

Министерство образования и науки РФ
Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ГОУВПО «АмГУ»)

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ

Учебно-методический комплекс дисциплины
по направлению подготовки
010600.68 – «Прикладные математика и физика»

Утвержден на заседании кафедры математического анализа и моделирования факультета математики и информатики «13» сентября 2010г., (протокол № 1 от 13.09.2010)
Зав. кафедрой _____ В.В. Сельвинский

*ББК
Т 80*

*Печатается по решению
редакционно-издательского совета
факультета математики и
информатики
Амурского государственного
университета*

Масловская А.Г.

Математические методы обработки данных. Учебно-методический комплекс дисциплины для студентов АмГУ по направлению подготовки магистратуры 010600.68 – «Прикладные математика и физика» – Благовещенск: Амурский гос. ун-т, 2010 – 229с.

Учебно-методический комплекс по дисциплине содержит рабочую программу дисциплины, краткий курс лекций, варианты индивидуальных заданий к практическим занятиям, а также контролирующие материалы для осуществления контроля усвоения знаний учащимися.

© Амурский государственный университет, 2010

СОДЕРЖАНИЕ

1	Цели и задачи дисциплины, ее место в учебном процессе	6
1.1	Цели и задачи курса	6
1.2	Требования к уровню содержания дисциплины	6
1.3	Перечень дисциплин с указанием разделов (тем), усвоение которых необходимо при изучении данной дисциплины	6
2	Содержание дисциплины	7
2.1	Федеральный компонент	7
2.2	Наименование тем, их содержание, объем в лекционных часах	7
2.3	Лабораторные занятия, их содержание, и объем в часах	9
2.4	Самостоятельная работа студентов	10
2.5	Вопросы к зачету	11
2.6	Виды контроля	13
2.7	Требования к знаниям студентов, предъявляемые на экзамене	14
3	Краткий курс лекций	14
3.1	Основы математического и компьютерного моделирования	14
3.2	Методы оценки ошибок вычислений	28
3.3	Математическая обработка результатов опыта: таблицы и разности. Интегрирование и дифференцирование функций, заданных таблично.	30
3.4	Графическая обработка данных. Обработка экспериментальных данных методом наименьших квадратов.	44
3.5	Основы теории подобия и размерностей. Автомодельность.	48
3.6	Методы статистической обработки и анализа результатов измерений.	56
3.7	Планирование численного и физического экспериментов.	82
4	Учебно-методические материалы по дисциплине	169
4.1	Лабораторный практикум	169
	Лабораторная работа №1	169

Лабораторная работа №2	185
Лабораторная работа №3	193
Лабораторная работа №4	201
Лабораторная работа №5	211
Лабораторная работа №6	216
Лабораторная работа №7	223
4.2 Перечень обязательной литературы	227
4.3 Перечень дополнительной литературы	227
4.4 Перечень методических пособий	228
5 Необходимое техническое и программное обеспечение	228
6 Учебно-методическая карта дисциплины	229

1 ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ, ЕЕ МЕСТО В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ

1.1 Цели и задачи курса

Дисциплина «Математические методы обработки данных» занимает важное место в системе прикладного математического образования. Целью преподавания дисциплины является изучение: фундаментальных основ теории обработки данных физического и вычислительного экспериментов в различных областях применения, современных методов компьютерной диагностики данных, а также освоение методов анализа результатов реализации математических моделей, проектируемых с помощью вычислительной техники.

По завершению курса обучаемые должны приобрести устойчивые навыки и умения, позволяющие освоить основные методы параметрического и непараметрического оценивания; изучить основные современные математические методы учета априорной экспертной информации; использовать современные методы выделения детерминированных компонент из хаотических рядов и методов их прогнозирования.

1.2 Требования к уровню освоения содержания дисциплины

В результате освоения дисциплины студенты должны иметь четкое представление об основных классификациях математических методов обработки данных, о принципах построения оценок, об основных этапах планирования эксперимента, о возможностях программных реализаций с помощью инструментальных средств, об особенностях проведения вычислительных экспериментов. В процессе обучения студенты должны приобрести навыки решения прикладных задач с помощью средств визуального моделирования, самостоятельно осуществлять выбор методики решения и построения алгоритма той или иной задачи, давать полный анализ результатов решения и оценивать границы применимости выбранного метода.

1.3 Перечень дисциплин с указанием разделов (тем), усвоение которых студентами необходимо при изучении данной дисциплины

Данный курс базируется на ранее изученных дисциплинах: «Численные методы», «Теория вероятностей и математическая статистика», «Программирование», связан с дисциплиной: «Математическое и компьютерное моделирование», и дает основу для применения методов обработки данных физического и вычислительного эксперимента в ходе выполнения магистерской диссертации.

2 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2.1 Федеральный компонент

Дисциплина «Математические методы обработки данных» является дисциплиной, входящей в блок дисциплин федерального компонента для направления 010600.68 – «Прикладные математика и физика» по циклу: «Специальные дисциплины магистра». Тематическое содержание курса государственным стандартом не ограничено.

2.2 Наименование тем, их содержание, объем в лекционных часах **ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ЛЕКЦИОННЫХ ЗАНЯТИЙ**

Наименование темы	Кол-во часов
Введение в предмет «Математические метода анализа и обработки данных физического и вычислительного экспериментов».	2
1. Основы математического и компьютерного моделирования	2
2. Методы оценки ошибок вычислений	2
3. Математическая обработка результатов опыта: таблицы и разности. Интегрирование и дифференцирование функций,	2

заданных таблично.	
4. Графическая обработка данных. Обработка экспериментальных данных методом наименьших квадратов.	2
5. Основы теории подобия и размерностей. Автомодельность.	2
6. Методы статистической обработки и анализа результатов измерений.	12
7. Планирование численного и физического экспериментов	10
8. Математические методы обработки изображений	2
Итого за семестр	36

Введение в предмет «Математические методы анализа и обработки данных физического и вычислительного экспериментов».

Введение в анализ данных. Основные понятия и классификация задач анализа данных. Методы и подходы к обработке неопределенных данных.

Тема 1. Основы математического и компьютерного моделирования

Построение моделей. Основные вопросы методологии моделирования. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент. Схема вычислительного эксперимента. Принципы, этапы и методы построения моделей.

Тема 2. Методы оценки ошибок вычислений

Этапы решения прикладной задачи и классификация ошибок. Абсолютная и относительная погрешности. Оценка погрешностей значения функции. Способы приближенных вычислений по заданной формуле. Приближенные вычисления по формулам с использованием инструментальных пакетов. Вероятностные и эмпирические методы оценки ошибок.

Тема 3. Математическая обработка результатов опыта: таблицы и разности. Интегрирование и дифференцирование функций, заданных таблично.

Табулированные функции. Задачи интерполяции и экстраполяции. Методы аппроксимации функций. Особые случаи для кусочно-заданных функций. Формулы численной аппроксимации производных. Проблемы численного дифференцирования и интегрирования.

Тема 4. Графическая обработка данных. Обработка экспериментальных данных методом наименьших квадратов.

Постановка задачи. Графический способ подбора формул. Подбор формул по данным опыта по методу наименьших квадратов. Нахождение приближающих функций в виде линейных функций и квадратного трехчлена. Нахождение приближающих функций в виде других элементарных функций. Оценка среднеквадратичного отклонения. Приближение функций с помощью инструментальных средств.

Тема 5. Основы теории подобия и размерностей. Автомодельность.

Анализ подобия и размерности. П-теорема. Примеры применения анализа размерностей. Автомодельность, показатель автомодельности. Примеры физических приложений с использованием безразмерных переменных. Измерения в физических системах. Физические парадоксы при моделировании.

Тема 6. Методы статистической обработки и анализа результатов измерений.

Особенности фиксации и статистической обработки результатов моделирования систем на ЭВМ; анализ и интерпретация результатов машинного моделирования; обработка результатов машинного эксперимента.

Основные понятия прикладной статистики. Важные законы распределения вероятностей. Основы проверки статистических гипотез. Начала теории оценивания. Анализ одной и двух нормальных выборок. Однофакторный анализ. Двухфакторный анализ. Линейный регрессионный анализ. Независимость признаков. Критерии согласия. Выборочные исследования. Многомерный анализ и другие статистические методы. Комплексная статистическая аналитика. Методы контроля качества. Анализ временных рядов.

Тема 7. Планирование численного и физического экспериментов

Основные положения теории планирования эксперимента. Общие принципы планирования эксперимента. Варианты постановок задач теории планирования эксперимента. Параметр оптимизации. Обобщенный параметр оптимизации. Фактор. Полный факторный эксперимент. Дробный факторный эксперимент. Проведение эксперимента. Обработка результатов эксперимента.

Тема 8. Математические методы обработки изображений

Цифровые изображения в Matlab. Преобразование яркости и пространственная фильтрация. Цифровые изображения в Matlab. Обработка в частотной области. Цифровые изображения в Matlab. Цифровые изображения в Matlab. Восстановление изображений. Цифровые изображения в Matlab. Обработка цветных изображений. Цифровые изображения в Matlab. Вейвлеты. Сжатие изображений.

2.3 Практические (семинарские) занятия, их содержание и объем в часах.

ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

Наименование темы	Кол-во часов
1. Методы оценки погрешностей.	2
2. Обработка экспериментальных данных. Интерполирование функций.	4
3. Обработка экспериментальных данных методом наименьших квадратов	4
4. Применение операций численного дифференцирования и интегрирования в обработке экспериментальных данных	2
5. Статистическая обработка массива данных	4
6. Сравнение двух выборок	4
7. Дисперсионный анализ	4

8. Корреляционный анализ	4
9. Представление и защита индивидуальных работ	4
Итого	36

При выполнении лабораторных работ по данному курсу студенты должны продемонстрировать умение решать прикладные задачи. При прохождении практикума на ЭВМ рекомендованы ППП Matlab 8.0, ППП Statistica, ППП SPSS.

Лабораторная работа выполняется строго в соответствии с выданным преподавателем заданием и вариантом. Завершающим этапом выполнения лабораторной работы является оформление отчета. Отчет содержит: титульный лист, лист задания, раздел, содержащий теоретические основы соответствующего раздела курса, включая расчетные формулы основного метода и расчет погрешности метода, раздел, содержащий описание программной реализации: листинг программного блока (описание интерфейса программы можно вынести в приложение), раздел, содержащий описание результатов, полученных с использованием возможностей ППП, список использованной литературы.

2.4 Самостоятельная работа студентов (42 час.).

В качестве самостоятельной работы по дисциплине «Математические методы обработки данных» студентам предлагается выполнить индивидуальную контрольную работу по составлению полного факторного эксперимента. Данная работа должна содержать математическую модель, ее теоретическое обоснование, алгоритм решения и программную реализацию в ППП Matlab (собственный программный блок и/или использование встроенных функций пакета), обязательным элементом является графический интерфейс пользователя. Работа должна отвечать требованиям, предъявляемым к оформлению курсовых работ, и содержать разделы 1-4, описанные ниже.

ПРАВИЛА ОФОРМЛЕНИЯ ЗАЧЕТНЫХ РАБОТ

Оформлять работу следует четко и аккуратно, придерживаясь основных правил оформления отчетных работ:

1. Титульный лист (содержит: наименование вуза, кафедра, ФИО исполнителя, № группы, курс, дисциплина, тема лаб. работы, вариант, выполнил, проверил и т. д.), содержание, введение.

Основная часть.

2. Лист задания (содержит предложенное задание). Раздел, содержащий теоретические основы соответствующего раздела курса (включая подробный алгоритм основного метода).

3. Раздел, содержащий описание программной реализации. Листинг программного блока и описание интерфейса программы (если таковой имеется) можно вынести в приложение. Предлагаемый ППП – Matlab.

4. Заключение, список использованной литературы.

2.5 Вопросы к зачету

1. Основные понятия и классификация задач анализа данных.
2. Методы и подходы к обработке неопределенных данных.
3. Основные вопросы методологии моделирования.
4. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент.

Схема вычислительного эксперимента.

5. Принципы, этапы и методы построения моделей.
6. Этапы решения прикладной задачи и классификация ошибок.

Абсолютная и относительная погрешности. Оценка погрешностей значения функции.

7. Способы приближенных вычислений по заданной формуле. Приближенные вычисления по формулам с использованием инструментальных пакетов.

8. Вероятностные и эмпирические методы оценки ошибок.
9. Методы аппроксимации функций.

10. Формулы численной аппроксимации производных. Проблемы численного дифференцирования и интегрирования.
11. Графический способ подбора формул.
12. Подбор формул по данным опыта по методу наименьших квадратов. Нахождение приближающих функций в виде линейных функций и квадратного трехчлена.
13. Подбор формул по данным опыта по методу наименьших квадратов. Нахождение приближающих функций в виде других элементарных функций.
14. Подбор формул по данным опыта по методу наименьших квадратов. Приближение функций с помощью инструментальных средств.
15. Анализ подобия и размерности. П-теорема. Примеры применения анализа размерностей.
16. Автомодельность, показатель автоматодельности. Примеры физических приложений с использованием безразмерных переменных.
17. Измерения в физических системах. Физические парадоксы при моделировании.
18. Основные понятия прикладной статистики. Важные законы распределения вероятностей.
19. Основы проверки статистических гипотез. Начала теории оценивания.
20. Анализ одной и двух нормальных выборок.
21. Однофакторный анализ.
22. Двухфакторный анализ.
23. Линейный регрессионный анализ.
24. Независимость признаков.
25. Критерии согласия.
26. Выборочные исследования.
27. Многомерный анализ и другие статистические методы.
28. Комплексная статистическая аналитика.
29. Методы контроля качества.

30. Анализ временных рядов.
31. Основные положения теории планирования эксперимента. Общие принципы планирования эксперимента. Варианты постановок задач теории планирования эксперимента.
32. Параметр оптимизации. Обобщенный параметр оптимизации.
33. Фактор. Полный факторный эксперимент.
34. Фактор. Дробный факторный эксперимент.
35. Проведение эксперимента.
36. Обработка результатов эксперимента.
37. Цифровые изображения в Matlab. Преобразование яркости и пространственная фильтрация.
38. Цифровые изображения в Matlab. Обработка в частотной области.
39. Цифровые изображения в Matlab.
40. Цифровые изображения в Matlab. Восстановление изображений.
41. Цифровые изображения в Matlab. Обработка цветных изображений.
42. Цифровые изображения в Matlab. Вейвлеты. Сжатие изображений.

2.6 Виды контроля

Текущий контроль за аудиторной и самостоятельной работой обучаемых осуществляется во время проведения лабораторных занятий посредством устного опроса по контрольным вопросам соответствующего раздела, а также проверки отчетов по лабораторным работам и индивидуальным заданиям. Промежуточный контроль осуществляется два раза в семестр в виде анализа итоговых отчетов на аттестационные вопросы. Итоговый контроль осуществляется после успешного прохождения студентами текущего и промежуточного контроля в виде зачета.

2.7 Требования к знаниям студентов, предъявляемые на зачете

Зачет сдается в конце семестра. Форма сдачи зачета – устная. Необходимым условием допуска на зачет является сдача всех лабораторных

работ и индивидуальной контрольной работы. В предлагаемый билет входят два вопроса: основной и дополнительный. Студент должен дать развернутый ответ на основной вопрос, и краткий – на дополнительный. Развернутый ответ предполагает полное знание теории по данной части курса, свободную ориентацию в материале, краткий ответ – основных теоретических моментов: понятий и терминологии. При выполнении указанных требований ставится отметка «зачтено».

3 КРАТКИЙ КУРС ЛЕКЦИЙ

3.1 Основы математического и компьютерного моделирования

Предмет теории моделирования

Развитие научного познания в современном обществе сопряжено с использованием средств и методик математического моделирования. *Сущность* ММ состоит в замене исходного объекта его «образом» – математической моделью – и дальнейшем изучении модели с помощью реализуемых на компьютере вычислительно-логических алгоритмов. Такой метод познания, конструирования и проектирования сочетает в себе многие *достоинства* как *теории*, так и *эксперимента*.

СВОЙСТВА МОДЕЛЕЙ И ЦЕЛИ МОДЕЛИРОВАНИЯ.

КЛАССИФИКАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Место моделирования среди методов познания

Безусловно, моделирование является далеко не единственным методом изучения окружающего мира. Существует целая область знания, которая специально занимается изучением методов познания и которую принято именовать *методологией*. Методы научного познания принято подразделять по степени их общности, т.е. по широте применимости в процессе научного исследования на всеобщие, общенаучные и частнонаучные. Итак, моделирование - метод познания окружающего мира, который можно отнести к общенаучным методам, применяемым как на эмпирическом, так и на

теоретическом уровнях познания. При построении и исследовании модели (см. ниже) могут применяться практически все остальные методы познания.

1.2 Определение модели

Научное познание сосредоточено на изучении предметов, явлений и процессов, существующих вне нашего сознания и называемых *объектами исследования* (от лат. *objectum* - предмет).

Важную роль при разработке моделей играют *гипотезы* (от греч. *hypothesis* - основание, предположение), т.е. определенные предсказания, предположительные суждения о причинно-следственных связях явлений, основанные на некотором количестве опытных данных, наблюдений, догадок.

Аналогия (от греч. *analogia* - соответствие, соразмерность) - это представление о каком-либо частном сходстве двух объектов, причем такое сходство может быть как существенным, так и несущественным.

Под *моделью* (от лат. *modulus* - мера, образец, норма) понимают такой материальный или мысленно представляемый объект, который в процессе познания (изучения) замещает объект-оригинал, сохраняя некоторые важные для данного исследования типичные его черты. Процесс построения и использования модели называется моделированием.

Свойства моделей

В настоящее время нет предпосылок к выделению «самых элементарных» и «неделимых» кирпичиков мироздания. Поэтому можно утверждать, что любой объект исследования является бесконечно сложным и характеризуется бесконечным числом параметров. При построении модели исследователь всегда исходит из поставленных *целей*, учитывает только наиболее существенные для их достижения факторы. Поэтому любая модель нетождественна объекту-оригиналу и, следовательно, *неполна*, поскольку при ее построении исследователь учитывал лишь важнейшие с его точки зрения факторы. Другие факторы, несмотря на свое относительно малое влияние на поведение объекта по сравнению с выбранными факторами, в совокупности

все же могут приводить к значительным различиям между объектом и его моделью. «Полная» модель, очевидно, будет полностью тождественна оригиналу.

Если результаты моделирования удовлетворяют исследователя и могут служить основой для прогнозирования поведения или свойств исследуемого объекта, то говорят, что модель *адекватна* (от лат. *adaequatus* - приравненный) объекту. При этом адекватность модели зависит от целей моделирования и принятых критериев. Учитывая заложенную при создании неполноту модели, можно утверждать, что идеально адекватная модель принципиально невозможна.

В качестве одной из характеристик модели может выступать *простота* (или *сложность*) модели. Очевидно, что из двух моделей, позволяющих достичь желаемой цели и получить требуемые результаты с заданной точностью, предпочтение должно быть отдано более простой. При этом адекватность и простота модели далеко не всегда являются противоречивыми требованиями. Учитывая бесконечную сложность любого объекта исследования, можно предположить существование бесконечной последовательности его моделей, различающихся по степени полноты, адекватности и простоты.

В качестве еще одного свойства модели можно рассматривать *потенциальность модели* (от лат. *potentia* - мощь, сила), или предсказательность с позиций возможности получения новых знаний об исследуемом объекте.

Цели моделирования

Хорошо построенная модель, как правило, доступнее, информативнее и удобнее для исследователя, нежели реальный объект.

Рассмотрим основные цели, преследуемые при моделировании в научной сфере.

Итак, модель нужна для того, чтобы:

1) понять, как устроен конкретный объект: какова его структура, внутренние связи, основные свойства, законы развития, саморазвития и

взаимодействия с окружающей средой;

2) научиться управлять объектом или процессом, определять наилучшие способы управления при заданных целях и критериях

3) прогнозировать прямые и косвенные последствия реализации заданных способов и форм воздействия на объект.

Классификация моделей

Представляется возможным подразделить математические модели на различные классы в зависимости от:

- сложности объекта моделирования;
- оператора модели (подмодели);
- входных и выходных параметров;
- способа исследования модели;
- цели моделирования.

Приведем классификацию моделей ***по факту неопределенности***: ММ делятся на детерминированные, стохастические и модели с элементами неопределенности.

Приведем и другую классификацию ***степень абстрагирования модели от оригинала.***

Аналитической моделью называется такое формализованное описание системы, которое позволяет получить решение уравнения (1.2) в явном виде, используя известный математический аппарат.

Численная модель характеризуется зависимостью (1.2) такого вида, который допускает только частные решения для конкретных начальных условий и количественных параметров моделей.

Имитационная модель — это совокупность описания системы и внешних воздействий, алгоритмов функционирования системы или правил изменения состояния системы под влиянием внешних и внутренних возмущений. Эти алгоритмы и правила не дают возможности использования имеющихся математических методов аналитического и численного решения, но позволяют имитировать процесс функционирования системы и производить

вычисления интересующих характеристик. Имитационные модели могут быть созданы для гораздо более широкого класса объектов и процессов, чем аналитические и численные. Поскольку для реализации имитационных моделей служат ВС, средствами формализованного описания ИМ служат универсальные и специальные алгоритмические языки. ИМ в наибольшей степени подходят для исследования ВС на системном уровне.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ. ПРИНЦИПЫ, ЭТАПЫ И МЕТОДЫ ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ

Этапы вычислительного эксперимента

Общая схема вычислительного эксперимента представлена на рисунке. Постановка задачи о ММ какого-либо объекта порождает реализацию следующих этапов.

Обследование объекта моделирования

Перечень сформулированных в содержательной (словесной) форме основных вопросов об объекте моделирования, интересующих заказчика, составляет содержательную постановку задачи моделирования.

Этап обследования проводится членами рабочей группы под руководством постановщиков задач и включает следующие работы:

1. тщательное обследование собственно объекта моделирования с целью выявления основных факторов, механизмов, влияющих на его поведение, определения соответствующих параметров, позволяющих описывать моделируемый объект;
2. сбор и проверка имеющихся экспериментальных данных об объектах-аналогах, проведение при необходимости дополнительных экспериментов;
3. аналитический обзор литературных источников, анализ и сравнение между собой построенных ранее моделей данного объекта (или подобных рассматриваемому объекту);
4. анализ и обобщение всего накопленного материала, разработка общего плана создания математической модели.



Весь собранный в результате обследования материал о накопленных к данному моменту знаниях об объекте, содержательная постановка задачи моделирования, дополнительные требования к реализации модели и представлению результатов оформляются в виде *технического задания на проектирование и разработку модели*.

Концептуальная постановка задачи моделирования

В отличие от содержательной концептуальная постановка задачи моделирования, как правило, формулируется членами рабочей группы без привлечения представителей заказчика, на основании разработанного на предыдущем этапе технического задания, с использованием имеющихся знаний об объекте моделирования и требований к будущей модели.

Концептуальная постановка задачи моделирования – это сформулированный в терминах конкретных дисциплин (физики, химии, биологии, экономики и т.д.) перечень основных вопросов, интересующих заказчика, а также совокупность гипотез относительно свойств и поведения объекта моделирования.

Наибольшие трудности при формулировке концептуальной постановки приходится преодолевать в моделях, находящихся на «стыке» различных дисциплин. Различия традиций, понятий и языков, используемых для описания

одних и тех же объектов, являются очень серьезными препятствиями, возникающими при создании «междисциплинарных» моделей. Например, такие понятия как «прибыль» и «баланс» вызывают совершенно разные ассоциации у экономиста и математика-прикладника.

Математическая постановка задачи моделирования

Законченная концептуальная постановка позволяет сформулировать математическую постановку задачи моделирования, включающую совокупность различных математических соотношений, описывающих поведение и свойства объекта моделирования.

Математическая постановка задачи моделирования — это совокупность математических соотношений, описывающих поведение и свойства объекта моделирования.

Совокупность математических соотношений указанных двух классов определяет оператор модели. В большинстве случаев оператор модели включает в себя систему обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), дифференциальных уравнений в частных производных (ДУЧП) и/или интегродифференциальных уравнений (ИДУ). Для обеспечения корректности постановки задачи к системе ОДУ или ДУЧП добавляются начальные и/или граничные условия, которые, в свою очередь, могут быть алгебраическими или дифференциальными соотношениями различного порядка.

Можно выделить несколько наиболее распространенных типов задач для систем ОДУ или ДУЧП:

❖ *задача Коши, или задача с начальными условиями*, в которой по заданным в начальный момент времени переменным (начальным условиям) определяются значения этих искомым переменных для любого момента времени;

❖ *начально-граничная, или краевая, задача*, когда условия на искомую функцию выходного параметра задаются в начальный момент времени для всей пространственной области и на границе последней в каждый момент времени (на исследуемом интервале);

❖ *задачи на собственные значения*, в формулировку которых входят

неопределенные параметры, определяемые из условия качественного изменения поведения системы (например, потеря устойчивости состояния равновесия или стационарного движения, появление периодического режима, резонанс и т.д.).

Для контроля правильности полученной системы математических соотношений требуется проведение ряда обязательных проверок:

- ❖ *Контроль размерностей.*
- ❖ *Контроль порядков.*
- ❖ *Контроль характера зависимостей.*
- ❖ *Контроль экстремальных ситуаций.*
- ❖ *Контроль граничных условий.*
- ❖ *Контроль физического смысла.*
- ❖ *Контроль математической замкнутости.*

Понятие корректности задачи имеет большое значение в прикладной математике. Математическая модель является *корректной*, если для нее осуществлен и получен положительный результат всех контрольных проверок: размерности, порядков, характера зависимостей, экстремальных ситуаций, граничных условий, физического смысла и математической замкнутости.

Выбор и обоснование выбора метода решения задачи

При использовании разработанных математических моделей, как правило, требуется найти зависимость некоторых неизвестных заранее параметров объекта моделирования (например, координат и скорости центра масс тела, точности броска), удовлетворяющих определенной системе уравнений. Таким образом, поиск решения задачи сводится к отысканию некоторых зависимостей искомых величин от исходных параметров модели.

Для решения математических задач используются следующие основные **группы методов**: аналитические, графические и численные.

Применение любого численного метода неминуемо приводит к погрешности результатов решения задачи. Выделяют три основных составляющих возникающей погрешности при численном решении исходной задачи:

1. *неустраняемая погрешность*, связанная с неточным заданием исходных данных

(начальные и граничные условия, коэффициенты и правые части уравнений);

2. *погрешность метода*, связанная с переходом к дискретному аналогу исходной задачи (например, заменяя производную разностным аналогом, получаем погрешность дискретизации);

3. *ошибка округления*, связанная с конечной разрядностью чисел, представляемых в ЭВМ.

Естественным требованием для конкретного вычислительного алгоритма является согласованность в порядках величин перечисленных трех видов погрешностей.

Численный, или приближенный, метод реализуется всегда в виде вычислительного алгоритма. Поэтому все требования, предъявляемые к алгоритму, применимы и к вычислительному алгоритму. Прежде всего, алгоритм должен быть *реализуем* – обеспечивать решение задачи за допустимое машинное время. Важной характеристикой алгоритма является его *точность*, т.е. возможность получения решения исходной задачи с заданной точностью $\varepsilon > 0$ за конечное число $Q(\varepsilon)$ действий. Очевидно, чем меньше ε , тем больше затрачиваемое машинное время. Для очень малых значений ε время вычислений может быть недопустимо большим. Поэтому на практике добиваются некоторого компромисса между точностью и затрачиваемым машинным временем. Очевидно, что для каждой задачи, алгоритма и типа ЭВМ имеется свое характерное значение достигаемой точности.

Время работы алгоритма зависит от числа действий $Q(\varepsilon)$, необходимых для достижения заданной точности. Для любой математической задачи, как правило, можно предложить несколько алгоритмов, позволяющих получить решение с заданной точностью, но за разное число действий $Q(\varepsilon)$. Алгоритмы, включающие меньшее число действий для достижения одинаковой точности, будем называть более *экономичными*, или более *эффективными*.

В процессе работы вычислительного алгоритма на каждом акте вычислений возникает некоторая погрешность. При этом от действия к действию она может возрастать или не возрастать (а в некоторых случаях даже уменьшаться). Если погрешность в процессе вычислений неограниченно возрастает, то такой алгоритм

называется неустойчивым, шт. расходящимся. В противном случае алгоритм называется *устойчивым*, или сходящимся.

Принципы построения математических моделей

Построение ММ процедура неформальная и сильно зависит от опыта. Модель должна правильно отражать явления, быть удобной для использования. Степень детализации ММ и форма ее представления зависят от цели исследования. Изучение и формализация экспериментального материала – это не единственный способ создания ММ. ММ, описывающие частные процессы могут быть получены из общей ММ, которая разработана на общих подходах построения. Говорят, что выделяют реальное движение из множества допустимых. При этом под движением понимается всякое изменение системы, либо всякое взаимодействие математических объектов. В разных областях знаний принципы отбора реальных движений тоже разные и зависят от принципов организации материи.

1) неживая (основными принципами отбора являются законы сохранения вещества, импульса, энергии, либо термодинамические соотношения, либо др.). Любое моделирование начинается с выбора основных фазовых переменных и с помощью них формулируются законы сохранения. Для выделения единственного решения из множества задают начальные и граничные условия.

2) живая (основные принципы отбора сохраняют свою силу. Моделирование начинается с записи закона сохранения. Все взаимодействия в живой природе динамические и имеют особенность – наличие обратной связи (взаимодействие характеризуется тем, что некоторые эффекты процесс возвращаются к своему источнику, в результате чего происходит либо усиление влияния (положит. Обратная связь), либо ослабление (отрицательная обратная связь))).

3) общественная (мыслящая материя). Пример области описания – трудовая деятельность. Для описания ММ пользуются экономическими терминами и соотношениями между экономическими характеристиками.

Реализация ММ в виде программы для ЭВМ

При создании различных программных комплексов, используемых для решения разнообразных исследовательских, проектно-конструкторских и управленческих задач, в настоящее время, основой, как правило, служат математические модели. В связи с этим возникает необходимость реализации модели в виде программы для ЭВМ. Процесс разработки надежного и эффективного программного обеспечения является не менее сложным, чем все предыдущие этапы создания математической модели. Успешное решение данной задачи возможно лишь при уверенном владении современными алгоритмическими языками и технологиями программирования, знании возможностей вычислительной техники, имеющегося программного обеспечения, особенностей реализации на ЭВМ методов вычислительной математики, наличии опыта решения подобных задач.

Процесс создания программного обеспечения можно разбить на ряд этапов:

1. составление технического задания на разработку пакета программ программного обеспечения;
2. проектирование структуры программного комплекса;
3. кодирование алгоритма;
4. тестирование и отладка;
5. сопровождение и эксплуатация.

Техническое задание на разработку программного обеспечения оформляют в виде *спецификации*. Примерная форма спецификации включает следующие семь разделов:

1. *Название задачи* — дается краткое определение решаемой задачи, название программного комплекса, указывается система программирования для его реализации и требования к аппаратному обеспечению (компьютеру, внешним устройствам и т.д.).

2. *Описание* — подробно излагается математическая постановка задачи, описываются применяемая математическая модель для задач вычислительного характера, метод обработки входных данных для задач не вычислительного (логического) характера и т.д.

3. *Управление режимами работы программы* — формируются основные

требования к способу взаимодействия пользователя с программой (интерфейс «пользователь-компьютер»).

4. *Входные данные* – описываются входные данные, указываются пределы, в которых они могут изменяться, значения, которые они не могут принимать, и т.д.

5. *Выходные данные* – описываются выходные данные, указывается, в каком виде они должны быть представлены (в числовом, графическом или текстовом), приводятся сведения о точности и объеме выходных данных, способах их сохранения и т.д.

6. *Ошибки* – перечисляются возможные ошибки пользователя при работе с программой (например, ошибки при вводе входных данных), указываются способы диагностики (в данном случае под диагностикой понимается выявление, обнаружение ошибок при работе программного комплекса) и защиты от этих ошибок на этапе проектирования, а также возможная реакция пользователя при совершении им ошибочных действий и реакция программного комплекса (компьютера) на эти действия.

7. *Тестовые задачи* – приводятся один или несколько тестовых примеров, на которых в простейших случаях проводится отладка и тестирование программного комплекса.

2. *Описание*

Приводится математическая постановка задачи и описание метода ее решения.

3. *Управление режимами работы программы*

Для управления режимами работы программы необходимо использовать интерфейс Windows с использованием меню, диалоговых окон, полей ввода данных, кнопок.

4. *Входные данные*

Радиус и масса мяча, его начальные координаты и скорость, угол бросания, координаты корзины.

5. *Выходные данные*

Траектория центра мяча, расчетная величина дальности и точность броска. Выходные данные представляются в табличном и графическом виде.

6. Ошибки

При вводе исходных данных предусмотреть контроль:

При диагностировании перечисленных ошибок программа должна выдавать соответствующие сообщения, которые могут сопровождаться звуковым сигналом, и предлагать повторить ввод.

7. Тестовые примеры

На этапе проектирования формируется общая структура программного комплекса. Вся программа разбивается на программные модули. Для каждого программного модуля формулируются требования по реализуемым функциям и разрабатывается алгоритм, выполняющий эти функции. Определяется схема взаимодействия программных модулей, называемая схемой потоков данных программного комплекса. Разрабатывается план и задаются исходные данные для тестирования отдельных модулей и программного комплекса в целом.

Большинство программ, реализующих математические модели, состоят из трех основных частей:

1. препроцессора (подготовка и проверка исходных данных модели);
2. процессора (решение задачи, реализация вычислительного эксперимента);
3. постпроцессора (отображение полученных результатов).

Для эффективной разработки программного обеспечения в области математического моделирования необходимо обратить внимание на создание следующих стандартных библиотек программ:

1. приближенные и численные методы (процессоры);
2. средства подготовки исходных данных (препроцессоры);
3. средства визуализации и представления результатов (постпроцессоры).

Разработка таких общих библиотек программ возможна лишь при стандартизации потоков передачи данных между препроцессором, процессором и постпроцессором. В простейшем случае речь может идти об унификации форматов передаваемых файлов.

Адекватность математической модели

Под *адекватностью* математической модели будет пониматься степень соответствия результатов, полученных по разработанной модели, данным эксперимента или тестовой задачи. Прежде чем переходить к проверке адекватности модели, необходимо убедиться в правильном комплексном функционировании всех алгоритмов и программ модели, выполнить независимое тестирование и отладку всех отдельных алгоритмов (например, используемых программных модулей, реализующих используемый численный метод).

Проверка адекватности модели преследует две цели:

1) убедиться в справедливости совокупности гипотез, сформулированных на этапах концептуальной и математической постановок. Переходить к проверке гипотез следует лишь после проверки использованных методов решения, комплексной отладки и устранения всех ошибок и конфликтов, связанных с программным обеспечением;

2) установить, что точность полученных результатов соответствует точности, оговоренной в техническом задании.

Практическое использование и анализ результатов моделирования

Дескриптивные модели, рассмотренные выше, предназначены для описания исследуемых параметров некоторого явления или процесса, а также для изучения закономерностей изменения этих параметров. Эти модели могут использоваться:

- ❖ для изучения свойств и особенностей поведения исследуемого объекта при различных сочетаниях исходных данных и разных режимах;
- ❖ как моделирующие блоки в различных САПР и автоматизированных системах управления (АСУ);
- ❖ при построении оптимизационных моделей и моделей-имитаторов сложных систем и комплексов.

Работая с моделью, разработчики становятся специалистами в области, связанной с объектом моделирования. Они достаточно хорошо представляют

свойства объекта, могут предсказать и объяснить его поведение. Поэтому всесторонний анализ результатов моделирования позволяет:

- ❖ выполнить модификацию рассматриваемого объекта, найти его оптимальные характеристики или, по крайней мере, лучшим образом учесть его поведение и свойства;

- ❖ обозначить область применения модели, что особенно важно в случае использования моделей для систем автоматического управления;

- ❖ проверить обоснованность гипотез, принятых на этапе математической постановки, оценить возможность упрощения модели с целью повышения ее эффективности при сохранении требуемой точности;

- ❖ показать, в каком направлении следует развивать модель в дальнейшем.

3.2 Методы оценки ошибок вычислений

ОБЩАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ ОЦЕНКИ ГЛАВНОЙ ЧАСТИ ПОГРЕШНОСТИ

Классификация погрешностей

При численном решении математических и прикладных задач почти неизбежно появление на том или ином этапе их решения погрешностей следующих трех типов.

- а) Погрешность задачи.*
- б) Погрешность метода.*
- в) Погрешность округлений.*

Все три описанных типа погрешностей в сумме дают *полную погрешность* результата решения задачи.

Приближенные числа, их абсолютные и относительные погрешности

Рассмотрим некоторые возможные подходы к учету погрешностей действий.

Пусть A и a – два «близких» числа; условимся считать A точным, a – приближенным.

Величина $\Delta a = |A - a|$ называется **абсолютной погрешностью** приближенного числа a , а $\delta a = \frac{\Delta a}{|A|}$ его **относительной погрешностью** (часто относительной погрешностью считают и величину: $\delta_a = \frac{\Delta_a}{|A|}$)

Числа Δ_a и δ_a такие, что $\Delta_a \geq \Delta a, \delta_a \geq \delta a$ называются **оценками** или **границами** абсолютной и относительной погрешностей соответственно (часто применяют также термин «**предельные погрешности**»). Так как обычно истинные погрешности не известны, то там, где не может возникнуть недоразумений, будем иногда называть Δ_a и δ_a просто абсолютной и относительной погрешностями.

Относительная погрешность приближенного числа связана с количеством его верных знаков. Количество верных знаков числа отсчитывается от первой значащей цифры числа до первой значащей цифры его абсолютной погрешности: например, число $a=13,2546$, с абсолютной погрешностью $\Delta_a=0,0824$ имеет три верных знака 1,3,2 и остальные знаки – сомнительные.

Ориентировочно можно считать, что наличие одного верного знака соответствует относительной погрешности порядка 10%, двух верных знаков – погрешности порядка 1% и т.д.

В окончательных вычислениях обычно оставляют, кроме верных, один сомнительный знак, в промежуточных вычислениях оставляют, кроме верных, два-три сомнительных знака.

Сложение и вычитание приближенных чисел

Умножение и деление приближенных чисел

Погрешности вычисления значения функции

Определение допустимой погрешности аргументов по допустимой погрешности функции

СТАТИСТИЧЕСКИЙ И ТЕХНИЧЕСКИЙ ПОДХОДЫ К УЧЕТУ ПОГРЕШНОСТЕЙ ДЕЙСТВИЙ

Чтобы результаты арифметических действий, совершаемых над приближенными числами, записанными в соответствии с принципом А. Н. Крылова, также соответствовали этому принципу, нужно придерживаться следующих нехитрых правил.

1. При сложении и вычитании приближенных чисел в результате следует сохранять столько десятичных знаков, сколько их в приближенном данном с наименьшим количеством десятичных знаков.

2. При умножении и делении в результате следует сохранять столько значащих цифр, сколько их имеет приближенное данное с наименьшим числом значащих цифр.

3. Результаты промежуточных вычислений должны иметь один-два запасных знака {которые затем должны быть отброшены}.

Таким образом, при техническом подходе к учету погрешностей приближенных вычислений предполагается, что в самой записи приближенного числа содержится информация о его точности. И хотя прямая выгода от применения приведенных правил работы с приближенными числами может быть получена лишь при ручном счете (не нужно оперировать с цифрами, не влияющими на информативную часть приближенного результата), их знание и понимание помогает правильной интерпретации компьютерных расчетов, а иногда и самой организации таковых.

