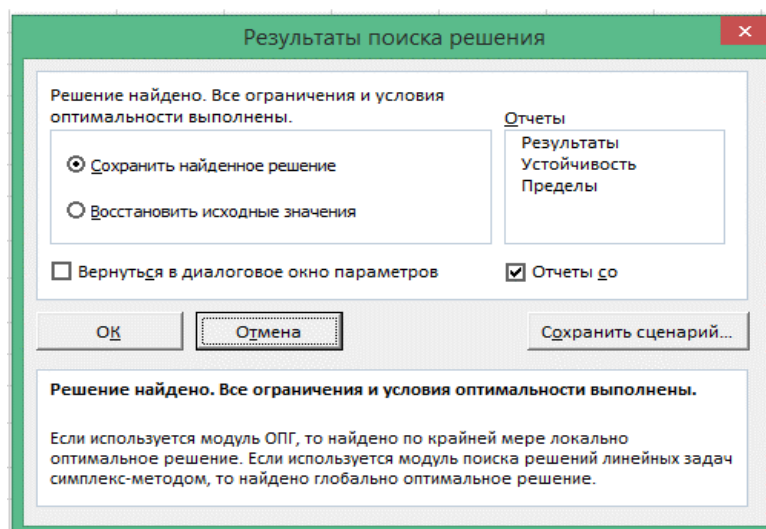


Рис. 5.22

	A	B	C
1	ПАРАМЕТРЫ		
2	<i>Переменные x_j:</i>		
3	имя	x_1	x_2
4	значения	4	1,5
5	<i>Целевая функция:</i>		
6	имя коэффициентов	c_1	c_2
7	значения коэффициентов	1	1
8	<i>значение целевой функции</i>	5,5	
9	<i>Ограничения g_i:</i>		
10	g_1		
11	имя коэффициентов	a_{11}	a_{12}
12	значения коэффициентов	1	4
13	значение левой части	10	
14	g_2		
15	имя коэффициентов	a_{21}	a_{22}
16	значения коэффициентов	3	4
17	значение левой части	18	
18	g_3		
19	имя коэффициентов	a_{31}	a_{32}
20	значения коэффициентов	6	2
21	значение левой части	27	

Рис. 5.23

Из данных рис. 5.23 следует, что максимальное значение целевой функции (ячейка B8) составляет 5,5 при значении $x_1 = 4$ (ячейка B4) и $x_2 = 1,5$ (ячейка C4).

Это решение можно принять за окончательное, так как оно совпадает с решением, полученным графоаналитическим методом [41].

Пример 5.1 [42, с. 25-26]

Лесничество имеет 24 гектара (га) свободной земли под паром и заинтересовано извлечь из этого доход. Оно может выращивать саженцы быстрорастущего гибрида новогодней ели, которые достигают спелости за один год, или бычков, отведя часть земли под пастбище. Деревья выращиваются и продаются партиями по 1000 штук. Требуется 1,5 га для выращивания одной партии деревьев и 4 га для вскармливания одного бычка. Лесничество может потратить только 200 часов в год на своё побочное производство. Практика показывает, что требуется 20 часов для культивации, подрезания, вырубki и паке-тирования одной партии деревьев. Для ухода за одним бычком также требуется 20 часов. Лесничество имеет возможность израсходовать на эти цели 6000 руб. Годовые издержки на выращивание одной партии елей выливаются в 150 руб и 1200 руб на одного бычка. Уже заключён контракт на поставку 2 бычков. По сложившимся ценам одна новогодняя ель должна принести при продаже чистый доход в 2,5 руб, а один бычок – 5000 руб. Необходимо оценить экономическую эффективность побочного производства лесничества.

Для решения этой оптимизационной задачи в качестве целевой функции F можно взять годовой чистый доход от использования земли в коммерческих целях (в рублях) при следующих переменных:

x_1 - количество откармливаемых бычков в год, голов;

x_2 - количество выращиваемых партий быстрораствующих годовалых елей (по 1000 штук в каждой) в год, единиц.

Составим математическую модель задачи оптимизации с назначением целевой функции на максимум:

В данной математической модели задачи оптимизации число переменных x_j ($n = 2$) меньше числа ограничений g_i ($m = 3$), но все ограничения имеют вид неравенств и, следовательно (табл. 5.2), оптимизационная задача имеет множество решений и может быть найдено оптимальное решение.

$$\left. \begin{aligned} F(x_1, x_2) &= 5000x_1 + 2500x_2 \rightarrow \max \\ g_1(x_1, x_2) &= 4x_1 + 1,5x_2 \leq 24 \\ g_2(x_1, x_2) &= 1200x_1 + 150x_2 \leq 6000 \\ g_3(x_1, x_2) &= 20x_1 + 20x_2 \leq 200 \\ x_1 &\geq 2 \\ x_2 &\geq 0 \\ x_1 &\text{ - целое} \\ x_2 &\text{ - целое} \end{aligned} \right\} .$$

Поскольку целевая функция и все ограничения являются линейными, переменные x_1 и x_2 в условиях задачи дискретные и целочисленные величины, то задача относится к задачам линейного целочисленного программирования (табл. 5.3).

Задача оптимизации относится к задачам по заказу, так как в её условиях сформулированы ограничения и граничные условия, в том числе обязательства по контракту к количеству выращенных бычков.

Представим данную математическую модель оптимизационной задачей в формате Excel для применения процедуры «Поиск решения» (лист Excel с исходными данными в режиме показа формул (рис. 5.24).

Вызовем процедуру «Поиск решения» и введём необходимые исходные данные задачи оптимизации (рис. 5.25).

Для того чтобы просмотреть результаты вычислений для всех итераций в диалоговом окне «Параметры» устанавливаем флажок «Показывать результаты итераций».

	A	B	C
1	ПАРАМЕТРЫ		
2	Переменные x_j:		
3	ИМЯ	x_1 , голов	x_2 , ед.
4	значения		
5	Целевая функция:		
6	значение целевой функции, руб.	$=5000*B4+2500*C4$	
7	Ограничения g_i:		
8	g_1 (по использованию земли), га:		
9	значение левой части	$=4*B4+1,5*C4$	
10	g_2 (по бюджету), руб.:		
11	значение левой части	$=1200*B4+150*C4$	
12	g_3 (по трудовым ресурсам), ч:		
13	значение левой части	$=20*B4+20*C4$	

Рис. 5.24

Параметры поиска решения

Оптимизировать целевую функцию:

До: ☒ Максимум ☐ Минимум ☐ Значения:

Изменяя ячейки переменных:

В соответствии с ограничениями:

$\$B\$11 \leq 6000$
 $\$B\$13 \leq 200$
 $\$B\$4 = \text{целое}$
 $\$B\$4 \geq 2$
 $\$B\$9 \leq 24$
 $\$C\$4 = \text{целое}$
 $\$C\$4 \geq 0$

☐ Сделать переменные без ограничений неотрицательными

Выберите метод решения:

Метод решения
 Для гладких нелинейных задач используйте поиск решения нелинейных задач методом ОПГ, для линейных задач - поиск решения линейных задач симплекс-методом, а для негладких задач - эволюционный поиск решения.

Найти решение

Рис. 5.25

По результатам вычислений симплекс-методом для всех итерации найдено одно оптимальное решение (рис. 5.26).