ПОНЯТИЕ О ПОГРЕШНОСТЯХ МАШИННОЙ АРИФМЕТИКИ

3.3 Математическая обработка результатов опыта: таблицы и разности. Интегрирование и дифференцирование функций, заданных таблично

Аппроксимация функций

1) В основе большинства численных методов математического анализа лежит подмена одной функции $f(x)$ (известной, неизвестной или частично известной) другой функцией $\varphi(x)$, близкой к $f(x)$ и обладающей «хорошими» свойствами, позволяющими легко производить над нею те или иные аналитические или вычислительные операции.

Как видим, задача аппроксимации состоит в построении для заданной функции $f(x)$ такой функции $\varphi(x)$, что

$$f(x) \approx \varphi(x)$$

Договоримся использовать в качестве аппроксимирующих функций $\varphi(x)$ только многочлены или функции, составленные из многочленов, в таком случае будем говорить о **полиномиальной аппроксимации** или **кусочно-полиномиальной аппроксимации** соответственно.

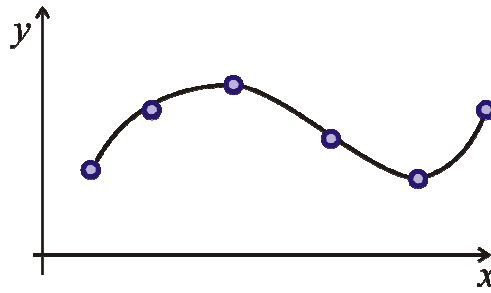
По сравнению с другими семействами функций, пригодных для построения теории приближений, например, таких, как тригонометрические или показательные функции, для вычислительной математики многочлены привлекательны тем, что они являются линейными функциями своих параметров (коэффициентов), и их вычисление сводится к выполнению конечного числа простейших арифметических операций — сложения и умножения.

Будем считать, что аппроксимация функции $f(x)$ производится с помощью многочленов степени $n \in N_0$. Тогда в зависимости от выбора критерия согласия и, в частности, от количества точек согласования (будем называть их узлами), т.е. точек, в которых известна информация об $f(x)$ и, возможно, ее производных, можно рассмотреть разные конкретные способы аппроксимации.

Интерполяционный полином Лагранжа

Пусть в точках x_0, x_1, \dots, x_n таких, что $a \leq x_0, x_1, \dots, x_n \leq b$, известны значения функции $y = f(x)$, т.е. на отрезке $[a, b]$ задана **табличная (сеточная) функция (2)**.

Функция $\varphi(x)$ называется **интерполирующей** или **интерполяционной** для $f(x)$ на $[a, b]$, если ее значения $\varphi(x_0), \varphi(x_1), \dots, \varphi(x_n)$ в заданных точках x_i , называемых узлами **интерполяции**, совпадают с заданными значениями функции $f(x)$. Геометрически факт интерполирования означает, что график функции $\varphi(x)$ проходит так, что, по меньшей мере, в $n+1$ заданных точках он пересекает или касается графика функции $y = f(x)$ (рис.).



Легко представить, что таких графиков, проходящих через заданные точки, можно изобразить сколько угодно, и они могут отличаться от графика $f(x)$ сколь угодно сильно, если не накладывать на $\varphi(x)$ и $f(x)$ определенных ограничений.

Таким образом, **базисные многочлены Лагранжа** имеют вид

$$l_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$$

а искомым **интерполяционный многочлен Лагранжа** есть

$$L_n(x) = \sum_{i=1}^n f_i \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$$

Выражение остаточного члена имеет вид:

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{n+1}(x) \quad (8)$$

Знание остаточного члена в предположении $n+1$ -кратной дифференцируемости $f(x)$ позволяет записать точное представление $f(x)$ через ее интерполяционный многочлен $L_n(x)$:

$$f(x) = L_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{n+1}(x) \quad (9)$$

где ξ – некоторая (вообще говоря, неизвестная, причем зависящая от x) точка из промежутка интерполяции (a, b) , а $\prod_{n+1}(x)$ определенный в (*) многочлен.

Конечные разности

Зададимся целью придать интерполяционной формуле более простой вид, подобный виду широко используемой в математическом анализе формулы Тейлора. Если в интерполяционном многочлене Лагранжа все слагаемые

однотипны и играют одинаковую роль в образовании результата, хотелось бы иметь такое представление интерполяционного многочлена, в котором, как и в многочлене Тейлора, слагаемые располагались бы в порядке убывания их значимости. Такая структура интерполяционного многочлена позволила бы более просто перестраивать его степень, добавляя или отбрасывая удаленные от начала его записи члены.

Поставленной цели будем добиваться сначала для несколько суженной постановки задачи интерполяции. А именно, будем считать, что интерполируемая функция $y=f(x)$ задана своими значениями y_0, y_1, \dots, y_n а системе **равноотстоящих** узлов x_0, x_1, \dots, x_n т.е. таких, что любой узел x_i , этой **сетки** можно представить в виде

$$x_i = x_0 + ih$$

где $i = \overline{0, n}$, $h > 0$ – некоторая постоянная величина, называемая *шагом сетки* (таблицы).

Прежде чем строить желаемые интерполяционные формулы, рассмотрим элементы теории конечных разностей.

Вычитая из каждого последующего члена конечной последовательности из $n + 1$ чисел y_0, y_1, \dots, y_n предыдущий, образуем n *конечных разностей первого порядка*

$$\Delta y_0 = y_1 - y_0, \Delta y_1 = y_2 - y_1, \dots, \Delta y_{n-1} = y_n - y_{n-1}$$

или, проще, n первых разностей данной табличной функции. Из них, в свою очередь, таким же образом можно получить $n - 1$ конечных разностей второго порядка, или вторых разностей:

$$\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0, \Delta^2 y_1 = \Delta y_2 - \Delta y_1, \dots, \Delta^2 y_{n-2} = \Delta y_{n-1} - \Delta y_{n-2}$$

Этот процесс построения разностей может быть продолжен, и весь он, очевидно, описывается одной рекуррентной формулой, выражающей конечную разность k -го порядка $\Delta^k y_i$, через разности $(k - 1)$ -го порядка:

$$\Delta^k y_i = \Delta^{k-1} y_{i+1} - \Delta^{k-1} y_i,$$

где $k = 1, 2, \dots, n$, $\Delta^0 y_i = y_i$

В некоторых случаях требуется знать выражения конечных разностей непосредственно через значения функции, лежащей в их основе. Для нескольких первых порядков разностей их можно получить прямой подстановкой:

$$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i,$$

$$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i = y_{i+2} - y_{i+1} - (y_{i+1} - y_i) = y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i,$$

$$\begin{aligned} \Delta^3 y_i &= \Delta^2 y_{i+1} - \Delta^2 y_i = y_{i+3} - 2y_{i+2} + y_{i+1} - (y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i) = \\ &= y_{i+3} - 3y_{i+2} + 3y_{i+1} - y_i \end{aligned}$$

Подметив закономерность в коэффициентах рассмотренных представлений конечных разностей, записываем общую формулу

$$\Delta^k y_i = \sum_{j=0}^k (-1)^j C_{k+i-j}^j,$$

которая может быть строго обоснована методом математической индукции и которая напоминает биномиальное разложение для $(y-1)^k$

Отметим лишь простейшие свойства конечных разностей:

1. конечные разности постоянной равны нулю (очевидно);
2. постоянный множитель y функции можно выносить за знак конечной разности.
3. конечная разность от суммы двух функций равна сумме их конечных разностей в одной и той же точке.

Для функции, заданной таблицей своих значений, конечные разности разных порядков удобно помещать в одну общую таблицу с узлами и значениями функции (последние можно интерпретировать как конечные разности нулевого порядка.). Эту общую таблицу называют *таблицей конечных разностей*. Заметим, что кроме принятого здесь так называемого диагонального расположения конечных разностей, когда числа в каждом столбце записываются со смещением на полстроки.

Конечноразностные интерполяционные формулы

Пусть функция $y = f(x)$ задана на сетке равноотстоящих узлов $x_i = x_0 + ih$, где $i = \overline{0, n}$, и для нее построена таблица конечных разностей.

В соответствии с тем, что было сказано о направлении модификации интерполяционной формулы Лагранжа в начале предыдущего параграфа, будем строить интерполяционный многочлен $P_n(x)$ в форме

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + a_n(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1}). \quad (12)$$

Его $n + 1$ коэффициент a_0, a_1, \dots, a_n будем находить последовательно из $n + 1$ интерполяционных равенств

$$P_n(x_i) = y_i, i = \overline{0, n}$$

А именно, полагая $i=0$, т.е. $x=x_0$, в (12) имеем $P_n(x_0) = a_0$, а по условию интерполяции $P_n(x_0) = y_0$ следовательно, $a_0 = y_0$.

Далее, при $i = 1$ аналогично получаем равенство $a_0 + a_1(x_1 - x_0) = y_1$, в которое подставляем уже найденное значение $a_0 = y_0$. Разрешая это равенство относительно a_1 и используя обозначение конечной разности, получаем

$$a_1 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = \frac{\Delta y_0}{h}$$

Следующий шаг, при $i = 2$, дает:

$$a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_2$$

$$y_0 + \frac{\Delta y_0}{h} 2h + a_2 2hh = y_2$$

$$a_2 = \frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{2!h^2} = \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}$$

Полной индукцией можно показать справедливость выражения

$$a_k = \frac{\Delta^k y_0}{k!h^k}, \forall k \in \{1, 2, \dots, n\}$$

Подставляя найденные коэффициенты в (12), получаем многочлен

$$P_n(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x - x_0) + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2!h^2} \Delta^2 y_0 + \dots$$

$$\dots + \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1})}{n!h^n} \Delta^n y_0,$$
(13)

который называют **первым интерполяционным многочленом Ньютона**.

Учитывая, что каждое слагаемое многочлена (13), начиная со второго, содержит множитель $x - x_0$, естественно предположить, что этот многочлен наиболее приспособлен для интерполирования в окрестности узла x_0 (при x , близких к x_0 , $f(x) \approx y_0$). Будем называть узел x_0 *базовым* для многочлена (13), и упростим (13) введением новой переменной $t = \frac{x - x_0}{h}$, в результате подстановки этих разностей в (13) приходим к *первой интерполяционной формуле Ньютона* в виде

$$f(x) \approx P_n(x_0 + th) = f_0 + t \cdot \Delta f_0 + \frac{t(t-1)}{2!} \Delta^2 f_0 + \dots$$

$$\dots + \frac{t(t-1) \dots (t-n+1)}{n!} \Delta^n f_0,$$
(14)

Остаточный член этой формулы имеет вид:

$$R_n(x) = h^{n+1} \frac{q(q-1) \dots (q-n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi),$$

где ξ – некоторая внутренняя точка наименьшего промежутка, содержащего все узлы x_i и точку x .

Первая формула Ньютона (14) обычно применяется при значениях $|t| < 1$, а именно, для интерполирования вперед, (при $x \in (x_0, x_1)$, т.е. при $q \in (0, 1)$) и экстраполирования назад (при $x < x_0$, т.е. при $q < 0$).

Так как реально степени интерполяционных многочленов бывают не так велики, в то время как таблицы значений функций достаточно обширны, и так как в реальной числовой таблице никаких индексов – номеров узлов нет, то за базовый для формулы (14) узел можно принимать узел, ближайший к заданной

фиксированной точке x , если за ним имеется достаточное число узлов для построения необходимых для (14) разностей. Поскольку в первой формуле Ньютона используются нисходящие диагонали таблицы конечных разностей, то такое смещение узла, принимаемого за базовый, в конце таблицы будет неприемлемо.

Учет этого обстоятельства приводит к потребности в симметричной, в определенном смысле, для (14) формулы, которая была бы пригодной для интерполирования в конце таблицы.

Таким образом, получаем *второй интерполяционный многочлен Ньютона*

$$P_n(x) = y_n + (x - x_n) \cdot \frac{\Delta y_{n-1}}{h} + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!h^2} (x - x_n)(x - x_{n-1}) + \dots$$

$$\dots + \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n} (x - x_n)(x - x_{n-1}) \dots (x - x_1)$$

в котором базовым является узел x_n и коэффициенты которого определяются конечными разностями, расположенными на восходящей от y_n диагонали.

Положим в (15) $q = \frac{x - x_n}{h}$, В результате приходим ко *второй интерполяционной формуле Ньютона* вида

$$P_n(x) = f_n + q \cdot \Delta f_{n-1} + \frac{q(q+1)}{2!} \Delta^2 f_{n-2} + \dots + \frac{q(q+1) \cdot \dots \cdot (q+n-1)}{n!} \Delta^n f_0 .$$

Остаточный член этой формулы имеет вид:

$$R_n(x) = h^{n+1} \frac{q(q+1) \dots (q+n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi),$$

где ξ – некоторая внутренняя точка наименьшего промежутка, содержащего все узлы x_i и точку x .

Ее также целесообразно использовать при значениях $|q| < 1$, т.е. в окрестности узла x_n для интерполирования назад (при $q \in (-1, 0)$) и экстраполирования вперед (при $q > 0$).

Наряду с выведенными специально для начала и конца таблицы первой и второй интерполяционными формулами Ньютона, имеется еще несколько

формул, рассчитанных на их применение в центральной части таблицы и потому называемых *центральными интерполяционными формулами*. Прежде, чем определять эти формулы, введем понятие центральных разностей.

Сплайн-интерполяция

В тех случаях, когда промежуток, на котором нужно подменить функцию $f(x)$ функцией $\varphi(x)$, велик, и отсутствуют основания считать данную функцию $f(x)$ достаточно гладкой, нет смысла пытаться повышать качество ее полиномиальной аппроксимации за счет использования в роли $\varphi(x)$ многочленов высоких степеней. Более перспективным в этих условиях является применение *кусочно-полиномиальной аппроксимации $f(x)$* , предполагающей, что аппроксимирующая функция $\varphi(x)$ составляется из отдельных многочленов, как правило, одинаковой небольшой степени, определенных каждый на своей части отрезка $[a, b]$. При этом, если функция $f(x)$ непрерывна и имеется достаточное количество точечной информации о ней, то можно рассчитывать приблизить ее на $[a, b]$ сколь угодно хорошо кусочно-полиномиальной функцией $\varphi(x)$ только за счет увеличения числа частичных промежутков, составляющих $[a, b]$, при любых фиксированных степенях составных многочленов и любых способах согласования $f(x)$ и $\varphi(x)$.

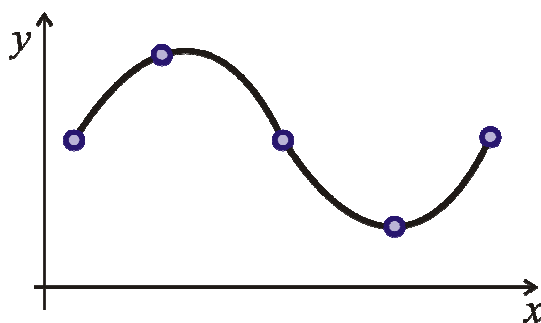
Использование низких степеней многочленов, составляющих $\varphi(x)$, позволяет легко находить их коэффициенты как из интерполяционных, так и из иных условий.

Так, если заданы значения y_i функции $y = f(x)$ на системе узлов x_i таких, что $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ и требуется аппроксимировать $f(x)$ *кусочно-линейной функцией $\varphi(x)$* , исходя из условий интерполяции $\varphi(x_i) = y_i, i = 0, 1, \dots, n$, то, беря функцию $\varphi(x)$ в виде

полиномы высокой степени. Можно этого избежать, разбив отрезок интерполяции на несколько частей и построив на каждой части свой интерполяционный многочлен. Существенный недостаток такого интерполирования состоит в том, что в точках сшивки разных интерполяционных полиномов их первая производная будет разрывной, поэтому для решения задачи кусочно-линейной интерполяции используют особый вид кусочно-полиномиальной интерполяции – сплайн-интерполяцию.

Сплайн – это функция, которая на каждом частичном отрезке интерполирования является алгебраическим многочленом, а на заданном отрезке непрерывна вместе с несколькими своими производными.

Пусть на отрезке $[a, b]$ задана упорядоченная система несовпадающих точек $x_k, k = \overline{0, n}$.



Определение. Сплайном $S_m(x)$ называется определенная на $[a, b]$ функция, принадлежащая классу $C_{[a,b]}^l$ l раз непрерывно дифференцируемых функций, такая, что на каждом промежутке $[x_{k-1}, x_k], k = \overline{2, n}$ – это многочлен n -й степени. Разность $d := m - l$ между степенью сплайна m и показателем его гладкости l называется *дефектом* сплайна.

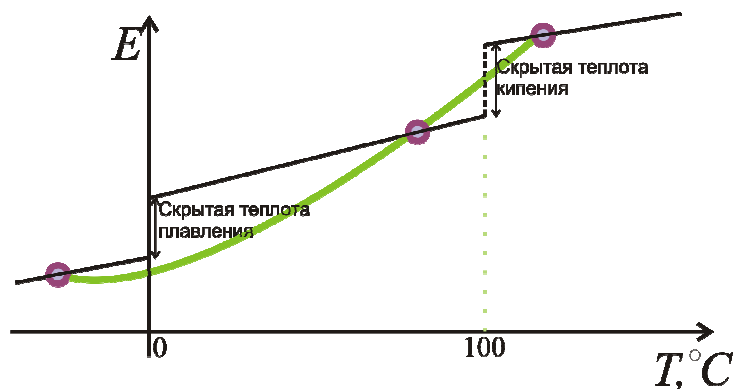
Если сплайн $S_m(x)$ строится по некоторой функции $f(x)$ так, чтобы выполнялись условия $S_m(x_i) = f(x_i)$, то такой сплайн называется *интерполяционным сплайном* для функции $f(x)$ при этом узлы сплайна x_k , вообще говоря, могут не совпадать с узлами интерполяции x_i .

Таблицы и разности в прикладных задачах

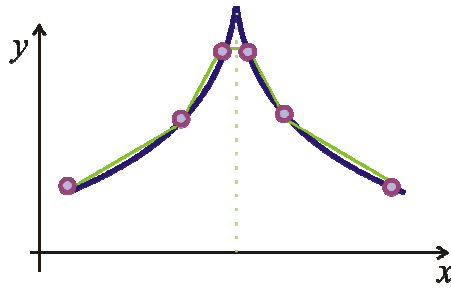
Часто, на практике приходится иметь дела с функциями, заданными в виде таблицы значений (математические таблицы, физические таблицы из справочников, либо не вполне обработанные результаты опыта или измерений). Функции, заданные подобным образом, могут входить в дальнейшие операции, в частности, может потребоваться дифференцировать или интегрировать. Также, могут понадобиться значения в внутренних узлах, в которых функция неопределенна (задача интерполяции), либо за пределами отрезка рассмотрения (экстраполирование).

Если изучаемая функция разрывная, то интерполяцию можно проводить только на интервалах, не содержащих точек разрыва. Если не обратить на это внимание, то интерполяция может дать совершенно неправильное представление о действительном поведении функции.

На рис. показана зависимость внутренней энергии, которая обладает единица массы воды при нормальном давлении от температуры.



(Чаще пользуются так называемой энтальпией (теплосодержанием) $H = E + pV$, где P – давление, V – объем). Эта зависимость имеет разрывы при перемене фазового состояния, т.е. замерзании или испарении воды. Сплошной линией показан результат квадратичной интерполяции, если узлы интерполяции отвечают разным фазам. Аналогичная ситуация возникает при разрыве производной. на рис. показан результат линейной интерполяции при наличии «острого» максимума.



Проблемы численного интегрирования и дифференцирования функций, заданных таблично

Очень важные и принципиальные вопросы возникают в связи с ограниченной точностью и ошибками, присущими каждому измерению.

При вычислении интеграла каждое отдельное измеренное значение умножается на величину Δx (при увеличении числа измерений повышается точность – уменьшается ошибка в интеграле).

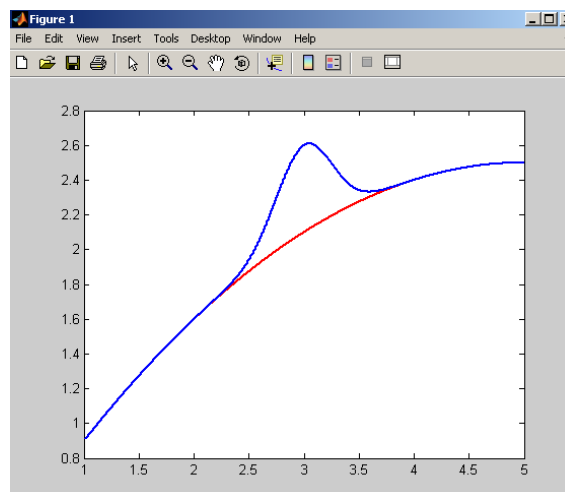
При вычислении производной разность делится на Δx , и следовательно, чем больше измерений (меньше Δx), тем больше ошибка производной. Поэтому производная функции, заданной экспериментальными значениями, оказывается известной с меньшей точностью, чем сама эта функция.

Разницу между численным дифференцированием и интегрированием поясним на примере.

Построим в одной СК графики функций:

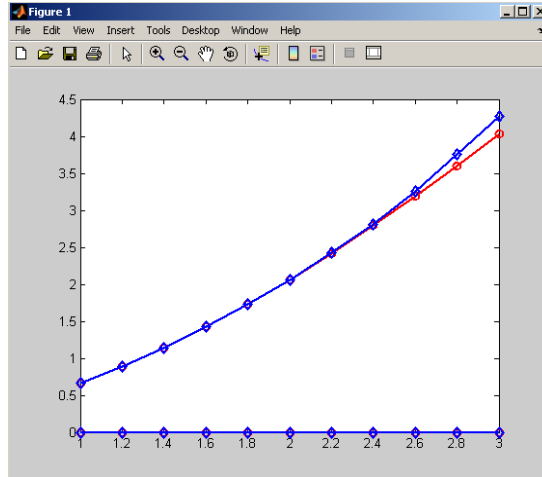
```
>>y1=x-0.1*x.^2;
```

```
>>y2=x-0.1*x.^2+0.5*exp(-8*(x-3).^2);
```

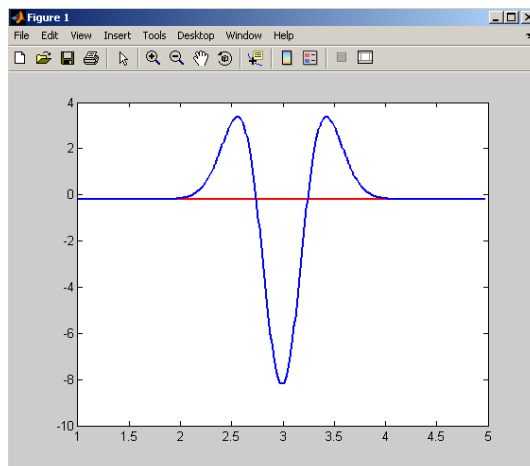
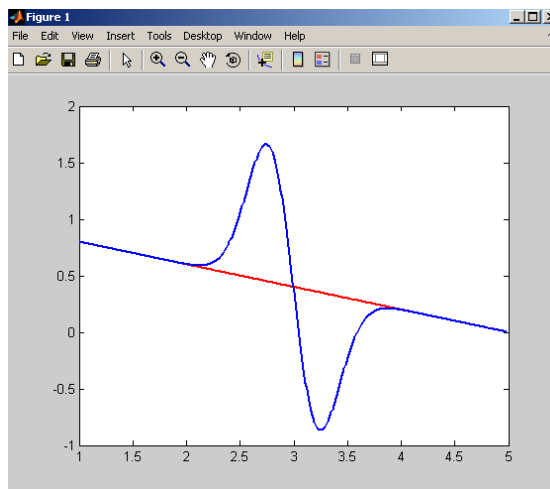


Из рисунка видно, что одна кривая отличается от другой лишь в небольшой окрестности изменения аргумента x .

Приведем в одной СК графики функций:



А также графики первой и второй производных от указанных функций.



Т.о., небольшое изменение функции на малом промежутке приводит к значительным изменениям в графике производных. Поэтому, для получения надежных значений производной необходимо, сначала качественно выполнить аппроксимацию, а уже затем проводить дифференцирование

3.4 Обработка экспериментальных данных методом наименьших квадратов

Пусть в результате измерений получена таблица некоторой зависимости $f(x)$:

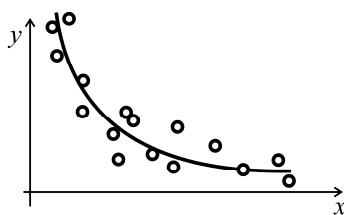
x	x_1	x_2	...	x_n
$F(x)$	y_1	y_2	...	y_n

Требуется найти формулу, выражающую данную зависимость аналитически. Один из подходов состоит в построении интерполяционного многочлена, значения которого в узлах интерполяции x_i совпадают со значениями данной функции $f(x_i) = f_i$.

Если значения функции $f(x)$ известны с некоторой погрешностью, то требование совпадения значений в узлах интерполяции не оправдано, поскольку оно не означает совпадение характеров исходной и интерполирующей функции. Поэтому поставим задачу следующим образом – найти функцию вида

$$y = F(x),$$

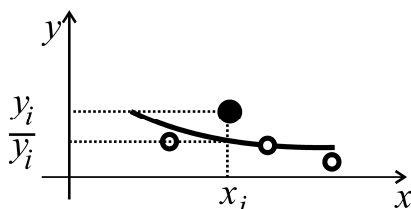
которая в точках x_1, x_2, \dots, x_n принимает значения, близкие к табличным значениям y_1, y_2, \dots, y_n .



Предположим, что приближающая функция $F(x)$ в точках x_1, x_2, \dots, x_n имеет значения $\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n$. Тогда нужно найти функцию $F(x)$ определенного вида так, чтобы сумма квадратов

$$(y_1 - \bar{y}_1)^2 + (y_2 - \bar{y}_2)^2 + \dots + (y_n - \bar{y}_n)^2 \quad (1)$$

была наименьшей.



Нахождение приближающей функции в виде линейной

Пусть приближающая функция имеет вид

$$F(x) = ax + b, \quad (2)$$

где a, b – параметры.

Составим сумму вида (1) для этого случая:

$$\Phi(a, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)^2 \rightarrow \min \quad (3)$$

Функция $\Phi(a, b)$ является неотрицательной квадратичной, поэтому в некоторой области она имеет единственную точку минимума (a^*, b^*) , удовлетворяющую условиям:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial b} = 0,$$

т.е. системе уравнений:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)x_i = 0, \\ \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b) = 0. \end{cases}$$

Разделив каждое уравнение на n , получаем

$$\left\{ \begin{aligned} \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 \right) \cdot a + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i \right) \cdot b &= \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i y_i, \\ \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i \right) \cdot a + b &= \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n y_i. \end{aligned} \right. \quad (5)$$

Вычислив значения параметров a , b , получаем конкретный вид функции (2).

В зависимости от характера табличных данных, изучаемого с помощью их изображения в соответствующей системе координат, при обработке экспериментальных данных часто используют иные семейства двухпараметрических функций. Существует возможность с помощью подходящего преобразования переменных получить линейную зависимость и использовать метод (5) для следующих семейств функций:

Функция $y = f(x)$	Линеаризованная форма, $Y = ax + b$	Замена переменных и постоянных
$y = \frac{a}{x} + b$	$y = a \cdot \frac{1}{x} + b$	$X = \frac{1}{x}, Y = y$
$y = \frac{d}{x+c}$	$y = -\frac{1}{c} \cdot xy + \frac{d}{c}$	$X = xy, Y = y,$ $c = -\frac{1}{a}, d = -\frac{b}{a}$
$y = \frac{1}{ax+b}$	$\frac{1}{y} = ax + b$	$X = x, Y = \frac{1}{y}$
$y = \frac{x}{ax+b}$	$\frac{1}{y} = a \cdot \frac{1}{x} + b$	$X = \frac{1}{x}, Y = \frac{1}{y}$
$y = a \cdot \ln(x) + b$	$y = a \cdot \ln(x) + b$	$X = \ln(x), Y = y$
$y = c \cdot e^{ax}$	$\ln(y) = ax + \ln(c)$	$X = x, Y = \ln(y), c = e^b$
$y = c \cdot x^a$	$\ln(y) = a \cdot \ln(x) + \ln(c)$	$X = \ln(x), Y = \ln(y),$ $c = e^b$
$y = \frac{1}{(ax+b)^2}$	$\frac{1}{\sqrt{y}} = ax + b$	$X = x, Y = \frac{1}{\sqrt{y}}$

$y = \frac{c \cdot x}{e^{dx}}$	$\ln\left(\frac{y}{x}\right) = -dx + \ln(c)$	$X = x, Y = \ln\left(\frac{y}{x}\right),$ $c = e^b, d = -a$
$y = \frac{1}{1 + c \cdot e^{ax}}$	$\ln\left(\frac{1}{y} - 1\right) = ax + \ln(c)$	$X = x, Y = \ln\left(\frac{1}{y} - 1\right),$ $c = e^b$

Нахождение приближающей функции в виде квадратного трехчлена

Приближающая функция имеет вид:

$$F(x) = ax^2 + bx + c, \quad (6)$$

где a, b, c – параметры.

Составим сумму вида (1) как функцию $\Phi(a, b)$ для этого случая:

$$\Phi(a, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i^2 - bx_i - c)^2 \rightarrow \min \quad (7)$$

Функция $\Phi(a, b)$ является неотрицательной квадратичной, поэтому в некоторой области она имеет единственную точку минимума (a^*, b^*) , удовлетворяющую условиям:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial b} = 0,$$

т.е. системе уравнений:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i^2 - bx_i - c)x_i^2 = 0, \\ \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i^2 - bx_i - c)x_i = 0, \\ \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i^2 - bx_i - c) = 0. \end{cases}$$

Разделив каждое уравнение на n , имеем

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^4\right) \cdot a + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3\right) \cdot b + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2\right) \cdot c = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i, \\ \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3\right) \cdot a + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2\right) \cdot b + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i\right) \cdot c = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i y_i, \\ \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2\right) \cdot a + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i\right) \cdot b + c = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n y_i. \end{cases}$$

Решив систему относительно неизвестных a , b , c , находим значения параметров приближающей функции (6).

Численные примеры. Реализация в пакете Matlab

Пример 1. Даны табличные значения квадратичной зависимости. Найти коэффициенты квадратичной аппроксимирующей функции (6).

x	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y	- 0.28	0.42	2.11	4.82	7.75	12.4 3	12.1 6	15.4 1	23.0 7	31.0 6	36.6 8

Пример 2. Используя табличные значения примера 1, найти параметры квадратичной аппроксимирующей функции (6) с помощью встроенной функции Matlab.

Для решения задачи обобщенной нелинейной регрессии в пакете Matlab имеется функция **lsqnonlin()**, возвращающая решение задачи нахождения точки минимума функции:

$$\min_x (f(x)) = f_1^2(x) + f_2^2(x) + \dots + f_n^2(x) + L,$$

где $f(x)$ – вектор-функция, x – столбец искоемых переменных, L – искомая константа.

3.5 Основы теории подобия и размерностей. Измерения в физических системах

Теоретический анализ экспериментальных данных основан на теории размерностей. Несмотря на простоту и эффективность, этот анализ требует от исследователя определенного опыта и проникновения в сущность изучаемого

явления. Самый замечательный итог применения теории размерностей заключается в том, что она оказывается достаточной для установления особого класса автомодельных решений математической формулировки задач, отражающих глубокие физические закономерности изучаемого явления.

Теория размерностей и подобия играет важную роль при моделировании различных физических процессов и явлений. Методами теории размерностей практически решена важная газодинамическая задача о сильном взрыве (Седов, 1946г.), а также задача о влиянии мгновенного сосредоточенного теплового источника в нелинейной теплопроводности (Зельдович, Компанец, 1950г.) и ряд др.

Пусть в некоторой системе единиц измерения физических величин установлены основные единицы: q_1, q_2, \dots, q_n для измерения основных физических величин. Так, например, в системе единиц СИ: килограмм, метр, секунда, ампер, градус Кельвина, свеча, моль.

Единицы производных величин (с помощью физических формул и законов) определяются через основные единицы.

Тогда, если

$$R = r_1^{b_1} \cdot r_2^{b_2} \cdot \dots \cdot r_n^{b_n}$$

говорят, что величина a имеет размерность

$$[a] = q_1^{b_1} \cdot q_2^{b_2} \cdot \dots \cdot q_n^{b_n} = \dim a$$

Если все показатели размерности b_i равны 0, величина a называется безразмерной или $\dim a = 1$.

Правила вычисления размерностей:

Если $f = A \cdot B$, то $[a] = [A] \cdot [B]$ и если $f = A/B$, то $[a] = [A]/[B]$.

Примеры.

1. Размерность скорости $v = \frac{\Delta S}{\Delta t}$, $[v] = \frac{[\Delta S]}{[\Delta t]} = \frac{m}{c}$.

2. Кинетической энергии $W_k = \frac{1}{2}mv^2$, $[W_k] = \frac{1}{2}[m][v]^2 = \text{кг} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{с}^{-2}$.

3. Удельной массовой теплоемкости $c = \frac{\Delta Q}{m\Delta T}$,

$$[c] = \frac{[\Delta Q]}{[m][\Delta T]} = m^2 \cdot c^{-2} \cdot K^{-1}.$$

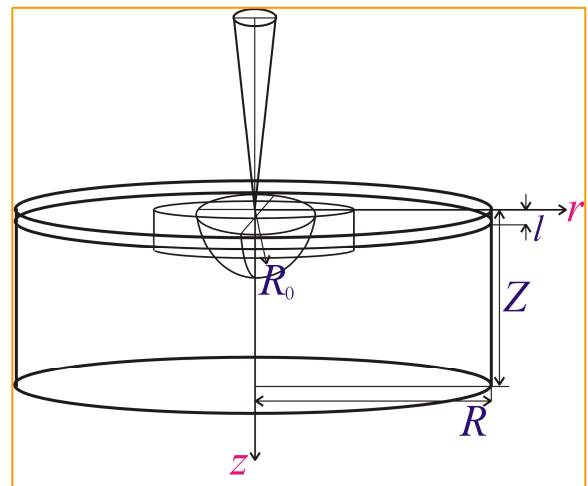
Теория размерностей накладывает ограничения на возможные функциональные зависимости между размерными величинами. Так, если две величины a_1, a_2 связаны равенством $a_1 = a_2$, то $[a_1] = [a_2]$. Равенство размерностей означает сохранение равенства величин при изменении масштабов основных единиц измерения.

Аналогично, если $a = b + c$, то размерности всех величин должны быть одинаковы $[a] = [b] = [c]$. Это свойство физических (и соответственно математических) формул носит название – свойство однородности)

Если задача математической физики решается в постановке дифференциального уравнения, то определяющие параметры:

- 1) коэффициенты ДУ
- 2) величины, входящие в НУ и ГУ
- 3) геометрические параметры области

Пример. Задача распространения тепла в стальном стержне, вызванном влиянием сосредоточенного источника тепла



$$\frac{\partial T}{\partial t} = a^2 \Delta T + \frac{f}{\rho c} \quad T(r, z, t)$$

$$[T] = K$$

$$\begin{cases} T(t = 0) = 300 K \\ \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = 0 \frac{K}{m} \end{cases} \quad [t] = c$$

$$[r] = [z] = m$$

$$[a^2] = \frac{m^2}{c}, [f] = \frac{Вт}{m^3}, [c] = \frac{Дж}{кг \cdot K}, [\rho] = \frac{кг}{m^3}$$

Т.о., решая задачу математической физики, требуется установить функциональную взаимосвязь:

$$U = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (1)$$

Теория размерности накладывает ограничения на структуру этой связи.

Соотношение (1) должно выражать тот бесспорный факт, что физическая закономерность, которую представляет эта зависимость, не зависит от выбора системы единиц измерения. Анализ размерностей основан на физически содержательном утверждении, сформулированном Э. Бакингамом и известном как П-теорема.

Пусть существует физическая закономерность, выраженная в виде зависимости некоторой размерной величины от размерных определяющих параметров. Эта зависимость может быть представлена в виде зависимости некоторой безразмерной величины от безразмерных комбинаций определяющих параметров. Количество этих безразмерных комбинаций меньше общего числа определяющих параметров на число размерных определяющих параметров с независимыми размерностями.

Следует отметить, что П-теорема интуитивно вполне понятна и ее неявное использование началось задолго до того, как она была сформулирована и формально доказана. В этой связи следует прежде всего назвать имена: Галилей, Ньютон, Фурье, Максвелл, Рейнольдс, Рэлей и др.

Разобьем величины x_1, x_2, \dots, x_n на две группы: x_1, x_2, \dots, x_k – с независимыми размерностями, $x_{k+1}, x_{k+2}, \dots, x_n$ – величины, размерности которых можно выразить через размерности величин первой группы.

$$[U] = [x_1]^{s_1} \cdot [x_2]^{s_2} \cdots [x_k]^{s_k}$$

$$[x_{k+1}] = [x_1]^{r_1} \cdot [x_2]^{r_2} \cdots [x_k]^{r_k}$$

.....

$$[x_n] = [x_1]^{p_1} \cdot [x_2]^{p_2} \cdots [x_k]^{p_k}$$

Следовательно, можно ввести $n-k+1$ безразмерных параметров или критериев:

$$\Pi = \frac{U}{(x_1)^{s_1} \cdot (x_2)^{s_2} \cdots (x_k)^{s_k}}$$

$$\Pi_1 = \frac{x_{k+1}}{(x_1)^{r_1} \cdot (x_2)^{r_2} \cdots (x_k)^{r_k}}$$

.....

$$\Pi_{n-k} = \frac{x_n}{(x_1)^{p_1} \cdot (x_2)^{p_2} \cdots (x_k)^{p_k}}$$

Π -теорема утверждает, что соотношение между размерными физическими величинами, не зависящее от выбора масштаба основных единиц измерения, всегда можно сформулировать как соотношение между меньшим числом соответствующих безразмерных величин. В частности, функциональную связь (1), всегда можно привести к эквивалентной зависимости между безразмерными величинами:

$$\Pi = F(\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_{n-k}) \quad (2).$$

Преимущество: уменьшении числа независимых переменных на k

Соотношение (2) можно записать также, выделив множитель, имеющий размерность величины U .

Тогда из (2) получим:

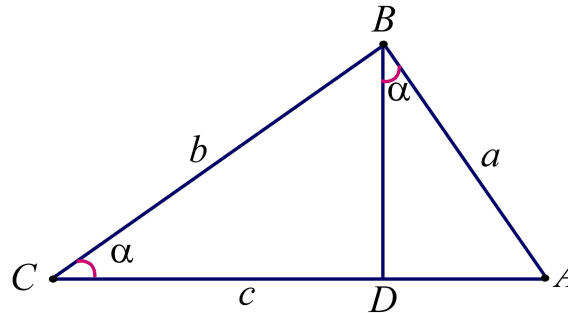
$$U = (x_1)^{s_1} \cdot (x_2)^{s_2} \cdots (x_k)^{s_k} \cdot F(\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_{n-k}) \quad (3)$$

Если из величин x_1, x_2, \dots, x_k нельзя образовать ни одной безразмерной комбинации, тогда (3) запишется в виде:

$$U = C \cdot x_1^{s_1} \cdot x_2^{s_2} \cdots x_k^{s_k}$$

Пример 1.

Пусть задан прямоугольный треугольник,



который полностью определяется заданием длины гипотенузы c и угла α .

Поэтому

$$S = S(c, \alpha)$$

$$[S] = L^2, [c] = L, [\alpha] = 1$$

Поэтому из П-теоремы вытекает, что

$$S = c^2 F(\alpha)$$

где $F(\alpha)$ – некоторая функция безразмерного угла α , измеренного в радианах.