	A	B	C
1	ПАРАМЕТРЫ		
2	Переменные x_j:		
3	имя	x_1 , голов	x_2 , ед.
4	значения	3	7
5	Целевая функция:		
6	значение целевой функции, руб.	32500	
7	Ограничения g_i:		
8	g_1 (по использованию земли), га:		
9	значение левой части	22,5	
10	g_2 (по бюджету), руб.:		
11	значение левой части	4650	
12	g_3 (по трудовым ресурсам), ч:		
13	значение левой части	200	

Рис. 5.26

Из полученных данных (рис. 5.26) следует, что максимальный годовой чистый доход от коммерческого использования земли (ячейка B6 – значение целевой функции) равен 32500 руб. при выращивании и продаже 3 бычков (ячейка B4) и 7 партий ели (ячейка C4).

Для задач целочисленного программирования и некоторых других в Excel формируется только отчёт «Результаты» [41].

Применение для решения данной задачи целочисленного программирования метода ветвей и границ [42, с. 80-83] показывает, что помимо найденного существует и другое оптимальное решение ($x_1 = 4$ и $x_2 = 5$), приносящее чистый доход такого же размера 32500 руб.

Если в программе Excel в надстройке «Поиск решения» выбрать в качестве метода решения не симплекс-метод, а метод ОПГ (с введением в диалоговом окне «Параметры» во вкладке «Все методы» в окне «Целочисленная оптимальность (%):» цифру 0, то первое оптимальное решение (рис. 5.26) выводится на экран монитора в одной из итераций, а второе решение выдаётся как найденное (рис. 5.27).

	A	B	C
1	ПАРАМЕТРЫ		
2	Переменные x_j:		
3	имя	x_1 , голов	x_2 , ед.
4	значения	4	5
5	Целевая функция:		
6	значение целевой функции, руб.	32500	
7	Ограничения g_i:		
8	g_1 (по использованию земли), га:		
9	значение левой части	23,5	
10	g_2 (по бюджету), руб.:		
11	значение левой части	5550	
12	g_3 (по трудовым ресурсам), ч:		
13	значение левой части	180	

Рис. 5.27

Учитывая одинаковое значение целевой функции для обоих найденных оптимальных решений, окончательное решение для практического применения должен принять руководитель лесничества исходя из приоритета экономии ресурсов.

Пример 5.2

В книге Ф.В. Пошарникова [27] описана задача поиска наиболее экономного расходования материала при изготовлении цилиндрической бочки объёмом 100 дм^3 с днищем и крышкой. Анализ задачи показывает, что минимальный расход материала будет в том случае, если бочка будет иметь наименьшую поверхность.

Проведём формализацию данной оптимизационной задачи и составим её математическую модель. За целевую функцию примем общую поверхность материала (S) как сумму поверхности цилиндра ($S_{\text{ц}}$), поверхности днища ($S_{\text{дн}}$) и крышки ($S_{\text{кр}}$) бочки. Ограничением служит объём бочки (V), равный 100 дм^3 . Граничными условиями для диаметра (D) и высоты бочки (H) является область их положительных значений. Исходя из этого математическая модель задачи оптимизации будет следующей:

$$\left. \begin{aligned} S(D,H) &= S_{\text{ц}} + S_{\text{дн}} + S_{\text{кр}} = \pi DH + 2 \frac{\pi D^2}{4} \rightarrow \min \\ V(D,H) &= \frac{\pi D^2}{4} H = 100 \\ D &> 0 \end{aligned} \right\} .$$

Анализ математической модели задачи оптимизации показывает, что:

по виду задача является однокритериальной;

отклик объекта (S) и параметры (D, H) - непрерывные детерминированные величины;

задача имеет оптимальное решение, так как существует множество допустимых решений, ибо число переменных ($n = 2$) больше числа ограничений ($m = 1$) при ограничении в виде уравнения (табл. 5.2).

Данная задача оптимизации является решением по заказу (задачей условной оптимизации), так как содержит ограничение и граничные условия. Она даёт ответ на вопрос «Какие необходимо сделать диаметр и высоту цилиндрической бочки при её изготовлении для того

чтобы объём бочки составил 100 дм^3 при минимальном расходе материала?».

По классификации (табл. 5.3) эта задача относится к задачам нелинейного программирования, так как:

исходные данные задачи – это детерминированные величины;

переменные – непрерывные;

целевая функция и ограничение – нелинейные функции относительно переменной D (D входит в математические зависимости не в первой степени).

Применение для решения этой оптимизационной задачи аналитического метода дифференциального исчисления показало [27], что оптимумом являются одинаковые значения диаметра и высоты бочки, равные $5,03 \text{ дм}$.

Применим программу Excel для решения этой оптимизационной задачи. Сделаем форму для ввода условий задачи и введём в ячейки соответствующие формулы из математической модели задачи оптимизации для расчёта значений целевой функции (B6) и левой части ограничения (B8). В формате с показом формул результаты выполнения этих действий представлены на рис. 5.28.

	A	B	C
1	ПАРАМЕТРЫ		
2	Переменные x_j:		
3	имя	D, дм	H, дм
4	значения		
5	Целевая функция:		
6	значение целевой функции (S), дм^2	=ПИ()*B4*C4+ПИ()*B4^2/2	
7	Ограничение:		
8	Значение объёма бочки (V), дм^3	=ПИ()*B4^2/4*C4	

Рис. 5.28

В окне «Параметры поиска решения» в поле «Оптимизировать целевую функцию:» укажем адрес ячейки, в которой находится рассчитываемое значение целевой функции (B6). В поле «До» установим переключатель на «Минимум». В поле «Изменяя ячейки переменных:» укажем диапазон ячеек входных факторов (B4:C4).

Поскольку оптимизационная задача относится к задачам нелинейного программирования, то для её решения в поле «Выберите метод решения» выбираем метод «Поиск решения нелинейных задач

методом ОПГ», так как целевая функция дифференцируемая и относится к гладким функциям.

Нажав кнопку «Добавить» в появившемся диалоговом окне «Добавление ограничения», выбираем вид ограничения «=» и вводим в поле «Ссылка на ячейки:» адрес ячейки, в которой находится рассчитываемое значение левой части ограничения (B8).

В поле «Ограничение:» вводим с клавиатуры значение правой части ограничения (100). Нажимаем кнопку «Добавить» и вводим граничные условия для обеих переменных (D и H), выбирая вид ограничений « $\geq$ » (так как в Excel «машинный нуль» равен по модулю $2,225 \cdot 10^{-308}$ [24, с. 26] и эта величина больше нуля) и вводя в поле «Ограничение:» значение нуль.

После введения граничных условий нажатием кнопки «ОК» выходим из диалогового окна «Добавление ограничения» и возвращаемся в окно «Поиск решения» (рис. 5.29). После установки в диалоговом окне «Параметры» флажка «Показывать результаты итераций» нажимаем кнопку «ОК» и в появившемся диалоговом окне «Параметры поиска решения» нажимаем кнопку «Найти решение».