Для треугольников ABD и BCD :

$$S_1 = a^2 F(\alpha)$$

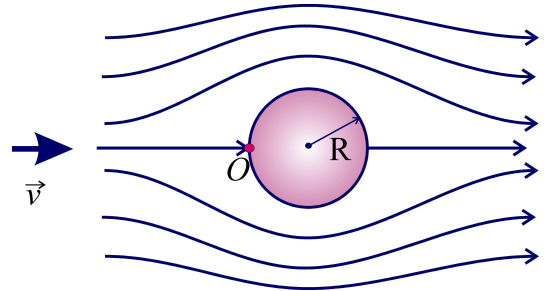
$$S_2 = b^2 F(\alpha)$$

$$S = S_1 + S_2 \text{ и следовательно,}$$

$$c^2 = a^2 + b^2.$$

Теорема Пифагора доказана методами теории размерностей.

Пример 2. Поток несжимаемой идеальной жидкости обтекает шар радиуса R . Вдали от шара давление будем считать равным нулю, а скорость однородного потока – равной v . Требуется определить давление P в лобовой точке O .



Давление P_0 исключаем из определяющих параметров, поскольку можно принять $(P-P_0)$.

$$P = f(\rho, v, R)$$

$$[\rho] = \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, [v] = \frac{\text{м}}{\text{с}}, [R] = \text{м}$$

$$k = n = 3$$

Из П-теоремы

$$P = C\rho^{s_1} \cdot v^{s_2} \cdot R^{s_3}, C = \text{const}.$$

Т.к. размерность давления $[P] = \frac{H}{\text{м}^2} = \frac{\text{кг} \cdot \text{м}}{\text{м}^2 \cdot \text{с}^2} = \frac{\text{кг}}{\text{м} \cdot \text{с}^2}$, то из последнего

получаем:

$$\frac{\text{кг}}{\text{м} \cdot \text{с}^2} = \left(\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}\right)^{s_1} \cdot \left(\frac{\text{м}}{\text{с}}\right)^{s_2} \cdot (\text{м})^{s_3}. \text{ Следовательно, получим:}$$

$$s_1 = 1, s_2 = 2, s_3 = 0.$$

Следовательно искомое давление в точке O не зависит от радиуса шара и определяется формулой:

$$P = C\rho \cdot v^2.$$

Значение константы C можно определить, привлекая полную систему гидродинамических уравнений и решая соответствующую задачу.

$$(\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_{n-k})$$

$$\sigma = \frac{\rho \cdot g \cdot l}{E} \frac{F}{E \cdot l^2} \rho$$

$$\text{Re} = \frac{v \cdot l}{\nu}$$

$$M = \frac{v}{a}$$

$$\text{Fr} = \frac{v^2}{g \cdot l} \nu$$

$$\text{Fo} = \frac{a^2 \cdot t}{l^2}$$

$$\text{Nu} = \frac{a^2 \cdot l}{\lambda}$$

$$\text{Bi} = \frac{a \cdot l}{\lambda}$$

$$\text{Pe} = \frac{v \cdot l}{a^2}$$

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{a^2} \lambda$$

$$\eta = \frac{x}{\beta \cdot t^s}, [\beta] = \frac{M}{c^s}$$

$$P = f(t, Q, \mu, \rho)$$

$$[P] = \frac{\kappa \mathcal{L}}{M \cdot c^2} \quad [\rho] = \frac{\kappa \mathcal{L}}{M^3}, [t] = c, [Q] = M^3, [\mu] = \frac{\kappa \mathcal{L}}{M \cdot c}$$

$$[\rho] = [\mu] \cdot [t] \cdot [Q]^{-2/3}$$

$$k = 3, n - k = 1$$

$$\Pi = \Phi(\Pi_1), \Pi = \frac{P}{\mu \cdot t^{-1}}, \Pi_1 = \frac{\rho}{\mu \cdot t \cdot Q^{-2/3}} \mu$$

3.6. Методы статистической обработки и анализа результатов измерений

ОСНОВЫ ВЫБОРОЧНОГО МЕТОДА

Генеральная совокупность и выборка.

По своей сути математическая статистика – это применение понятий, методов и результатов теории вероятностей к обработке экспериментальных данных. Рассмотрим примеры.

Пример. На заводе выпущена партия из N изделий, имеющих определенный срок эксплуатации. Из нее отобрано n изделий ($n \ll N$), для которых найдено время их работы до отказа. Можно ли эти результаты перенести на все N изделий?

Пример. Физик-экспериментатор измеряет интервал времени между двумя последовательными распадами частиц. Всего он измерил t_1, t_2, \dots, t_n значений этой величины. Что можно сказать о случайной величине T – интервале времени между двумя последовательными распадами?

В математической статистике исходная исследуемая величина называется *генеральной совокупностью*, а полученный из нее набор экспериментальных данных – *выборочной совокупностью* или *выборкой*.

Определение. Выборочным методом исследования называется исследование выборки и перенесение его результатов на генеральную совокупность.

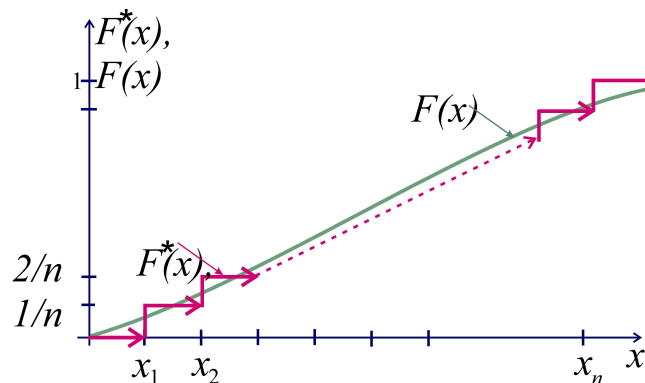
Можно ли вообще применять выборочный метод?

Введем несколько понятий и определений.

Пусть исследуется случайная величина X с функцией распределения $F(X)$. Из нее взята выборка объема n : x_1, x_2, \dots, x_n . Будем считать, что выборку упорядочили $x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_n$. По данным значениям построили функцию – выборочную функцию распределения:

$$F^*(x) = \begin{cases} 0, & x < x_1; \\ \frac{1}{n}, & x_1 \leq x < x_2; \\ \frac{2}{n}, & x_2 \leq x < x_3; \\ \dots & \dots \\ \frac{n-1}{n}, & x_{n-1} \leq x < x_n; \\ 1, & x \geq x_n \end{cases} \quad (1)$$

Вид функции распределения:



Почему функцию распределения строят по формуле (1) – ответ дает принцип максимума правдоподобия: На практике чаще всего происходят события с максимальными вероятностями.

Каким бы ни было распределение случайной величины X , с увеличением n выборочная функция распределения $F^*(x)$ сходится по вероятности к функции распределения генеральной совокупности $F(x)$.

Теорема Гливенко-Кантелли. Для любого непрерывного распределения при $n \rightarrow \infty$ максимальная по модулю разность между выборочной функцией распределения $F^*(x)$ и генеральной $F(x)$ имеет предел по вероятности, равный нулю:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \max_{\forall x \in R} |F^*(x) - F(x)| = 0, \quad (2)$$

где под пределом понимается предел по вероятности.

Т.о., если мы будем увеличивать объем выборки n , то $F^*(x)$ будет иметь все больше и больше ступенек, а высота каждой ступеньки будет все меньше и

меньше. В пределе выборочная функция распределения $F^*(x)$ будет сглаживаться и стремиться к генеральной функции распределения.

Требование: Выборка должна быть репрезентативной или представительной, т.е. представлять все возможные значения генеральной совокупности и примерно в том же соотношении, что и в исходной величине X .

Пример. Нельзя из полученных значений x_1, x_2, \dots, x_n отобрать несколько первых (минимальных) или несколько средних, т.к. в первом случае исказится математическое ожидание, а во втором – дисперсия.

Оценки и требования к ним

Определение. Генеральными параметрами называют числовые параметры генеральной совокупности. Выборочными параметрами – числовые параметры выборки.

m_x^* – выборочное математическое ожидание,

σ_x^* – выборочное среднеквадратичное отклонение.

Выборочные параметры называют оценками соответствующих генеральных параметров.

Требования: Состоятельность, Несмещенность, Эффективность.

Требование 1. Вытекает из теоремы Гливенко-Кателли. При $n \rightarrow \infty$ случайная величина B^* сходится по вероятности к детерминированной величине b : $\lim_{n \rightarrow \infty} B^* = b$ – состоятельность.

Требование 2. $M(B^*) = b$ – несмещенность (более жесткое требование, чем 1).

Требование 3. Из всех состоятельных и несмещенных оценок выбирают ту, у которой при каждом n минимальная дисперсия – эффективность.

Оценка математического ожидания и дисперсии.

Если случайная величина X – дискретная, n -значная и принимает значения x_1, x_2, \dots, x_n с одинаковыми вероятностями $p_i = 1/n$, то математическое ожидание:

$$m_X^* = \sum_{i=1}^n x_i \cdot p_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i, \quad (3)$$

т.е. вычисляется как среднее арифметическое.

Данная оценка является состоятельной и несмещенной.

Если случайная величина X – дискретная, n -значная и принимает значения x_1, x_2, \dots, x_n с одинаковыми вероятностями $p_i = 1/n$, то дисперсия:

$$D_X^* = \sum_{i=1}^n x_i \cdot p_i = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - m_x^*)^2. \quad (4)$$

Среднеквадратичное отклонение: $\sigma_x^* = \sqrt{D_x^*}$.

Данные оценки являются состоятельными и несмещенными.

Определение. Число в знаменателе выборочной дисперсии $f = n - 1$ называется числом степеней свободы выборки из n элементов.

Другие выборочные параметры.

По такому же принципу можно построить формулы для вычисления выборочных асимметрии и эксцесса. Для получения несмещенных и состоятельных оценок исходят из того, что выборочные начальные моменты любого порядка k

$$M_x^{k*} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^k.$$

являются состоятельными и несмещенными оценками соответствующих генеральных моментов.

На практике используют и упрощенные формулы, которые являются немного смещенными, но состоятельными. Асимметрия:

$$a_X^* = \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{(n-1)^3 \cdot (\sigma_x^*)^3}} \sum_{i=1}^n (x_i - m_x^*)^3,$$

$$\text{эксцесс: } e_X^* = \frac{n}{(n-1)^3 \cdot (\sigma_x^*)^4} \sum_{i=1}^n (x_i - m_x^*)^4 - 3.$$

Медиана выборочного распределения равна среднему элементу упорядоченной выборки (в выборе нечетное число элементов) или полусумме средних элементов (если их число четно).

Методика текущих измерений.

На практике не всегда есть возможность провести большое число испытаний. Могут возникнуть следующие ситуации:

1. Над одним и тем же объектов работают различные лаборатории. Различные методики приводят к различным дисперсиям, а один объект исследования – к одному среднему.

2. Для исследования различных объектов применяется одна и та же методика. Матожидания – различные, а дисперсия – одинаковая.

Схема учета полученных ранее результатов для повышения точности своих исследований называется *методикой текущих измерений (МТИ)*.

Пример.

В статье опубликованы результаты исследования некоторого объекта X . В ней приведены: объем выборки $n_1=20$, выборочное среднее $m_1=8.6$ и дисперсия $D_1=6.8$. Некая лаборатория также занимается исследованием этого объекта и смогла провести только $n_2=12$ опытов и получила $m_2=8.4$ и $D_2=8.4$. МТИ позволяет объединить все опыты в одну выборку по формуле: $n=n_1+n_2=32$.

Среднее выборки:

$$m_x = \frac{n_1 \cdot m_1 + n_2 \cdot m_2}{n_1 + n_2} = 8.525,$$

а общее число степеней свободы: $f = n - 1 = 31$.

Теперь можно считать, что мы провели $n=32$ опыта и $m_x = 8.525$ и дисперсия $D_2=8.4$.

Пример.

В некоторой лаборатории проведено $n_1=20$ над некоторым объектом X , выборочное среднее $m_1=8.6$ и дисперсия $D_1=6.8$. В некоторой работе эта же методика применяется для исследования объекта Y и авторы получили $n_2=18$ опытов и получила $m_2=15.4$ и $D_2=6.4$. По МТИ, несмотря на то, что в статье

описан другой объект исследования, результаты можно применить для оценки выборочной дисперсии по формуле:

$$D = \frac{f_1 D_1 + f_2 D_2}{f_1 + f_2} = 6,611 \quad \text{с общим числом степеней свободы}$$

$f = f_1 + f_2 = n_1 + n_2 - 2 = 36$. Теперь можно считать, что проведено 38 опытов и $m_1=8.6$ и $D = 6,611$.

ДОВЕРИТЕЛЬНЫЕ ОЦЕНКИ ПАРАМЕТРОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

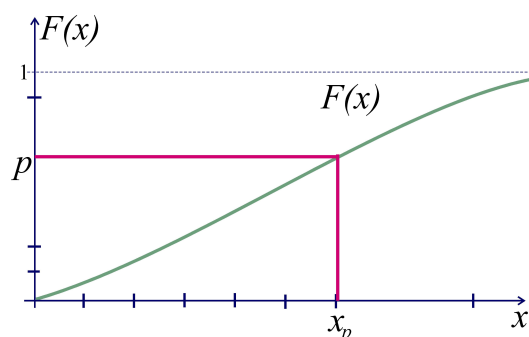
Важно понимать, насколько точно выборочные параметры совпадают с генеральными.

Квантили.

Определение. Квантилем x_p распределения случайной величины X с функцией распределения $F(X)$ называется решение уравнения:

$$F(x_p) = p. \quad (1)$$

Квантиль – это аргумент, соответствующий данному значению функции распределения (см. рис.).



Индекс внизу у квантиля соответствует уровню квантиля. Например, $x_{0,05}$ – 5% квантиль.

Доверительный интервал и доверительная вероятность.

Пусть известен закон распределения генеральной совокупности X , например, ее функции распределения $F(x)$ или плотность распределения $f(x)$. Тогда вероятность того, что случайная величина B^* отличается от своего математического ожидания b на величину, не превышающую ε :

$$P(B^* - b \leq \varepsilon) = \int_{b-\varepsilon}^{b+\varepsilon} f(b^*) db^* = F(b + \varepsilon) - F(b - \varepsilon)$$

и

$$b - \varepsilon \leq B^* \leq b + \varepsilon$$

и

$$B^* - \varepsilon \leq b \leq B^* + \varepsilon.$$

Определение. *Доверительным интервалом* называется интервал со случайными границами для детерминированной величины – генерального параметра. *Доверительной вероятностью* называется вероятность попадания генерального параметра в его доверительный интервал.

Величина $q = 1 - p$ - называется уровнем значимости. (p – доверительная вероятность).

Абсолютная и практическая достоверность. Проверка статистических гипотез.

Из каких соображений назначается доверительная вероятность в практических задачах? Конечно, желательно было бы назначить $p=1$, но этому значению соответствует бесконечный доверительный интервал.

Определение. Событие A называется абсолютно достоверным, если $P(A)=1$. Событие A называется практически достоверным, если оно практически всегда происходит на практике ($P(A) \approx 1$).

Определение. Статистической гипотезой называется любое предположение о законе распределения генеральной совокупности или его параметрах.

Определение. Области, не попадающие в доверительный интервал, называются критическими областями статистической гипотезы, а границы доверительного интервала – критическими числами гипотезы.

ОЦЕНКИ ГЕНЕРАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Оценка генерального математического ожидания

Пусть генеральная совокупность X имеет нормальное распределение. Из нее получена выборка x_1, x_2, \dots, x_n . Далее найдено выборочное матожидание. Требуется найти доверительный интервал для генерального матожидания с доверительной вероятностью p .

Если дисперсия генеральной совокупности известна, то

$$m_x^* - \frac{\sigma_x u_{1-\frac{q}{2}}}{\sqrt{n}} \leq m_x \leq m_x^* + \frac{\sigma_x u_{1-\frac{q}{2}}}{\sqrt{n}},$$

где m_x – генеральное среднее, $q = 1 - p$ – уровень значимости.

Данное выражение получено в предположении, что величина

$$U = \frac{M_x^* - m_x}{\sigma_x} \sqrt{n}$$

имеет нормальное распределение.

Однако дисперсия генеральной совокупности на практике часто неизвестна, а известна лишь величина D_x^* .

Тогда, величина

$$T = \frac{M_x^* - m_x}{\sigma_x^*} \sqrt{n}$$

уже не будет иметь нормальное распределение. Этот факт и распределение вошло в историю под именем t -распределения Стьюдента (Госсет, псевдоним – Стьюдент), которое дает доверительный интервал для матожидания:

$$m_x^* - \frac{\sigma_x^* t_{1-\frac{q}{2}}(f)}{\sqrt{n}} \leq m_x \leq m_x^* + \frac{\sigma_x^* t_{1-\frac{q}{2}}(f)}{\sqrt{n}}.$$

Оценка генеральной дисперсии.

Пусть генеральная совокупность X имеет нормальное распределение. Из нее получена выборка x_1, x_2, \dots, x_n . Далее найдена выборочная дисперсия. Требуется найти доверительный интервал для генеральной дисперсии с доверительной вероятностью p .

Для этих целей используется величина:

$$\chi^2 = \frac{1}{D_x} \sum_{i=1}^n (X_i - M_x^*)^2,$$

которую ввел в рассмотрение Карл Пирсон.

Распределение этой величины имеет название χ^2 -распределение Пирсона. Тогда доверительный интервал для дисперсии:

$$\frac{fD_x^*}{\chi^2_{1-\frac{q}{2}}} \leq D_x \leq \frac{fD_x^*}{\chi^2_{\frac{q}{2}}}.$$

АНАЛИЗ ЗАКОНА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Простейший критерий проверки основной гипотезы.

Определение. Основной гипотезой называется гипотеза о нормальном распределении генеральной совокупности X .

У нормальной величины асимметрия и эксцесс равны нулю. Поэтому выборочные асимметрия и эксцесс должны не очень сильно отличаться от нуля, т.е. доверительные интервалы для генеральных асимметрии и эксцесса должны включать в себя нули. Подобный критерий реализован в Matlab (тест Бера-Жарка) в виде функции `jbtest`. Однако, этот критерий позволяет ответить лишь на вопрос: нормальное распределение или нет. Важно выделить более точные критерии, которые годятся для проверки не только основной гипотезы, но и гипотез о других теоретических распределениях.

Определение. Критерием согласия называется критерий проверки правильности подбора теоретического распределения на его соответствие выборке.

Подбор теоретического распределения и его параметров.

Этапы подбора теоретического распределения:

- 1) подбор вида распределения (закона),
- 2) подбор параметров (числовых констант, входящих в функцию распределения и функцию плотности распределения),
- 3) проверка правильности подбора.

Вид теоретического распределения.

Различные законы распределения отличаются видом графиков $f(x)$ и $F(x)$. Поскольку при дифференцировании особенности проявляются сильнее, график функции плотности распределения является более информативным, чем график функции распределения.

Выборочная плотность распределения:

$$f^*(x) = \frac{n_j}{n \cdot h},$$

– выборочная вероятность попадания в некоторый интервал (отношение числа попаданий в интервал n_j к общему числу попаданий n), деленная на ширину интервала h .

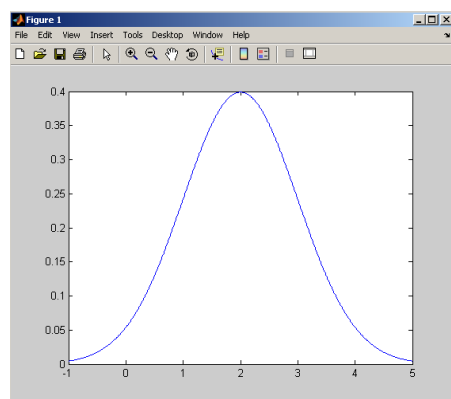
Вопрос: сколько участков k взять? Обычно выбирают для построения гистограммы как ближайшее целое к \sqrt{n} .

Определение. Столбиковая диаграмма числа попаданий в участок n_j называется *гистограммой*.

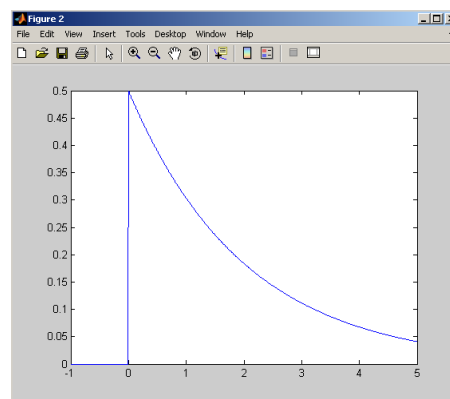
Гистограмма с точностью до множителя nh совпадает с графиком выборочной плотности распределения.

По виду гистограммы подбирают теоретический закон распределения. Для этого смотрят, на какую плотность распределения похожа гистограмма и выбирают соответствующий закон. Рассмотрим 4 из наиболее часто встречающихся в приложениях законов распределений: нормальное, показательное, равномерное, рэлеевское.

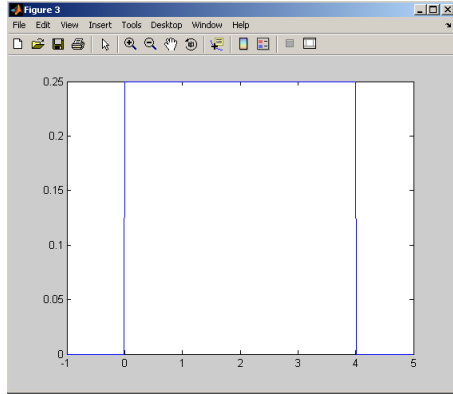
Графический вид приведен на следующем рисунке.



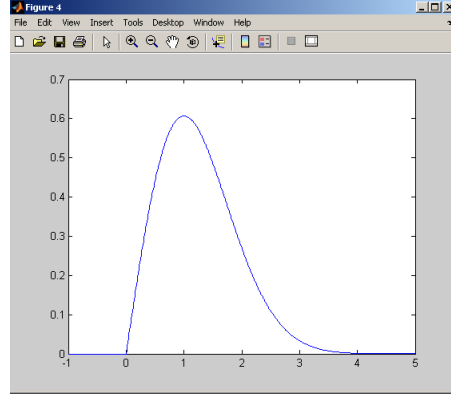
а - Нормальное



б - Экспоненциальное



в - Равномерное



г - Рэлеевское

Нормальное распределение.

Плотность имеет вид:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right).$$

Функция распределения:

$$F(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x \exp\left(-\frac{(t-m)^2}{2\sigma^2}\right) dt = \Phi\left(\frac{x-m}{\sigma}\right) + 0.5,$$

где $\Phi(u)$ – интеграл Лапласа.

Нормальное распределение является двухпараметрическим (параметры m и σ).

В Matlab: `normpdf` и `normcdf` с параметрами m и σ .

Плотность показательного распределения отлична от нуля только для неотрицательных значений x . В нуле она принимает максимальное значение, равное α . С ростом x она убывает, оставаясь вогнутой и асимптотически приближаясь к нулю. Плотность показательного распределения:

$$f(x) = \begin{cases} 0; & x < 0; \\ \alpha \exp(-\alpha x); & x \geq 0. \end{cases}$$

Функция распределения:

$$F(x) = \begin{cases} 0; & x < 0; \\ 1 - \exp(-\alpha x); & x \geq 0. \end{cases}$$

Показательное распределение является однопараметрическим (параметр α). В Matlab: `expmpdf` и `expmcdf` с параметром – величиной, обратной к α .

Плотность равномерного распределения отлична от нуля только в заданном интервале $[a, b]$, и принимает в этом интервале постоянное значение:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}; & x \in [a, b]; \\ 0; & x \notin [a, b]. \end{cases}$$

Функция распределения:

$$F(x) = \begin{cases} 0; & x < a \\ \frac{x-a}{b-a}; & x \in [a, b]; \\ 1; & x > b \end{cases}$$

Равномерное распределение – двухпараметрическое (параметры a и b). В Matlab: `unifpdf` и `unifcdf` с параметрами a и b .

Плотность рэлеевского распределения отлична от нуля для неотрицательных значений. От нуля она выпуклая и возрастает до некоторого максимального значения. Далее убывает, становясь вогнутой и асимптотически приближается к нулю.

Плотность рэлеевского распределения:

$$f(x) = \begin{cases} 0; & x < 0; \\ \frac{x}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right); & x \geq 0. \end{cases}$$

Функция распределения:

$$F(x) = \begin{cases} 0; & x < 0; \\ 1 - \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right); & x \geq 0. \end{cases}$$

Показательное распределение является однопараметрическим (параметр α). В Matlab: `raylpdf` и `raylcdf` с параметром – величиной σ .

Вид гистограммы позволяет выбрать сразу несколько законов. Дальнейшая диагностика основана на критериях согласия.

Параметры теоретического распределения.

Для определения параметров можно применить метод максимального правдоподобия или метод моментов.

Более простым является второй подход. В нем, параметры, входящие в выражения для $f(x)$ и $F(x)$, подбираются так, чтобы вычисленные по этим параметрам матожидание (для 1-параметрических законов) или матожидание и дисперсия (для 2-параметрических законов) совпадали с выборочными. Для 3-параметрических законов распределения должны совпадать среднее, дисперсии, асимметрия и т.д.

Для нормального распределения: $m = m_x^*; \sigma = \sigma_x^*$.

Для показательного распределения: $\alpha = \frac{1}{m_x^*}$.

Для равномерного распределения: $a = m_x^* - \sigma_x^* \sqrt{3}; b = m_x^* + \sigma_x^* \sqrt{3}$.

Для рэлеевского распределения: $\sigma = m_x^* \sqrt{\frac{2}{\pi}}$.

Критерии согласия.

Т.о. получены две функции, как сравнить их? Найти максимальную по ординатам разность и взять ее модуль. Другой вариант – посчитать площадь между кривыми или интеграл от квадрата разности.

Два наиболее распространенных критерия: критерий Колмогорова и критерий Пирсона.

Критерий согласия Колмогорова

Максимальная по модулю разность между выборочной и генеральной функциями распределения:

$$D = \max_{\forall x \in R^1} |F^*(x) - F(x)|$$

является случайной величиной.

Эта величина с ростом объема выборки сходится по вероятности к нулю. Колмогоров уточнил этот результат, выяснив как именно D сходится к нулю. Он рассмотрел случайную величину $\Lambda = D\sqrt{n}$ и нашел ее закон распределения.

При достаточно больших n он вообще не зависит от закона распределения генеральной совокупности.

Теорема (Колмогорова). Для любого непрерывного закона распределения генеральной совокупности X функция распределения случайной величины $\Lambda = D\sqrt{n}$ при достаточно большом n имеет вид:

$$F(\lambda) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} (-1)^k \exp(-2k^2 \cdot \lambda^2).$$

- распределение Колмогорова.

Эта теорема дает возможность проверить правильность подбора теоретического распределения. Если опытные данные взяты из генеральной совокупности с функцией распределения $F(x)$, то вычисленная реализация λ случайной величины Λ на уровне значимости q должна лежать в квантильных границах распределения Колмогорова. 0-гипотезу можно принять, если выполнено условие:

$$\lambda \leq \lambda_{1-q}. \quad (*)$$

Т.о., необходимо найти максимальную по модулю разность между выборочной и теоретической функциями распределения D , вычислить по ней λ - реализацию случайной величины Λ и проверить выполнение условия (*).

В Matlab проверка критерия согласия Колмогорова может быть проведена с помощью функции `kstest`.

При этом выбираем такое распределение, для которого q максимальное (вероятность p разницы между функциями распределения минимальная). График выборочной функции распределения строит функция `cdfplot`.

СРАВНЕНИЕ ВЫБОРОК

Рассмотрим не одну, а две или более выборок и задачи статистики для них. Будем предполагать, что генеральные совокупности независимы и имеют нормальные распределения, опыты в каждой выборке также независимы.

Сравнение двух дисперсий.

Пусть имеются две генеральные совокупности X_1 и X_2 . Из каждой взята выборка объемом n_1, n_2 соответственно. Вычислены выборочные матожидания m_1^*, m_2^* и дисперсии D_1^*, D_2^* . Требуется проверить 0-гипотезу о равенстве генеральных дисперсий:

$$D_1 = D_2.$$

Будем считать, что выборочные дисперсии – это реализации случайных величин – D_1^*, D_2^* . Рассмотрим случайную величину:

$$F = \frac{D_1^*}{D_1} \div \frac{D_2^*}{D_2} = \frac{D_1^*}{D_1} \frac{D_2}{D_2^*}.$$

Распределение этой величины носит имя Фишера и называется *F-распределением Фишера*.

Используя $\chi^2 = \frac{1}{D_x} \sum_{i=1}^n (X_i - M_x^*)^2$ можно получить другое выражение для

F:

$$F = \frac{\chi^2(f_1)}{f_1} \div \frac{\chi^2(f_2)}{f_2} = \frac{\chi^2(f_1)}{f_1} \frac{f_2}{\chi^2(f_2)}.$$

F-распределение Фишера используется для проверки 0-гипотезы и носит название *F-критерием Фишера*.

Если 0-гипотеза имеет место отношение выборочных дисперсий должно иметь *F*-распределение Фишера:

$$F = \frac{D_1^*}{D_1} \div \frac{D_2^*}{D_2} = \frac{D_1^*}{1} \frac{1}{D_2^*}.$$

Значит реализация этой случайной величины, т.е. вычисленное на практике отношение выборочных дисперсий, должно на уровне значимости q попадать в квантильные границы. Интервал для 0-гипотезы:

$$F_{\frac{q}{2}}(f_1, f_2) \leq \frac{D_1^*}{D_2^*} \leq F_{1-\frac{q}{2}}(f_1, f_2).$$

Выход за левую границу интервала соответствует альтернативной гипотезе: $D_1 < D_2$, а за правую – гипотезе $D_1 > D_2$.

Сравнение двух средних

Пусть имеются две генеральные совокупности X_1 и X_2 . Из каждой взята выборка объемом n_1, n_2 соответственно. Вычислены выборочные матожидания m_1^*, m_2^* и дисперсии D_1^*, D_2^* . Требуется проверить 0-гипотезу о равенстве генеральных матожиданий:

$$m_1 = m_2.$$

Если генеральные дисперсии известны, то можно получить следующий доверительный интервал (см. книга):

$$-\sqrt{\frac{D_1}{n_1} + \frac{D_2}{n_2}} \cdot u_{1-\frac{q}{2}} \leq m_1^* - m_2^* \leq \sqrt{\frac{D_1}{n_1} + \frac{D_2}{n_2}} \cdot u_{1-\frac{q}{2}} \quad (**)$$

Если (**) выполняется, то можно принять 0-гипотезу. Однако на практике генеральные дисперсии чаще всего неизвестны. Обычно по выборкам можно найти только выборочные характеристики.

В Matlab сравнение двух средних проводит функция `ttest2`.

ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ

Ранее мы полагали, что все условия опытов остаются неизменными, а разброс экспериментальных данных вызывается лишь случайными причинами. Другая, не менее важная задача матстатистики заключается в том, что во время эксперимента один или несколько подконтрольных нам факторов изменяются и необходимо оценить влияние этих факторов. В более общей постановке необходимо отделить изучаемые факторы от случайных, друг от друга и оценить значимо ли влияет каждый из них на результат эксперимента по сравнению с неконтролируемыми (случайными факторами).

Здесь будем исследовать зависит ли вообще эксперимент от этого фактора или изучаемый фактор лишь незначимо влияет на результат по сравнению со случайными факторами.

Будем считать, что случайные ошибки наблюдений имеют нормальное распределение, а изучаемые факторы A , B и т.д.

- ✓ Не зависят от случайных,
- ✓ Не зависят друг от друга
- ✓ Влияют только на среднее результатов и не влияют на дисперсию.

Как охарактеризовать меру влияния фактора A ? Будем считать, что проведены эксперименты без погрешностей. Пусть при n значениях фактора A получены истинные результаты x_1, x_2, \dots, x_n . Если A не влияет на них, то они все одинаковые, иначе – нас интересует только степень зависимости и в качестве меры влияния удобно взять степень разброса результатов - выборочную дисперсию:

$$m_x^* = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i ; \quad (6.1)$$

$$D_A = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - m_x^*)^2 . \quad (6.2)$$

D_A – лишь аналог выборочной дисперсии и характеризует не случайность, а лишь влияние фактора A . На практике является очень удобной.

Определение. Изучение переменных факторов по их дисперсиям называется *дисперсионным анализом*.

При решении задач дисперсионного анализа полагают действие факторов и случайностей независимыми случайными событиями. Совместное их действие приводит к тому, что экспериментальные результаты будут реализациями случайной величины, дисперсия которой будет равна сумме дисперсий факторов и случайностей. Например, если генеральная дисперсия X при неизменном A равна D_0 и дисперсия фактора A при отсутствии случайностей равна D_A и других факторов нет, то генеральная дисперсия X будет равна

$$D_x = D_A + D_0 . \quad (6.3)$$

Пример. Пусть D_0 известна и исследуется влияние фактора A . При n значениях фактора A получены истинные результаты x_1, x_2, \dots, x_n . Является ли влияние фактора A значимым на уровне значимости q ?

Найдем выборочное матожидание по (6.1), а затем дисперсию выборки:

$$D_x^* = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - m_x^*)^2,$$

она является оценкой генеральной дисперсии (6.2). выдвинем 0-гипотезу: фактор A влияет незначимо. В этом случае D_x^* не должна быть слишком большой по сравнению с D_0 . Две дисперсии можно сравнить по критерию Фишера. 0-гипотезу можно принять на уровне значимости q , если выполнено условие:

$$\frac{D_x^*}{D_0} \leq F_{1-q}(k-1, \infty), \quad (6.4)$$

где F_{1-q} – квантиль F -распределения Фишера, $k-1$ – число степеней свободы D_x^* , а у генеральной дисперсии D_0 – бесконечно большое число степеней свободы.

Если (6.4) нарушается, то необходимо отвергнуть 0-гипотезу и принять альтернативную – фактор A влияет значимо. В этом случае можно вычислить его выборочную дисперсию

$$D_A^* = D_x^* - D_0. \quad (6.5)$$

1-факторный дисперсионный анализ.

Часто на практике D_0 не известна. Поэтому на каждом уровне фактора A необходимо проводить несколько измерений. Пусть $A_1, A_2, \dots, A_j, \dots, A_k$ – уровни фактора A . Положим, что на каждом уровне проведено n измерений. Тогда измерения, проведенные на уровне A_j : $x_{j1}, x_{j2}, \dots, x_{ji}, \dots, x_{jn}$ (первый индекс – номер уровня фактора, второй – номер опыта).

Получаем матрицу опыта размера $k \times n$:

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{k1} & x_{k2} & \dots & x_{kn} \end{pmatrix}.$$

Каждая строка соответствует одному уровню фактора.

Чтобы вычислить дисперсию, которая учитывает влияние только случайностей необходимо вычислить дисперсии всех строк, которые должны быть примерно одинаковые (фактор A не влияет на разброс результатов):

$$m_j^* = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ji}; \quad D_j = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_{ji} - m_j^*)^2.$$

Пусть проверка по критериям Барлета или Кохрана (для нескольких выборок) показала, что гипотезы справедливы и выборочные дисперсии сравнимы. По МТИ можно вычислить средневзвешенную всех D_j^* , которую и можно считать оценкой дисперсии случайностей D_0

$$D_0^* = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k D_j^*.$$

Число степеней свободы равно числу степеней свободы всех выборок:

$$f = k(n-1).$$

Т.о. мы нашли знаменатель (6.4) – выборочную дисперсию.

Перейдем к числителю, который оценивает влияние и случайностей, и фактора A .

Способ 1.

Проще всего собрать все kn измерений в одну выборку и найти ее среднее и дисперсию:

$$m_x^* = \frac{1}{kn} \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^n x_{ji},$$

$$D_x^* = \frac{1}{kn-1} \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^n (x_{ji} - m_x^*)^2.$$

Фактор A считаем незначимым на уровне значимости q , если

$$\frac{D_x^*}{D_0^*} \leq F_{1-q}(kn-1, k(n-1)). \quad (6.6)$$

При нарушении (6.6) нужно считать, что фактор A влияет значимо и можно вычислить его выборочную дисперсию по (6.5).

Способ 2.

Можно оценить разброс не всех данных x_{ji} , а только средних m_j^*

$$D_x^{**} = \frac{1}{k-1} \sum_{j=1}^k (m_j^* - m_x^*)^2,$$

то она будет включать в себя не D_0^* , а D_0^*/n .

И вместо (6.3) будем иметь

$$D_x^{**} = D_A^* + D_0^*/n.$$

Критерий 0-гипотезы:

$$\frac{nD_x^{**}}{D_0^*} \leq F_{1-q}(k-1, k(n-1)).$$

Если это неравенство выполняется, то фактор A влияет незначимо, иначе – значимо.

В Matlab задачу 1-факторного дисперсионного анализа решает функция `anova1`.

2-факторный дисперсионный анализ.

Дисперсионный анализ оказывается удобным при исследовании совместного действия нескольких факторов. Пусть изучается 2 фактора: A и B . Уровни фактора A : $A_1, A_2, \dots, A_j, \dots, A_k$ (всего k уровней) и уровни фактора B : $B_1, B_2, \dots, B_i, \dots, B_m$ (всего m уровней). Матрица экспериментов имеет вид:

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{k1} & x_{k2} & \dots & x_{km} \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

Каждая строка j соответствует j -му уровню фактора A , каждый столбец i соответствует i -му уровню фактора B . Этих данных вполне достаточно, чтобы оценить D_0^* , D_A^* и D_B^* .

По способу 2 найдем средние каждой строки:

$$m_j^{R*} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m x_{ji}, \quad (6.8)$$

а затем разброс относительно общего среднего:

$$D_{A0}^* = \frac{1}{k-1} \sum_{j=1}^k (m_j^{R*} - m_x^*)^2, \quad (6.9)$$

где $m_x^* = \frac{1}{km} \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^m x_{ji}$ – среднее всей матрицы.

В каждом из средних строки (6.8) произведено усреднение по фактору B , поэтому в их дисперсии (6.9) сказывается влияние только фактора A и случайностей. При этом дисперсия случайностей уменьшена в m раз, т.к. вместо конкретного измерения мы берем среднее из m измерений.

$$D_{A0}^* = D_A^* + D_0^* / m. \quad (6.10)$$

Теперь повторим выкладки (6.8-6.10). Найдем среднее каждого столбца:

$$m_j^{C*} = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k x_{ji} \quad (6.11)$$

и разброс относительно общего среднего:

$$D_{B0}^* = \frac{1}{m-1} \sum_{j=1}^m (m_j^{C*} - m_x^*)^2. \quad (6.12)$$

Эта дисперсия учитывает влияние фактора B и случайностей, причем дисперсия случайностей здесь в k раз меньше, чем в том случае, если бы мы вместо средних брали отдельные измерения:

$$D_{B0}^* = D_B^* + D_0^* / k. \quad (6.13)$$

Теперь проведем выкладки, аналогичные способу 1 из п.6.2

Если собрать все km опытов в одну выборку, то ее дисперсия будет учитывать влияние и A , и B , и случайностей. Это и будет 3-е уравнение,

замыкающее систему (6.10) и (6.13). Но точность этого метода низка и на практике поступают иначе.

На данном уровне A_j фактора A разброс элементов j -ой строки матрицы эксперимента вокруг их среднего (6.8) характеризует влияние фактора B и случайностей, причем в одинаковой степени:

$$D_j^{R*} = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (x_{ji} - m_j^{R*})^2. \quad (6.14)$$

Различные уровни фактора A не влияют на дисперсию. Значит, все D_j^{R*} сравнимы, и более точной оценкой влияния фактора B и случайностей является средневзвешенное всех D_j^{R*} :

$$D_x^{R*} = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k D_j^{R*} = D_B^* + D_0^*. \quad (6.15)$$

Аналогично можно найти разброс элементов каждого столбца вокруг его среднего, который учитывает влияние фактора A и случайностей:

$$D_i^{C*} = \frac{1}{k-1} \sum_{j=1}^k (x_{ji} - m_i^{C*})^2,$$

и взять средневзвешенное всех D_i^{C*} :

$$D_x^{C*} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m D_i^{C*} = D_A^* + D_0^* \quad (6.16)$$

Теперь из решений какой-либо пары уравнений (6.10)+(6.16) или (6.13)+(6.15) можно найти D_0^* . Например,

$$\begin{cases} D_{B0}^* = D_B^* + D_0^* / k \\ D_x^{R*} = D_B^* + D_0^* \end{cases},$$

вычтем из 2-го уравнения 1-ое и подставим (6.12) и (6.14):

$$D_0^* = \frac{1}{(m-1)(k-1)} \left(\sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^m (x_{ji} - m_j^{R*})^2 - k(m_j^{C*} - m_x^*)^2 \right). \quad (6.17)$$

Дисперсия имеет $(m-1)(k-1)$ степеней свободы, ее можно применить для оценки влияния факторов A и B .

На уровне значимости q влиянием фактора A можно пренебречь, если:

$$\frac{mD_{A0}^*}{D_0^*} \leq F_{1-q}(k-1, (m-1)(k-1))$$

Нарушение этого неравенства свидетельствует о значимости фактора A , аналогично записывается критерий проверки значимости фактора B .

В Matlab задачу 2-факторного дисперсионного анализа решает функция `anova2`.

МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Часто возникает необходимость ответить не просто на вопрос: влияет ли подконтрольный фактор на результаты измерений, а как именно.

МНК и его связь с ПМП

Пусть x – подконтрольный фактор, различные значения которого будем считать детерминированными, Y – результат опыта – случайную величину. Пусть из теоретических соображений известен вид зависимости Y от x :

$$Y = y(x, B_1, B_2, \dots, B_n),$$

где B_1, B_2, \dots, B_n – параметры, которые являются случайными величинами.

Поскольку B_1, B_2, \dots, B_n – случайные величины, то проводится число опытов $n \gg m$.

Поскольку кривых можно провести множество, возникает вопрос: какую кривую считать наилучшей? – Ответ дает ПМП.

КОРРЕЛЯЦИОННЫЙ АНАЛИЗ

В теории вероятностей: рассматриваются детерминированные функции случайных величин. В задачи обработки ЭД МНК необходимо установить связь между детерминированными значениями аргументов и случайными значениями функции.

Рассмотрим промежуточную задачу – где аргумент X и величины Y – случайные, будем оценивать взаимосвязаны ли эти величины, и если да, то насколько.

Понятие о корреляции.

Определение. Связь между координатами случайного вектора (при изменении X меняется и Y) называется стохастической.

Пример. Температура воздуха и атмосферное давление в данный момент времени – две случайные величины. Связь между ними – стохастическая.

В стохастической связи есть две составляющие.

Определение. Та часть стохастической связи, которая определяется взаимным влиянием X и Y называется стохастической составляющей стохастической связи.

Определение. Та часть стохастической связи, которая определяется случайностями самих X и Y называется случайной составляющей стохастической связи.

Для численной оценки взаимосвязи X и Y нужно ввести числовую характеристику.

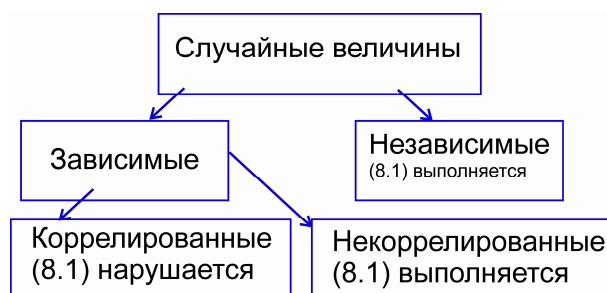
Пусть величины независимы. Тогда

$$D(X + Y) = D_x + D_y. \quad (8.1)$$

Это условие могло бы служить критерием разделения величин на зависимые и независимые, если бы не было справедливо и обратное. Однако, если X и Y зависимые, то не обязательно данное условие будет нарушено.

(8.1) может служить характеристикой стохастической составляющей – корреляции.

Определение. *Корреляцией* называется та часть стохастической составляющей стохастической связи, которая влияет на нарушение равенства (8.2).



Определение. Случайные величины X и Y называются коррелированными, если для них (8.1) нарушается и некоррелированными, если (8.1) имеет место.

Пусть величины X и Y зависимы. Тогда

$$D(X + Y) = M((X - m_x) + (Y - m_y))^2 = D_x + D_y + 2M((X - m_x)(Y - m_y)). \quad (8.2)$$

Появление второго смешанного центрального момента свидетельствует о зависимости X и Y . Поэтому по величине $M((X - m_x)(Y - m_y))$ можно судить об абсолютной величине корреляции.

Определение. Коэффициентом корреляции называется отношение второго смешанного центрального момента величин X и Y к произведению их среднеквадратичных отклонений:

$$\rho = \frac{M((X - m_x)(Y - m_y))}{\sigma_x \sigma_y}.$$

Если $\rho = 0$, то X и Y – некоррелированные.

Свойства коэффициента корреляции:

- 1) Величина ρ не меняется, если к X и (или) Y прибавить произвольное детерминированное слагаемое.
- 2) Величина ρ не меняется, если к X и (или) Y умножить на произвольный детерминированный множитель.
- 3) Величина ρ изменит только знак, если одну из величин X (или) Y умножить на -1.
- 4) Величина ρ не изменится, если перейти от X и Y к центрированным и нормированным центральным моментам по формулам:

$$X_0 = \frac{X - m_x}{\sigma_x}, \quad Y_0 = \frac{Y - m_y}{\sigma_y}.$$

- 5) Величина ρ лежит в пределах: $-1 \leq \rho \leq 1$.

6) Если $\rho=1$, то X и Y связаны детерминированной линейной зависимостью $Y = kX + b, k > 0$. При $\rho = -1$ они связаны детерминированной линейной зависимостью $Y = kX + b, k < 0$.

7) Справедливо и обратное к 6.

8) Если X и Y нормальные и некоррелированные ($\rho=0$), то они независимые.

Оценка коэффициента корреляции по данным наблюдений.

Пусть проведено n испытаний и получена выборка $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$. Требуется по этим данным оценить коэффициент корреляции генеральной совокупности.

Определение. Оценка коэффициента корреляции по данным наблюдений называется *корреляционным анализом*.

Предположим, что генеральные совокупности X и Y имеют нормальное распределения с математическими ожиданиями m_x, m_y и дисперсиями D_x, D_y и коэффициентом корреляции ρ . По этим данным находим второй смешанный центральный момент :

$$M_{xy}^* = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - M_x^*)(Y_i - M_y^*),$$

а затем функцию, реализацией которой является выборочный коэффициент корреляции ρ^* :

$$R = \frac{M_{xy}^*}{\sqrt{D_x^* D_y^*}}. \quad (8.3)$$

Определение. Распределение случайной величины R называется r -распределением выборочного коэффициента корреляции, соответствующего генеральному ρ .

0-гипотезу о некоррелированности величин X и Y можно принять на уровне значимости q , если выборочный коэффициент корреляции лежит в квантильных границах:

$$-r_{1-\frac{q}{2}} \leq \rho^* \leq r_{1-\frac{q}{2}}. \quad (8.4)$$

Если (8.4) нарушается, то нужно принять одну из двух альтернативных гипотез: $\rho > 0, \rho < 0$.

В Matlab функция `corrcoef` вычисляет корреляционную матрицу для массива, состоящего из столбцов данных.

3.7 Планирование численного и физического экспериментов

ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Из названия темы видно, что речь идет об экспериментальных методах. Большинство научных исследований связано с экспериментом. Он проводится в лабораториях, на производстве, на опытных полях и участках, в клиниках и т.д. Эксперимент может быть физическим, психологическим или модельным. Он может непосредственно проводиться на объекте или на его модели. Модель обычно отличается от объекта масштабом, а иногда природой.

Как вы считаете, можно ли поставить эксперимент на абстрактной математической модели?

Если модель достаточно точно описывает объект, то эксперимент на объекте может быть заменен экспериментом на модели. В последнее время наряду с физическими моделями все большее распространение получают абстрактные математические модели. Можно получать новые сведения об объекте, экспериментируя на модели, если она достаточно точно описывает объект.

Эксперимент занимает центральное место в науке. Однако возникает вопрос, насколько эффективно он используется. Джон Бернал, например, отмечал, что научные исследования организуются и проводятся настолько хаотично, что их коэффициент полезного действия может быть оценен величиной порядка 2%. Для того чтобы повысить эффективность исследований, требуется нечто совершенно новое. Одним из возможных путей является применение математических методов, построение математической теории планирования эксперимента.

Планирование эксперимента – это процедура выбора числа и условий проведения опытов, необходимых и достаточных для решения поставленной задачи с требуемой точностью. При этом существенно следующее:

стремление к минимизации общего числа опытов;

одновременное варьирование всеми переменными, определяющими процесс, по специальным правилам – алгоритмам;

использование математического аппарата, формализующего многие действия экспериментатора;

выбор четкой стратегии, позволяющей принимать обоснованные решения после каждой серии экспериментов.

Задачи, для решения которых может использоваться планирование эксперимента, чрезвычайно разнообразны.

Поиск оптимальных условий, построение интерполяционных формул, выбор существенных факторов, оценка и уточнение констант теоретических моделей (например, кинетических), выбор наиболее приемлемых из некоторого множества гипотез о механизме явлений, исследование диаграмм состав свойства – вот примеры задач, при решении которых применяется планирование эксперимента. Можно сказать, что там, где есть эксперимент, имеет место и наука о его проведении – планирование эксперимента.

Поиск оптимальных условий является одной из наиболее распространенных научно-технических задач. Они возникают в тот момент, когда установлена возможность проведения процесса и необходимо найти наилучшие (оптимальные в некотором смысле) условия его реализации?; Пусть, например, у химика возникла гипотеза о том, что при взаимодействии двух веществ должен получаться некоторый интересующий его продукт. Чтобы убедиться в правильности своей гипотезы, он начинает проводить эксперимент. Возможно, что ему повезло и он получил требуемый продукт. Однако выход продукта весьма низок, скажем, 2%. Вот тут-то и возникает задача выбора оптимальных условий. Требуется так подобрать концентрации реагирующих веществ, температуру, давление, время реакции и другие факторы, чтобы

сделать выход возможно более близким к 100%. В данном примере находятся условия проведения процесса, оптимальные в смысле максимизации выхода требуемого продукта. Но это далеко не единственно возможная постановка задачи. Найденные условия оказались бы другими, если бы ставилась, например, цель минимизации себестоимости продукта или минимизации количества вредных примесей. Следует подчеркнуть, что всегда необходимо четко формулировать, в каком смысле условия должны быть оптимальными. Этим определяется выбор цели исследования. Точная формулировка цели в значительной мере определяет успех исследования, и мы посвятим этому вопросу следующую главу.

Задачи, сформулированные аналогичным образом, называются задачами оптимизации. Процесс их решения называется процессом оптимизации или просто оптимизацией. Выбор оптимального состава многокомпонентных смесей или сплавов, повышение производительности действующих установок, повышение качества продукции, снижение затрат на ее получение – вот примеры задач оптимизации.

Рассмотрим следующие две задачи.

1. Прочность бетона в значительной степени определяется маркой цемента, количеством наполнителя и количеством воды. Требуется установить связь между прочностью бетона и названными факторами.

2. Надежность некоторого полупроводникового прибора зависит от ряда технологических факторов. Требуется так подобрать значения этих факторов, чтобы надежность прибора повысилась.

Как вы думаете, какая из этих задач является экстремальной? Чтобы облегчить вам выбор, укажем на признак, отличающий экстремальные задачи. Задача является экстремальной, если цель ее состоит в поиске экстремума некоторой функции. Чтобы установить, какая из двух задач является экстремальной, надо обратиться к их формулировкам и выяснить, где удовлетворяются требования экстремальности. В задаче 1 требуется установить связь между прочностью бетона и тремя факторами. Здесь не определено, какая

прочность является оптимальной, и не требуется ее оптимизировать. В задаче 2 необходимо повысить надежность прибора. Сама постановка задачи указывает на то, что существующая надежность не удовлетворяет экспериментатора и требуется поиск таких условий, при которых ее значения повысятся. Задачи типа 1 мы будем называть интерполяционными, а типа 2 – экстремальными.

Чтобы продвинуться дальше, нам придется определить еще ряд важных понятий, первое из которых – «объект исследования». Для описания объекта исследования удобно пользоваться представлением о кибернетической системе, которая схематически изображена на рис. 1. Иногда такую кибернетическую систему называют «черным ящиком». Стрелки справа изображают численные характеристики целей исследования. Мы обозначаем их буквой μ и называем параметрами оптимизации. В литературе вы можете встретить другие названия: критерий оптимизации, целевая функция, выход «черного ящика» и т. д.

Для проведения эксперимента необходимо иметь возможность воздействовать на поведение «черного ящика». Все способы такого воздействия мы обозначаем буквой x и называем факторами. Их называют также входами «черного ящика».

При решении задачи будем использовать математические модели объекта исследования. Под математической моделью понимаем уравнение, связывающее параметр оптимизации с факторами. Это уравнение в общем виде можно записать так:

$$y = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_k)$$

где символ φ заменяет слова: «функция от». Такая функция называется *функцией отклика*. В четвертой главе мы рассмотрим вопрос о том, как эту функцию можно выбрать и построить. А сейчас важно понять, как получаются условия проведения опытов в том эксперименте, который мы собираемся провести.

Каждый фактор может принимать в опыте одно из нескольких значений. Такие значения будем называть уровнями. Может оказаться, что фактор

способен принимать бесконечно много значений (непрерывный ряд). Однако на практике точность, с которой устанавливается некоторое значение, не беспредельна. Поэтому мы вправе считать, что всякий фактор имеет определенное число дискретных уровней. Это соглашение существенно облегчает построение «черного ящика» и эксперимента, а также упрощает оценку их сложности.

Фиксированный набор уровней факторов (т. е. установление каждого фактора на некоторый уровень) определяет одно из возможных состояний «черного ящика». Одновременно это есть условия проведения одного из возможных опытов. Если перебрать все возможные наборы состояний, то мы получим полное множество различных состояний данного «ящика». Одновременно это будет число возможных различных опытов.

Чтобы узнать число различных состояний, достаточно число уровней факторов (если оно для всех факторов одинаково) возвести в степень числа факторов k : p^k , где p – число уровней. Поупражняйтесь в подсчете числа различных состояний для разных случаев. Это вам пригодится в дальнейшем. Кроме того, вы увидите, что реальные объекты, с которыми вы сталкиваетесь ежедневно, обладают огромной сложностью. Так, на первый взгляд простая система с пятью факторами на пяти уровнях имеет 3125 состояний, а для десяти факторов на четырех уровнях их уже свыше миллиона!

В этих условиях мы просто вынуждены отказаться от таких экспериментов, которые включают все возможные опыты: перебор слишком велик. Тогда возникает вопрос: сколько и каких опытов надо включить в эксперимент, чтобы решить поставленную задачу? Здесь-то и приходит на помощь планирование эксперимента.

Однако нужно иметь в виду, что при планировании эксперимента не безразлично, какими свойствами обладает объект исследования. Укажем два основных требования, с которыми приходится считаться. Прежде всего существенно, воспроизводятся ли на объекте результаты эксперимента. Выберем некоторые уровни для всех факторов и в этих условиях проведем

эксперимент. Затем повторим его несколько раз через неравные промежутки времени и сравним значения параметра оптимизации. Разброс этих значений характеризует воспроизводимость результатов. Если он не превышает некоторой заранее заданной величины (наших требований к точности эксперимента), то объект удовлетворяет требованию воспроизводимости результатов, а если превышает, то не удовлетворяет этому требованию. Мы будем рассматривать только такие объекты, для которых требование воспроизводимости выполняется.

Планирование эксперимента предполагает активное вмешательство в процесс и возможность выбора в каждом опыте тех уровней факторов, которые представляют интерес. Поэтому такой эксперимент называется активным. Объект, на котором возможен активный эксперимент, называется управляемым. Это и есть второе требование к объекту исследования.

На практике нет абсолютно управляемых объектов. На реальный объект обычно действуют как управляемые, так и неуправляемые факторы. Неуправляемые факторы влияют на воспроизводимость эксперимента и являются причиной ее нарушения. Если требования воспроизводимости не выполняются, приходится обращаться к активно-пассивному эксперименту.

Возможно, плохая воспроизводимость объясняется действием фактора, систематически изменяющегося (дрейфующего) во времени. Тогда нужно обращаться к специальным методам планирования. Наконец, возможно, что все факторы неуправляемы. В этом случае возникает задача установления связи между параметром оптимизации и факторами по результатам наблюдений за поведением объекта, или, как говорят, по результатам пассивного эксперимента. Эти случаи мы не будем рассматривать. Наша цель – изложение методов планирования экстремального эксперимента для воспроизводимых управляемых статических объектов.

Планирование экстремального эксперимента – это метод выбора количества и условий проведения опытов, минимально необходимых для отыскания оптимальных условий, т. е. для решения поставленной задачи.

Приступая к знакомству с планированием экстремального эксперимента, надо иметь в виду, что при оптимизации распространен так называемый детерминированный подход, особенно широко используемый в химии. При этом предполагается построение физической модели процесса на основании тщательного изучения механизма явлений (например, кинетики, гидродинамики), что позволяет получить математическую модель объекта в виде системы дифференциальных уравнений. Несомненно, что детерминированный и статистический (связанный с планированием эксперимента) подходы должны разумно дополнять друг друга, а не противопоставляться, как это иногда делается.

Теперь можно считать, что основные определения введены, и мы готовы перейти к детальному рассмотрению нашей задачи. Но сначала подведем итог.

Прежде чем приступать к эксперименту, необходимо однозначно и непротиворечиво сформулировать его цель и выбрать подходящую количественную характеристику этой цели, которую мы назвали параметром оптимизации.

Понятие «объект исследования» требует точного формального определения. Для такого определения удалось приспособить кибернетическое понятие «черный ящик» – модель объекта. Экспериментатор, вставший на путь применения методов планирования эксперимента, должен уметь формулировать свою задачу в терминах «черного ящика».

Входы «черного ящика» называются факторами. Каждый фактор может принимать некоторое определенное число различных значений, называемых уровнями. Сочетание определенных уровней всех факторов определяет возможное состояние «черного ящика» и условия одного из возможных опытов.

Совокупность всех различных возможных состояний определяет сложность «черного ящика» и общее число возможных опытов.

Результаты эксперимента используются для получения математической модели объект исследования, которая представляет собой уравнение,

связывающее параметр оптимизации и факторы. Такое уравнение называется функцией отклика.

Использование для получения модели всех возможных опытов приводит к абсурдно, большим экспериментам. Задача выбора необходимых для эксперимента опытов, методов математической обработки их результатов и принятия решений – это и есть задача планирования эксперимента. Частный случай этой задачи – планирование экстремального эксперимента, т. е. эксперимента, поставленного с целью поиска оптимальных условий функционирования объекта. Планирование экстремального эксперимента – метод выбора минимального количества опытов, необходимых для отыскания оптимальных условий.

ПАРАМЕТР ОПТИМИЗАЦИИ

При планировании экстремального эксперимента очень важно определить параметр, который нужно оптимизировать. Сделать это совсем не так просто, как кажется на первый взгляд. Цель исследования должна быть сформулирована очень четко и допускать количественную оценку. Будем называть характеристику цели, заданную количественно, параметром оптимизации. Параметр оптимизации является реакцией (откликом) на воздействие факторов, которые определяют поведение выбранной вами системы. Реакция объекта многогранна, многоаспектна. Выбор того аспекта, который представляет наибольший интерес, как раз и задается целью исследования.

При традиционном нематематическом подходе исследователь стремится как-то учесть разные аспекты, взвесить их и принять *согласованное* решение о том, какой опыт *лучше*. Однако разные экспериментаторы проведут сравнение опытов неодинаково. Различия, если хотите, одно из проявлений таланта исследователя или его бездарности.

Прежде чем сформулировать требования к параметрам оптимизации и рекомендации по их выбору, познакомимся с различными видами параметров.

Виды параметров оптимизации

В зависимости от объекта и цели исследования параметры оптимизации могут быть весьма разнообразными. Чтобы ориентироваться в этом многообразии, введем некоторую классификацию. Мы не стремимся к созданию полной и детальной классификации. Наша задача – построить такую условную схему, которая включала бы ряд практически важных случаев и помогала экспериментатору ориентироваться в реальных ситуациях.

Реальные ситуации, как правило, сложны. Они часто требуют одновременного учета нескольких, иногда очень многих, параметров. В принципе каждый объект может характеризоваться сразу **всей** совокупностью параметров, приведенных на рис., или любым подмножеством из этой совокупности. Движение к оптимуму возможно, если выбран единственный параметр оптимизации. Тогда прочие характеристики процесса уже не выступают в качестве параметров оптимизации, а служат ограничениями. Другой путь – построение обобщенного параметра оптимизации как некоторой функции от множества исходных.

Прокомментируем некоторые элементы схемы.

Экономические параметры оптимизации, такие, как прибыль, себестоимость и рентабельность, обычно используются при исследовании действующих промышленных объектов, тогда как затраты на эксперимент имеет смысл оценивать в любых исследованиях, в том числе и лабораторных. Если цена опытов, затраты на эксперимент пропорциональны числу опытов, которые необходимо поставить для решения данной задачи. Это в значительной мере определяет выбор плана эксперимента.

Среди технико-экономических параметров наибольшее распространение имеет производительность. Такие параметры, как долговечность, надежность и стабильность, связаны с длительными наблюдениями. Имеется некоторый опыт их использования при изучении дорогостоящих ответственных объектов, например радиоэлектронной аппаратуры.

Почти во всех исследованиях приходится учитывать количество и качество получаемого продукта. Как меру количества продукта используют выход, например, процент выхода химической реакции, выход годных изделий.

Показатели качества чрезвычайно разнообразны. В нашей схеме они сгруппированы по видам свойств. Характеристики количества и качества продукта образуют группу технико-технологических параметров.

Под рубрикой «прочие» сгруппированы различные параметры, которые реже встречаются, но не являются менее важными. Сюда попали статистические параметры, используемые для улучшения характеристик случайных величин или случайных функций. В качестве примеров назовем задачи на минимизацию дисперсии случайной величины, на уменьшение числа выбросов случайного процесса за фиксированный уровень и т. д. Последняя задача возникает, в частности, при выборе оптимальных настроек автоматических регуляторов или при улучшении свойств нитей (проволока, пряжа, искусственное волокно и др.).

С ростом сложности объекта возрастает роль психологических аспектов взаимодействия человека или животного с объектом. Так, при выборе оптимальной организации рабочего места оператора параметром оптимизации может служить число ошибочных действий в различных возможных ситуациях. Сюда относятся задачи выработки условных рефлексов типа задачи «крысы в лабиринте».

При решении задачи технической эстетики или сравнении произведений искусства возникает потребность в эстетических параметрах. Они основаны на ранговом подходе, который будет рассмотрен ниже.

Таковы некоторые виды параметров оптимизации.

Давайте рассмотрим следующий пример.

Пример 1. Во время второй мировой войны несколько сот английских торговых судов на Средиземном море были вооружены зенитными орудиями для защиты от вражеских бомбардировщиков. Поскольку это мероприятие было достаточно дорогим (требовалось иметь на каждом судне боевую

команду), через несколько месяцев решили оценить его эффективность. Какой из параметров оптимизации более подходит для этой цели?

Число сбитых самолетов.

Потери в судах, оснащенных орудиями, по сравнению с судами без орудий.

Если Вы считаете, что эффективность установления орудий на торговые суда можно оценить числом сбитых самолетов, то Вы вряд ли смогли бы занять пост командующего английским флотом на Средиземном море. Выбранный Вами параметр оптимизации оценивает эффективность уничтожения самолетов. В то же время ясно, что значения параметра оптимизации в этом случае будут низкими, так как существуют куда более эффективные средства для этой цели (авиация, боевой флот), чем зенитные орудия на торговых судах.

Если же Вы полагаете, что эффективность установки орудий на торговые суда можно оценить сопоставлением потерь в судах, оснащенных орудиями, с потерями в судах без орудий, то это разумный выбор параметра оптимизации, потому что основной задачей при установке орудий была защита судов. Самолеты вынуждены были теперь использовать противозенитные маневры и бомбометание с большой высоты, что уменьшало потери. Из числа атакованных самолетами торговых судов с зенитными орудиями было потоплено 10% судов, а потери в судах без орудий составили 25%. Затраты на установку орудий и содержание боевых расчетов окупились очень быстро.

Требования к параметру оптимизации

Параметр оптимизации – это признак, по которому мы хотим оптимизировать процесс. Он должен быть *количественным*, задаваться числом. Мы должны уметь его измерять при любой возможной комбинации выбранных уровней факторов. Множество значений, которые может принимать параметр оптимизации, будем называть областью его определения. Области определения могут быть непрерывными и дискретными, ограниченными и неограниченными. Например, выход реакции – это параметр оптимизации с непрерывной ограниченной областью определения. Он может изменяться в

интервале от 0 до 100%. Число бракованных изделий, число зерен на шлифе сплава, число кровяных телец в пробе крови – вот примеры параметров с дискретной областью определения, ограниченной снизу.

Уметь измерять параметр оптимизации – это значит располагать подходящим прибором. В ряде случаев такого прибора **может не существовать или он слишком дорог**. Если нет способа количественного измерения результата, то приходится воспользоваться приемом, называемым ранжированием (ранговым подходом). При этом параметрам оптимизации присваиваются оценки – ранги по заранее выбранной шкале: двухбалльной, пятибалльной и т. д. Ранговый параметр имеет дискретную ограниченную область определения. В простейшем случае область содержит два значения (да, нет; хорошо, плохо). Это может соответствовать, например, годной продукции и браку.

Ранг – это количественная оценка параметра оптимизации, но она носит условный (субъективный) характер. Мы ставим в соответствие качественному признаку некоторое число – ранг.

Для каждого физически измеряемого параметра оптимизации можно построить ранговый аналог. Потребность в построении такого аналога возникает, если имеющиеся в распоряжении исследователя численные характеристики неточны или неизвестен способ построения удовлетворительных численных оценок. При прочих равных условиях всегда нужно отдавать предпочтение физическому измерению, так как ранговый подход менее чувствителен и с его помощью трудно изучать тонкие эффекты.

Пример 2. Ваша жена решила испечь яблочный пирог по новому рецепту (аналогичный пример рассмотрен в литературе). Вам, конечно, трудно остаться в стороне, и вы предлагаете ей свои услуги по оптимизации этого процесса. Цель процесса – получение вкусного пирога, но такая формулировка цели еще не дает возможности приступить к оптимизации: необходимо выбрать количественный критерий, характеризующий степень достижения цели. Можно

принять следующее решение: очень вкусный пирог получает отметку 5, просто вкусный пирог — отметку 4 и т. д.

Как вы полагаете, можно ли после такого решения переходить к оптимизации процесса?

Давайте разберемся. Нам важно количественно оценить результат оптимизации. Решает ли отметка эту задачу? Конечно, потому что, как мы договорились, отметка 5 соответствует очень вкусному пирогу и т. д. Другое дело, что этот подход, называемый ранговым, часто оказывается грубым, нечувствительным. Но возможности такой количественной оценки результатов не должна вызывать сомнений.

Другие примеры рангового подхода: определение чемпиона мира по фигурному катанию или гимнастике, дегустация вин, сравнение произведений искусства и т. д. Или, если хотите, из области химии: сравнение продуктов по цвету, прозрачности, форме кристаллов.

Следующее требование: параметр оптимизации должен выражаться единым числом. Иногда это получается естественно, как регистрация показания прибора. Например, скорость движения машины определяется числом на спидометре. Чаше приходится производить некоторые вычисления. Так бывает при расчете выхода реакции. В химии часто требуется получать продукт с заданным отношением компонентов. Один из возможных вариантов решения подобных задач состоит в том, чтобы выразить отношение одним числом (1,5) и в качестве параметра оптимизации пользоваться значениями отклонений (или квадратов отклонений) от этого числа.

Еще одно требование, связанное с количественной природой параметра оптимизации, — *однозначность* в статистическом смысле. Заданному набору значений факторов должно соответствовать одно с точностью до ошибки эксперимента значение параметра оптимизации. (Однако обратное неверно: одному и тому же значению параметра могут соответствовать разные наборы значений факторов.)

Для успешного достижения цели исследования необходимо, чтобы параметр оптимизации действительно оценивал эффективность функционирования системы в заранее выбранном смысле. Это требование является главным, определяющим корректность постановки задачи. «Если мы требуем победы и не знаем, что подразумеваем под этим, мы встретимся с призраком, стучащимся к нам в дверь».

Представление об эффективности не остается постоянным в ходе исследования. Оно меняется по мере накопления информации и в зависимости от достигнутых результатов. Это приводит к последовательному подходу при выборе параметра оптимизации. Так, например, на первых стадиях исследования технологических процессов в качестве параметра оптимизации часто используется выход продукта. Однако в дальнейшем, когда – возможность повышения выхода исчерпана, нас начинают интересовать такие параметры, как себестоимость, чистота продукта и т. д.

Говоря об оценке эффективности функционирования системы, важно помнить, что речь идет о системе в целом. Часто система состоит из ряда подсистем, каждая из которых может оцениваться своим локальным параметром оптимизации. При этом оптимальность каждой из подсистем по своему параметру оптимизации «не исключает возможности гибели системы в целом».

Мало иметь эффективный параметр оптимизации. Надо еще, чтобы он был эффективным в статистическом смысле. Понятие статистической эффективности достаточно сложное, и мы не будем здесь заниматься точными формулировками. Фактически это требование сводится к выбору параметра оптимизации, который определяется с наибольшей возможной точностью. (Если и эта точность недостаточна, тогда приходится обращаться к увеличению числа повторных опытов.)

Пусть, например, нас интересует исследование прочностных характеристик некоторого сплава. В качестве меры прочности можно использовать как прочность на разрыв, так и макротвердость. Поскольку эти

характеристики функционально связаны, то с точки зрения эффективности они эквивалентны. Однако точность измерения первой характеристики существенно выше, чем второй. Требование статистической эффективности заставляет отдать предпочтение прочности на разрыв.

Следующее требование к параметру оптимизации – требование *универсальности* или *полноты*. Под универсальностью параметра оптимизации понимается его способность всесторонне характеризовать объект. В частности, технологические параметры оптимизации недостаточно универсальны: они не учитывают экономику. Универсальностью обладают, например, обобщенные параметры оптимизации, которые строятся как функции от нескольких частных параметров.

Желательно, чтобы параметр оптимизации имел *физический смысл, был простым и легко вычисляемым*.

Требование физического смысла связано с последующей интерпретацией результатов эксперимента. Не представляет труда объяснить, что значит максимум извлечения, максимум содержания ценного компонента. Эти и подобные им технологические параметры оптимизации имеют ясный физический смысл, но иногда для них может не выполняться, например, требование статистической эффективности. Тогда рекомендуется переходить к преобразованию параметра оптимизации. Преобразование, например типа $\arcsin \sqrt{y}$ может сделать параметр оптимизации статистически эффективным (например, дисперсии становятся однородными), но остается неясным: что же значит достигнуть экстремума этой величины?

Второе требование часто также оказывается весьма существенным. Для процессов разделения термодинамические параметры более универсальны. Однако на практике их используют мало: их расчет довольно труден.

Пожалуй, из этих двух требований первое является более существенным, потому что часто удастся найти идеальную характеристику системы и сравнить ее с реальной характеристикой. Иногда при этом целесообразно нормировать параметр с тем, чтобы он принимал значения от нуля до единицы.

Кроме высказанных требований и пожеланий при выборе параметра оптимизации нужно еще иметь в виду, что параметр оптимизации в некоторой степени оказывает влияние на вид математической модели исследуемого объекта. Экономические параметры, в силу их аддитивной природы, легче представляются простыми функциями, чем физико-химические показатели. Не случайно методы линейного программирования, основанные на простых моделях, получили широкое распространение именно в экономике. Температура плавления сплава является, как известно, сложной, многоэкстремальной характеристикой состава, тогда как стоимость сплава зависит от состава линейно.

Итак, вы наверное уже поняли, что найти параметр оптимизации, удовлетворяющий всем требованиям, все равно, что поймать жар-птицу.

О задачах с несколькими выходными параметрами

Задачи с одним выходным параметром имеют очевидные преимущества. Но на практике чаще всего приходится учитывать несколько выходных параметров. Иногда их число довольно велико. Так, например, при производстве резиновых и пластмассовых изделий приходится учитывать физико-механические, технологические, экономические, художественно-эстетические и другие параметры (прочность, эластичность, относительное удлинение, способность смеси прилипать к форме и т. д.). Математические модели можно построить для каждого из параметров, но одновременно оптимизировать несколько функций невозможно.

Обычно оптимизируется одна функция, наиболее важная с точки зрения цели исследования, при ограничениях, налагаемых другими функциями. Поэтому из многих выходных параметров выбирается один в качестве параметра оптимизации, а остальные служат ограничениями. Всегда полезно исследовать возможность уменьшения числа выходных параметров. Для этого можно воспользоваться корреляционным анализом.

При этом между всевозможными парами параметров необходимо вычислить коэффициент парной корреляции, который является общепринятой в

математической статистике характеристикой связи между двумя случайными величинами.

Если обозначить один параметр через y_1 , а другой – через y_2 и число опытов, в которых они будут измеряться, – через N , так, что $u = 1, 2, \dots, N$, где u – текущий номер опыта, то коэффициент парной корреляции r вычисляется по формуле

$$r_{y_1 y_2} = \frac{\sum_{u=1}^N (y_{u1} - \bar{y}_1)(y_{u2} - \bar{y}_2)}{\sqrt{\sum_{u=1}^N (y_{u1} - \bar{y}_1)^2 (y_{u2} - \bar{y}_2)^2}},$$

где $\bar{y}_1 = \sum_{u=1}^N \frac{y_{u1}}{N}$, $\bar{y}_2 = \sum_{u=1}^N \frac{y_{u2}}{N}$ – средние арифметические.

Значения коэффициента парной корреляции могут лежать в пределах от – 1 до +1. Если с ростом значения одного параметра возрастает значение другого, у коэффициента будет знак плюс, а если уменьшается, то минус. Чем ближе найденное значение $r_{y_1 y_2}$ к единице, тем сильнее значение одного параметра зависит от того, какое значение принимает другой, т. е. между такими параметрами существует линейная связь, и при изучении процесса можно рассматривать только один из них. Необходимо помнить, что коэффициент парной корреляции как мера тесноты связи имеет четкий математический смысл только при линейной зависимости между параметрами и в случае нормального их распределения.

Для проверки значимости коэффициента парной корреляции нужно сравнить его значение с табличным (критическим) значением r , которое приведено в табл. 2.1. Для пользования этой таблицей нужно знать число степеней свободы $f = N - 2$ и выбрать определенный уровень значимости, например, равный 0,05. Такое значение уровня значимости называют еще 5%-ным уровнем риска, что соответствует вероятности верного ответа "при проверке нашей гипотезы $P = 1 - \alpha = 0,95$, или 95%. Это значит, что в среднем только в 5% случаев возможна ошибка при проверке гипотезы.

В практических исследованиях 5%-ный уровень риска применяется наиболее часто. Но экспериментатор всегда свободен в выборе уровня значимости, и возможны ситуации, в которых, например, требуется 1%-ный уровень риска. При этом возрастает надежность ответа. Проверка гипотезы сводится к сравнению абсолютной величины коэффициента парной корреляции с критическим значением. Если экспериментально найденное значение r меньше критического, то нет оснований считать, что имеется тесная линейная связь между параметрами, а если больше или равно, то гипотеза о корреляционной линейной связи не отвергается.

При высокой значимости коэффициента корреляции любой из двух анализируемых параметров можно исключить из рассмотрения как не содержащий дополнительной информации об объекте исследования. Исключить можно тот параметр, который технически труднее измерять, или тот, физический смысл которого менее ясен. При планировании эксперимента целесообразно измерять все параметры, затем оценить корреляцию между ними и строить модели для их минимально возможного числа или же воспользоваться обобщенным параметром. Но бывают случаи, когда приходится рассматривать и коррелированные параметры.

Таблица 2. 1
Критические значения коэффициента парной корреляции при $\alpha = 0,05$

Число степеней свободы f	Критическое значение r	Число степеней свободы f	Критическое значение r	Число степеней свободы f	Критическое значение r
1	0,997	9	0,602	17	0,456
2	0,950	10	0,576	18	0,444
3	0,878	11	0,553	19	0,433
4	0,811	12	0,532	20	0,423
5	0,754	13	0,514	30	0,349
6	0,707	14	0,497	50	0,273
7	0,666	15	0,482	80	0,217
8	0,632	16	0,468	100	0,195

Резюме

Мы познакомились с некоторыми практически важными аспектами весьма сложной проблемы – выбора параметра оптимизации. Параметр

оптимизации – это реакция (отклик) на воздействия факторов, которые определяют поведение изучаемой системы.

Параметры оптимизации бывают экономическими, технико-экономическими, технико-технологическими, статистическими, психологическими и т. д.

Параметр оптимизации должен быть:

1. эффективным с точки зрения достижения цели;
2. универсальным;
3. количественным и выражаться одним числом
4. статистически эффективным;
5. имеющим физический смысл, простым и легко вычисляемым;
6. существующим для всех различимых состояний.

В тех случаях, когда возникают трудности с количественной оценкой параметров оптимизации, приходится обращаться к ранговому подходу. В ходе исследования могут меняться априорные представления об объекте исследования, что приводит к последовательному подходу при выборе параметра оптимизации.

Из многих параметров, характеризующих объект исследования, только один, часто обобщенный, может служить параметром оптимизации. Остальные рассматриваются как ограничения.

ОБОБЩЕННЫЙ ПАРАМЕТР ОПТИМИЗАЦИИ

Путь к единому параметру оптимизации часто лежит через обобщение. Как уже говорилось, из многих откликов, определяющих объект, очень часто трудно выбрать один, самый важный. Если же это возможно, тогда мы попадаем в ситуацию, описанную в предыдущей главе. Здесь же нам предстоит познакомиться с более сложной ситуацией, когда необходимо множество откликов обобщать (свертывать) в единый количественный признак. С таким обобщением связан ряд трудностей.

Каждый отклик имеет свой физический смысл и свою размерность. Чтобы объединить различные отклики, прежде всего приходится ввести для

каждого из них некоторую безразмерную шкалу. Шкала должна быть однотипной для всех объединяемых откликов – это делает их сравнимыми. Выбор шкалы – не простая задача, зависящая от априорных сведений об откликах, а также от той точности, с которой мы хотим определить обобщенный признак.

После того как для каждого отклика построена безразмерная шкала, возникает, следующая трудность – выбор правила комбинирования исходных частных откликов в обобщенный показатель. Единого правила не существует. Здесь можно идти различными путями, и выбор пути не формализован. Рассмотрим несколько различных способов построения обобщенного показателя.