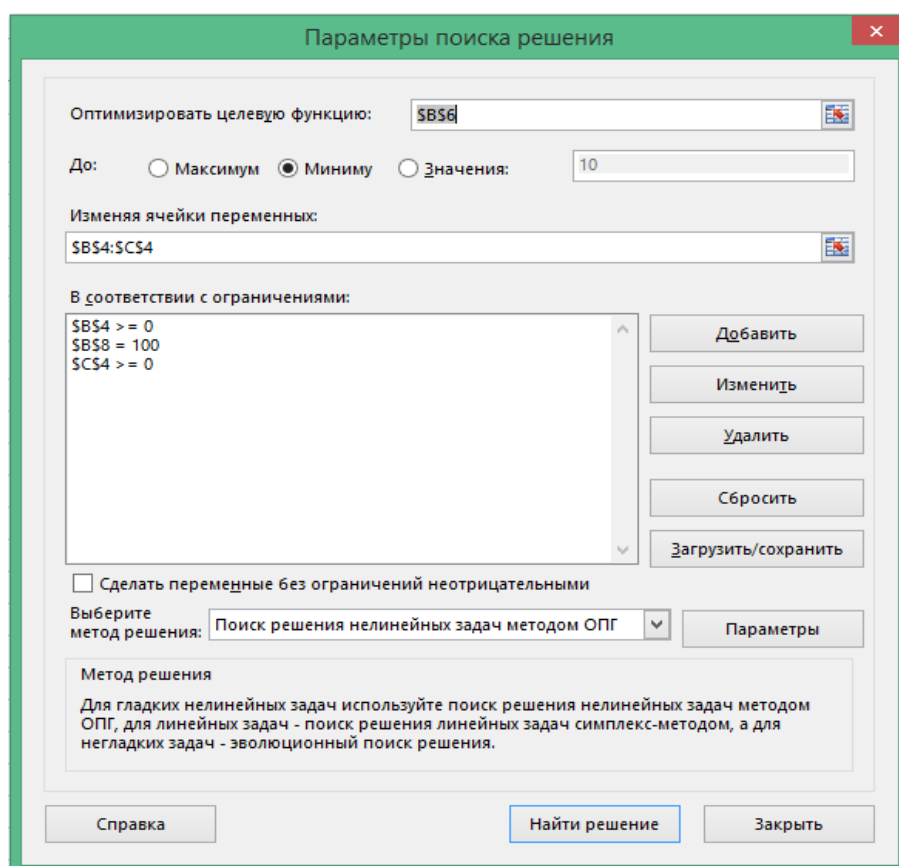


Рис. 5.29

После выполнения нескольких итераций на экране монитора появляется сообщение «В ходе поиска не удалось найти допустимого решения.» (рис. 5.30).

Для запуска поиска решения методом ОПГ из другой области факторного пространства изменим граничное условие для переменной $D \geq 0$ на $D \geq 1$. В этом случае после 55 итераций программа выдала сообщение «Решение найдено. Все ограничения и условия оптимальности выполнены.»

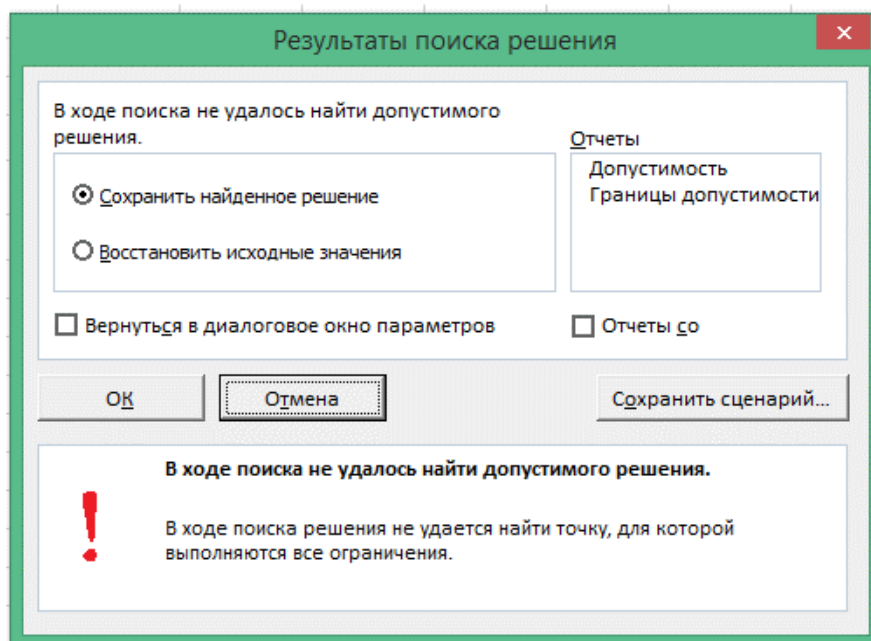


Рис. 5.30

Наилучшие из результатов вычислений всех итераций приведены на рис. 5.31. Оптимальные значения диаметра и высоты бочки совпадают с результатами метода дифференциальных исчислений [27], и поэтому их принимаем за окончательное решение.

	A	B	C
1	ПАРАМЕТРЫ		
2	Переменные x_j:		
3	имя	D, дм	H, дм
4	значения	5,030789363	5,030809249
5	Целевая функция:		
6	значение целевой функции (S), дм ²	119,2654206	
7	Ограничение:		
8	Значение объёма бочки (V), дм ³	100	

Рис. 5.31

Для анализа оптимального решения в диалоговом окне «Отчёты» окна «Результаты поиска решения» можно вызвать отчёты трёх типов:

- «Результаты»;
- «Устойчивость»;
- «Пределы».

Отчёты каждого типа могут быть вызваны по следующему алгоритму. Начнём с отчёта по результатам:

устанавливаем курсор на тип вызываемого отчёта «Результаты»; нажимаем на кнопку «ОК».

На экране монитора появляется новый лист, на ярлыке которого указано название отчёта «Отчёт о результатах 1» (рис. 5.32). Щёлкнув на ярлыке «Отчёт о результатах 1» этот отчёт вызывается на экран монитора (рис. 5.32). Аналогичным образом вызываются отчёты по устойчивости и пределам (рис. 5.33, 5.34).

Для анализа оптимального решения в диалоговом окне «Отчёты» окна «Результаты поиска решения» можно вызвать отчёты трёх типов.

1	A	B	C	D	E	F	G																									
2			Microsoft Excel 15.0 Отчет о результатах																													
3			Лист: [Пример 5_1.xls]Лист1																													
4			Отчет создан: 16.08.2016 15:48:10																													
5			Результат: Решение найдено. Все ограничения и условия оптимальности выполнены.																													
6			Модуль поиска решения																													
7			Модуль: Поиск решения нелинейных задач методом ОПГ																													
8			Время решения: 38,313 секунд.																													
9			Число итераций: 55 Число подзадач: 0																													
10			Параметры поиска решения																													
11			Максимальное время 100 с, Число итераций 100, Precision 0,000001, Показывать результаты итераций																													
12			Сходимость 0,0001, Размер совокупности 100, Случайное начальное значение 0, Правые производные																													
13			Максимальное число подзадач Без пределов, Максимальное число целочисленных решений Без пределов, Целочисленное отклонение 5%																													
14			Ячейка целевой функции (Минимум)																													
15			<table><tr><th>Ячейка</th><th>Имя</th><th>Исходное значение</th><th>Окончательное значение</th></tr><tr><td>\$B\$6</td><td>значение целевой функции (S), дм2 D, дм</td><td>1,570796327</td><td>119,2654206</td></tr></table>	Ячейка	Имя	Исходное значение	Окончательное значение	\$B\$6	значение целевой функции (S), дм2 D, дм	1,570796327	119,2654206																					
Ячейка	Имя	Исходное значение	Окончательное значение																													
\$B\$6	значение целевой функции (S), дм2 D, дм	1,570796327	119,2654206																													
16																																
17																																
18																																
19			Ячейки переменных																													
20			<table><tr><th>Ячейка</th><th>Имя</th><th>Исходное значение</th><th>Окончательное значение</th><th>Целочисленное</th></tr><tr><td>\$B\$4</td><td>значения D, дм</td><td>1</td><td>5,030789363</td><td>Продолжить</td></tr><tr><td>\$C\$4</td><td>значения H, дм</td><td>0</td><td>5,030809249</td><td>Продолжить</td></tr></table>	Ячейка	Имя	Исходное значение	Окончательное значение	Целочисленное	\$B\$4	значения D, дм	1	5,030789363	Продолжить	\$C\$4	значения H, дм	0	5,030809249	Продолжить														
Ячейка	Имя	Исходное значение	Окончательное значение	Целочисленное																												
\$B\$4	значения D, дм	1	5,030789363	Продолжить																												
\$C\$4	значения H, дм	0	5,030809249	Продолжить																												
21																																
22																																
23																																
24																																
25			Ограничения																													
26			<table><tr><th>Ячейка</th><th>Имя</th><th>Значение ячейки</th><th>Формула</th><th>Состояние</th><th>Допуск</th></tr><tr><td>\$B\$8</td><td>Значение объема бочки (V), дм3 D, дм</td><td>100</td><td>\$B\$8=100</td><td>Привязка</td><td>0</td></tr><tr><td>\$B\$4</td><td>значения D, дм</td><td>5,030789363</td><td>\$B\$4>=1</td><td>Без привязки</td><td>4,030789363</td></tr><tr><td>\$C\$4</td><td>значения H, дм</td><td>5,030809249</td><td>\$C\$4>=0</td><td>Без привязки</td><td>5,030809249</td></tr></table>	Ячейка	Имя	Значение ячейки	Формула	Состояние	Допуск	\$B\$8	Значение объема бочки (V), дм3 D, дм	100	\$B\$8=100	Привязка	0	\$B\$4	значения D, дм	5,030789363	\$B\$4>=1	Без привязки	4,030789363	\$C\$4	значения H, дм	5,030809249	\$C\$4>=0	Без привязки	5,030809249					
Ячейка	Имя	Значение ячейки	Формула	Состояние	Допуск																											
\$B\$8	Значение объема бочки (V), дм3 D, дм	100	\$B\$8=100	Привязка	0																											
\$B\$4	значения D, дм	5,030789363	\$B\$4>=1	Без привязки	4,030789363																											
\$C\$4	значения H, дм	5,030809249	\$C\$4>=0	Без привязки	5,030809249																											
27																																
28																																
29																																
30																																
31																																
32																																

Рис. 5.32

Отчёт о результатах состоит из трёх таблиц. Первая таблица содержит сведения о целевой функции. В столбце «Исходное значение» приведены значения целевой функции до начала вычислений, а в столбце «Окончательное значение» – найденное значение. Во второй таблице приводятся значения искомых переменных, полученные в результате решения задачи. В третьей таблице показываются результаты оптимального решения для ограничений и граничных условий. Для ограничений в графе «Значение ячейки» приведены величины использованного ресурса, а в графе «Формула» – зависимости, которые были введены в диалоговое окно «Поиск решения». В графе «Состояние» слово «Привязка» означает отсутствие ресурса (в графе «Допуск» значение нуль). При неполном использовании ресурса в этой графе было бы приведено слово «Без привязки».

Для граничных условий приводятся аналогичные значения и слова с той лишь разницей, что вместо величины неиспользованного ресурса показана разность между значением переменной в найденном оптимальном решении и заданным для неё граничным условием.

Отчёт по устойчивости (рис. 5.33) состоит из двух таблиц. В первой таблице приводятся следующие значения для переменных:

результат решения задачи в графе «Окончательное значение»;
приведённый градиент («Приведенн. Градиент») – величина, приводимая при выборе некоторых методов решения оптимизационных задач [41].

	A	B	C	D	E
1	Microsoft Excel 15.0 Отчет об устойчивости				
2	Лист: [Пример 5_1.xls]Лист1				
3	Отчет создан: 16.08.2016 15:48:10				
4					
5					
6	Ячейки переменных				
7			Окончательное	Приведенн.	
8	Ячейка	Имя	Значение	Градиент	
9	\$B\$4	значения D, дм	5,030789363	0	
10	\$C\$4	значения H, дм	5,030809249	0	
11					
12	Ограничения				
13			Окончательное	Лагранжа	
14	Ячейка	Имя	Значение	Множитель	
15	\$B\$8	Значение объема бочки (V), дм3 D, дм	100	0,795103873	

Рис. 5.33

Во второй таблице приводятся:
окончательное значение ограничения в графе «Окончательное значение»;

множитель Лагранжа в графе «Лагранжа Множитель», который показывает на сколько изменится целевая функция при изменении правой части ограничения на единицу [41], то есть для данной задачи при увеличении объёма бочки на 1 дм^3 её общая поверхность (S) возрастёт на $0,795103873 \text{ дм}^2$.

В отчёте по пределам (рис. 5.34) показано в каких пределах могут изменяться переменные, вошедшие в оптимальное решение, при сохранении структуры оптимального решения:

приводятся значения X_j для оптимального решения;
приводятся нижние и верхние пределы изменения значений X_j , значения целевой функции при этих предельных значениях переменных.

Кроме этого, в отчёте указаны значения целевой функции при оптимальных значениях переменных. Далее приводятся нижние и верхние пределы изменения X_j и значения целевой функции при этих значениях переменных.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	Microsoft Excel 15.0 Отчет о пределах									
2	Лист: [Пример 5_1.xls]Лист1									
3	Отчет создан: 16.08.2016 15:48:10									
4										
5										
6	Целевая функция									
7	Ячейка	Имя	Значение							
8	\$B\$6	значение ц	119,26542							
9										
10										
11	Переменная			Нижний		Целевая функция	Верхний			
12	Ячейка	Имя	Значение	Предел		Результат	Предел		Целевая функция	Результат
13	\$B\$4	значения C	5,0307894	5,03079		119,2654206	5,030789		119,2654206	
14	\$C\$4	значения H	5,0308092	5,03081		119,2654206	5,030809		119,2654206	

Рис. 5.34

Пример 5.3 [42, с. 83-86]

Из 50 заготовленных брёвен (**ЗБ**) длиной 6,5 м необходимо изготовить наибольшее число комплектов срубов (**К**), в состав каждого из которых входит 2 детали длиной 2 м (деталь **А**) и 3 детали длиной 1,25 м (деталь **Б**).

Составим математическую модель задачи оптимизации для следующих переменных:

K - число комплектов срубов, шт.;

X_A - число деталей A , получаемых из одного бревна;

X_B - число деталей B , получаемых из одного бревна.

$$\left. \begin{array}{l} F(K) = K \rightarrow \max \\ g_1(X_A, X_B) = 2X_A + 1,25X_B \leq 6,5 \\ g_2(X_A, K) = 50X_A - 2K \geq 0 \\ g_3(X_B, K) = 50X_B - 3K \geq 0 \\ K \geq 0 \\ X_A \geq 0 \\ X_B \geq 0 \\ K - \text{целое} \\ X_A - \text{целое} \\ X_B - \text{целое} \end{array} \right\} .$$

В данной математической модели число переменных x_j ($n = 3$) равно числу ограничений g_i ($m = 3$), но все ограничения имеют вид неравенств и, следовательно (табл. 5.2), оптимизационная задача имеет множество решений и может быть найдено оптимальное решение.