Простейшие способы построения обобщенного отклика

Пусть исследуемый объект характеризуют n частных откликов $y_u (u=1, 2, \dots, n)$ и каждый из этих откликов измеряется в N опытах. Тогда y_{ui} – это значение u -го отклика в i -м опыте ($i=1, 2, \dots, N$). Каждый из откликов y_u имеет свой физический смысл и, чаще всего, разную размерность. Введем простейшее преобразование: набор данных для каждого y_u поставим в соответствие, с самым простым стандартным аналогом – шкалой, на которой имеется только два значения: 0 – брак, неудовлетворительное качество, 1 – годный продукт, удовлетворительное качество. Преобразованные значения обозначим так: y_{ui} – преобразованное значение u -го отклика в i -м опыте. Здесь мы применили шкалу, в которой использовано числовое множество из двух элементов (в данном случае 0 и 1). Стандартизовав таким образом шкалу частных откликов, мы подошли ко второму этапу – их обобщению. По какому же правилу следует комбинировать частные отклики?

Будем рассуждать следующим образом. В ситуации, когда каждый преобразованный частный отклик принимает только два значения 0 и 1, естественно желать, чтобы и обобщенный отклик принимал одно из этих двух возможных значений, причем так, чтобы значение 1 имело место, если, и

только если, все частные отклики в этом опыте приняли значение 1. А если хотя бы один из откликов обратился в 0, то и обобщенный отклик будет нулем.

При таких рассуждениях для построения обобщенного отклика удобно воспользоваться формулой

$$Y_i = \sqrt[n]{\prod_{u=1}^n y_{ui}},$$

где Y_i — обобщенный отклик в i -м опыте.

Корень мы ввели для того, чтобы связать эту формулу с другой, более сложной, которая будет рассмотрена далее. В данном же случае ничего не изменится, если написать

$$Y_i = \prod_{u=1}^n y_{ui}.$$

Совершенно очевидно, что такой подход слишком груб и жёсток. Рассмотрим пример.

Пример 1. При разработке оптимальной рецептуры нового пластифицированного полимерного материала качество продукции оценивалось семью выходными параметрами: y_1 — термостабильность композиции, мин; y_2 — блеск (баллы), y_3 — морозостойкость, °С; y_4 — модуль упругости при +20° С, кгс/см²; y_5 — предел прочности при растяжении, кг/см²; y_6 — относительное удлинение при разрыве, %; y_7 — число перегибов до разрушения, шт. Для каждого частного отклика введем следующие преобразования:

$$y_{1i} = \begin{cases} 1, \text{если } y_{1i} > 100 \\ 0, \text{если } y_{1i} \leq 100 \end{cases}, \quad y_{2i} = \begin{cases} 1, \text{если } y_{2i} < 20 \\ 0, \text{если } y_{2i} \geq 20 \end{cases},$$

$$y_{3i} = \begin{cases} 1, \text{если } y_{3i} < -18 \\ 0, \text{если } y_{3i} \geq -18 \end{cases}, \quad y_{4i} = \begin{cases} 1, \text{если } y_{4i} < 120 \\ 0, \text{если } y_{4i} \geq 120 \end{cases},$$

$$y_{5i} = \begin{cases} 1, \text{если } y_{5i} > 200 \\ 0, \text{если } y_{5i} \leq 200 \end{cases}, \quad y_{6i} = \begin{cases} 1, \text{если } y_{6i} > 200 \\ 0, \text{если } y_{6i} \leq 200 \end{cases},$$

$$y_{7i} = \begin{cases} 1, \text{если } y_{5i} > 75 \\ 0, \text{если } y_{5i} \leq 75 \end{cases}.$$

Данные для девяти опытов приведены в табл. .

Номер опыта	Натуральные частные отклики							Преобразованные частные отклики							Обобщенные отклики	
	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_6	y_7	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_6	y_7	Y_1	Y_2
1	272	14	-25	103	215	299	103	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	187	20	-23	91	179	254	29	1	0	1	1	0	1	1	0	0
3	162	21	-24	102	216	270	99	1	0	1	1	1	1	1	0	1
4	461	14	-25	114	198	251	54	1	1	1	1	0	1	1	0	0
5	267	14	-21	105	208	268	31	1	1	1	1	1	1	1	1	1
6	250	24	-27	99	220	304	46	1	0	1	1	1	1	1	0	1
7	489	12	-25	123	201	238	33	1	1	1	0	1	1	1	0	1
8	380	14	-23	116	230	292	126	1	1	1	1	1	1	1	1	1
9	580	29	-22	100	215	304	48	1	0	1	1	1	1	1	0	1

Для комплексной оценки материалов были построены два обобщенных показателя:

$$Y_1 = \sqrt[7]{y_1 y_2 y_3 y_4 y_5 y_6 y_7},$$

учитывающий требования и разработки и заказчика, и

$$Y_2 = \sqrt[3]{y_3 y_5 y_7},$$

учитывающий только основные требования заказчика. По обобщенному показателю Y_1 могут рекомендоваться только три рецептуры (каждый опыт соответствует одной определенной рецептуре). Если же взять за основу только требования заказчика, то удовлетворительное качество имеют материалы в семи опытах.

Приведем еще один способ получения обобщенного отклика, который может применяться в тех случаях, когда для каждого из частных откликов известен «идеал», к которому нужно стремиться. Существует много способов введения метрики, задающей «близость к идеалу». Дополним предыдущие обозначения еще одним: y_m — наилучшее («идеальное») значение i -го отклика. Тогда $y_m - y_{i0}$ можно рассматривать как некоторую меру близости к идеалу.

Однако использовать разность при построении обобщенного отклика невозможно по двум причинам. Она имеет размерность соответствующего отклика, а у каждого из откликов может быть своя размерность, что препятствует, как мы уже знаем, их объединению. Отрицательный или положительный знак разности также создает неудобство. Чтобы перейти к безразмерным значениям, достаточно разность поделить на желаемое значение. Чтобы нивелировать знаки, можно разность возводить в квадрат. Тогда обобщенный отклик получим по следующей формуле:

$$Y_i = \sum_{u=1}^n \left(\frac{y_{ui} - y_{u0}}{y_{u0}} \right)^2.$$

Если в некотором опыте все частные отклики совпадут с идеалом, то Y станет равным нулю. Это и есть то значение, к которому нужно стремиться. Чем ближе к нулю, тем лучше. Конечно, необходимо условиться о том, что считать нижней границей, если верхняя равна нулю. Обратите внимание, нуль здесь имеет другой смысл, чем в первом случае.

Среди недостатков такой оценки выделяется нивелировка частных откликов. Все они входят в обобщенный отклик на равных правах. На практике же различные показатели бывают далеко не равноправны. Устранить этот недостаток можно введением некоторого веса a_u

$$Y_i = \sum_{u=1}^n a_u \cdot \left(\frac{y_{ui} - y_{u0}}{y_{u0}} \right)^2$$

причем

$$\sum_{u=1}^n a_u = 1 \text{ и } a_u > 0.$$

Чтобы проранжировать отклики по степени их важности и найти соответствующие веса, можно воспользоваться экспертными оценками.

Мы рассмотрели простейшие способы построения обобщенного показателя. Для перехода к более сложным способам нужно научиться фиксировать более тонкие различия на шкале преобразования откликов. Здесь в

основном приходится опираться на опыт экспериментатора. Но, чтобы этот опыт разумно употребить в рамках формальных процедур, его тоже нужно формализовать. Наиболее естественный путь такой формализации – введение системы предпочтений экспериментатора на множестве значений каждого частного отклика, получение стандартной шкалы и затем обобщение результатов.

Пользуясь системой предпочтений, можно получить более содержательную шкалу вместо шкалы классификаций с двумя классами. К примеру построения такой шкалы мы перейдем в следующем параграфе.

Шкала желательности

Одним из наиболее удобных способов построения обобщенного отклика является обобщенная функция желательности Харрингтона. В основе построения этой обобщенной функции лежит идея преобразования натуральных значений частных откликов в безразмерную шкалу желательности или предпочтительности. Шкала желательности относится к психофизическим шкалам. Ее назначение – установление соответствия между физическими и психологическими параметрами. Здесь под физическими параметрами понимаются всевозможные отклики, характеризующие функционирование исследуемого объекта. Среди них могут быть эстетические и даже статистические параметры (см. классификацию параметров во второй главе), а под психологическими параметрами понимаются чисто субъективные оценки экспериментатора желательности (предпочтительности) того или иного значения отклика. Чтобы получить шкалу желательности, удобно пользоваться готовыми разработанными таблицами соответствий между отношениями предпочтения в эмпирической и числовой (психологической) системах (табл.).

Таблица – Стандартные отметки на шкале желательности

Желательность	Отметки на шкале желательности
Очень хорошо	1,00-0,80
Хорошо	0,80-0,63

Удовлетворительно	0,63-0,37
Плохо	0,37-0,20
Очень плохо	0,20-0,00

Значение частного отклика, переведенное в безразмерную шкалу желательности, обозначается через d_u ($u = 1, 2, \dots, n$) и называется частной желательностью (от. desirable фр. – желательный). Шкала желательности имеет интервал от нуля до единицы. Значение $d_u=0$ соответствует абсолютно неприемлемому уровню данного свойства, а значение $d_n=1$ – самому лучшему значению свойства. Понятию «очень хорошо» соответствуют значения на шкале желательности $0.8 < d_u < 1$, а понятию «очень плохо» – $0 < d_u < 0.2$ и т.д. Выбор отметок на шкале желательности 0,63 и 0,37 объясняется удобством вычислений: $0,63=1-(1/e)$, $0,37=1/e$. Значение $d_u=0,37$ обычно соответствует границе допустимых значений.

Эти числа на первый взгляд напоминают черную магию. Но все объясняется достаточно просто. В табл. представлены числа, соответствующие некоторым точкам кривой (рис. 4), которая задается уравнением $d = e^{-e^{-y}}$ или $d = \exp(-\exp(-y))$, где \exp — принятое обозначение экспоненты. На оси ординат нанесены значения желательности, изменяющиеся от **0** до **1**. По оси абсцисс указаны значения отклика, записанные в условном масштабе. За начало отсчета **0** по этой оси выбрано значение, соответствующее желательности **0,37**. Выбор именно данной точки связан с тем, что она является точкой перегиба кривой, что в свою очередь создает определенные удобства при вычислениях. То же самое верно для значения желательности, соответствующего **0,63**. Выбор этой кривой не является единственной возможностью. Однако она возникла в результате наблюдений за реальными решениями экспериментаторов и обладает такими полезными свойствами как непрерывность, монотонность и гладкость. Кроме того, эта кривая хорошо передает тот факт, что в областях желательностей, близких к **0** и **1**, «чувствительность» ее существенно ниже, чем в средней зоне.

Симметрично относительно нуля на оси y' (y' – кодированная шкала) расположены кодированные значения отклика. Значение на кодированной шкале принято выбирать от 3 до 6. Например, на рис. использовано шесть интервалов в сторону убывания и шесть – в **Сторону** возрастания. Ниже вы познакомитесь со случаем, когда выбрано три интервала. Выбор числа интервалов определяет крутизну кривой в средней зоне.

Пример 1. Пусть среди откликов будет выход реакции, естественные границы которого заключены между 0% и 100%.

Предположим, что 100% соответствует на шкале желательности единице, а 0% – нулю. Это отображено на рис. на шкале, расположенной под шкалой y' . На ней пока имеются только две точки: 0 и 100. Выбор других точек зависит от ряда обстоятельств, таких, как сложившаяся в начальный момент ситуация, требования к результату, возможности экспериментатора.

Можно себе представить случай, когда процесс идет с выходом около 50%. в выходе более 70% трудно мечтать, а может быть он и невозможен из-за побочных реакций. Из сказанного ясно, что в данном случае выход в 70% для экспериментатора практически эквивалентен выходу в 100%. Это и отражено при выборе второй точки справа, для которой желательность близка к единице. Третья точка ограничивает область, которой экспериментатор может дать оценку «очень хорошо». В табл. это соответствует диапазону 1,00–0,80. Какое натуральное значение y поставить в соответствие этой точке, зависит от «азартности» или «осторожности» экспериментатора. Построение этой шкалы напоминает игру. Именно из теории игр заимствована эта терминология. Азарт азартом, но нужно еще и уметь играть. Опытными химик может сказать, что «больше 60% из этой реакции вы не выжмете». Тогда бы мы поставили в соответствие третьей точке выход 60%.

Конечно, такое рассуждение может не иметь смысла, если вследствие ошибок эксперимента мы не в состоянии различить выхода в 60 и 70%. Следовательно, разным точкам на шкале должны соответствовать разные значения выхода. «Азартный» экспериментатор может поставить в

соответствие, выход, скажем, в 67%. Область хороших результатов (0,80–0,63 по шкале желательности) наш экспериментатор заключил в границы 60–55%. Уже достигнутый результат – 50%, дает естественную нижнюю границу области «удовлетворительно», ну а результат ниже 45% просто никуда не годится. На рис. разобранная ситуация обозначена (I).

Но все может быть и иначе. Имеется хорошо налаженный технологический процесс с выходом 95%, но возросли требования к чистоте продукта. Поэтому, наряду с другими мероприятиями, возникла задача увеличения выхода хотя бы до 98%. Эта ситуация на нашем рисунке обозначена (II). Конечно, такая шкала возможна только при прецизионных измерениях.

Совсем другая картина получается, когда речь идет о задаче синтеза нового вещества, которого до сих пор не удавалось получить в количествах, достаточных для идентификации.

При выходе менее 2% нет способа в данном случае идентифицировать продукт. Любой выход выше 10% – превосходен. Эта ситуация (III), по-видимому, не нуждается в дальнейших комментариях.

Кривую желательности обычно используют как номограмму, поскольку это легко и оперативно. Так, если в ситуации (I) получен выход 63%, то ему будет соответствовать желательность 0,9, что показано пунктиром на рисунке. На практике такой простой прием часто оказывается **Вполне** достаточным, но не всегда. Во-первых, потому что точность графического определения желательности может оказаться недостаточной, а, во-вторых, потому что эта точность зависит от положения на шкале y .

Тогда приходится прибегать к аналитическому методу определения желательности и с помощью шкалы y' и приведенного выше уравнения находить оценки желательности.

В нашем примере рассмотрен только один отклик – выход реакции, и границы его заданы естественно: от 0 до 100%. Однако, это не всегда бывает

так. Стоит включить в рассмотрение отклики, характеризующие, например, качество материала, и границы станут весьма неопределенными.

Естественно возникает вопрос, на, каком основании устанавливаются границы допустимых значений для частных откликов. При этом нужно иметь в виду, что ограничения могут быть односторонними в виде $y_u \leq y_{\max}$ или $y_u \geq y_{\min}$ и двусторонними в виде $y_{\min} \leq y \leq y_{\max}$. Здесь возможны две ситуации. Первая, самая благоприятная, возможна, если экспериментатор располагает инструкцией, в которой четко сформулированы требования ко всем частным откликам, т.е. имеется спецификация с одним или двумя ограничивающими пределами. Тогда отметка на шкале желательности $d_M=0,37$ соответствует y_{\min} , если имеется одностороннее ограничение $y_u \geq y_{\min}$ или y_{\max} для $y_u \leq y_{\max}$. В случае двустороннего ограничения этой отметке ставится в соответствие и y_{\max} , y_{\min} . Во второй ситуации спецификация отсутствует, тогда ограничения на шкале и другие отметки делаются весьма субъективно, на основании опыта и интуиции экспериментатора. Совершенно очевидно, что в таком случае довольно опасно руководствоваться мнением одного-единственного исследователя, а желательно учесть мнения нескольких специалистов. При обобщении ряда мнений и установлении степени согласованности между различными специалистами можно воспользоваться методом ранговой корреляции.

Преобразование частных откликов в частные функции желательности

Представим себе такой случай, когда существует спецификация с одним или двумя ограничивающими пределами и эти пределы являются единственными значениями качества. Тогда вне пределов $d_u=0$, а внутри пределов $d_u=1$.

Пусть y_{\min} – нижний предел спецификации и $y_u \geq y_{\min}$. При таком одностороннем ограничении частная функция желательности будет иметь вид

$$d_u = \begin{cases} 0, & \text{если } y_u < y_{\min}, \\ 1, & \text{если } y_u \geq y_{\min} \end{cases}$$

Аналогично для двустороннего ограничения получаем

$$d_u = \begin{cases} 0, & \text{если } y_u < y_{\min}, y > y_{\max}, \\ 1, & \text{если } y_{\min} \leq y_u \leq y_{\max} \end{cases}$$

Нетрудно видеть, что мы пришли к случаю, когда шкала желательности выродилась в простейшую шкалу классификаций с двумя классами эквивалентности. Эти два случая показаны на рис. Но такое положение, когда ограничивающие пределы спецификации являются единственными критериями качества, встречается довольно редко, так как трудно разделить результаты твердой границей на две категории: годен, не годен. Поэтому преобразования частных откликов в их стандартные аналоги на шкале желательности осуществляются по более сложным законам. Примером такого более сложного преобразования служит таблица желательности (табл.) и соответствующая ей функция желательности.

При односторонних ограничениях на рис. представлена частная функция желательности для

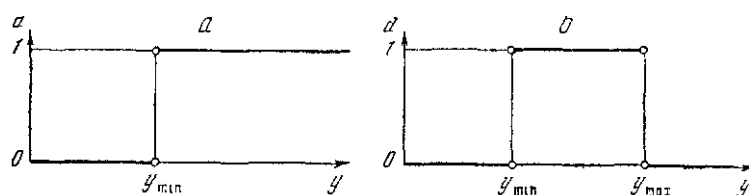


Рис. 5. Задание частной функции желательности

a – одностороннее ограничение; *б* – двустороннее ограничение

свойства, ограниченного с одной стороны. К числу свойств, подчиняющихся одностороннему ограничению, относятся очень многие характеристики качества материалов: теплостойкость, прочность, ударная вязкость, морозостойкость, модуль упругости, относительное удлинение при

разрыве и т.д. (это можно было видеть из примера 1). Для всех этих показателей ограничение имело вид $y_u \geq y_{\min}$.

Другой вид одностороннего ограничения $y_u \leq y_{\max}$ характерен для таких показателей, как содержание различных вредных примесей, влажность, удельный вес, содержание дорогих или дефицитных компонентов и т. п.

Шкала желательности есть попытка формализации представлений экспериментатора о важности тех или других значений частных откликов. Нет никакой гарантии, что такие представления можно считать правильными. Особенно, если не существует спецификации: В тех случаях, когда шкала желательности создается совместно экспериментаторов и консультантом по планированию эксперимента, можно представить себе и такую ситуацию, когда не было между ними достаточно глубокого взаимопонимания и шкала получилась неудачной. Тогда нужно учесть все недостатки и построить другую шкалу, более точно отражающую предпочтительность значений откликов.

Обобщенная функция желательности

После того, как выбрана шкала желательности и частные отклики преобразованы в частные функции желательности, можно приступить к основной задаче – построению обобщенного показателя D , названного Харрингтоном обобщенной функцией желательности. Обобщать, то есть переходить от d_i к D предлагается по формуле

$$D = \sqrt[n]{\prod_{u=1}^n d_u} .$$

Здесь обобщенная функция желательности задается как среднее геометрическое частных желательностей. Такое представление можно рассматривать как удобную модель психологической реакции исследователя, которая возникает при решении определенного класса задач. Примером может служить установление пригодности материала с данным набором свойств для использования его в заданных условиях.

Если хотя бы один частный отклик, входящий в комплекс параметров качества материала, не удовлетворяет требованиям спецификации (например,

при определенной температуре материал становится хрупким и разрушается), то как бы ни были хороши прочие свойства, этот материал не может быть использован по назначению.

Действительно, способ задания обобщенной функции желательности таков, что если хотя бы одна частная желательность $d_n = 0$, то обобщенная функция тоже будет равна нулю, с другой стороны, $D=1$ тогда и только тогда, когда все $d_u = 1$ ($u=1, 2, \dots, n$). Обобщенная функция желательности весьма чувствительна к малым значениям частных желательностей. Можно представить себе другие задачи, когда столь жесткие свойства обобщенного критерия окажутся неприемлемыми. Тогда нужно перейти к другим способам обобщения. А пока вернемся к функции желательности.

Способ задания базовых отметок шкалы желательности, представленный в табл., один и тот же как для частных желательностей, так и для обобщенной. Так, если $d_1, d_2, \dots, d_n = 0.63$, то и $D=0,63$, если $d_1, d_2, \dots, d_n = 0.37$, то и $D=0,37$ и т.п. В обобщенную функцию желательности могут входить самые разнообразные частные отклики: технологические, технико-экономические, экономические, эстетические и т. п.

Резюме

Построение обобщенного параметра оптимизации связано с созданием единого признака, количественно определяющего функционирование исследуемого объекта с многими выходными параметрами. При этом возникают некоторые трудности. Каждый выходной параметр – отклик имеет свой физический смысл, свою размерность. Чтобы объединить различные отклики, необходимо ввести единую для всех откликов искусственную метрику. Набор данных каждого отклика нужно поставить в соответствие с некоторым стандартным аналогом, с безразмерной шкалой. Поэтому первым вопросом, который нужно решить при построении обобщенного параметра оптимизации, является вопрос о выборе шкалы. Шкала должна быть однотипной для всех объединяемых откликов. Построение шкалы во многом

зависит от уровня априорных сведений о выходных параметрах, а также от той точности, с которой мы хотим определить обобщенный отклик.

Второй важный вопрос – выбор правила комбинирования исходных частных откликов в обобщенный показатель. Единого правила не существует, здесь можно идти различными путями, и выбор пути не формализован. Рассмотрено несколько различных способов построения обобщенного показателя.

ФАКТОРЫ

Теперь нам предстоит рассмотреть способы воздействия на оптимизируемый объект. Как вы знаете, способы воздействия были названы факторами.

После того как выбран объект исследования и параметр оптимизации, нужно включить в рассмотрение все существенные факторы, которые могут влиять на процесс. Если какой-либо существенный фактор окажется неучтенным, то это может привести к неприятным последствиям. Так, если неучтенный фактор произвольно флуктуировал – принимал случайные значения, которые экспериментатор не контролировал, – это значительно увеличит ошибку опыта. При поддержании фактора на некотором фиксированном уровне может быть получено ложное представление об оптимуме, так как нет гарантии, что фиксированный уровень является оптимальным.

Число различных состояний объекта p^k , где p – число уровней, а k – число факторов. Действительно, число опытов растет по показательной функции. Размерность факторного пространства увеличивается, и математики в таких случаях говорят о «проклятии размерности».

Если число факторов больше пятнадцати, нужно обратиться к методам отсеивания несущественных факторов. Здесь можно воспользоваться формализацией априорной информации, методом случайного баланса, планами Плаккета-Бермана и др. Иногда эти планы применяются и при меньшем числе факторов.

Мы не имеем возможности в этой книге рассказать об отсеивающих экспериментах и о формализации априорной информации. В «Ограничениях» сказано, что рассматривается случай, когда множество факторов задано и число факторов не превышает пятнадцати.

Однако обратить ваше внимание на важность выбора факторов, влияющих на процесс, на опасность пропуска существенного фактора мы сочли совершенно необходимым. От удачного выбора факторов зависит успех оптимизации.

Определение фактора

Фактором называется измеряемая переменная величина, принимающая в некоторый момент времени определенное значение. Факторы соответствуют способам Воздействия на объект исследования.

Так же, как и параметр оптимизации, каждый фактор имеет область определения. Мы будем считать фактор заданным, если вместе с его названием указана область его определения. Под областью определения понимается совокупность всех значений, которые в принципе может принимать данный фактор. Ясно, что совокупность значений фактора, которая используется в эксперименте, является подмножеством из множества значений, образующих область определения.

Область определения может быть непрерывной и дискретной. Однако в тех задачах планирования эксперимента, которые мы собираемся рассматривать, всегда используются дискретно области определения. Так, для факторов с непрерывной областью определения, таких, как температура, время, количество вещества и т.п., всегда выбираются дискретные множества уровней. В практических задачах области определения факторов, как правило, ограничены. Ограничения могут носить принципиальный либо технический характер.

Произведем классификацию факторов в зависимости от того, является ли фактор переменной величиной, которую можно оценивать количественно:

измерять, взвешивать, титровать и т. п., или же он – некоторая переменная, характеризующаяся качественными свойствами.

Вы уже догадались, что факторы разделяются на количественные и качественные. Качественные факторы – это разные вещества, разные технологические способы, аппараты, исполнители и т. д.

Хотя качественным факторам не соответствует числовая шкала в том смысле, как это понимается для количественных факторов, однако можно построить условную порядковую шкалу, которая ставит в соответствие уровням качественного фактора числа натурального ряда, т.е. производит кодирование. Порядок уровней может быть произволен, но после кодирования он фиксируется.

В ряде случаев граница между понятием качественного и количественного фактора весьма условна. Пусть, например, при изучении воспроизводимости результатов химического анализа надо установить влияние положения тигля с навеской в муфельной печи. Можно разделить под печи на квадраты и считать номера квадратов уровнями качественного фактора, определяющего положение тигля. Вместо этого можно ввести два количественных фактора – ширину и длину пода печи. Качественным факторам не соответствует числовая шкала, и порядок уровней факторов не играет роли.

Время реакции, температура, концентрация реагирующих веществ, скорость подачи веществ, величина рН – это примеры наиболее часто встречающихся количественных факторов. Различные реагенты, адсорбенты, вулканизирующие агенты, кислоты, металлы являются примером уровней качественных факторов.

Пример 1. Первый пример относится к исследованию процесса вулканизации бутадиен-стирольного каучука солями непредельных кислот. В планирование эксперимента были включены следующие факторы: x_1 – температура вулканизации, °С; x_2 – время вулканизации, мин; x_3 – количество инициатора, вес. ч.; x_4 – количество вулканизирующего агента, вес. ч.; x_5 –

количество окисла, вес. ч.; x_6 – тип окисла (окись цинка или окись магния); x_7 – тип кислотного остатка (метакрилат, малеат); x_8 – тип катиона соли (Na, Mg).

Довольно большое количество факторов и наличие среди них качественных объясняется тем, что планировать эксперимент приходилось на первой стадии, когда еще неясно, какие вещества нужно использовать для структурирования эластомеров, какие соли добавить для увеличения прочности, какие ускорители окажутся наиболее эффективными и т. д.

Таким образом, в планирование эксперимента можно включать факторы, относящиеся к различным стадиям, но не во всех случаях это является необходимым.

Требования, предъявляемые к факторам при планировании эксперимента

Мы дали определение понятию «фактор» и привели примеры факторов. Теперь сформулируем требования, предъявляемые к факторам.

При планировании эксперимента факторы должны быть *управляемыми*. Это значит, что экспериментатор, выбрав нужное значение фактора, может его поддерживать постоянным в течение всего опыта, т. е. может управлять фактором. В этом состоит особенность «активного» эксперимента. Планировать эксперимент можно только в том случае, если уровни факторов подчиняются воле экспериментатора.

Представьте себе, что вы изучаете процесс синтеза аммиака. Колонна синтеза установлена на открытой площадке. Является ли температура воздуха фактором, который можно включить в планирование эксперимента?

Температура воздуха – фактор *неуправляемый*. Мы еще не научились делать погоду по заказу. А в планировании могут участвовать только те факторы, которыми можно управлять, – устанавливать и поддерживать на выбранном уровне в течение опыта или менять по заданной программе. Температурой окружающей среды в данном случае управлять невозможно. Ее можно только контролировать.

Чтобы точно определить фактор, нужно указать последовательность действий (операций), с помощью которых устанавливаются его конкретные значения (уровни). Такое определение фактора будем называть *операциональным*. Так, если фактором является давление в некотором аппарате, то совершенно необходимо указать, в какой точке и с помощью какого прибора оно измеряется и как оно устанавливается. Введение операционального определения обеспечивает однозначное понимание фактора.

С операциональным определением связаны выбор размерности фактора и точность его фиксирования. Мы привыкли считать, что выбор размерности фактора не представляет особой трудности. Экспериментатор хорошо ориентируется в том, какую размерность нужно использовать. Это действительно так в тех случаях, когда существует устоявшаяся традиция, построены измерительные шкалы, приборы, созданы эталоны и т.д. Так обстоит дело при измерении температуры, времени, давления и т.д. Но бывает, что выбор размерности превращается в весьма трудную проблему выбора измерительных шкал, сложность которой далеко выходит за рамки нашего рассмотрения.

Замена одной измерительной шкалы другой называется преобразованием шкал. Оно может быть использовано для упрощения модели объекта.

Точность замера факторов должна быть возможно более высокой. Степень точности определяется диапазоном изменения факторов. При изучении процесса, который длится десятки часов, нет необходимости учитывать доли минуты, а в быстрых процессах необходимо учитывать, быть может, доли секунды. Если факторы измеряются с большой ошибкой или особенность объекта исследования такова, что значения факторов трудно поддерживать на выбранном уровне (уровень фактора «плышет»), то экспериментатору следует обратиться к конфлюэнтному анализу.

Факторы должны быть непосредственными воздействиями на объект. Факторы должны быть *однозначны*. Трудно управлять фактором, который, является функцией других факторов. Но в планировании могут участвовать

сложные факторы, такие, как соотношения между компонентами, их логарифмы и т.п.

Необходимость введения сложных факторов возникает при желании представить динамические особенности объекта в статической форме. Пусть, например, требуется найти оптимальный режим подъема температуры в реакторе. Если относительно температуры известно, что она должна нарастать линейно, то в качестве фактора вместо функции (в данном случае линейной) можно использовать тангенс угла наклона, т.е. градиент. Положение усложняется, когда исходная температура не зафиксирована. Тогда ее приходится вводить в качестве еще одного фактора. Для более сложных кривых пришлось бы ввести большее число факторов (производные высоких порядков, координаты особых точек и т.д.). Поэтому целесообразно пользоваться сложным качественным фактором – номером кривой. Различные варианты кривых рассматриваются в качестве уровней. Это могут быть разные режимы термообработки сплавов, переходные процессы в системах управления и т.д. Мы показали, как можно сложный фактор-функцию представить с помощью простых однозначных факторов.

Пример 3. При оптимизации процесса получения одного производного пиперазина изучалось влияние семи факторов, среди которых были соотношения между компонентами: x_1 – количество едкого натра, г/мол; x_2 – способ поддержания pH; x_3 – время прилива вещества a , час; x_4 – время выдержки реакционной массы, час; x_5 – температура реакционной среды, °C; x_6 – весовое соотношение вещества b и метанола, г/г; x_7 – мольное соотношение вещества a и вещества b , г/мол/г/мл.

А теперь ответьте, пожалуйста, на следующий вопрос. Изучается процесс растворения твердого тела в жидкости – диффузионный процесс. Может ли скорость диффузии служить фактором в планировании эксперимента?

Скорость диффузии зависит от концентрации, величины поверхности соприкосновения двух фаз – жидкости и твердого тела, от коэффициента

растворения. Коэффициент растворения зависит от коэффициента диффузии и от толщины диффузионного слоя. Коэффициент диффузии, в свою очередь, является функцией нескольких переменных.

Конкретное значение скорости диффузии определяется сочетанием значений других факторов. Если бы мы могли управлять скоростью диффузии, придавая ей в каждом опыте желаемое значение, то она могла бы стать фактором. Те, кто сталкивался с диффузионными задачами, знают, как далеки мы от реализации этой возможности. Скорость диффузии не может являться фактором при планировании эксперимента.

При растворении твердого тела в жидкости образуется диффузионный слой, прилегающий к поверхности твердого тела. Состав этого слоя неодинаков в различных зонах. В пограничной части слой в большей или меньшей степени находится в состоянии равновесия, и концентрация растворенного вещества в нем приближается к концентрации насыщенного раствора, $c_{нас}$. В части слоя, прилегающей к внутреннему объему жидкости, концентрация растворенного вещества приближается к концентрации c в остальном объеме жидкости. Скорость диффузии тем больше, чем больше различие в концентрациях ($c_{нас} - c$) диффундирующего вещества

$$\frac{dc}{dt} = KS(c_{нас} - c),$$

где dc/dt – скорость изменения концентрации в объеме рассматриваемой фазы, S – величина поверхности соприкосновения данных фаз, K – коэффициент растворения.

Коэффициент растворения зависит от коэффициента диффузии D растворяемого вещества и от толщины диффузионного слоя δ $K=D/\delta$. Коэффициент диффузии, в свою очередь, зависит от ряда факторов.

Теперь вам должно быть ясно, что скорость диффузии является функцией многих переменных. Скоростью диффузии весьма трудно управлять.

Такие требования, предъявляемые к факторам при планировании эксперимента, как *управляемость* и *однозначность*, не выполняются.

Требования к совокупности факторов

При планировании эксперимента обычно одновременно изменяется несколько факторов. Поэтому очень важно сформулировать требования, которые предъявляются к совокупности факторов. Прежде всего выдвигается требование *совместимости*. Совместимость факторов означает, что все их комбинации осуществимы и безопасны. Это очень важное требование. Представьте себе, что вы поступили легкомысленно, не обратили внимания на требование совместимости факторов и запланировали такие условия опыта, которые могут привести к взрыву установки или осмоле-цию продукта. Согласитесь, что такой результат очень далек от целей оптимизации.

Несовместимость факторов может наблюдаться на границах областей их определения. Избавиться от нее можно сокращением областей. Положение усложняется, если несовместимость проявляется внутри областей определения. Одно из возможных решений – разбиение на подобласти и решение двух отдельных задач.

При планировании эксперимента важна *независимость* факторов, т.е. возможность установления фактора на любом уровне вне зависимости от уровней других факторов. Если это условие невыполнимо, то невозможно планировать эксперимент. Итак, мы подошли ко второму требованию – отсутствию корреляции между факторами. Требование некоррелированности не означает, что между значениями факторов нет никакой связи. Достаточно, чтобы связь не была линейной.

Исследуется некоторая термодинамическая система. Можно ли включить в планирование эксперимента следующие три фактора: x_1 – давление, атм, x_2 – объем, л, x_3 – температуру, °К?

Пусть в термодинамической системе имеет место уравнение Менделеева–Клапейрона $PV=nRT$ и заданы два фактора, например $V(x_1)$ и $T(x_2)$. Тогда $P(x_3)$ может быть вычислено. То же самое и с двумя другими парами факторов. Поэтому в планирование можно включать два (а не три) фактора. Здесь возможны три комбинации: 1) x_1 и x_2 , 2) x_1 и x_3 , 3) x_2 и x_3 .

Примеры факторов

Области практических приложений планирования эксперимента чрезвычайно многообразны: химия, металлургия, биология, медицина, обогащение полезных ископаемых, пищевая и текстильная промышленность, сельское хозяйство, военное дело и др.

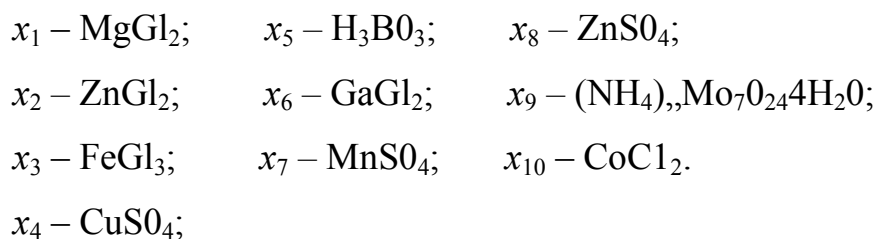
Применяется планирование эксперимента и в несколько неожиданных областях исследования, в таких, как геронтология (наука о долголетию), при классификации образцов древней керамики, в хлебопечении и табачном деле.

В зависимости от объектов исследования меняются и факторы. В выборе примеров мы также руководствовались принципом многофакторности; приводили задачи, в которых количество факторов было бы не меньше четырех, так как придумать примеры с двумя-тремя факторами очень легко может и сам читатель.

Пример 4. При исследовании электролитического процесса получения алюминия в планирование эксперимента были включены следующие семь факторов: x_1 – напряжение на электролизере, в; x_2 – время между обработками электролизера, час; x_3 – концентрация фтористого магния в электролите, %; x_4 – концентрация фтористого кальция в электролите, % ; x_5 – криолитовое отношение; x_6 – уровень электролита в ванне, см; x_7 – время между операциями съема угольной пены, сутки.

Пример 5. Влияние следующих факторов заинтересовало экспериментатора при оптимизации производства резисторов: x_1 – давление при прессовке, кг/см²; x_2 – температура при прессовке, °С; x_3 – время выдержки под давлением, мин; x_4 – температура в муфеле при прессовке, °С; x_5 – время температурной выдержки, мин; x_6 – дисперсность наполнителя, мк; x_7 – соотношение флюса и наполнителя, г/г; x_8 – давление при шамотировании, кг/см²; x_9 – дисперсность сажи, мк; x_{10} – время выдержки при шамотировании, мин; x_{11} – качество керамики оснований; x_{22} – дисперсность флюсов, мк.

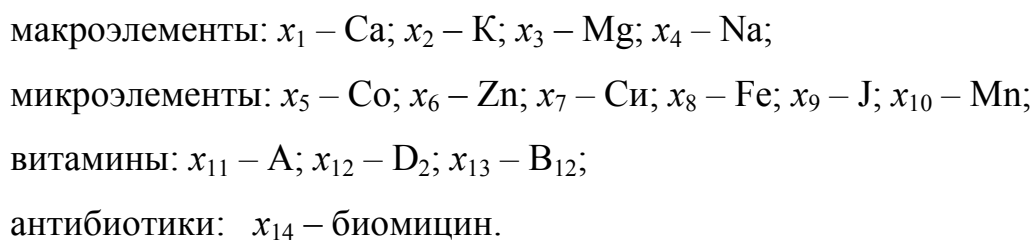
Пример 9. В микробиологических исследованиях весьма важной задачей является нахождение оптимального состава питательной среды. В одной из микробиологических работ проверялось влияние следующих факторов:



Обработка результатов эксперимента велась по пробам, полученным в четвертые сутки выращивания. В экспериментах такого рода возможно также варьировать время выращивания, температуру и т. д.

Пример 10. И, наконец, для специалистов, занимающихся животноводством, приведем пример факторов, влияющих на откорм свиней.

Определялось соотношение в рационе питательных веществ и стимуляторов, т.е. химических соединений, воздействующих на обмен веществ в организме. Изучалось влияние следующих четырнадцати факторов:



Мы надеемся, что приведенных примеров достаточно, чтобы вы составили себе ясное представление о понятии «факторы».

Резюме

Итак, мы установили, что факторы – это переменные величины, соответствующие способам воздействия внешней среды на объект. Они определяют как сам объект, так и его состояние. Требования к факторам: управляемость и однозначность.

Управлять фактором – это значит установить нужное значение и поддерживать его постоянным в течение опыта или менять по заданной программе. В этом состоит особенность «активного» эксперимента.

Планировать эксперимент можно только в том случае, если уровни факторов подчиняются воле экспериментатора.

Факторы должны непосредственно воздействовать на объект исследования. Трудно управлять фактором, если он является функцией других переменных, но в планировании эксперимента могут участвовать сложные факторы, такие, как логарифмы, соотношения и т.д. Факторы должны быть определены операционально.

Требования к совокупности факторов: совместимость и отсутствие линейной корреляции. Выбранное множество факторов должно быть достаточно полным. Если какой-либо существенный фактор пропущен, это приведет к неправильному определению оптимальных условий или к большой ошибке опыта. Факторы могут быть количественными и качественными.

Точность фиксации факторов должна быть высока. Степень точности определяется диапазоном изменения факторов.

Выбор факторов – очень ответственный этап при подготовке к планированию эксперимента. От удачного выбора зависит успех оптимизации.

После того как мы рассказали вам о параметре оптимизации и факторах, можно подойти к выбору модели исследуемого процесса.

ВЫБОР МОДЕЛИ

Выбрать модель – значит выбрать вид функции отклика

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_k),$$

записать ее уравнение. Тогда останется спланировать и провести эксперимент для оценки численных значений констант (коэффициентов) этого уравнения. Но как выбрать модель?