Поскольку целевая функция и все ограничения являются линейными, переменные K , X_A и X_B в условиях задачи дискретные и целочисленные величины, то задача относится к задачам линейного целочисленного программирования (табл. 5.3).

Задача оптимизации относится к задачам по заказу, так как в её условиях сформулированы ограничения и граничные условия.

Представим данную математическую модель оптимизационной задачей в формате Excel для применения процедуры «Поиск решения» с исходными данными в режиме показа формул (рис. 5.35).

Вызовем надстройку «Поиск решения» и введём необходимые исходные данные задачи оптимизации (рис. 5.36).

В результате поиска симплекс-методом и методом ОПГ с целочисленной оптимальностью 0 % было получено одно наилучшее значение (рис. 5.37)

	A	B	C	D
1	ПАРАМЕТРЫ			
2	Переменные x_j:			
3	имя	K	X_A	X_B
4	значения, шт.			
5	Целевая функция:			
6	значение целевой функции (F), шт.	=B4		
7	Ограничения:			
8	g₁ (суммарная длина заготовок, полученных из одного бревна, м):			
9	значение левой части ограничения	=2*C4+1,25*D4		
10	g₂ (остатки заготовок A, полученных из 50 бревён, шт.):			
11	значение левой части ограничения	=50*C4-2*B4		
12	g₃ (остатки заготовок B, полученных из 50 бревён, шт.):			
13	значение левой части ограничения	=50*D4-3*B4		

Рис. 5.35

Параметры поиска решения

Оптимизировать целевую функцию:

До: ☒ Максимум ☐ Минимум ☐ Значения:

Изменяя ячейки переменных:

В соответствии с ограничениями:

☐ Сделать переменные без ограничений неотрицательными

Выберите метод решения:

Метод решения

Для гладких нелинейных задач используйте поиск решения нелинейных задач методом ОПГ, для линейных задач - поиск решения линейных задач симплекс-методом, а для негладких задач - эволюционный поиск решения.

Рис. 5.36

	A	B	C	D
1	ПАРАМЕТРЫ			
2	Переменные x_j:			
3	имя	K	X_A	X_B
4	значения, шт.	33	2	1,98
5	Целевая функция:			
6	значение целевой функции (F), шт.	33		
7	Ограничения:			
8	g_1 (суммарная длина заготовок, полученных из одного бревна, м):			
9	значение левой части ограничения	6,475		
10	g_2 (остатки заготовок А, полученных из 50 брёвен, шт.):			
11	значение левой части ограничения	34		
12	g_3 (остатки заготовок Б, полученных из 50 брёвен, шт.):			
13	значение левой части ограничения	0		

Рис. 5.37

Из данных рис. 5.37 следует, что из каждого бревна нужно выкраивать по две детали А и Б и из 50 брёвен можно получить 33 комплекта срубов. При этом значительное количество деталей А (34 шт.) в этих комплектах не используется.

Если же, например, технолог разработает несколько карт раскроя брёвен, включая полученную (табл. 5.6), то можно сравнить эти карты раскроя по их эффективности.

В качестве критерия эффективности для сравнения карт раскроя можно использовать такую же целевую функцию $F(K)$, но для других переменных:

X_1 – общее число брёвен, раскраиваемых по варианту раскроя № 1;

X_2 – общее число брёвен, раскраиваемых по варианту раскроя № 2;

X_3 – общее число брёвен, раскраиваемых по варианту раскроя № 3;

X_4 – общее число брёвен, раскраиваемых по варианту раскроя № 4.

Таблица 5.6

Карта раскроя бревна

Данные	Варианты раскроя одного бревна			
	№ 1	№ 2	№ 3	№ 4
Раскрой одного бревна:				
деталь А, шт.	3	2	1	0
деталь Б, шт.	0	2	3	5
отходы бревна после раскроя, м	0,5	0	0,75	0,25
Число раскраиваемых брёвен, шт.	X_1	X_2	X_3	X_4

Составим математическую модель задачи оптимизации для этих переменных:

$$\left. \begin{aligned} F(K) &= K \rightarrow \max \\ g_1(x_1, x_2, x_3, x_4) &= 3B = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 50 \\ g_2(x_1, x_2, x_3, K) &= 3x_1 + 2x_2 + x_3 - 2K \geq 0 \\ g_3(x_2, x_3, x_4, K) &= 2x_2 + 3x_3 + 5x_4 - 3K \geq 0 \\ x_1, x_2, x_3, x_4, K &\geq 0 \\ x_1, x_2, x_3, x_4, K &\text{ - целое} \end{aligned} \right\} .$$

В данной математической модели число переменных x_j ($n = 5$) больше числа ограничений g_i ($m = 3$), все ограничения имеют вид неравенств и, следовательно (табл. 5.2), оптимизационная задача имеет множество решений и может быть найдено оптимальное решение.

Поскольку целевая функция и все ограничения являются линейными, переменные K, x_1, x_2, x_3, x_4 в условиях задачи дискретные и целочисленные величины, то задача относится к задачам линейного целочисленного программирования (табл. 5.3).

Представим данную математическую модель оптимизационной задачей в формате Excel для применения процедуры «Поиск решения» с исходными данными в режиме показа формул (рис. 5.38).

	A	B	C	D	E	F
1	ПАРАМЕТРЫ					
2	Переменные x_j:					
3	имя	K	x_1	x_2	x_3	x_4
4	значения, шт.	0	0	0	0	0
5	Целевая функция:					
6	значение целевой функции (F), шт.	=B4				
7	Ограничения:					
8	g_1 (суммарная число раскраиваемых бревен, шт.):					
9	значение левой части ограничения	=СУММ(C4:F4)				
10	g_2 (остаток деталей A, неиспользуемых в комплектах срубов, шт.):					
11	значение левой части ограничения	=3*C4+2*D4+E4-2*B4				
12	g_3 (остаток деталей B, неиспользуемых в комплектах срубов, шт.):					
13	значение левой части ограничения	=2*D4+3*E4+5*F4-3*B4				

Рис. 5.38

Вызовем надстройку «Поиск решения» и введём необходимые исходные данные задачи оптимизации (рис. 5.39).

Параметры поиска решения

Оптимизировать целевую функцию:

До: ☒ Максимум ☐ Минимум ☐ Значения:

Изменяя ячейки переменных:

В соответствии с ограничениями:

☐ Сделать переменные без ограничений неотрицательными

Выберите метод решения:

Метод решения
Для гладких нелинейных задач используйте поиск решения нелинейных задач методом ОПГ, для линейных задач - поиск решения линейных задач симплекс-методом, а для негладких задач - эволюционный поиск решения.

Справка Найти решение Закрыть

Рис. 5.39

В результате поиска оптимального решения симплекс-методом с целочисленной оптимальностью 0 % было получено одно максимальное значение целевой функции (рис. 5.40).

	A	B	C	D	E	F
1	ПАРАМЕТРЫ					
2	Переменные x_j:					
3	ИМЯ	K	x_1	x_2	x_3	x_4
4	значения, шт.	41	0	41	0	9
5	Целевая функция:					
6	значение целевой функции (F), шт.	41				
7	Ограничения:					
8	g_1 (суммарная число раскраиваемых бревен, шт.):					
9	значение левой части ограничения	50				
10	g_2 (остаток деталей A, неиспользуемых в комплектах срубов, шт.):					
11	значение левой части ограничения	0				
12	g_3 (остаток деталей B, неиспользуемых в комплектах срубов, шт.):					
13	значение левой части ограничения	4				

Рис. 5.40

Из данных рис. 5.40 следует, что если по карте раскроя № 2 выкраивать по две детали А и Б из 41 бревна и 9 брёвен раскраивать по карте раскроя № 4, то можно получить уже не 33, а 41 комплект срубов. При такой схеме раскроя всех 50 брёвен не используются в комплектах срубов только 4 детали Б с общей длиной 5 м.