Чтобы постепенно продвигаться к ответу на этот вопрос, давайте сначала построим геометрический аналог функции отклика – поверхность отклика. Будем для наглядности рассматривать случай с двумя факторами.

Заметим, что в случае многих факторов геометрическая наглядность теряется. Мы попадаем в абстрактное многомерное пространство, где у нас нет навыка ориентирования. Приходится переходить на язык алгебры. Тем не менее

простые примеры, которые мы сейчас рассмотрим, помогут вам, как мы думаем, при работе с многими факторами.

Мы хотим изобразить геометрически возможные состояния «черного ящика» с двумя входами. Для этого достаточно располагать плоскостью с обычной декартовой системой координат. По одной оси координат будем откладывать в некотором масштабе значения (уровни) одного фактора, а по другой оси – второго. Тогда каждому состоянию «ящика» будет соответствовать точка на плоскости.

Для факторов существуют области определения. Это значит, что у каждого фактора есть минимальное и максимальное возможные значения, между которыми он может изменяться либо непрерывно, либо дискретно. Если факторы совместимы, то границы образуют на плоскости некоторый прямоугольник, внутри которого лежат точки, соответствующие состояниям «черного ящика». Пунктирными линиями на рис. обозначены границы областей определения каждого из факторов, а сплошными – границы их совместной области определения.

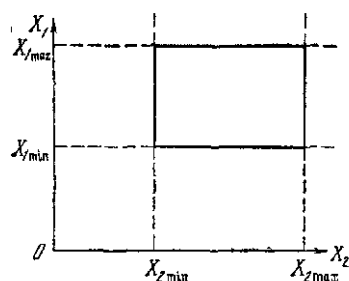


Рис. – Область определения факторов

Чтобы указать значение параметра оптимизации, требуется еще одна ось координат. Если ее построить, то поверхность отклика будет выглядеть так, как на рис. Пространство, в котором строится поверхность отклика, мы будем называть областью определения факторным пространством. Оно задается координатными осями, по которым откладываются значения факторов и параметра оптимизации. Размерность факторного пространства зависит от числа факторов. При многих факторах поверхность опущка уже нельзя

изобразить наглядно и приходится ограничиваться только алгебраическим языком.

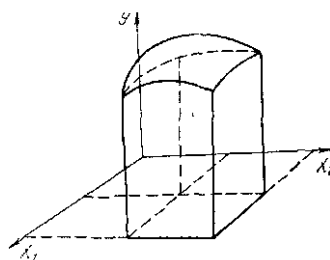


Рис. – Поверхность отклика

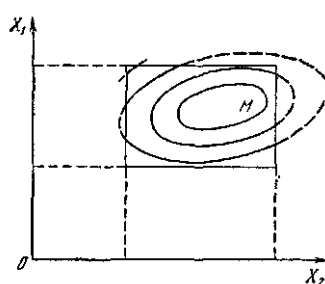


Рис. – Проекция сечений

Но для двух факторов можно даже не переходить к трехмерному пространству, а ограничиться плоскостью. Для этого достаточно произвести сечение поверхности отклика плоскостями, параллельными плоскости XOx_2 , и полученные в сечениях линии спроектировать на эту плоскость. Так строят, например, изображения гор и морских впадин на географических картах. Точка M на рисунке – это и есть та оптимальная точка, которую мы ищем. Каждая линия соответствует постоянному значению параметра оптимизации. Такая линия называется линией равного отклика. Существует соответствие между состоянием «ящика» и значением параметра оптимизации: каждому возможному состоянию «ящика» соответствует одно значение параметра оптимизации. Однако обратное неверно: одному возможному значению параметра оптимизации может соответствовать и одно, и несколько; и сколько угодно состояний «ящиков».

Правда, эти утверждения справедливы, если не учитывать ошибок в определении значений параметра оптимизации. К вопросу об оценке и учете этих ошибок мы вернемся ниже, а пока не будем принимать их во внимание.

Теперь, когда мы можем представить себе поверхность отклика, пора вернуться к основному вопросу: как ставить эксперимент, чтобы найти оптимум при минимуме затрат? Это прежде всего вопрос стратегии.

Если бы мы располагали таблицей, в которой содержались бы все возможные состояния объекта и соответствующие им отклики, то особой необходимости в построении математической модели не было бы. Просто мы бы выбрали то (или те) состояние, которое соответствует наилучшему отклику. Но мы уже знаем, сколь велик перебор возможных состояний, и должны отказаться от практической реализации этой возможности.

Другая возможность – случайный выбор некоторого числа состояний и определение откликов в них, в надежде, что среди этих состояний попадутся оптимальное или по крайней мере близкие к нему состояния. Мы не будем рассматривать эту интересную возможность, так как, к сожалению, она не вписывается в нашу тему.

Наконец, третья возможность – строить математическую модель, чтобы с ее помощью предсказывать значения откликов в тех состояниях, которые не изучались экспериментально. Если не можем измерить отклик в каждом состоянии, то сумеем хоть предсказывать результат. Причем даже не в каждом состоянии, а только в наиболее интересных, в тех, которые приближают нас к оптимуму.

Такая стратегия приводит нас к шаговому принципу, лежащему в основе рассматриваемого метода планирования эксперимента.

Шаговый принцип

За отказ от полного перебора состояний надо чем-то платить. Цена – это предположения, которые мы должны сделать относительно свойств неизвестной нам модели до начала эксперимента (как говорят, априори).

Некоторые из предположений мы никогда не сможем проветрить. Такие предположения называются постулатами. Если в действительности они не выполняются, то весьма возможно, что мы не найдем оптимум. Точнее, мы примем за оптимум то, что на самом деле им не является (хотя, быть может, нас и удовлетворит).

Какие же предположения о свойствах поверхности отклика мы делаем? Главное – это непрерывность поверхности, ее гладкость и наличие единственного оптимума (быть может, и на границе области определения факторов).

Эти постулаты позволяют представить изучаемую функцию в виде степенного ряда в окрестности любой возможной точки факторного пространства (такие функции в математике называются аналитическими). Кроме того, если мы придумаем какой-то способ постепенного приближения к оптимальной точке, нужно, чтобы результат не зависел от исходной точки. Если оптимум один, то неважно, приближаемся мы к нему справа или слева, а если их несколько, да они еще неравноценны.

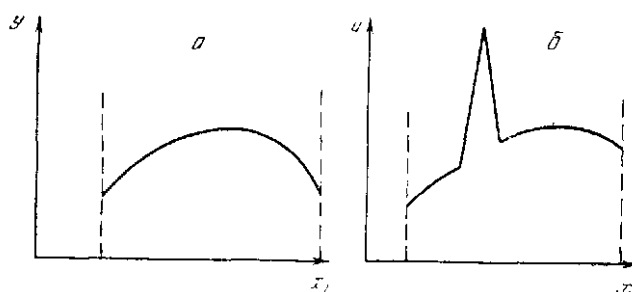


Рис. – Примеры функций отклика для одного фактора

На рис. приведены две картинки, изображающие функции отклика для одного фактора. На рис. *a* показан благоприятный случай. На рис. *б* – много нарушений. Здесь и два экстремума (оптимума) и пик (нарушение гладкости и непрерывности).

Если в поисках оптимума мы начнем последовательно двигаться слева направо, то найдем наименьший из максимумов и вряд ли узнаем о существовании второго, наибольшего. Правда, он так локализован и остр, что

его не мудрено пропустить и при движении с правого конца, если ставить опыты не во всех точках.

Возможно, вы обратили внимание на то, что требование непрерывности не согласуется с представлением о дискретных уровнях факторов. Однако в действительности это не страшно. Мы ведь можем считать, что фактор принимает непрерывный ряд значений (если даже некоторые значения не имеют смысла или физически нереализуемы). Важно только помнить о таком соглашении при использовании результатов. А для построения математической модели это создает значительные удобства.

Так как мы заранее считаем, что предпосылки выполняются, то надо максимально использовать возможности, которые при этом открываются.

Если, например, мы будем знать значения параметра оптимизации в нескольких соседних точках факторного пространства, мы сможем (в силу гладкости и непрерывности функции отклика) представить себе результаты, которые можно ожидать в других соседних точках. Следовательно, можно найти такие точки, для которых ожидается наибольшее увеличение (или уменьшение, если мы ищем минимум) параметра оптимизации. Тогда ясно, что следующий эксперимент надо переносить именно в эти точки. Надо продвигаться в этом направлении, пренебрегая остальными. (Вот где экономятся опыты!) Сделав новый эксперимент, снова можно оценить направление, в котором скорее всего следует двигаться. В силу единственности оптимума мы, таким образом, рано или поздно непременно его достигнем. Это и есть шаговый принцип.

Сделаем некоторые пояснения. Мы выбираем в факторном пространстве какую-то точку и рассматриваем множество точек в ее окрестности, т. е. выбираем в области определения факторов малую подобласть. Здесь мы хотим провести эксперимент, на основании которого должна быть построена первая модель. Эту модель мы намерены использовать для предсказания результатов опытов в тех точках, которые не входили в эксперимент. Если эти точки лежат внутри нашей подобласти, то такое предсказание называется интерполяцией, а

если вне – экстраполяцией. Чем дальше от области эксперимента лежит точка, для которой мы хотим предсказать результат, тем с меньшей уверенностью это можно делать. Поэтому мы вынуждены экстраполировать недалеко и использовать результаты экстраполяции для выбора условий проведения следующего эксперимента. Дальше цикл повторяется.

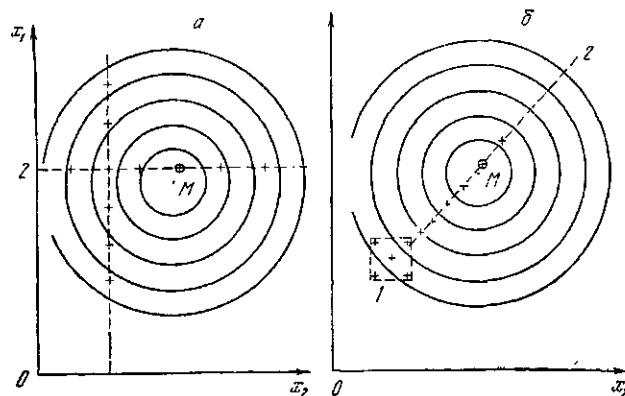


Рис. – Два способа поиска оптимума

Попутно полученную модель можно использовать для проверки различных гипотез о механизме изучаемого явления или о его отдельных сторонах. Например, если вы предполагаете, что увеличение значения некоторого фактора должно приводить к увеличению значения параметра оптимизации, то с помощью модели можно узнать, так ли это. Такая проверка называется интерпретацией модели.

На рис. изображены два варианта поиска оптимума для одной и той же поверхности. Крестиками на рисунке обозначены условия опытов. В случае *a* использован подход, который иногда называют классическим (метод Гаусса–Зейделя). Он состоит в том, что сначала последовательно изменяются значения одного фактора. (На рисунке этот эксперимент обозначен *1*) Затем находится и фиксируется наилучшее значение этого фактора. В этих условиях последовательно изменяются значения второго фактора (*2*) и т. д. (если больше факторов).

В случае *б* представлен простейший вариант шаговой процедуры. Сначала изучается локальная область (*1*), затем определяется наиболее интересное направление и в этом направлении ставятся следующие опыты (*2*).

Оказалось (см. рис., что в обоих случаях достигнут одинаковый результат при одинаковом суммарном количестве опытов.

Как вы думаете, всегда ли эти две процедуры эквивалентны?

Что нам требуется? Выяснить, нет ли нарушений наших предпосылок. Легче всего установить, сколько оптимумов (экстремумов) имеет изображенная функция. Если экстремумов больше одного, то уже нарушена предпосылка. Кроме того, существенно, нет ли каких-нибудь нарушений гладкости и непрерывности функции (например, пиков).

Дело в том, что эффективность зависит от вида поверхности, а также от того, в какой последовательности перебираются факторы в случае *a* и из окрестностей какой точки начат эксперимент в случае *б*.

Попробуйте вместо окружностей, которые задают линии равных откликов, нарисовать эллипсы, главные оси которых составляют некоторый острый угол с осями координат. Вы увидите, что эффективность процедур окажется различной.

Вот иллюстрация, которая сразу показывает правильность вашего ответа (рис.). Это, разумеется, только иллюстрация. В жизни не всегда удается за один цикл достигнуть оптимума.

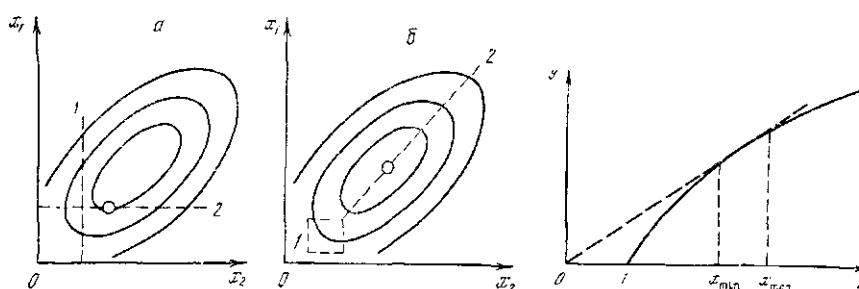


Рис. – Два способа поиска оптимума. Рис. – График логарифмической функции

Но несомненно, что по крайней мере в отношении результата процедура *б*, т. е. шаговый метод, в среднем эффективнее, чем процедура *a*. Можно придумать и более конкурентоспособные процедуры, чем *a*, но они обычно требуют значительно больше опытов.

Теперь займемся выбором модели для первого эксперимента более конкретно.

Как выбрать модель?

Модели бывают разные. Моделей бывает много. Чтобы выбрать одну из них, надо понять, что мы хотим от модели, какие требования мы к ней предъявляем. Теперь мы, пожалуй, сможем сформулировать эти требования.

Исходя из выбранной стратегии, ясно, что главное требование к модели – это способность предсказывать направление дальнейших опытов, причем предсказывать с требуемой точностью. Так как до получения модели мы не знаем, какое направление нам понадобится, то естественно требовать, чтобы точность предсказания во всех возможных направлениях была одинакова.

Это значит, что в некоторой подобласти, в которую входят и координаты выполненных опытов, предсказанное с- помощью модели значение отклика не должно отличаться от фактического больше чем на некоторую заранее заданную величину. Модель, которая удовлетворяет такому или какому-либо аналогичному требованию, называется адекватной. Проверка выполнимости этого требования называется проверкой адекватности модели. Разработаны специальные статистические методы, с помощью которых проверяется адекватность.

Если несколько различных моделей отвечают нужным требованиям, то следует предпочесть ту из них, которая является самой простой.

На рис. изображена логарифмическая функция. На некотором отрезке $[x_{\min}, x_{\max}]$ она с удовлетворительной точностью описывается двумя уравнениями:

$$y = \log_b x,$$

$$y = bx.$$

В втором уравнении b – коэффициент, который мы можем оценить, например, по результатам эксперимента. Какое из уравнений, (1) или (2), по вашему мнению, проще? Простота – вещь относительная. Если вы заранее не сформулируете точно, что называется простым, а что сложным, то невозможно произвести выбор. Вот почему на наш вопрос не было никакого другого ответа, кроме «не знаю». При прочих равных условиях мы всегда будем предпочитать

степенные ряды. Точнее, отрезки степенных рядов – алгебраические полиномы. При таком соглашении можно сказать, что уравнение (2) проще, чем уравнение (1).

Фактически мы произвели выбор класса моделей. Мы сказали, что всегда, когда это возможно, будем искать модель среди полиномов. Построение полинома возможно в окрестностях любой точки факторного пространства, поскольку мы предположили, что функция является аналитической.

Выбрать – значит сравнить. А как сравнить между собой классы моделей, если свойства объекта заранее неизвестны? Остается предполагать, что нам будут редко встречаться задачи, в которых исходные постулаты окажутся существенно неверными. Если это так, то мы действительно выбрали наиболее простой, удобный и математически разработанный класс моделей.

Возможно, что кто-то заранее выбрал для нашей задачи конкретную модель. Тогда тоже возникает необходимость в планировании эксперимента для оценки ее коэффициентов. Но мы не будем рассматривать задачи этого типа.

Давайте выпишем полиномы для случая двух факторов. Они будут различаться по максимальным степеням входящих в них переменных.

Полином нулевой степени: $y = b_0$.

Полином первой степени: $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$.

Полином второй степени: $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2$.

Полиномиальные модели

Итак, мы представили неизвестную нам функцию отклика полиномом. Операция замены одной функции другой, в каком-то смысле эквивалентной функцией называется аппроксимацией. Значит, мы аппроксимировали неизвестную функцию полиномом.

Но полиномы бывают разных степеней. Какой взять на первом шаге?

Эксперимент нужен только для того, чтобы найти численные значения коэффициентов полинома. Поэтому чем больше коэффициентов, тем больше опытов окажется необходимым. А мы стремимся сократить их число. Значит,

надо найти такой полином, который содержит как можно меньше коэффициентов, но удовлетворяет требованиям, предъявленным к модели. Чем ниже степень полинома при заданном числе факторов, тем меньше в нем коэффициентов.

Мы хотим, чтобы модель хорошо предсказывала направление наискорейшего улучшения параметра оптимизации. Такое направление называется направлением градиента. Ясно, что движений в этом направлении приведет к успеху быстрее, чем движение в любом другом направлении {это значит, что будет достигнута экономия числа опытов}.

Как вы думаете, можно ли в этой связи всегда использовать полином первой степени?

С одной стороны, он содержит информацию о направлении градиента, с другой – в нем минимально возможное число коэффициентов при данном числе факторов. Единственное опасение в том, что неясно, будет ли линейная модель всегда адекватной. Ответ зависит еще и от объекта. Этим нам и предстоит сейчас заняться, чтобы завершить столь утомительную главу.

Вопрос в том, как выбрать подобласть в факторном пространстве, чтобы линейная модель оказалась адекватной. Условие аналитичности функции отклика гарантирует нам эту возможность. Всегда существует такая окрестность любой точки (точнее, почти любой точки), в которой линейная модель адекватна. Размер такой области заранее не известен, но адекватность, как вы помните, можно проверять по результатам эксперимента. Значит, выбрав сначала произвольную подобласть, мы, рано или поздно, найдем ее требуемые размеры. И как только это случится, воспользуемся движением по градиенту.

На следующем этапе мы будем искать линейную модель уже в другой подобласти. Цикл повторяется до тех пор, пока движение по градиенту не перестанет давать эффект. Это значит, что мы попали в область, близкую к оптимуму. Такая область называется «почти стационарной». Здесь линейная модель уже не нужна. Либо попаданием в почти стационарную область задача

решена (случай, рассматриваемый в этой книге), либо надо переходить к полиномам более высоких степеней, например второй степени, чтобы подробнее описать область оптимума.

Удачный выбор подобласти имеет, как вы видите, большое значение для успеха всей работы. Он связан с интуитивными решениями, которые принимает экспериментатор на каждом этапе.

Кроме задачи оптимизации, иногда возникает задача построения интерполяционной модели. В этом случае нас не интересует оптимум. Просто мы хотим предсказывать результат с требуемой точностью во всех точках некоторой заранее заданной области. Тут не приходится выбирать подобласть. Необходимо последовательно увеличивать степень полинома до тех пор, пока модель не окажется адекватной. Если адекватной оказывается линейная, или неполная квадратная модель (без членов, содержащих квадраты факторов), то ее построение аналогично тому, что требуется для оптимизации. Поэтому мы попутно будем рассматривать и эту задачу.

Резюме

Итак, мы выбрали модель, которую будем систематически использовать на первом этапе планирования эксперимента. Это алгебраический полином первой степени – линейная модель.

Чтобы произвести такой выбор, нам понадобилось научиться изображать поверхность отклика в факторном пространстве, задаваемом прямоугольными декартовыми координатами, по осям которых откладываются в некотором масштабе значения (уровни) факторов и значения параметров оптимизации. Поверхность отклика задана только в совместной области определения факторов. В этой области каждому возможному набору значений факторов (состоянию объекта) соответствует единственное значение параметра оптимизации. Для уменьшения размерности факторного пространства при геометрическом построении поверхности отклика можно использовать сечения.

Мы выяснили, что математическая модель требуется для предсказания направления градиента, т. е. направления, в котором величина параметра

оптимизации улучшается быстрее, чем в любом другом направлении. Такая модель позволяет избежать полного перебора состояний объекта и тем самым уменьшить количество опытов, необходимых для отыскания оптимума.

Отказ от полного перебора требует оплаты в виде предположений о свойствах поверхности отклика, которые мы не сможем проверить. Такие предположения можно выбрать по-разному. Мы выбрали предположения об аналитичности функции отклика и об единственности оптимума. Аналитической называется такая функция, которую можно разложить в степенной ряд в окрестностях любой точки из области ее определения.

Используя эти предпосылки, можно предложить процедуру поиска оптимума, основанную на шаговом принципе. Этот принцип гласит: проводи короткие (насколько возможно) серии опытов, по их результатам строй математическую модель, используй модель для оценки градиента, ставь новые опыты только в этом направлении. Получается циклический процесс, который заканчивается при попадании в область, близкую к оптимуму («почти стационарную» область).

Чтобы выбрать теперь конкретную модель, надо сформулировать конкретные требования. К ним относятся адекватность и простота.

Под адекватностью понимается способность модели предсказывать результаты эксперимента в некоторой области с требуемой точностью. После реализации опытов можно проверить адекватность модели.

Простота – вещь относительная. Мы просто условились считать алгебраические полиномы самыми простыми. Это соглашение базируется на накопленном разными исследователями опыте работы с такими моделями и обычно удовлетворяет экспериментатора. Кроме того, полином линейен относительно неизвестных коэффициентов, что упрощает обработку наблюдений.

Так мы выбрали класс моделей. Осталось выбрать степень полинома и подобласть, в которой надо начинать эксперимент. Эти выборы связаны между собой. Однако важно, что в принципе возможен такой выбор области, при

котором линейная модель окажется адекватной. Этого достаточно, чтобы оценить градиент.

Выбор области связан с теми интуитивными решениями, которые принимает экспериментатор на каждом этапе работы.

Попутно мы упомянули о задаче построения интерполяционных моделей, которые используются для предсказания откликов во всей области. Область фиксируется заранее. Надо последовательно повышать степень полинома до тех пор, пока не найдется адекватная модель.

ПОЛНЫЙ ФАКТОРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Прежде чем приступить к планированию, необходимо выбрать локальную область факторного пространства. Возникают вопросы: где ее выбирать и какого размера она должна быть? Это важный этап принятия неформализованных решений, предшествующих построению плана первой серии эксперимента.

Здесь мы впервые сталкиваемся с проблемой принятия решений при планировании эксперимента. Поэтому уместны несколько слов об особенностях этих этапов решения задачи. Весь процесс исследования можно считать состоящим из последовательности этапов, часть из которых полностью формализована, а часть требует «интуитивных» решений. Причем, по мере развития теории формальные этапы будут играть все большую роль, но до конца не вытеснят неформализованные этапы. В силу этого, между прочим, не ожидается создание «логарифмической линейки» по планированию эксперимента и надо тратить время на его изучение.

Принятие решений перед планированием эксперимента

При выборе области эксперимента прежде всего надо оценить границы областей определения факторов. При этом должны учитываться ограничения нескольких типов. Первый тип – принципиальные ограничения для значений факторов, которые не могут быть нарушены ни при каких обстоятельствах. Например, если фактор – температура, то нижним пределом будет абсолютный нуль. Второй тип – ограничения, связанные с технико-экономическими

соображениями, например, со стоимостью сырья, дефицитностью отдельных компонентов, временем ведения процесса. Третий тип ограничений, с которым чаще всего приходится иметь дело, определяется конкретными условиями проведения процесса, Например, существующей аппаратурой, технологией, организацией. В реакторе, изготовленном из некоторого материала, температуру нельзя поднять выше температуры плавления этого материала или выше рабочей температуры данного катализатора.

Оптимизация обычно начинается в условиях, когда объект уже подвергался некоторым исследованиям. Информацию, содержащуюся в результатах предыдущих исследований, будем называть априорной (т. е. полученной до начала эксперимента). Мы можем использовать априорную информацию для получения представления о параметре оптимизации, о факторах, о наилучших условиях ведения процесса и характере поверхности отклика, т. е. о том, как сильно меняется параметр оптимизации при небольших изменениях значений факторов, а также о кривизне поверхности. Для этого можно использовать графики (или таблицы) однофакторных экспериментов, осуществлявшихся в предыдущих исследованиях или описанных в литературе. Если однофакторную зависимость нельзя представить линейным уравнением (в рассматриваемой области), то в многомерном случае, несомненно, будет существенная кривизна. Обратное утверждение, к сожалению, не очевидно.

Итак, выбор экспериментальной области факторного пространства связан с тщательным анализом априорной информации.

Пример 1. Изучалось ионообменное разделение смесей группы редкоземельных элементов растворами иминодиуксусной кислоты. Параметр оптимизации – содержание неодима в выходном растворе (элюате) в процентах. Рассматривалось всего два фактора: концентрация элюанта (входного раствора), % вес (x_1) и рН элюанта (x_2). Как построить область определения факторов? Начнем с x_1 . Известно, что при $x_1 > 3$ работать нельзя, так как это предел растворимости данного вещества при нормальной температуре. Значит, верхний предел $x_1=3$. С нижним пределом дело обстоит сложнее. Здесь нельзя

указать четкую границу. Известно только, что чем ниже концентрация, тем дольше идет процесс. При $x_1=0,5$ время протекания процесса находится в разумных пределах. Это и определяет нижнюю границу. Ради большой выгоды ее можно будет сдвинуть, тогда как изменить верхнюю границу практически нельзя.

Для выбора области определения x_2 использовались теоретические представления о процессе, из которых следует, что разделение происходит благодаря одновременному присутствию в системе двух соединений: моно-и ди-комплексов. Специальные предварительные опыты показали, что при $pH < 3$ кислота находится в недиссоциированном состоянии, а при $pH > 8$ оба соединения разрушаются. Следовательно, x_2 может изменяться от 3 до 8. Если факторы совместимы (а в данном случае это так), то их совместная область определения тоже задана. В области определения надо найти локальную подобласть для планирования эксперимента. Процедура выбора этой подобласти включает два этапа: выбор основного уровня и выбор интервалов варьирования.

Выбор основного уровня. Наилучшим условиям, определенным из анализа априорной информации, соответствует комбинация (или несколько комбинаций) уровней факторов. Каждая комбинация является многомерной точкой в факторном пространстве. Ее можно рассматривать как исходную точку для построения плана эксперимента. Назовем ее основным (нулевым) уровнем. Построение плана эксперимента сводится к выбору экспериментальных точек, симметричных относительно нулевого уровня.

В разных случаях мы располагаем различными сведениями об области наилучших условий. Если имеются сведения о координатах одной наилучшей точки и нет информации о границах определения факторов, то остается рассматривать эту точку в качестве основного уровня. Аналогичное решение принимается, если границы известны и наилучшие условия лежат внутри области.

Положение усложняется, если эта точка лежит на границе (или весьма близко к границе) области. Тогда приходится основной уровень выбирать с некоторым сдвигом от наилучших условий.

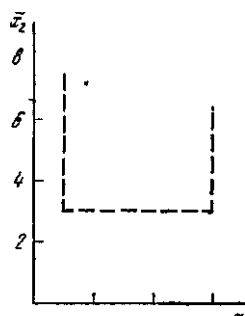
Может случиться, что координаты наилучшей точки неизвестны, но есть сведения о некоторой подобласти, в которой процесс идет достаточно хорошо. Тогда основной уровень выбирается либо в центре, либо в случайной точке этой подобласти. Сведения о подобласти можно получить, анализируя изученные ранее подобные процессы, из теоретических соображений или из предыдущего эксперимента.

Наконец, возможен случай с несколькими эквивалентными точками, координаты которых различны. Когда отсутствуют дополнительные данные (технологического, экономического характера и т. д.), выбор произволен. Конечно, если эксперимент недорог и требует немного времени, можно приступить к построению планов экспериментов вокруг нескольких точек.

Следующий пример иллюстрирует одну из возможных ситуаций.

Пример 2. На рис. изображена область определения для двух факторов. Кружком отмечены наилучшие условия, известные из априорной информации. Известно также, что имеется возможность дальнейшего улучшения параметра оптимизации, а данное значение нас не удовлетворяет. Эту точку нельзя рассматривать в качестве основного уровня. Дело в том, что она расположена на границе области определения. Требование симметрии экспериментальных точек относительно нулевого уровня привело бы в этом случае к выходу за границы области определения, чего делать также нельзя. Резюмируем наши рассуждения о принятии решений при выборе основного уровня в виде блок-схемы.

После того как нулевой уровень Выбран, переходим к следующему шагу – выбору интервалов варьирования.



Выбор интервалов варьирования. Теперь наша цель состоит в том, чтобы для каждого фактора выбрать два уровня, на которых он будет варьироваться в эксперименте.

Представьте себе координатную ось, на которой откладываются значения данного фактора, для определенности — температуры. Пусть основной уровень уже выбран и равен 100°C . Это значение изображается точкой. Тогда два интересующих нас уровня можно изобразить двумя точками, симметричными относительно первой. Будем называть один из этих уровней верхним, а второй — нижним. Обычно за верхний уровень принимается тот, который соответствует большему значению фактора, хотя это не обязательно, а для качественных факторов вообще безразлично.

Интервалом варьирования факторов называется некоторое число (свое для каждого фактора), прибавление которого к основному уровню дает верхний, а вычитание — нижний уровни фактора. Другими словами, интервал варьирования двух факторов — это расстояние на координатной оси между основным и верхним (или нижним) уровнем. Таким образом, задача выбора уровней сводится к более простой задаче выбора интервала варьирования.

Заметим еще, что для упрощения записи условий эксперимента и обработки экспериментальных данных масштабы по осям выбираются так, чтобы верхний уровень соответствовал $+1$, нижний -1 , а основной — нулю. Для факторов с непрерывной областью определения это всегда можно сделать с помощью преобразования

$$x_j = \frac{\bar{x}_j - \bar{x}_{j0}}{I_j},$$

где x_j – кодированное значение фактора, \bar{x}_j – натуральное значение фактора, \bar{x}_{j0} – натуральное значение основного уровня, I_j – интервал варьирования, j – номер фактора.

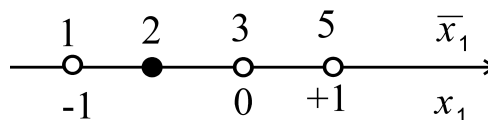
Для качественных факторов, имеющих два уровня, один уровень обозначается +1, а другой – 1; порядок уровней не имеет значения.

Пусть процесс определяется четырьмя факторами. Основной уровень и интервалы варьирования выбраны следующим образом.

	\bar{x}_1	\bar{x}_2	\bar{x}_3	\bar{x}_4
Основной уровень	3	30	1,5	15
Интервал варьирования	2	10	1	10

Остановимся на первом факторе. Отметим на координатной оси три уровня: нижний, основной и верхний.

Натуральные значения



Кодированные значения

Нужно найти кодированное значение для $\bar{x}_1=2.0$. Это значение лежит между 1,0 и 3,0, т.е. между –1 и 0 в кодированном масштабе. Так как в натуральном масштабе 2.0 лежит посередине между 1.0 и 3.0, то ему соответствует –0.5 в кодированном масштабе. (Для $\bar{x}_1 = 2.5$ будет $x_1 = -0,25$, для $\bar{x}_1 = 1.5$ будет $x_1 = -0,75$ и т. д.)

На выбор интервалов варьирования накладываются естественные ограничения сверху и снизу. Интервал варьирования не может быть меньше той ошибки, с которой экспериментатор фиксирует уровень фактора. Иначе верхний и нижний уровни окажутся неразличимыми. С другой стороны, интервал не может быть настолько большим, чтобы верхний или нижний

уровни оказались за пределами области определения. Внутри этих ограничений обычно еще остается значительная неопределенность выбора, которая устраняется с помощью интуитивных решений.

Обратите внимание, что при решении задачи оптимизации мы стремимся выбрать для первой серии экспериментов такую подобласть, которая давала бы возможность для шагового движения к оптимуму. В задачах же интерполяции интервал варьирования охватывает всю описываемую область.

Выбор интервалов варьирования – задача трудная, так как она связана с неформализованным этапом планирования эксперимента. Возникает вопрос, какая априорная информация может быть полезна на данном этапе? Это – сведения о точности, с которой экспериментатор фиксирует значения факторов, о кривизне поверхности отклика и о диапазоне изменения параметра оптимизации. Обычно эта информация является ориентировочной (в некоторых случаях она может оказаться просто ошибочной), но это единственная разумная основа, на которой можно начинать планировать эксперимент. В ходе эксперимента ее часто приходится корректировать.

Точность фиксирования факторов определяется точностью приборов и стабильностью уровня в ходе опыта. Для упрощения схемы принятия решений мы введем приближенную классификацию, полагая, что есть низкая, средняя и высокая точности. Можно, например, считать, что поддержание температуры в реакторе с погрешностью не более 1 % соответствует высокой, ее более 5% – средней, а более 16% – низкой точности.

Источником сведений о кривизне поверхности отклика могут служить уже упоминавшиеся графики однофакторных зависимостей, а также теоретические соображения. Из графиков сведения о кривизне можно получить визуально. Некоторое представление о кривизне дает анализ табличных данных, так как наличие кривизны соответствует непропорциональное изменение параметра оптимизации при равномерном изменении фактора. Мы будем различать три случая: функция отклика линейна, функция отклика существенно нелинейна и информация о кривизне отсутствует.

Наконец, полезно знать, в каких диапазонах меняются значения параметра оптимизации в разных точках факторного пространства. Если имеются результаты некоторого множества опытов, то всегда можно найти наибольшее или наименьшее значения параметра оптимизации. Разность между этими значениями будем называть диапазоном изменения параметра оптимизации для данного множества опытов. Условимся различать широкий и узкий диапазоны. Диапазон будет узким, если он несущественно отличается от разброса значений параметра оптимизации в повторных опытах. В противном случае будем считать диапазон широким. Учтем также случай, когда информация отсутствует. Итак, для принятия решений используется априорная информация о точности фиксирования факторов, кривизне поверхности отклика и диапазоне изменения параметра оптимизации. Каждое сочетание градаций перечисленных признаков определяет ситуацию, в которой нужно принимать решение.

При принятых нами градациях возможно $3^3 = 27$ различных ситуаций. Они представлены на рис. в виде кружочков, цифры в которых соответствуют порядковым номерам ситуаций.

Теперь мы приблизились к принятию решения о выборе интервалов варьирования. Для интервалов также введем градацию. Будем рассматривать широкий, средний и узкий интервалы варьирования, а также случай, когда трудно принять однозначное решение. Размер интервала варьирования составляет некоторую долю от области определения фактора. Можно, например, условиться о следующем: если интервал составляет не более 10% от области определения, считать его узким, не более 30% – средним и в остальных случаях – широким. Это, конечно, весьма условно, и в каждой конкретной задаче приходится специально определять эти понятия, которые зависят не только от размера области определения, но и от характера поверхности отклика, и от точности фиксирования факторов.

Перейдем к рассмотрению блок-схем принятия решений. На первой схеме (рис.) представлены девять ситуаций, имеющих место при низкой

точности фиксирования факторов. При выборе решений учитываются информация о кривизне поверхности отклика и о диапазоне изменения параметра оптимизации. Типичное решение – широкий интервал варьирования. Узкий интервал варьирования совершенно не используется, что вполне понятно при низкой точности.

Пусть ситуация определяется следующими признаками: поверхность отклика линейна, а диапазон изменения параметра оптимизации узок. Какое решение вы бы предпочли? Эта ситуация обозначена на нашей схеме номером 2. Признаки ситуации определяются стрелками, направленными к данному кружочку. Стрелка, выходящая из кружочка, указывает решение. Низкая точность фиксирования факторов приводит к отказу от выбора узкого интервала варьирования, иначе результаты могут оказаться неразличимыми. Нам известно, что поверхность линейна. Это не налагает ограничений на расширение интервалов. Кроме того, надо учитывать сведения о диапазоне изменения параметра оптимизации. Он узок, а мы стремимся получить в эксперименте различающиеся значения параметра оптимизации. Поэтому интервал следует увеличивать.

Вернемся снова к блок-схеме. Вы видите, что средний интервал варьирования в этой схеме выбирается дважды, причем в девятой ситуации как редко применяемая альтернатива. Здесь отсутствует информация об обоих признаках, и выбор широкого интервала представляется более естественным.

Наибольшие трудности возникают, когда поверхность отклика нелинейна. Появляется противоречие между низкой точностью фиксирования факторов и кривизной. Первая требует расширения интервала, а вторая – сужения. Решение оказывается неоднозначным. Как поступить? Приходится рассматривать дополнительные рекомендации (см. блок-схему). Прежде всего нужно выяснить, нельзя ли увеличить точность эксперимента либо за счет инженерных решений, либо за счет увеличения числа повторных опытов. Если это возможно, то решения принимаются на основе блок-схемы (рис. 20) для

средней точности фиксирования факторов. Если это невозможно, то для принятия решения нет достаточных оснований и оно становится интуитивным.

Это блок-схема, как и последующие, служит весьма грубым приближением к действительности. На практике учитывается еще масса обстоятельств. Например, решения, принимаемые по каждому фактору в отдельности, корректируются при рассмотрении совокупности факторов.

На рис. изображена блок-схема для случая средней точности фиксирования факторов.

Характерен выбор среднего интервала варьирования. Лишь в случае нелинейной поверхности и широкого диапазона рекомендуется узкий интервал варьирования. При сочетаниях линейной поверхности с узким диапазоном и отсутствием информации о диапазоне выбирается широкий интервал варьирования. Пунктиром, как и выше, показаны редко применяемые альтернативы.

Наконец, на рис. построена блок-схема для случая высокой точности фиксирования фактора.

Сочетание высокой точности с нелинейностью поверхности всегда приводит к выбору узкого интервала. Довольно часто выбирается средний интервал и лишь в двух случаях широкий. В обеих последних блок-схемах отсутствуют неоднозначные решения.

Пример 3. Давайте продолжим рассмотрение примера 1. Область определения факторов была выбрана следующим образом: для \bar{x}_1 от 0,5 до 3, для \bar{x}_2 от 3 до 8. Основной уровень: $\bar{x}_1=1,5$, $\bar{x}_2=7,0$.

Экспериментатор имел такую априорную информацию: точность фиксирования факторов средняя, поверхность отклика линейна, диапазон изменения параметра оптимизации довольно узок. Этот случай соответствует ситуации блок-схемы. Принимаемое решение – широкий интервал варьирования. Экспериментатор выбрал такие интервалы: $I_1=0,5$, $I_2=1,0$, что составляет 20% от области определения факторов. Это несомненно широкие интервалы варьирования. Отметим еще, что для \bar{x}_2 основной уровень выбран

вблизи границы области определения. Поэтому рекомендация о выборе широкого интервала варьирования приводит к совпадению верхнего уровня с этой границей. Так на практике осуществляется выбор интервалов варьирования.

Итак, вооружившись умением выбирать основной уровень и интервалы варьирования факторов, мы готовы приступить к построению плана проведения эксперимента.

Полный факторный эксперимент типа 2^k

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

Таблица - Матрица планирования эксперимента 2^2

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

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

Матрица планирования для двух факторов приведена в табл. Каждый столбец в матрице планирования называют вектор-столбцом, а каждую строку – вектор-строкой. Таким образом, в табл. мы имеем два вектора-столбца независимых переменных и один вектор-столбец параметра оптимизаций. То, что записано в этой таблице в алгебраической форме, можно изобразить геометрически. Найдем в области определения факторов точку, соответствующую основному уровню, и проведем через нее новые оси координат, параллельные осям факторов.