При использовании для поиска максимума целевой функции метода ОПГ с целочисленной оптимальностью 0 % было получено такое же оптимальное значение целевой функции, но для другой комбинации вариантов раскроя (рис. 5.41): по карте раскроя № 2 нужно выкраивать по две детали А и Б из 42 брёвен и 8 брёвен раскраивать по карте раскроя № 4. При такой схеме раскроя всех брёвен не используются в комплектах срубов 2 детали А и 1 деталь Б с общей длиной 5,25 м.

	A	B	C	D	E	F
1	ПАРАМЕТРЫ					
2	Переменные x_j:					
3	имя	K	x_1	x_2	x_3	x_4
4	значения, шт.	41	0	42	0	8
5	Целевая функция:					
6	значение целевой функции (F), шт.	41				
7	Ограничения:					
8	g_1 (суммарная число раскраиваемых бревен, шт.):					
9	значение левой части ограничения	50				
10	g_2 (остаток деталей А, неиспользуемых в комплектах срубов, шт.):					
11	значение левой части ограничения	2				
12	g_3 (остаток деталей Б, неиспользуемых в комплектах срубов, шт.):					
13	значение левой части ограничения	1				

Рис. 5.41

По данным В.Н. Андреева и Ю.Ю. Герасимова [42], помимо этих решений существуют ещё три решения раскроя брёвен для формирования 41 комплекта срубов (табл. 5.7).

Поэтому окончательный вариант раскроя, который будет использован на практике, должен принять технолог по дополнительным критериям, например, по количеству образующихся остатков от раскроя 50 брёвен.

Таблица 5.7

Варианты решения

Переменная	Решения				
	1	2	3	4	5
x_1	0	0	0	1	0
x_2	41	41	42	40	40
x_3	0	1	0	1	2
x_4	9	8	8	8	8
K	41	41	41	41	41

С другими оптимизационными задачами и примерами их практического решения в среде Excel можно познакомиться в книгах [41, 42, 45, 46].

Пример 5.4

В прикладном научном исследовании изучалось влияние на водостойкость древесностружечных плит OSB двух технологических факторов:

Z_1 - расхода фенолформальдегидных смол, мас. % смолы от древесной стружки (по сухим веществам);

Z_2 – доля карданола в фенолах смолы, мас. %.

В качестве показателей водостойкости измерялись разбухание плит в воде (S_{24}) и их водопоглощение (W_{24}) за 24 часа. Для этих показателей плит были получены адекватные экспериментально-статистические модели в виде следующих регрессионных функций:

$$S_{24} = 388,21 - 56,18Z_1 + 8,21Z_2 - 0,6967Z_1Z_2 + 2,1708Z_1^2 + 0,1347Z_2^2;$$

$$W_{24} = 19,08Z_1 - 0,8292Z_1^2.$$

Для определения значений технологических факторов, обеспечивающих наилучшую водостойкость плит (наименьшие значения S_{24} и W_{24}), необходимо было решить задачу двухкритериальной оптимизации.

Для решения поставленной задачи был применён один из методов свёртки целевых функций [41-44] – метод однокритериальной оптимизации обобщённой целевой функции ($F_{\text{обобщ}}$), которая записывается следующим образом [41, с.]

$$F_{\text{обобщ}}(Z_1, Z_2) = \sum_{k=1}^s \alpha_k \frac{F_k}{F_k^{\text{норм}}},$$

где F_k – k -ая целевая функция,

$\frac{F_k}{F_k^{\text{норм}}}$ – нормирующее значение k -ой целевой функции,

S – число целевых функций,

α_k – коэффициент веса k -ой целевой функции.

Экспертной оценкой были приняты следующие весовые коэффициенты для разбухания в воде ($\alpha_1 = 0,8$) и водопоглощения ($\alpha_2 = 0,8$) плит.

Для получения нормирующих значений целевых функций были составлены математические модели задач оптимизации для поиска оптимальных решений для каждого показателя водостойкости плит:

$$\left. \begin{aligned} F_1(Z_1, Z_2) = S_{24} &= 388,21 - 56,18Z_1 + 8,21Z_2 - 0,6967Z_1Z_2 + 2,1708Z_1^2 + \\ &+ 0,1347Z_2^2 \rightarrow \min \\ Z_1 &\geq 12 \\ Z_1 &\leq 16 \\ Z_2 &\geq 0 \\ Z_2 &\leq 15 \\ S_{24} &\geq 0 \end{aligned} \right\} ;$$

$$\left. \begin{aligned} F_2(Z_1) = W_{24} &= 19,08Z_1 - 0,8292Z_1^2 \rightarrow \\ \min \\ Z_1 &\geq 12 \\ Z_1 &\leq 16 \end{aligned} \right\} .$$

Граничные условия в моделях соответствуют факторному пространству при получении регрессионных уравнений для показателей водостойкости плит.

Результаты решений данных двух оптимизационных задач в программе Excel методом ОПГ приведены на рис. 5.42. Значения целевых функций для полученных оптимальных значений были взяты в качестве нормирующих и с ними было составлено выражение для обобщённой целевой функции и соответствующая математическая модель задачи оптимизации:

$$\begin{aligned} F_{\text{обобщ}}(Z_1, Z_2) &= \sum_{k=1}^2 \alpha_k \frac{F_k}{F_k^{\text{норм}}} = \\ &= 0,8 \frac{(388,21 - 56,18Z_1 + 8,21Z_2 - 0,6967Z_1Z_2 + 2,1708Z_1^2 + 0,1347Z_2^2)}{22,67} + 0,2 \frac{(19,08Z_1 - 0,8292Z_1^2)}{93,005}; \end{aligned}$$

$$\left. \begin{array}{l} F_{\text{обобщ}}(Z_1, Z_2) \rightarrow \min \\ Z_1 \geq 12 \\ Z_1 \leq 16 \\ Z_2 \geq 0 \\ Z_2 \leq 15 \\ F_{\text{обобщ}} \geq 0 \end{array} \right\} .$$

Решение задачи для данной модели в программе Excel методом ОПГ приведено на рис. 5.42. При равенстве весовых коэффициентов свойств плит для оценки их водостойкости решение оптимизационной задачи представлено на рис. 5.43

	A	B	C
1	ПАРАМЕТРЫ		
2	Переменные x_j:		
3	имя	Z1, %	Z2, %
4	значения, шт.	13,76	5,1094
5	Целевая функция:		
6	значение целевой функции (S_{24}), %	22,67	

	A	B
1	ПАРАМЕТРЫ	
2	Переменные x_j:	
3	имя	Z1, %
4	значения, шт.	16
5	Целевая функция:	
6	значение целевой функции (W_{24}), %	93,005

	A	B	C
1	ПАРАМЕТРЫ		
2	Переменные x_j:		
3	имя	Z1, %	Z2, %
4	значения, шт.	13,853	5,351
5	Целевая функция:		
6	значение целевой функции ($F_{\text{обобщ}}$), %	1,0266	

Рис. 5.42

	А	В	С
1	ПАРАМЕТРЫ		
2	Переменные x_j:		
3	имя	Z1, %	Z2, %
4	значения, шт.	14,187	6,2132
5	Целевая функция:		
6	значение целевой функции ($F_{\text{обобщ}}$), %	1,0631	

Рис. 5.43

5.3.2. Применение для решения оптимизационных задач других компьютерных программ

Пакет программ Statgraphics имеет ограниченные возможности для решения задач оптимизации. В тех версиях пакета, в которых такие возможности имеются, можно решать только задачи линейного программирования. Алгоритмы и конкретные примеры решения оптимизационных задач с помощью Statgraphics подробно описаны Р.З. Пенем [35].