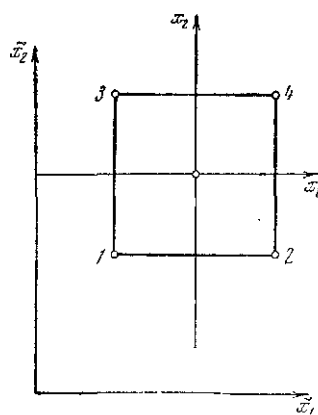


Рис. – Геометрическая интерпретация полного факторного эксперимента 2^2

Далее, натуральных значений выберем масштабы по новым осям так, чтобы интервал варьирования для каждого фактора равнялся единице. Тогда условия проведения опытов будут соответствовать вершинам квадрата, центром которого является основной уровень, а каждая сторона параллельна одной из осей координат и равна двум интервалам. Номера вершин квадрата соответствуют номерам опытов в матрице планирования. Площадь, ограниченная квадратом, называется областью эксперимента. Иногда удобнее считать областью эксперимента площадь, ограниченную окружностью, описывающей квадрат. В задачах интерполяции область эксперимента есть область предсказываемых значений y .

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

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

Таблица – Матрица планирования эксперимента 2^2

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

Теперь вместо полной записи матрицы планирования можно пользоваться только буквенными обозначениями. Ниже приведена буквенная запись еще одного плана: c , b , a , abc , (1), bc , ac , ab . Матрица планирования приведена в табл.

Таблица – Матрица планирования эксперимента 2^3

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	Буквенные обозначения строк	y
1	-1	-1	+1	c	y_1
2	-1	+1	-1	b	y_2
3	+1	-1	-1	a	y_3
4	+1	+1	+1	abc	y_4

5	-1	-1	-1	(1)	y_5
6	-1	+1	+1	bc	y_6
7	+1	-1	+1	ac	y_7
8	+1	+1	-1	ab	y_8

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

Если для двух факторов все возможные комбинации уровней легко найти прямым перебором (или просто запомнить), то с ростом числа факторов возникает необходимость в некотором приеме построения матриц. Из многих возможных обычно используется три приема, основанных на переходе от матриц меньшей размерности к матрицам большей размерности. Рассмотрим первый. При добавлении нового фактора каждая комбинация уровней исходного плана встречается дважды: в сочетании с нижним и верхним уровнями нового фактора. Отсюда естественно появляется прием: записать исходный план для одного уровня нового фактора, а затем повторить его для другого уровня. Вот как это выглядит при переходе от эксперимента 2^2 к 2^3 (табл.):

Таблица 6.4 – Построение матрицы планирования эксперимента 2^3

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

7	+		-		-	y_7
8	+		+		-	y_8

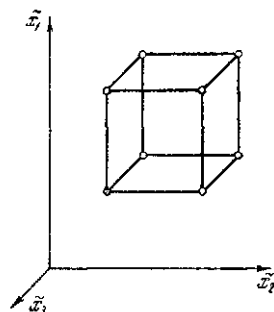
Этот прием распространяется на построение матриц любой размерности.

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

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

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

По аналогии с полным факторным экспериментом 2^2 можно дать геометрическую интерпретацию полного факторного эксперимента 2^3 . Геометрической интерпретацией полного факторного эксперимента 2^3 служит куб, координаты вершин которого задают условия опытов.



Если поместить центр куба в точку основного уровня факторов, а масштабы по осям выбрать так, чтобы интервал варьирования равнялся единице, то получится куб, изображенный на рис. Куб задает область

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

Свойства полного факторного эксперимента типа 2^k

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

Два свойства следуют непосредственно из построения матрицы. Первое из них – симметричность относительно центра эксперимента – формулируется следующим, образом: алгебраическая сумма элементов вектор-столбца каждого фактора равна нулю, или

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

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

Второе свойство – так называемое условие нормировки – формулируется следующим образом: сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу

опытов, или $\sum_{i=1}^N x_{ji}^2 = N$. Это следствие того, что значения факторов в матрице задаются $+1$ и -1 .

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

Сумма почленных произведений любых двух вектор-столбцов матрицы равна нулю, или $\sum_{i=1}^N x_{ji} \cdot x_{ui} = 0, j \neq u, j, u = 0, 1, 2, \dots, k$. Это важное свойство называется ортогональностью матрицы планирования.

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

Полный факторный эксперимент и математическая модель

Давайте еще раз вернемся к матрице 2^2 (табл.). Для движения к точке оптимума нам нужна линейная модель $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$. Наша цель – найти по результатам эксперимента значения неизвестных коэффициентов модели. До сих пор, говоря о линейной модели, мы не останавливались на важном вопросе о статистической оценке ее коэффициентов. Теперь необходимо сделать ряд замечаний по этому поводу. Можно утверждать, что эксперимент проводится для проверки гипотезы о том, что линейная модель $\eta = \beta_0 + \beta_1x_1 + \beta_2x_2$ адекватна. Греческие буквы использованы для обозначения «истинных» генеральных значений соответствующих неизвестных. Эксперимент, содержащий конечное число опытов, позволяет только получить выборочные оценки для коэффициентов уравнения $y = b_0 + b_1x_1 + \dots + b_kx_k$. Их точность и надежность зависят от свойств выборки и нуждаются в статистической проверке. А пока займемся вычислением оценок коэффициентов. Их можно вычислить по простой формуле

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

Воспользуемся этой формулой для подсчета коэффициентов b_1 и b_2

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

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

Благодаря кодированию факторов расчет коэффициентов превратился в простую арифметическую процедуру. Для подсчета коэффициента b_1 используется вектор-столбец x_1 , а для b_2 – столбец x_2 . Остается неясным, как найти b_0 . Если наше уравнение $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$ справедливо, то оно верно и для средних арифметических значений переменных: $\bar{y} = b_0 + b_1\bar{x}_1 + b_2\bar{x}_2$. Но в силу свойства симметрии $\bar{x}_1 = \bar{x}_2 = 0$. Следовательно, $\bar{y} = b_0$. Мы показали, что b_0 есть среднее арифметическое значение параметра оптимизации. Чтобы его получить, необходимо сложить все y и разделить на число опытов. Чтобы привести эту процедуру в соответствие с формулой для вычисления коэффициентов, в матрицу планирования удобно ввести вектор-столбец фиктивной переменной x_0 , которая принимает во всех опытах значение +1. Это было уже учтено в записи формулы, где j принимало значения от 0 до k .

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

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2.$$

Коэффициенты при независимых переменных указывают на силу влияния факторов. Чем больше численная величина коэффициента, тем большее влияние оказывает фактор. Если коэффициент имеет знак плюс, то с увеличением значения фактора параметр оптимизации увеличивается, а если минус, то уменьшается. Величина коэффициента соответствует вкладу данного фактора в величину параметра оптимизации при переходе фактора с нулевого уровня на верхний или нижний.

Иногда удобно оценивать вклад фактора при переходе от нижнего к верхнему уровню. Вклад, определенный таким образом называется эффектом фактора (иногда его называют основным или главным эффектом). Он численно равен удвоенному коэффициенту. Для качественных факторов, варьируемых на двух уровнях, основной уровень не имеет физического смысла. Поэтому понятие «эффект фактора» является здесь естественным.

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

варьирования процесс описывается линейной моделью. Существуют способы проверки пригодности линейной модели. А если модель нелинейна, как количественно оценить нелинейность, пользуясь полным факторным экспериментом?

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

Таблица – Матрица планирования эксперимента 2^2 с эффектом взаимодействия

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

Теперь модель выглядит следующим образом:

$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2$. Коэффициент x_{12} вычисляется обычным путем

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

Столбцы x_1 и x_2 задают планирование – по ним непосредственно определяются условия опытов, а столбцы x_0 и x_1x_2 служат только для расчета.

Обращаем ваше внимание на то, что при оптимизации мы стремимся сделать эффекты взаимодействия возможно меньшими. В задачах интерполяции, напротив, их выявление часто важно и интересно.

Покажем на примере еще один способ расчета коэффициентов, известный под названием метода Йетса. Все операции по расчету приведены в табл.

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

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

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

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

Однако сформулированные выше утверждения справедливы лишь в том случае, если модель включает только линейные эффекты и эффекты взаимодействия. Между тем существенными могут оказаться коэффициенты

при квадратах факторов, их кубах и т. п. Так, для случая существенных квадратичных членов в двухфакторном эксперименте модель можно записать так:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

необходимых опытов. Этим мы и займемся в следующей главе. Но прежде подведем итог сказанному.

Резюме

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

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

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

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

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

В задачах оптимизации выбирают подобласть, которая давала бы возможность реализовать шаговую процедуру движения к оптимуму. В задачах интерполяции интервал варьирования охватывает всю описываемую область.

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

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

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

Коэффициенты, вычисленные по результатам эксперимента, указывают на силу влияния факторов. Эффект фактора численно равен удвоенному коэффициенту. В тех случаях, когда эффект одного фактора зависит от уровня, на котором находится другой фактор, говорят о наличии эффекта взаимодействия двух факторов. Для его количественной оценки получают

столбец произведений этих факторов и обращаются с ним как с вектор-столбцом любого фактора.

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

В полном факторном эксперименте разность между числом опытов и числом коэффициентов велика. Возникает проблема уменьшения числа опытов. Этому вопросу посвящена следующая глава.

ДРОБНЫЙ ФАКТОРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Количество опытов в полном факторном эксперименте значительно превосходит число определяемых коэффициентов линейной модели. Другими словами, полный факторный, эксперимент обладает большой избыточностью опытов. Было бы заманчивым сократить их число за счет той информации, которая не очень существенна при построении линейных моделей. При этом нужно стремиться к тому, чтобы матрица планирования не лишилась своих оптимальных свойств. Сделать это не так просто, но все же возможно.

Минимизация числа опытов

Начнем с самого простого – полного факторного эксперимента 2^2 . Напишем еще раз эту хорошо нам известную матрицу (табл.).

Таблица – Полный факторный эксперимент 2^2

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

Пользуясь таким планированием, можно вычислить четыре коэффициента и представить результаты эксперимента в виде неполного квадратного уравнения

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

Если имеются основания считать, что в выбранных интервалах варьирования процесс может быть описан линейной моделью, то достаточно определить три коэффициента b_0, b_1, b_2 . Остается одна степень свободы. Употребим ее для минимизации числа опытов. При линейном приближении $b_{12} \rightarrow 0$ и вектор-столбец x_1x_2 можно использовать для нового фактора x_3 . Поставим этот фактор в скобках над взаимодействием x_1x_2 и посмотрим, каковы будут оценки коэффициентов. Здесь уже не будет тех отдельных оценок, которые мы имели в полном факторном эксперименте 2^k . Оценки смешаются следующим образом:

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

Мы постулируем линейную модель, и, следовательно, все парные взаимодействия незначимы. Главное, мы нашли средство минимизировать число опытов: вместо восьми опытов для изучения трех факторов оказывается можно поставить четыре! При этом матрица планирования не теряет своих оптимальных свойств (ортогональность, ротатабельность и т. п.). Найденное правило можно сформулировать так: чтобы сократить число опытов, нужно новому фактору присвоить вектор-столбец матрицы, принадлежащий взаимодействию, которым можно пренебречь. Тогда значение нового фактора в условиях опытов определяется знаками этого столбца.

Эти матрицы предлагаются взамен полного факторного эксперимента 2^3 , требующего, как вы знаете, восьми опытов. Каким бы из них вы воспользовались?

Матрица № 1

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	y

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

Матрица № 2

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

Матрица № 3

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

Проверим свойства матрицы № 1. Каждый вектор-столбец матрицы, кроме первого, содержит равное число +1 и -1. Это означает, что выполняется условие:

$$\sum_{j=1}^4 x_{ji} = 0.$$

Теперь перемножим каждую пару вектор-столбцов и посмотрим, будет ли сумма произведений равна 0. К сожалению,

$$\sum_1^4 x_{2i}x_{3i} = -4$$

т. е. совершена какая-то ошибка в выборе матрицы. Постараемся ее найти. Вектор-столбцы для x_1 и x_2 не вызывают сомнения. Ведь эта часть матрицы – полный факторный эксперимент 2^2 . А как построен вектор-столбец для x_3 ? Элементы этого столбца обратны по знаку элементам соседнего столбца x_2 . Два этих столбца оказались взаимосвязанными: $x_3 = -x_2$. При этом $b_3 \rightarrow \beta_3 - \beta_2$, $b_2 \rightarrow \beta_2 - \beta_3$. В таком планировании не могут быть отдельно оценены основные эффекты. Значит, мы потеряли информацию о двух линейных коэффициентах нашей модели. Таким планированием воспользоваться невозможно.

Матрица № 2 содержит всего три опыта. Три опыта недостаточны для оценки четырех коэффициентов. Кроме того, ни одно из свойств, присущих полному факторному эксперименту, здесь не выполняется, за исключением нормировки. Матрица № 3 сохраняет все свойства полного факторного эксперимента. Она дает возможность оценить свободный член b_0 и три коэффициента при линейных членах, потому что для x_3 использован вектор-столбец x_1x_2 полного факторного эксперимента 2^2 .

Если мы в дополнение к столбцам матрицы №3 вычислим еще столбцы для произведений x_1x_3 и x_2x_3 то увидим, что элементы столбца x_1x_3 совпадут с элементами столбца x_2 , а элементы столбца x_2x_3 – с элементами столбца x_1 . Найденные нами коэффициенты будут оценками для совместных эффектов

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

Такое планирование нас вполне устраивает. Мы смешали эффекты взаимодействия с основными эффектами. (Но все основные эффекты оцениваются отдельно друг от друга!) Так как постулируется линейная модель, то предполагается, что эффекты взаимодействия близки к нулю, и поэтому $b_2 \cong \beta_2$, $b_1 \cong \beta_1$, $b_3 \cong \beta_3$.

Мы рассмотрели самый простой случай: матрицу из четырех опытов для трехфакторного планирования. С увеличением числа факторов вопрос о минимизации числа опытов превращается в довольно сложную задачу. Рассмотрим ее детально.

Дробная реплика

Поставив четыре опыта для оценки влияния трех факторов, мы воспользовались половиной полного факторного эксперимента 2^3 , или «полурепликой». Если бы мы x_3 приравняли к $-x_1x_2$, то получили бы вторую половину матрицы 2^3 . В этом случае:

$$b_2 \rightarrow \beta_2 - \beta_{13}, b_1 \rightarrow \beta_1 - \beta_{23}, b_3 \rightarrow \beta_3 - \beta_{12}.$$

При реализации обеих полуреplik можно получить отдельные оценки для линейных эффектов и эффектов взаимодействия, как и в полном факторном эксперименте 2^3 .

Объединение этих двух полуреplik и есть полный факторный - эксперимент 2^3 .

Матрица из восьми опытов для четырехфакторного планирования будет полурепликой от полного факторного эксперимента 2^4 , а для пятифакторного планирования — четверть-репликой от 2^5 . В последнем случае два линейных эффекта приравниваются к эффектам взаимодействия. Для обозначения дробных реplik, в которых p линейных эффектов приравнены к эффектам взаимодействия, удобно пользоваться условным обозначением 2^{k-p} . Так, полуреплика от 2^6 запишется в виде 2^{6-x} , а четверть-реплика от 2^5 — в виде 2^{5-2} .

Выбор полуреplik. Генерирующие соотношений и определяющие контрасты

При построении полуреplik 2^{3-1} существует всего две возможности: приравнять x_3 к x_1x_2 или к $-x_1x_2$. Поэтому есть только две полуреplik 2^{3-1} (табл.).

Таблица – Две полуреplik 2^{3-1}

Номер	I. $x_3 = x_1x_2$
-------	-------------------

ОПЫТА	x_1	x_2	x_3	$x_1x_2x_3$
1	+	+	+	+
2	-	-	+	+
3	+	-	-	+
4	-	+	-	+

Номер опыта	I. $x_3 = -x_1x_2$			
	x_1	x_2	x_3	$x_1x_2x_3$
1	+	+	-	-
2	-	-	-	-
3	+	-	+	-
4	-	+	+	-

Для произведения трех столбцов матрицы I выполняется соотношение: $+1 = x_1x_2x_3$, а матрицы II: $-1 = x_1x_2x_3$. Вы видите, что все знаки столбцов произведений одинаковы и в первом случае равны плюс единице, а во втором – минус единице.

Символическое обозначение произведения столбцов, равного $+1$ или -1 , называется *определяющим контрастом*. Контраст помогает определять смешанные эффекты. Для того чтобы определить, какой эффект смешан с данным, нужно помножить обе части определяющего контраста на столбец, соответствующий данному эффекту. Так, если $1 = x_1x_2x_3$, то для x_1 имеем

$$x_1 = x_1^2 x_2 x_3 = x_2 x_3,$$

так как всегда $x_i^2 = 1$.

Для x_2 находим

$$x_2 = x_1 x_2^2 x_3 = x_1 x_3.$$

Для x_3 находим

$$x_3 = x_1 x_2 x_3^2 = x_1 x_2.$$

Это значит, что коэффициенты линейного уравнения будут оценками

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

Соотношение, показывающее, с каким из эффектов смешан данный эффект, называется *генерирующим соотношением*.

Полуреплики, в которых основные эффекты смешаны с двух-факторными взаимодействиями, носят название планов с разрешающей способностью III (по наибольшему числу факторов в определяющем контрасте). Такие планы принято обозначать: 2^3 .

При выборе полуреплики 2^{4-1} возможно восемь решений:

1) $x_4 = x_1x_2$,

2) $x_4 = -x_1x_2$,

3) $x_4 = x_2x_3$,

4) $x_4 = -x_2x_3$,

5) $x_4 = x_1x_3$,

6) $x_4 = -x_1x_3$,

7) $x_4 = x_1x_2x_3$,

8) $x_4 = -x_1x_2x_3$.

Разрешающая способность этих полуреплик различна. Так, реплики 1–6 имеют по три фактора в определяющем контрасте, а 7–8 по четыре. Реплики 7 и 8 имеют максимальную разрешающую способность и называются главными. Разрешающая способность задается системой смешивания данной реплики. Она будет максимальной, если линейные эффекты смешаны с эффектами взаимодействия наибольшего возможного порядка.

При отсутствии априорной информации об эффектах взаимодействия экспериментатор стремится выбрать реплику с наибольшей разрешающей способностью, так как тройные взаимодействия обычно менее важны, чем парные. Если существует информация об эффектах взаимодействия, то она должна использоваться при выборе реплики.

Реплики, в которых нет ни одного главного эффекта, смешанного с другим главным эффектом или парным взаимодействием, а все парные взаимодействия смешаны друг с другом, носят название планов с разрешающей способностью IV (по наибольшему числу факторов в определяющем контрасте). Полуреплика, заданная определяющим контрастом $1 = +x_1x_2x_3x_4$ имеет только четные комбинации букв в каждой строке. Ее можно записать следующим образом, считая строку (1) четной:

(1), *ad, bd, ab, ac, cd, be, abcd.*

А полуреплика, заданная $1 = -x_1x_2x_3x_4$, имеет только нечетные комбинации

a, b, c, d, abd, acd, abc, bcd.

Такие полуреплики называют главными полурепликами, так как они обладают наибольшей разрешающей способностью.

Резюме

Дробные реплики находят широкое применение при получении линейных моделей. Целесообразность их применения возрастает с ростом количества факторов. При исследовании влияния 15 факторов можно в 2048 раз сократить число опытов, применяя реплику большой дробности (16 опытов вместо 32768). Эффективность применения дробных реплик зависит от удачного выбора системы смешивания линейных эффектов с эффектами взаимодействия, а также от умелой стратегии экспериментирования в случае значимости некоторых взаимодействий. Априорные сведения о взаимодействиях могут оказать большую услугу экспериментатору.

При построении дробных реплик используют следующее правило: для того чтобы сократить число опытов при введении в планирование нового фактора, нужно поместить этот фактор в вектор-столбец матрицы, принадлежащий взаимодействию, которым можно пренебречь.

Реплики, которые используются для сокращения опытов в 2^m раз, где $m=1, 2, 3, 4, \dots$, называются регулярными. Они пользуются большой

популярностью, так как позволяют производить расчет коэффициентов уравнения так же просто, как и в случае полного фактор.

ПРОВЕДЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Анкета для сбора априорной информации

Постановка задачи, выбор параметров оптимизации

1. Краткое описание процесса, объекта.
2. Формулировка цели исследования (если задач несколько – проранжировать их по степени важности).
3. Выбор параметров оптимизации (откликов). Заполните следующую таблицу, включив в нее все возможные

отклики

Номер отклика	Название	Размерность	Область определения	Точность	Примечание

4. Желаемый результат. Число и точность.
5. Какой результат будет считаться отличным, хорошим, удовлетворительным, неудовлетворительным.

|Выбор факторов

1. Список всех «подозреваемых»: факторов, которые могут влиять на процесс.
2. Список факторов, включаемых в реальный эксперимент.

Номер фактора	Название	Размерность	Область определения	Область интереса	Точность	Примечание

3. Существуют ли возможности установления значения фактора на любом заданном уровне?
4. Сохраняются ли заданные значения уровней в течение опыта?

5. Могут ли некоторые комбинации уровней факторов привести к остановке процесса (например, взрыв, нетехнологичность и т. д.)?

Число опытов

1. Желаемое число опытов, ограничения на число опытов.
2. Желаемый срок проведения исследования.
3. Примерная длительность одного опыта.
4. Стоимость д- затраты труда при проведении одного опыта серии.
5. Желаемое число уровней для одного фактора.
6. Возможность выполнения параллельных опытов и их желаемое число.
7. Возможность проведения параллельных измерений.
8. Желаемая стратегия проведения опытов (например, по одному в день и т. д.).

Учет априорной информации

1. Условия и результаты, достигнутые при изучении аналогичных процессов.
2. Результаты предварительного эксперимента и данные (литературные и собственные) о величине ошибки эксперимента.
3. Взаимодействия факторов.

В следующем параграфе приведен конкретный пример постановки задачи, в котором использованы некоторые части этой анкеты.

Реализация плана эксперимента

К проведению опытов необходимо тщательно подготовиться, собрать опытную установку, проверить и прокалибровать приборы, подготовить исходное сырье, составить специальный журнал. Журнал заранее оформляют в соответствии с методикой и планом опытов так, чтобы была ясна последовательность действий. Первую страницу можно посвятить выбору цели исследования и параметрам оптимизации, с указанием их размерностей. Желательно перечислить все параметры, которые могут служить характеристиками процесса и указать, какая между ними существует корреляция. Если же сведения о корреляции отсутствуют, целесообразно

подсчитать коэффициенты парной корреляции, проверить их значимость и выделить группу некоррелированных параметров. На второй странице перечислить факторы и поместить таблицу уровней факторов и интервалов варьирования. Не забудьте указать единицы измерения факторов! Для матрицы планирования удобно отвести разворот журнала, чтобы имелась возможность дополнить ее до расчетной матрицы, записать повторные опыты и примечания.

Чтобы облегчить работу лаборанта и исключить ошибки при выборе условий опыта, в рабочей матрице планирования целесообразно проставлять не только кодовые значения факторов, но и натуральные.

При составлении рабочей матрицы планирования необходимо оставить место для столбцов, в которых отмечаются даты постановки опытов и фамилии лаборантов, если опыты проводят несколько человек. Имея перед собой план опытов, необходимо подсчитать количество исходного сырья и заранее его подготовить. Желательно, чтобы сырье было однородное. Если требование однородности выполнить невозможно, нужно заблаговременно определить количество различных партий сырья и соответствующим образом разбить матрицу планирования на блоки. На этом вопросе мы далее остановимся подробно. Отдельные страницы нужно отвести для расчетов, которые необходимы для определения количеств всех компонентов реакции и т. п., а также для анализа результатов эксперимента. Все расчеты должны сохраняться до окончания работы.

4. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

4.1. Лабораторный практикум

Лабораторная работа № 1

Обработка экспериментальных данных. Интерполирование функций

Пусть функция $f(x)$ задана множеством своих значений для дискретного набора точек:

x_0	x_1	...	x_n
f_0	f_1	...	f_n

здесь $f_i = f(x_i)$.

Требуется найти интерполяционный многочлен $P(x) = P_n(x)$ степени не выше n , значения которого в узлах интерполяции x_i совпадают со значениями данной функции $P(x_i) = f_i$.

Интерполяционный полином Лагранжа

Для функции $f(x)$, заданной таблицей, построим интерполяционный многочлен $L_n(x)$, степень которого не выше n , в следующем виде:

$$L_n(x) = l_0(x) + l_1(x) + \dots + l_n(x),$$

где $l_i(x)$ – многочлен степени n , причем

$$l_i(x_k) = \begin{cases} f_i, & \text{если } i = k, \\ 0, & \text{если } i \neq k. \end{cases} \quad (1)$$

Многочлены $l_i(x)$ составим следующим образом

$$l_i(x) = c_i(x - x_0)(x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdot \dots \cdot (x - x_n),$$

где c_i – постоянный коэффициент, значение которого находится из первой части условия (1)

$$c_i = \frac{f_i}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \cdot \dots \cdot (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdot \dots \cdot (x_i - x_n)}.$$

Тогда интерполяционный многочлен Лагранжа имеет вид

$$L_n(x) = \sum_{i=1}^n f_i \frac{(x - x_0)(x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdot \dots \cdot (x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \cdot \dots \cdot (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdot \dots \cdot (x_i - x_n)}.$$

Интерполяционные формулы Ньютона

Формулы Ньютона предназначены для таблиц с равноотстоящими узлами, т.е. $h = x_{i+1} - x_i$, $i = \overline{1, n}$. Определим разности между значениями функции в узлах интерполяции. Конечная разность первого порядка имеет вид

$$\Delta f_i = f_{i+1} - f_i.$$

Конечная разность второго порядка:

$$\Delta^2 f_i = \Delta f_{i+1} - \Delta f_i = f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i.$$

Конечная разность n -го порядка вычисляется по формуле:

$$\Delta^k f_i = f_{i+k} - k \cdot f_{i+k-1} + \frac{k(k-1)}{2!} f_{i+k-2} - \dots + (-1)^k f_i.$$

Первая интерполяционная формула Ньютона используется для интерполирования и экстраполирования в точках x , близких к началу таблицы x_0 , и имеет следующий вид:

$$P_n(x) = f_0 + t \cdot \Delta f_0 + \frac{t(t-1)}{2!} \Delta^2 f_0 + \dots + \frac{t(t-1) \cdot \dots \cdot (t-n+1)}{n!} \Delta^n f_0,$$

где $t = \frac{x-x_0}{h}$, число n выбирают так, чтобы конечные разности n -го порядка были практически постоянными.

Когда значение аргумент находится ближе к концу отрезка интерполяции x_n , используется *вторая интерполяционная формула Ньютона*:

$$P_n(x) = f_n + q \cdot \Delta f_{n-1} + \frac{q(q+1)}{2!} \Delta^2 f_{n-2} + \dots + \frac{q(q+1) \cdot \dots \cdot (q+n-1)}{n!} \Delta^n f_0,$$

где $q = \frac{x-x_n}{h}$.

Сплайн-интерполяция

При большом количестве узлов интерполяции приходится использовать полиномы высокой степени. Можно этого избежать, разбив отрезок интерполяции на несколько частей и построив на каждой части свой интерполяционный многочлен. Существенный недостаток такого интерполирования состоит в том, что в точках сшивки разных интерполяционных полиномов их первая производная будет разрывной, поэтому для решения задачи кусочно-линейной интерполяции используют особый вид кусочно-полиномиальной интерполяции – сплайн-интерполяцию.

Сплайн – это функция, которая на каждом частичном отрезке интерполирования является алгебраическим многочленом, а на заданном отрезке непрерывна вместе с несколькими своими производными.

Пусть на отрезке $[a, b]$ задана упорядоченная система несовпадающих точек $x_k, k = \overline{0, n}$.

Определение. Сплайном $S_m(x)$ называется определенная на $[a, b]$ функция, принадлежащая классу $C_{[a,b]}^l$ l раз непрерывно дифференцируемых функций, такая, что на каждом промежутке $[x_{k-1}, x_k]$, $k = \overline{2, n}$ – это многочлен n -й степени. Разность $d:=m-l$ между степенью сплайна m и показателем его гладкости l называется *дефектом* сплайна.

Численные примеры. Реализация в пакете Matlab

Пример 1. Решить задачу интерполяции с помощью многочлена Лагранжа для функции $f(x) = \sin(x)$, заданной таблично на интервале $[0, 2\pi]$ при $n = 8$.

Примечание. В данном примере использован аналитический вид функции $f(x) = \sin(x)$ (только с целью сокращения листинга примера), для интерполяции используется табулированный ряд значений!!!

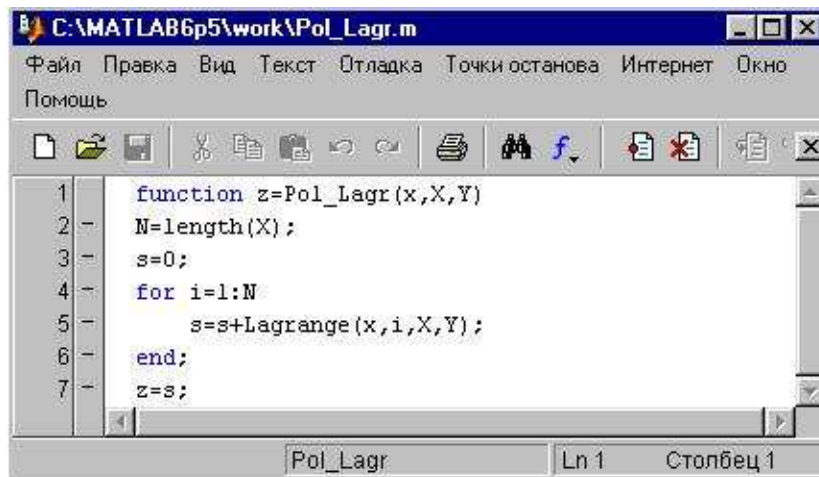
1. Создадим функцию, возвращающую значение многочлена $l_i(x)$.

```

1 function z=Lagrange(x,i,X,Y)
2 % x - абсцисса точки интерполяции
3 % i - номер полинома Лагранжа
4 % X - вектор, содержащий абсциссы узлов интерполяции
5 % Y - вектор, содержащий ординаты узлов интерполяции
6 N=length(X);
7 L=1;
8 for j=1:N
9     if not(j==i)
10        L=L*(x-X(j))/(X(i)-X(j));
11    end;
12 end;
13 z=L*Y(i);

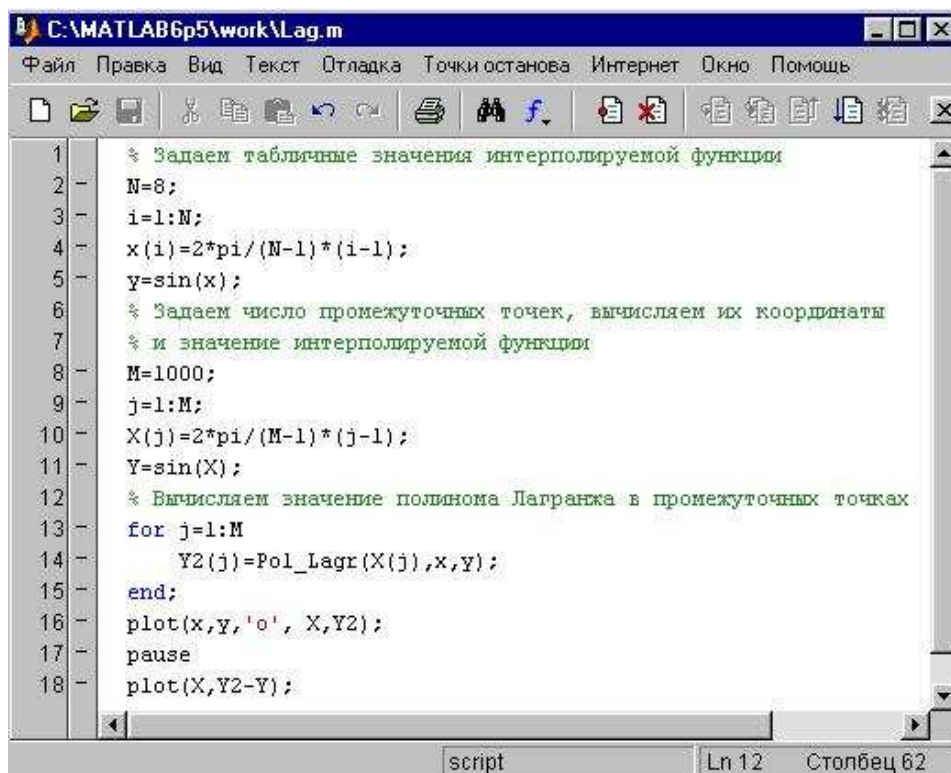
```

2. Создадим файл Pol_Lagr.m, возвращающий значение полинома Лагранжа.



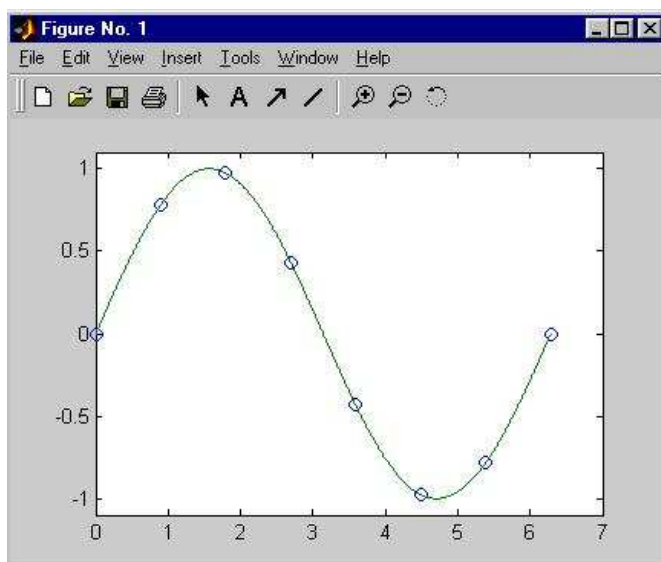
```
C:\MATLAB6p5\work\Pol_Lagr.m
Файл Правка Вид Текст Отладка Точки останова Интернет Окно
Помощь
function z=Pol_Lagr(x,X,Y)
N=length(X);
s=0;
for i=1:N
    s=s+Lagrange(x,i,X,Y);
end;
z=s;
```

3. В файле задается табличная функция, вычисляются ее точные значения, значения полинома Лагранжа.

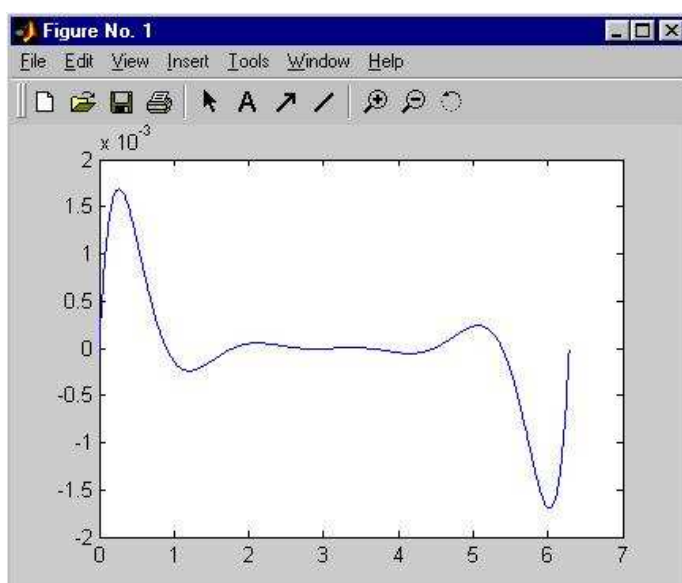


```
C:\MATLAB6p5\work\Lag.m
Файл Правка Вид Текст Отладка Точки останова Интернет Окно Помощь
% Задаем табличные значения интерполируемой функции
N=8;
i=1:N;
x(i)=2*pi/(N-1)*(i-1);
y=sin(x);
% Задаем число промежуточных точек, вычисляем их координаты
% и значение интерполируемой функции
M=1000;
j=1:M;
X(j)=2*pi/(M-1)*(j-1);
Y=sin(X);
% Вычисляем значение полинома Лагранжа в промежуточных точках
for j=1:M
    Y2(j)=Pol_Lagr(X(j),x,y);
end;
plot(x,y,'o', X,Y2);
pause
plot(X,Y2-Y);
```

Значения табличной функции и интерполированные значения функции представлены на графике.



Погрешность аппроксимации функции $f(x) = \sin(x)$ (в данном случае ее нетрудно получить, в отличие от табулированного ряда данных!!!) полиномом Лагранжа имеет вид, представленный на рисунке.



Пример 2. Решить задачу интерполяции для функции $f(x) = \sin(x)$, заданной таблично на интервале $[0, 2\pi]$ при $n = 8$ средствами пакета Matlab.

Для решения задачи одномерной интерполяции в пакете Matlab используется функция **interp1()**, которая реализует один из способов интерполирования:

‘nearest’ – интерполяция по соседним элементам,

‘linear’ – линейная интерполяция (применяется по умолчанию, если способ интерполирования не задан),

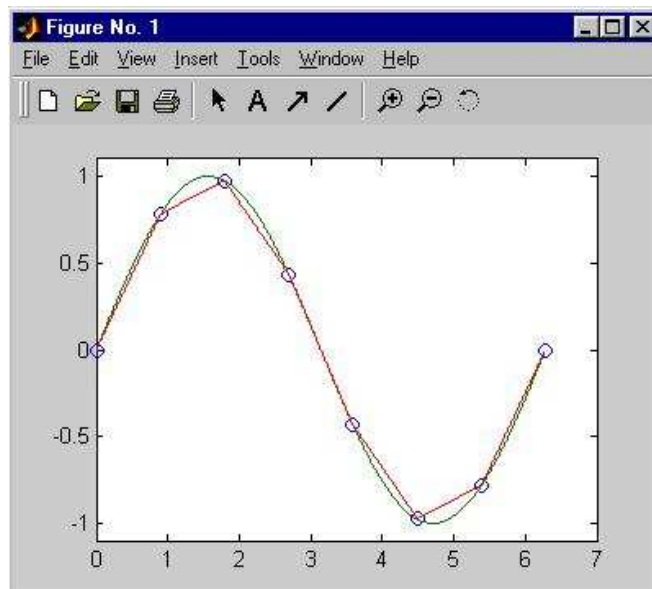
'spline' – интерполяция кубическими сплайнами,

'pchip' – интерполяция кубическими эрмитовыми сплайнами.

Синтаксис функции: **interp1(X,Y,xi,'type_interp')**, где X, Y – дискретные значения аргумента и функции, xi – вектор, задающий координаты абсцисс в промежуточных точках отрезка интерполирования, 'type_interp' – способ интерполирования.

```
C:\MATLAB6p5\work\int1.m
Файл Правка Вид Текст Отладка Точки останова Интернет Окно
Помощь
1 - N=8;
2 - i=1:N;
3 - x(i)=2*pi/(N-1)*(i-1);
4 - y=sin(x);
5 - M=1000;
6 - j=1:M;
7 - X(j)=2*pi/(M-1)*(j-1);
8 - Y=sin(X);
9 - Yi=interp1(x,y,X);
10 - plot(x,y,'o', X,Y,X,Yi);
script Ln 10 Столбец 25
```

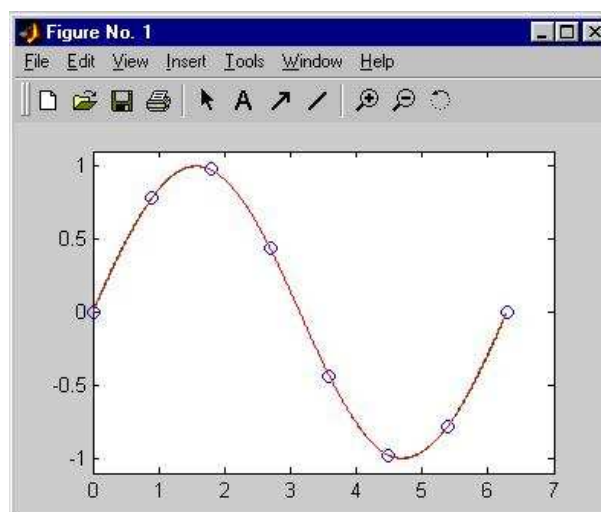
Исходные данные и результат линейной интерполяции представлены на рисунке.