Математический пакет Mathcad можно использовать для исследования экстремумов функций, поиска их минимальных и максимальных значений, решения систем линейных и нелинейных уравнений с использованием методов линейного программирования [46-48].

Задачи оптимизации, связанные с технологией упаковочных производств, проектированием новых технических устройств (самолёты, морские суда, машины и др.) можно решать, используя математический пакет Matlab [49,50].

Существуют и специальные компьютерные программы для решения оптимизационных задач, например, программа ASPEN HYSYS, используемая в химии и химической технологии [51].

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Глебов И.Т., Глухих В.В., Назаров И.В. Научно-техническое творчество: учеб. пособие. – Екатеринбург: Урал. гос. лесотехн. ун-т, 2002. – 238 с.
2. Назаров И.В. История и философия науки: учеб. пособие. Изд. 3-е, перераб. и доп. – Екатеринбург : УГЛТУ, 2011. – 198 с.
3. Черняк В.З. История и философия техники: пособие для аспирантов. – М.: Кнорус, 2006. – 576 с.
4. Бармин А.В. [и др.] История науки и техники: учеб. пособие; под ред. В.В. Запария. – 3-е изд., испр. и доп. – Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2009. – 254 с.
5. Шейпак А.А. История науки и техники. Материалы и технологии: учеб. пособие. – 2-е изд., стер. – М.: МГИУ, 2004. – Ч. 1. – 192 с.
6. Самин Д.К. Сто великих научных открытий. – М.: Вече, 2008. – 480 с.
7. Ломов В.М. Сто великих научных достижений России. – М.: Вече, 2011. – 432 с.
8. Фокель Ф.Г. Собрание лесной науки. – Архангельск: Северо-Западное книжное изд-во, 1996. – Ч. 1. – 208 с.
9. Мелехов И.С. Очерк развития науки о лесе в России: монография. – 2-е изд., репр. – М.: МГУЛ, 2004. – 209 с.
10. Лесоводственная наука на Урале / сост. Н.Н. Чернов; ред. совет Н.Н. Чернов [и др.]. – Екатеринбург: УГЛТУ, 2006. – 360 с.
11. Ожегов С.С. История ландшафтной архитектуры. Краткий очерк. – М.: Стройиздат, 1993. – 240 с.
12. История развития лесной промышленности Среднего Урала / сост. М. Ф. Маслюков. – Екатеринбург: Сред.-Урал. кн. изд-во, 1997. – 400 с.
13. Гарин В.А., Разиньков Е.М., Чернышев А.Н. История мебели древнего мира и Западной Европы: учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности 260200 (250303) "Технология деревообработки". – СПб.: Ноосфера СПб, 2006. – 152 с.
14. Балаченкова А.П. История бумаги и бумажного производства: учеб. пособие и хрестоматия. – СПб.: СПб ГТУРП, 2011. – 52 с.
15. Беляева С. Восточная десятка. Китай предложил свой рейтинг научных и технических достижений 2011 года // Еженедельная газ. научного сообщества «Поиск». – 2012. – 27 января (№ 4). – С. 14.

16. Аствацатурян М. Десять первых // Еженедельная газ. научно-го сообщества «Поиск». – 2012. – 28 декабря (№ 52). – С. 15.
17. Назаров И.В., Новикова О.Н. Методология научного исследования [Электронный ресурс]: методические указания (для изучения теоретического курса) для студентов всех специальностей и направлений. – Екатеринбург: Урал. гос. лесотехн. ун-т, 2014. – 43 с.
18. Романенко В.Н., Орлов А.Г., Никитина Г.В. Книга для начинающего исследователя-химика. – Л.: Химия, 1987. – 280 с.
19. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. – М.: Высш. шк., 1985. – 327 с.
20. Чарыков, А.К. Математическая обработка результатов химического анализа. – Л.: Химия, 1984. – 168 с.
21. ГОСТ 8.401-80. Государственная система обеспечения единства измерений. Классы точности средств измерений. Общие требования. – Введ. 1981-07-01. – М.: Изд-во стандартов, 1981. – 13 с.
22. ГОСТ 8.207-76. Государственная система обеспечения единства измерений. Прямые измерения с многократными наблюдениями. Методы обработки результатов наблюдений. Общие положения. – Введ. 1977-01-01. – М.: ИПК Изд-во стандартов, 2001. – 7 с.
23. МИ 2083-90. Государственная система обеспечения единства измерений. Измерения косвенные. Определения результатов измерений и оценивание их погрешностей. – М.: Изд-во стандартов, 1991. – 10 с.
24. Вадзинский, Р. Статистические вычисления в среде Excel [Текст] / Р. Вадзинский. - СПб.: Питер, 2008. - 608 с.
25. ГОСТ Р 15.000-94. Система разработки и постановки продукции на производство. Основные положения. – Введ. 1995-01-01. М.: ИПК Изд-во стандартов, 1994. – 14 с.
26. Гоберман В.А., Гоберман Л.А. Технология научных исследований - методы, модели, оценки: учеб. пособие, 2-е изд. стереотипное. – М.: МГУЛ, 2002. – 390 с.
27. Пошарников Ф.В. Моделирование и оптимизация процессов в лесном комплексе [Электронный ресурс]: учеб. пособие. – Воронеж: ВГЛТА, 2014. – 270 с. Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=64147.
28. ГОСТ 15.101-98. Система разработки и постановки продукции на производство. Порядок выполнения научно-исследовательских работ. – Введ. 2000-07-01. М.: ИПК Изд-во стандартов, 1999. – 10 с.
29. ГОСТ 15.011-96. Система разработки и постановки продукции на производство. Патентные исследования. Содержание и порядок проведения. – Введ. 1996-01-01. М.: ИПК Изд-во стандартов, 1996. – 22 с.

30. Романенко В.Н., Никитина Г.В., Неверов В.С. Работа в Интернете: от бытового до профессионального поиска: практ. пособие. – СПб.: Профессия, 2008. – 416 с.

31. ГОСТ Р 50995.0.1-96. Технологическое обеспечение создания продукции. Основные положения. – Введ. 1997-07-01. М.: ИПК Изд-во стандартов, 1997. – 11 с.

32. ГОСТ 15.001-88. Система разработки и постановки продукции на производство. Продукция производственно-технического назначения. – Введ. 1989-03-01. М.: ИПК Изд-во стандартов, 1989. – 5 с.

33. Халафян А.А. Статистический анализ данных: учебник. 3-е изд. – М.: ООО «Бином-Пресс», 2008. — 512 с.

34. Пен Р.З. Планирование эксперимента в Statgraphics. – Красноярск: СибГТУ-Красноярский писатель, 2012. – 270 с.

35. Тюрин Ю.Н., Макаров А.А. Анализ данных на компьютере. М.: Финансы и статистика, 1995. – 384 с.

36. Рекомендации по стандартизации Р 50.1.040-2002. Статистические методы. Планирование экспериментов. Термины и определения. – Введ. 2003-07-01. М.: ИПК Изд-во стандартов, 2002. – 36 с.

37. Саутин С.Н., Пунин А.Е. Мир компьютеров и химическая технология. – Л.: Химия, 1991. – 144 с.

38. Пижурин А.А., Пижурин А.А. (мл.), Пятков В.Е. Методы и средства научных исследований [Электронный ресурс]: учебник. — М.: ИНФРА-М, 2016. — 264 с. Режим доступа <http://www.znaniyum.com>.

39. Дэниел К. Применение статистики в промышленном эксперименте. – М.: Мир, 1979. – 300 с.

40. Дрейпер, Н. Смит Г. Прикладной регрессионный анализ: В 2-х кн. – М.: Финансы и статистика, 1986. – 1987.

41. Курицкий Б.Я. Поиск оптимальных решений средствами Excel 7.0. – СПб.: ВНУ – Санкт-Петербург, 1997. – 384 с.

42. Андреев В.Н., Герасимов Ю.Ю. Принятие оптимальных решений: теория и применение в лесном комплексе. – Йоэнсуу: Издательство университета Йоэнсуу, 1999. – 200 с.

43. Леоненков А.В. Решение задач оптимизации в среде MS Excel. – СПб.: БХВ-Петербург, 2005. – 704 с. Режим доступа: <http://znaniyum.com>.

44. Пижурин, А.А. Моделирование и оптимизация процессов деревообработки: учебник. – М.: НИЦ ИНФРА-М, 2016. – 375 с. Режим доступа: <http://znaniyum.com>.

45. Минько, А.А. Принятие решений с помощью Excel. Просто как дважды два. — М.: Эксмо, 2007. — 240 с.

46. Холоднов В.А. Системный анализ и принятие решений. Компьютерное моделирование и оптимизация объектов химической технологии в Mathcad и Excel: учебное пособие / В.А. Холоднов, В.П. Решетиловский, М.Ю. Лебедева, Е.С. Боровинская. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2007. – 425 с.

47. Макаров, Е.Г. Mathcad: учебный курс. – СПб.: Питер, 2009. – 384 с.

48. Холоднов В.А. [и др.]. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов. Практическое руководство: учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по направлению подготовки бакалавров 553000 - "Системный анализ и управление" по дисциплине "Системный анализ химических технологий". – СПб.: Профессионал, 2003. – 480 с.

49. Карпунин И.И. Моделирование и оптимизация технологических процессов применительно к упаковочному производству: учеб.-метод. пособие для студентов специальности 1-36 2002 «Упаковочное производство». – Минск: БИТУ, 2013. – 124 с.

50. Морозов В.К., Рогачев Г.Н. Моделирование информационных и динамических систем: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по направлению подготовки "Автоматизация и управление". – М.: Академия, 2011. – 384 с.

51. Бочкарев В.В. Оптимизация химико-технологических процессов: учеб. пособие. Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томск. политехн. ун-та, 2014. – 264 с.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	3
Глава 1. ОБЩИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О НАУКЕ.....	5
1.1. Термины и определения.....	5
1.2. Классификация научных исследований.....	8
1.3. История науки и её роль в жизни общества.....	9
1.4. Организация научной деятельности в России.....	16
1.5. Контрольные вопросы и задания.....	22
Глава 2. МЕТОДЫ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ.....	23
2.1. Классификация методов научных исследований.....	23
2.2. Количественные измерения.....	24
2.2.1. Характеристика результатов измерений как случайных величин.....	24
2.2.2. Погрешности и ошибки измерений.....	28
2.2.3. Формы представления конечных результатов измерений.....	37
2.3. Примеры статистической оценки и анализа количественных результатов наблюдений и экспериментов.....	37
2.3.1. Получение и представление окончательного результата количественных многократных измерений.....	37
2.3.2. Оценка и сравнение случайных ошибок измерений.....	41
2.4. Контрольные вопросы и задания.....	47
Глава 3. СОСТАВ ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ.....	48
3.1. Прикладные научно-исследовательские работы.....	49
3.2. Опытнo-технологические и опытнo-конструкторские работы.....	61
Глава 4. ПЛАНИРОВАНИЕ И СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТА.....	64
4.1. Планирование и корреляционный анализ результатов эксперимента.....	66
4.1.1. Составление планов эксперимента и корреляционный анализ его результатов.....	68

4.1.2. Корреляционный анализ результатов эксперимента	69
4.1.2.1. Корреляционный анализ двух случайных величин.....	69
4.1.2.2. Корреляционный анализ трёх и более случайных величин.....	75
4.1.3. Контрольные вопросы и задания.....	77
4.2. Планирование и дисперсионный анализ результатов эксперимента.....	78
4.2.1. Однофакторный дисперсионный анализ	81
4.2.2. Двухфакторный дисперсионный анализ	85
4.2.2.1. Двухфакторный дисперсионный анализ без повторений опытов.....	86
4.2.2.2. Двухфакторный дисперсионный анализ с повторениями опытов.....	87
4.2.3. Многофакторный дисперсионный анализ.....	90
4.2.4. Контрольные вопросы и задания.....	95
4.3. Планирование и регрессионный анализ результатов эксперимента.....	96
4.3.1. Классический регрессионный анализ.....	98
4.3.2. Математическое планирование эксперимента для проведения регрессионного анализа его результатов.....	129
4.3.2.1. Планы первого порядка.....	133
4.3.2.2. Планы второго порядка.....	144
4.3.4. Планирование эксперимента для изучения регрессионных зависимостей «состав смеси - свойство».....	172
4.3.5. Планирование промышленных экспериментов для получения регрессионных моделей объекта.....	173
4.3.6. Контрольные вопросы и задания.....	175
Глава 5. РЕШЕНИЕ ОПТИМИЗАЦИОННЫХ ЗАДАЧ.....	177
5.1. Термины и определения.....	177
5.2. Последовательность работы при поиске и принятии оптимальных решений.....	181
5.2.1. Содержательная постановка и формализация оптимизационной задачи.....	182
5.2.2. Получение исходных данных и адекватной математической модели объекта.....	187
5.2.3. Решение оптимизационных задач.....	188

5.2.3.1. Графические, аналитические и численные методы решения оптимизационных задач.....	189
5.2.3.2. Экспериментальные методы решения оптимизационных задач.....	199
5.2.4. Анализ решения и принятие оптимального решения.....	205
5.3. Применение компьютерных программ для решения оптимизационных задач.....	206
5.3.1. Применение для решения оптимизационных задач табличного процессора Microsoft Excel.....	206
5.3.2. Применение для решения оптимизационных задач других компьютерных программ.....	232
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК.....	233

Учебное издание

Виктор Владимирович Глухих

ПРИКЛАДНЫЕ НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

ISBN 978-5-94984-590-5



Редактор Р.В. Сайгина
Компьютерная верстка О.А. Казанцевой

Подписано в печать
Усл. печ. л. 13,95
Тираж 50 экз.

Формат 60х84 1/16
Уч.-изд. л. 12,69
Заказ №

ФГБОУ ВО «Уральский государственный лесотехнический университет»
620100, Екатеринбург, Сибирский тракт, 37
Тел.: 8(343)262-96-10. Редакционно-издательский отдел

Типография ООО «ИЗДАТЕЛЬСТВО УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ ЦЕНТР УПИ»
620062, РФ, Свердловская область, Екатеринбург, ул. Гагарина, 35а, оф. 2