Можно продемонстрировать решение задачи с помощью кубических сплайнов, используя другую встроенную функцию пакета Matlab – **spline()**.

```
C:\MATLAB6p5\work\spl.m
Файл Правка Вид Текст Отладка Точки останова Интернет Окно
Помощь
1 - N=8;
2 - i=1:N;
3 - x(i)=2*pi/(N-1)*(i-1);
4 - y=sin(x);
5 - M=1000;
6 - j=1:M;
7 - X(j)=2*pi/(M-1)*(j-1);
8 - Y=sin(X);
9 - yy=spline(x,y,X);
10 - plot(x,y,'o',X,yy,X,Y);
script Ln 10 Столбец 24
```

Визуализация исходных данных и результатов кубической сплайн-интерполяции показана на графике.



Пример 3. В Matlab можно также осуществить интерполяцию многомерных данных. Для интерполирования двумерных данных следует задать промежуточные узлы командой **meshgrid** и воспользоваться функцией **interp2**, которая реализует один из способов интерполирования:

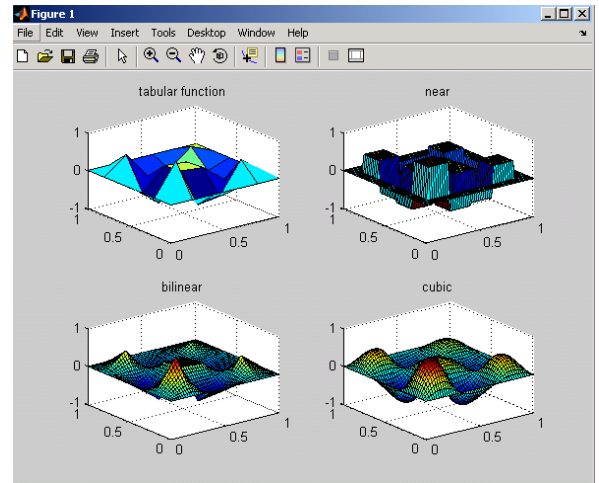
- ‘nearest’ – интерполяция по соседним элементам,
- ‘bilinear’ или ‘linear’ – билинейная интерполяция,
- ‘bicubic’ или ‘cubic’ – интерполяция бикубическими сплайнами,
- ‘spline’ – интерполяция кубическими сплайнами.

Пример использования функций, реализующих двумерную интерполяцию, показан на следующем листинге.


```

[X, Y]=meshgrid(0:0.2:1);
Z=sin(3*pi*X).*sin(3*pi*Y).*exp(-X.^2-Y.^2);
subplot(2,2,1)
surf(X, Y, Z)
title('tabular function')
[Xi, Yi]=meshgrid(0:0.02:1);
ZiNear=interp2(X, Y, Z, Xi, Yi, 'nearest');
ZiBiLin=interp2(X, Y, Z, Xi, Yi, 'bilinear');
ZiBiCub=interp2(X, Y, Z, Xi, Yi, 'bicubic');
subplot(2,2,2)
surf(Xi, Yi, ZiNear);
title('near');
subplot(2,2,3)
surf(Xi, Yi, ZiBiLin);
title('bilinear');
subplot(2,2,4)
surf(Xi, Yi, ZiBiCub);
title('cubic');

```



Задания к лабораторной работе

1. Дать геометрическое представление табулированной функции. Двумерную геометрическую реализацию обеспечить следующими функциями:

plot(x,y) – для построения точечного графика,

bar(x,y) и **line(x,y)** – для построения столбчатой диаграммы,

stem(x,y) – для построения точечного графика с визуализацией ординат значения функции

2. Применяя методы интерполяции решить прикладную задачу, соответствующую варианту задания. Использовать следующие способы аппроксимации:

а) полиномиальная интерполяция (многочлен Лагранжа или Ньютона),

б) встроенная функция пакета Matlab **interp1()** с различными способами интерполяции (по соседним элементам, линейную интерполяцию, кубическими сплайнами, кубическими эрмитовыми сплайнами),

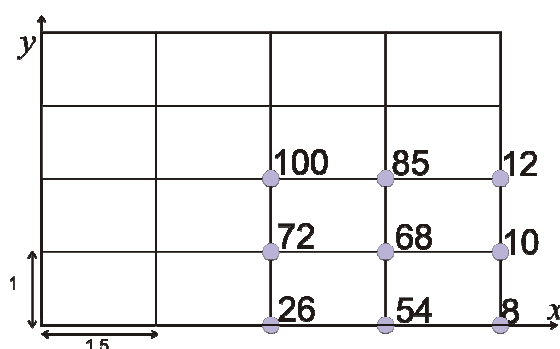
Исходя из эмпирического анализа данных и сравнительного анализа результатов всех видов интерполяции, сделать выводы.

Вариант 1

1. Найти непрерывный график зависимости изменения температуры в пригороде Лос-Анджелеса по заданным табличным данным и вычислить примерное значение температуры в 14 час. 30 мин.:

t , час.	13-00	14-00	15-00	16-00	17-00	18-00
T , °C	22	20	19	18	17	17

2. Экспериментальные данные распределения температуры (в усл.ед.) в некоторый момент времени на поверхности двумерной пластины представлены на рисунке (симметричное распределение). Используя возможности интерполирования многомерных данных дать графическую интерпретацию этим результатам. Координаты сетки определить исходя из размера единичных отрезков абсциссы и ординаты графика.

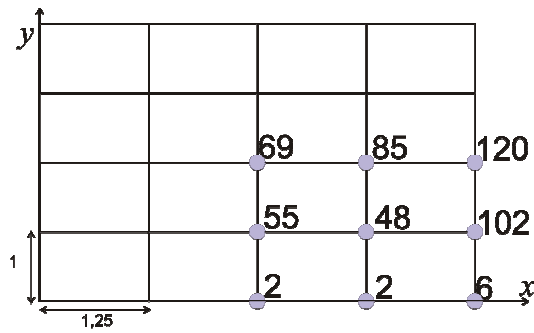


Вариант 2

1. Построить график зависимости значений коэффициентов внутреннего трения (вязкости) для водного раствора сахара (концентрация сахара 20%) при различных значениях температуры, найти значение коэффициента вязкости при значении температуры 32°C:

T , °C	0	10	20	30	40	50	60	80
$\eta \cdot 100$, $z/(cm \cdot c)$	3,804	2,652	1,96	1,504	1,193	0,97	0,808	0,59

2. При решении задачи упругого кручения призматических стержней получили следующий набор дискретных значений U – функции напряжений (симметричный набор данных):



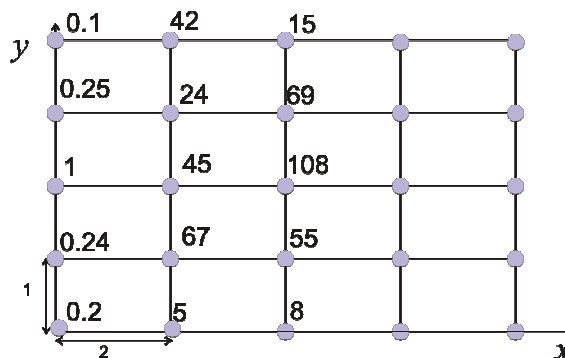
Используя возможности интерполирования многомерных данных дать графическую интерпретацию этим результатам. Координаты сетки определить исходя из размера единичных отрезков абсциссы и ординаты графика.

Вариант 3

1. Построить график зависимости температуры замерзания морской воды при различных значениях концентрации солей, найти значение температуры при значении концентрации 32%:

n, %	2	6	10	14	20	24	30	36	40
T, °C	0- 0,108	-0,320	-0,534	- 0,7486	- 1,0745	-1,294	-1,627	-1,967	-2,196

2. Экспериментальные данные распределения температуры (в усл.ед.) в некоторый момент времени на поверхности некоторой сплошной среды представлены на рисунке. Используя возможности интерполирования многомерных данных дать графическую интерпретацию этим результатам. Координаты сетки определить исходя из размера единичных отрезков абсциссы и ординаты графика.

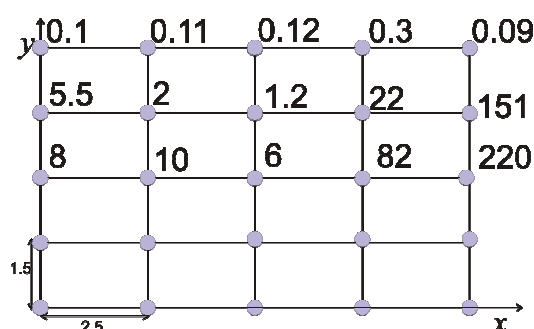


Вариант 4

1. Построить график зависимости плотности водных растворов серной кислоты при различных значениях температуры (для значения концентрации соли 20%), найти значение плотности при значении температуры 27°C:

$T, ^\circ\text{C}$	0	5	10	15	20	25	30	40
$\rho, \text{г/см}^3$	1,151	1,1481	1,1453	1,1424	1,1394	1,1365	1,1333	1,1275

2. При решении задачи определения потенциала U течения грунтовых вод под перемычкой получили следующий набор дискретных значений U (симметричный набор данных):



Используя возможности интерполирования многомерных данных дать графическую интерпретацию этим результатам. Координаты сетки определить исходя из размера единичных отрезков абсциссы и ординаты графика.

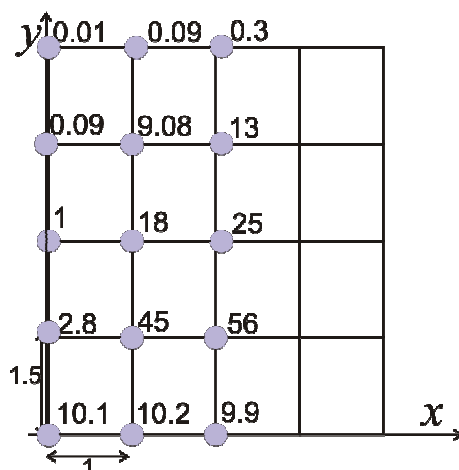
Вариант 5

1. Построить график зависимости плотности водных растворов серной кислоты при различных значениях концентрации солей (при температуре 20°C), найти значение температуры при значении концентрации 21%:

$\rho, \text{г/см}^3$	0,9982	1,0317	1,0661	1,1020	1,1394	1,2023	1,2185	1,2515	1,3028
$n, \%$	0	5	10	15	20	28	30	34	40

2. Экспериментальные данные распределения температуры (в усл.ед.) в некоторый момент времени на поверхности двумерной пластины представлены на рисунке (симметричное распределение). Используя возможности интерполирования многомерных данных дать графическую интерпретацию

этим результатам. Координаты сетки определить исходя из размера единичных отрезков абсциссы и ординаты графика.

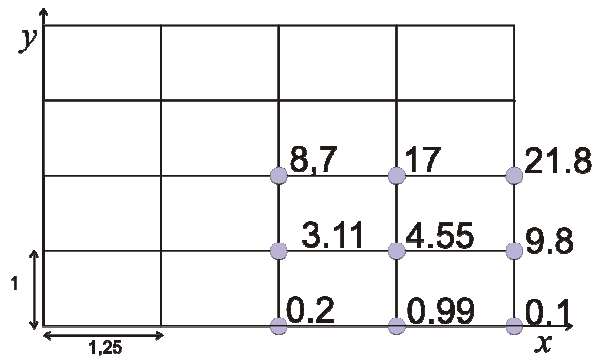


Вариант 6

1. Построить график зависимости точки кипения воды при различных барометрических давлениях, найти значение температуры при значении давления 726 мм рт. ст.:

H , мм рт. ст.	680	697	704	721	739	745	761	777	799
T , °C	96,916	97,596	97,872	98,582	99,218	99,443	100,037	100,62	100,441

2. При решении задачи упругого кручения призматических стержней получили следующий набор дискретных значений U – функции напряжений (симметричный набор данных):



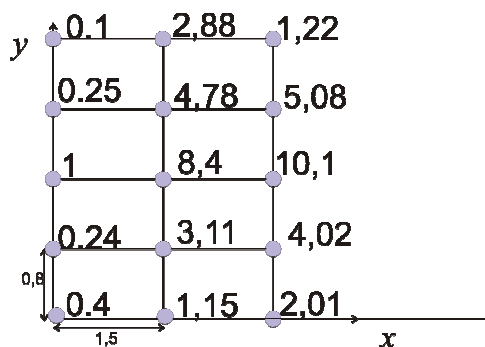
Используя возможности интерполирования многомерных данных дать графическую интерпретацию этим результатам. Координаты сетки определить исходя из размера единичных отрезков абсциссы и ординаты графика.

Вариант 7

1. Нормальная термопара Ле-Шателье (Pt-Pt10%Rh) рекомендована международным комитетом как основной прибор при точных измерениях температур. Однако на практике термопара не применяется и служит для контроля показаний рабочих термопар. Построить график зависимости значений электродвижущей силы E от температуры, найти значение э.д.с. при значении температуры 950°C :

$T, ^{\circ}\text{C}$	0	200	400	600	800	1000	1200	1400	1600
$E, \text{мВ}$	0	1,44	2,26	5,24	7,34	9,61	11,96	14,36	16,73

2. Экспериментальные данные распределения температуры (в усл.ед.) в некоторый момент времени на поверхности трубы представлены на рисунке. Используя возможности интерполирования многомерных данных дать графическую интерпретацию этим результатам. Координаты сетки определить исходя из размера единичных отрезков абсциссы и ординаты графика.

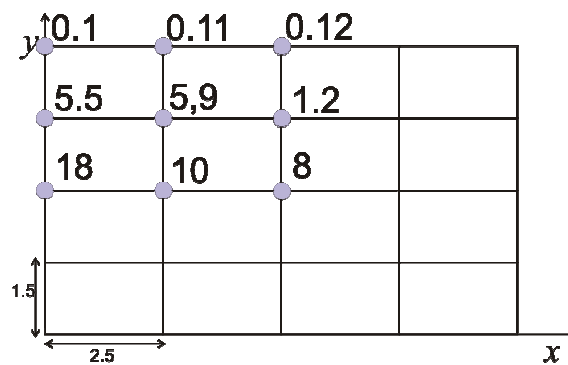


Вариант 8

1. Построить график зависимости значений коэффициентов внутреннего трения (вязкости) для водного раствора этилового спирта (концентрация спирта 20%) при различных значениях температуры, найти значение коэффициента вязкости при значении температуры 43°C:

$T, ^\circ\text{C}$	0	10	20	30	40	50	60	80
$\eta \cdot 100, \text{z}/(\text{cm} \cdot \text{c})$	6,319	1,306	1,004	0,801	0,653	0,549	0,47	0,356

2. При решении задачи определения потенциала U течения грунтовых вод под перемычкой получили следующий набор дискретных значений U (симметричный набор данных):



Используя возможности интерполирования многомерных данных дать графическую интерпретацию этим результатам. Координаты сетки определить исходя из размера единичных отрезков абсциссы и ординаты графика.

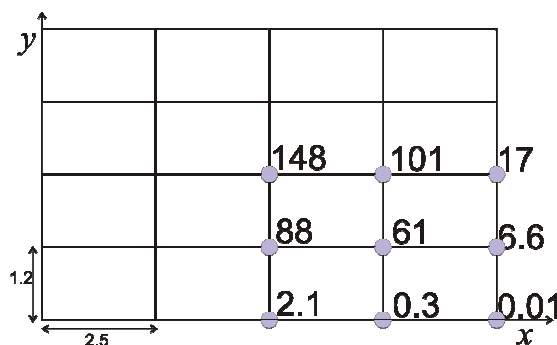
Вариант 9

1. Для анализа покупательской активности в некотором супермаркете зафиксирована численность покупателей в различное время суток. Оценить число покупателей в 15-30, построить непрерывный график зависимости.

t	8-00	9-00	10-00	12-00	14-00	16-00	17-30	18-00	20-00
N	33	52	78	126	115	108	136	158	85

2. Экспериментальные данные распределения температуры (в усл.ед.) в некоторый момент времени на поверхности двумерной пластины представлены на рисунке (симметричное распределение). Используя возможности интерполирования многомерных данных дать графическую интерпретацию

этим результатам. Координаты сетки определить исходя из размера единичных отрезков абсциссы и ординаты графика.

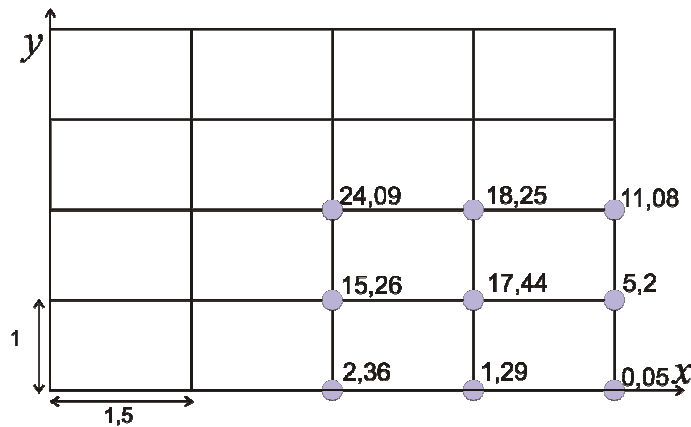


Вариант 10

1. Построить график зависимости точки кипения воды при различных барометрических давлениях, найти значение температуры при значении давления 742 мм рт. ст.:

H , мм рт. ст.	680	697	710	721	739	745	750	777	799
T , °C	96,916	97,596	98,108	98,582	99,218	99,443	99,63	100,62	100,441

2. Экспериментальные данные распределения температуры (в усл.ед.) в некоторый момент времени на поверхности двумерной пластины представлены на рисунке (симметричное распределение). Используя возможности интерполирования многомерных данных дать графическую интерпретацию этим результатам. Координаты сетки определить исходя из размера единичных отрезков абсциссы и ординаты графика.



Лабораторная работа №2
ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ
МЕТОДОМ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Пусть в результате измерений получена таблица некоторой зависимости $f(x)$:

x	x_1	x_2	...	x_n
$F(x)$	y_1	y_2	...	y_n

Требуется найти формулу, выражающую данную зависимость аналитически. Один из подходов состоит в построении интерполяционного многочлена, значения которого в узлах интерполяции x_i совпадают со значениями данной функции $f(x_i) = f_i$.

Если значения функции $f(x)$ известны с некоторой погрешностью, то требование совпадения значений в узлах интерполяции не оправдано, поскольку оно не означает совпадение характеров исходной и интерполирующей функции. Поэтому поставим задачу следующим образом – найти функцию вида

$$y = F(x),$$

которая в точках x_1, x_2, \dots, x_n принимает значения, близкие к табличным значениям y_1, y_2, \dots, y_n .

Предположим, что приближающая функция $F(x)$ в точках x_1, x_2, \dots, x_n имеет значения $\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n$. Тогда нужно найти функцию $F(x)$ определенного вида так, чтобы сумма квадратов

$$(y_1 - \bar{y}_1)^2 + (y_2 - \bar{y}_2)^2 + \dots + (y_n - \bar{y}_n)^2 \tag{1}$$

была наименьшей.

Нахождение приближающей функции в виде линейной

Пусть приближающая функция имеет вид

$$F(x) = ax + b, \tag{2}$$

где a, b – параметры.

Составим сумму вида (1) для этого случая:

$$\Phi(a, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)^2 \rightarrow \min \quad (3)$$

Функция $\Phi(a, b)$ является неотрицательной квадратичной, поэтому в некоторой области она имеет единственную точку минимума (a^*, b^*) , удовлетворяющую условиям:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial b} = 0,$$

т.е. системе уравнений:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)x_i = 0, \\ \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b) = 0. \end{cases} \quad (4)$$

Разделив каждое уравнение на n , получаем

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 \right) \cdot a + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i \right) \cdot b = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i y_i, \\ \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i \right) \cdot a + b = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n y_i. \end{cases} \quad (5)$$

Вычислив значения параметров a, b , получаем конкретный вид функции (2).

В зависимости от характера табличных данных, изучаемого с помощью их изображения в соответствующей системе координат, при обработке экспериментальных данных часто используют иные семейства двухпараметрических функций. Существует возможность с помощью подходящего преобразования переменных получить линейную зависимость и использовать метод (5) для следующих семейств функций:

Функция $y = f(x)$	Линеаризованная форма, $Y = ax + b$	Замена переменных и постоянных
$y = \frac{a}{x} + b$	$y = a \cdot \frac{1}{x} + b$	$X = \frac{1}{x}, Y = y$
$y = \frac{d}{x+c}$	$y = -\frac{1}{c} \cdot xy + \frac{d}{c}$	$X = xy, Y = y, c = -\frac{1}{a}, d = -\frac{b}{a}$
$y = \frac{1}{ax+b}$	$\frac{1}{y} = ax + b$	$X = x, Y = \frac{1}{y}$
$y = \frac{x}{ax+b}$	$\frac{1}{y} = a \cdot \frac{1}{x} + b$	$X = \frac{1}{x}, Y = \frac{1}{y}$
$y = a \cdot \ln(x) + b$	$y = a \cdot \ln(x) + b$	$X = \ln(x), Y = y$
$y = c \cdot e^{ax}$	$\ln(y) = ax + \ln(c)$	$X = x, Y = \ln(y), c = e^b$

$y = c \cdot x^a$	$\ln(y) = a \cdot \ln(x) +$	$X = \ln(x), Y = \ln(y), c = e^b$
$y = \frac{1}{(ax+b)^2}$	$\frac{1}{\sqrt{y}} = ax + b$	$X = x, Y = \frac{1}{\sqrt{y}}$
$y = \frac{c \cdot x}{e^{dx}}$	$\ln\left(\frac{y}{x}\right) = -dx + \ln(c)$	$X = x, Y = \ln\left(\frac{y}{x}\right), c = e^b, d = -a$
$y = \frac{1}{1+c \cdot e^{ax}}$	$\ln\left(\frac{1}{y} - 1\right) = ax + \ln(c)$	$X = x, Y = \ln\left(\frac{1}{y} - 1\right), c = e^b$

Нахождение приближающей функции в виде квадратного трехчлена

Приближающая функция имеет вид:

$$F(x) = ax^2 + bx + c, \quad (6)$$

где a, b, c – параметры.

Составим сумму вида (1) как функцию $\Phi(a, b)$ для этого случая:

$$\Phi(a, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i^2 - bx_i - c)^2 \rightarrow \min \quad (7)$$

Функция $\Phi(a, b)$ является неотрицательной квадратичной, поэтому в некоторой области она имеет единственную точку минимума (a^*, b^*) , удовлетворяющую условиям:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial b} = 0,$$

т.е. системе уравнений:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i^2 - bx_i - c)x_i^2 = 0, \\ \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i^2 - bx_i - c)x_i = 0, \\ \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i^2 - bx_i - c) = 0. \end{cases}$$

Разделив каждое уравнение на n , имеем

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^4\right) \cdot a + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3\right) \cdot b + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2\right) \cdot c = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i, \\ \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3\right) \cdot a + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2\right) \cdot b + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i\right) \cdot c = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i y_i, \\ \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2\right) \cdot a + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i\right) \cdot b + c = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n y_i. \end{cases}$$

Решив систему относительно неизвестных a , b , c , находим значения параметров приближающей функции (6).

Численные примеры. Реализация в пакете Matlab

Пример 1. Даны табличные значения квадратичной зависимости. Найти коэффициенты квадратичной аппроксимирующей функции (6).

x	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y	-0.28	0.42	2.11	4.82	7.75	12.43	12.16	15.41	23.07	31.06	36.68

```

1 - N=11;
2 - i=1:N;
3 - x(i)=i-1;
4 - y=[-0.28 0.42 2.11 4.82 7.75 12.43 12.16 15.41 23.07 31.06 36.68];
5 - A(1,1)=1/N*sum(x.^4);
6 - A(1,2)=1/N*sum(x.^3);
7 - A(1,3)=1/N*sum(x.^2);
8 - A(2,1)=A(1,2);
9 - A(2,2)=A(1,3);
10 - A(2,3)=1/N*sum(x);
11 - A(3,1)=A(2,2);
12 - A(3,2)=A(2,3);
13 - A(3,3)=1;
14 - B(1,1)=1/N*dot(x.^2,y);
15 - B(2,1)=1/N*dot(x,y);
16 - B(3,1)=1/N*sum(y);
17 - C=A^-1*B
18 - F=inline('a*x.^2+b*x+c','a','b','c','x');
19 - tmp(i)=feval(F,C(1,1),C(2,1),C(3,1),x(i));
20 - plot(x,tmp,x,y,'o');

```

В результате работы программы получаем значение параметров приближающей функции (6).

```

>> pol

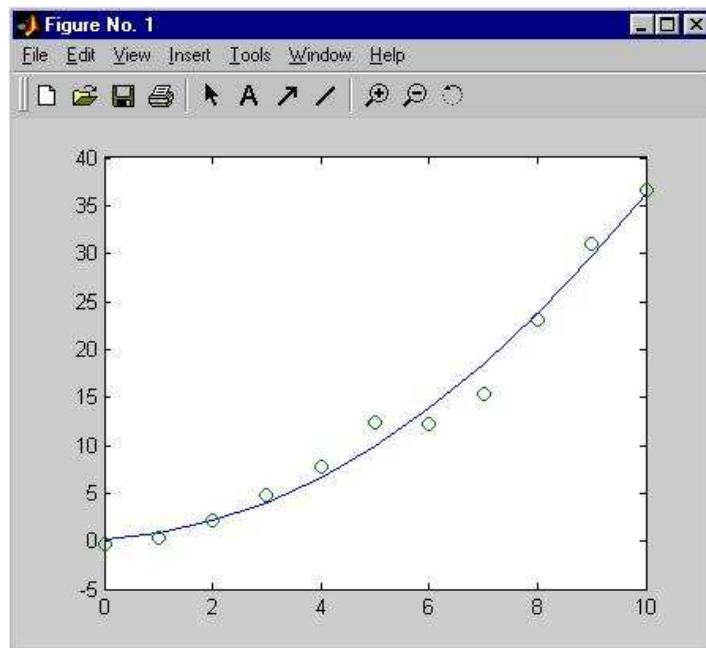
C =

    0.3320
    0.2788
    0.2264

>>

```

На графике представлены исходные данные и аппроксимирующая функция.



Пример 2. Используя табличные значения примера 1, найти параметры квадратичной аппроксимирующей функции (6) с помощью встроенной функции Matlab.

Для решения задачи обобщенной нелинейной регрессии в пакете Matlab имеется функция **lsqnonlin()**, возвращающая решение задачи нахождения точки минимума функции:

$$\min_x (f(x)) = f_1^2(x) + f_2^2(x) + \dots + f_n^2(x) + L,$$

где $f(x)$ – вектор-функция, x – столбец искоемых переменных, L – искомая константа.

1. Создадим файл F77.m, содержащий функцию, которая возвращает значение вектор-функции $f(x)$.

```

function z=F77(C,vx,vy)
k=1:length(vx);
z(k)=vy(k)-(C(1)*vx.^2+C(2)*vx+C(3));

```

2. Вычислим значения аппроксимирующей функции с помощью функции **lsqnonlin()** и визуализируем исходные данные и аппроксимирующую функцию.

```

C:\MATLAB6p5\work\poll.m
Файл Правка Вид Текст Отладка Точки останова Интернет Окно Помощь
1 - N=11;
2 - i=1:N;
3 - vx(i)=i-1;
4 - vy=[-0.28 0.42 2.11 4.82 7.75 12.43 12.16 15.41 23.07 31.06 36.68];
5 - z=[0 0 0];
6 - C=lsqnonlin('F77',z,[],[],[],vx,vy)
7 - F=inline('a*x.^2+b*x+c','a','b','c','x');
8 - X=vx(1):0.1:vx(length(vx));
9 - Y=feval(F,C(1),C(2),C(3),X);
10 - plot(X,Y,vx,vy,'o');
script Ln 1 Столбец 1

```

Параметры приближающей функции:

```

MATLAB
Файл Правка Вид Интернет Окно Помощь
Текущий каталог: C:\MATLAB
>> poll
Optimization terminated successfully:
  Relative function value changing by less than OPTIONS.TolFun

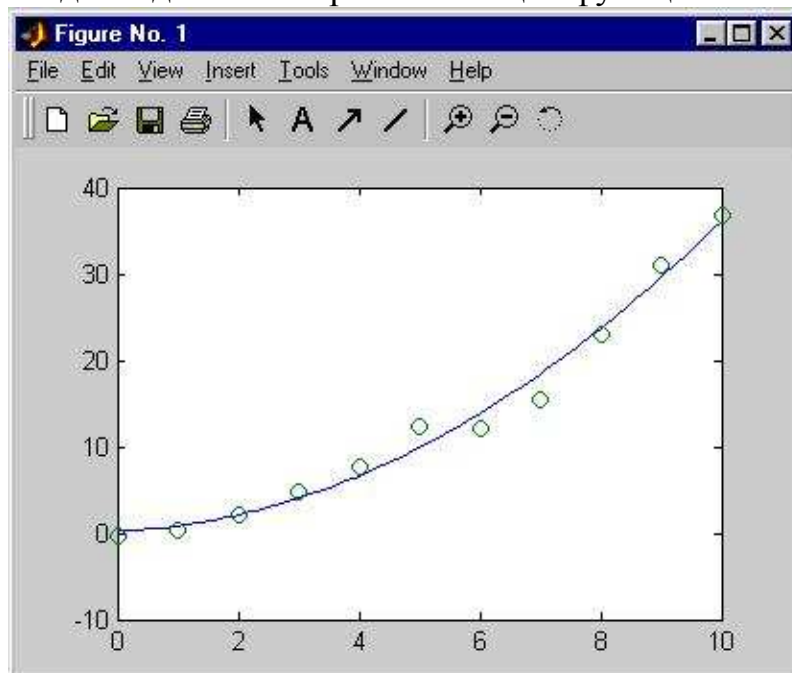
C =

    0.3320    0.2788    0.2264

>> |
Пуск

```

График исходных данных и приближающей функции:



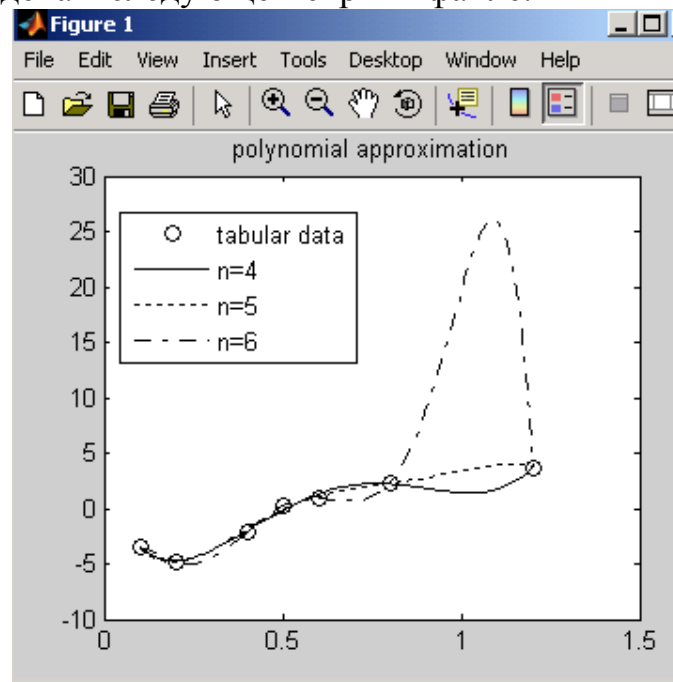
Пример 3. Приблизить функцию, заданную таблицей полиномами четвертой, пятой и шестой степени и вывести график, отражающий характер приближений.

x_i	0.1	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1.2
y_i	-3.5	-4.8	-2.1	0.2	0.9	2.3	3.7

Приближение табличной функции одной переменной полиномом заданного порядка по методу наименьших квадратов может быть реализовано в пакете Matlab с помощью функции **polyfit(x,y,n)**, в которой первые два входных аргумента являются векторами со значениями абсцисс и ординат табличной функции, а третий – требуемой степенью полинома.

Реализация поставленной задачи приведена в следующем скрипт-файле.

```
x=[0.1 0.2 0.4 0.5 0.6 0.8 1.2];
y=[-3.5 -4.8 -2.1 0.2 0.9 2.3 3.7];
plot(x, y, 'ko')
p4=polyfit(x, y, 4);
p5=polyfit(x, y, 5);
p6=polyfit(x, y, 6);
t=0.1:0.01:1.2;
P4=polyval(p4, t);
P5=polyval(p5, t);
P6=polyval(p6, t);
hold on
plot(t, P4, 'k-', t, P5, 'k:', t, P6, 'k-.')
legend('tabular data', 'n=4', 'n=5', 'n=6', 0)
title('polynomial approximation')
```



Индивидуальные задания

1. Для данного набора экспериментальных данных выполнить аппроксимацию, используя метод наименьших квадратов и, соответственно, следующие приближения:

а) линейной функцией,

б) нелинейной функцией, допускающей линеаризацию. Осуществить замену переменных, получить линеаризованную форму.

(Примеры описания таких функций и соответствующих преобразований см. в таблице – описание к лабораторной работе). Построить графики исходных данных и полученных аппроксимирующих функций. Рассчитать значение среднеквадратического отклонения в каждом из случаев. Сделать вывод о качестве и наилучшем виде аппроксимации.

2. Найти аппроксимирующую функцию средствами пакета Matlab (выполняя линеаризацию с помощью функции **lsqnonlin()** и используя приближение полиномами разных степеней – **polyfit(x,y,n)**). Сравнить с

результатом, полученным методом наименьших квадратов (п. 1 задания к лабораторной работе).

3. Оформить отчет по лабораторной работе.

Вариант 1

В таблице приведены данные зависимости удельной намагниченности I ферромагнитных тел в состоянии насыщения от различных значений температуры для электролитического железа Fe:

$t, ^\circ\text{C}$	-188	105	526	700	772
I	221	213	179	120	24

Вариант 2

Нормальная термопара Ле-Шателье (Pt-Pt10%Rh) рекомендована международным комитетом как основной прибор при точных измерениях температур. В таблице приведены данные зависимости значений электродвижущей силы E от температуры.

$t, ^\circ\text{C}$	100	300	700	1200	1600
$E, \text{мВ}$	1,435	3,240	7,339	13,155	17,922

Вариант 3

Нормальная термопара Ле-Шателье (Pt-Pt10%Rh) рекомендована международным комитетом как основной прибор при точных измерениях температур. В таблице приведены данные зависимости значений электродвижущей силы E от температуры.

$t, ^\circ\text{C}$	0	200	400	1100	1500
$E, \text{мВ}$	0,112	1,605	3,44	10,993	17,007

Вариант 4

В таблице приведены данные зависимости плотности водных растворов серной кислоты при различных значениях концентрации солей (при температуре 40°C).

$\rho, \text{г/см}^3$	0,9986	1,0371	1,1202	1,3555	1,4816
$n, \%$	1	7	19	42	60

Вариант 5

В таблице приведены данные зависимости удельной намагниченности I ферромагнитных тел в состоянии насыщения от различных значений температуры для кобальта Co:

$t, ^\circ\text{C}$	17	470	804	971	1149
I	166	151	125	99	18

Вариант 6

В таблице приведены данные зависимости коэффициента внутреннего трения (вязкости) для воды, свободной от примесей, от температуры.

t, °C	0	15	45	65	75
$\eta \cdot 100$ г/см*с	1,788	1,14	0,595	0,435	0.379

Вариант 7

В таблице приведены данные зависимости коэффициента внутреннего трения (вязкости) для водного раствора этилового спирта (80%) от температуры.

t, °C	5	26	50	60	75
$\eta \cdot 100$ г/см*с	3,125	1,784	0,968	0,789	0.6

Вариант 8

В таблице приведены данные зависимости плотности водных растворов серной кислоты при различных значениях концентрации солей (при температуре 0°C).

$\rho, \text{г/см}^3$	0,9999	1,0660	1,1351	1,2661	1,4618
n, %	0	9	19	36	55

Вариант 9

В таблице приведены данные зависимости коэффициента внутреннего трения (вязкости) для водного раствора сахара (20%) от температуры.

t, °C	0	35	50	65	80
$\eta \cdot 100$ г/см*с	3,804	1,331	0,97	0,742	0.590

Вариант 10

В таблице приведены данные зависимости удельной намагниченности I ферромагнитных тел в состоянии насыщения от различных значений температуры для железной магнитной руды Fe₃O₄:

t, °C	-253	110	497	557	578
I	99	88	46	26	0

Лабораторная работа №3 ПРИМЕНЕНИЕ ОПЕРАЦИЙ ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ И ИНТЕГРИРОВАНИЯ В ОБРАБОТКЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАнных

Пусть в результате измерений получена таблица некоторой зависимости $f(x)$:

x	x_1	x_2	...	x_n
F(x)	y_1	y_2	...	y_n

Также положим, что найдена формула, выражающая данную зависимость аналитически, например, методом наименьших квадратов.

1. Численное дифференцирование функций, заданных таблицей

Пусть функция $f(x)$ задана таблично в конечном числе точек отрезка $[a, b]$. Требуется определить значение производной в некоторой точке отрезка $[a, b]$.

Выбрав $(n+1)$ узлов, заменим функцию $f(x)$ интерполяционным многочленом $P_n(x)$. Тогда производная от этого многочлена применяется для приближенного представления производной функции $f(x)$:

$$f'(x) \approx P_n'(x).$$

Как правило, формулы численного дифференцирования применяют для нахождения производных в узлах x_i . Дифференцирование интерполяционных многочленов Ньютона в точке x_0 приводит к формуле:

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{h} \left(\Delta f_0 - \frac{1}{2} \Delta^2 f_0 + \frac{1}{3} \Delta^3 f_0 - \dots + \frac{(-1)^{n-1}}{n} \Delta^n f_0 \right), \quad (1)$$

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{h} \left(\Delta f_{-1} + \frac{1}{2} \Delta^2 f_{-2} + \frac{1}{3} \Delta^3 f_{-3} - \dots + \frac{1}{n} \Delta^n f_{-n} \right). \quad (2)$$

Формула (1) применяется для начальных строк таблицы, формула (2) – для последних строк.

Для середины таблицы применяют формулы центрированной разности второго порядка точности по h .

$$f'(x_0) \approx \frac{f_1 - f_{-1}}{2h},$$
$$f''(x_0) \approx \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2}, \quad (7)$$

$$f'''(x_0) \approx \frac{f_2 - f_1 + 2f_{-1} - f_{-2}}{2h^3},$$

где $f_k = f(x_0 + kh)$, $k = -2, -1, 0, 1, 2$.

2. Численное интегрирование

Численное интегрирование методом прямоугольников

Геометрический смысл определенного интеграла

$$F = \int_a^b f(x) dx$$

– площадь фигуры, ограниченной графиком функции $f(x)$ и прямыми:

$$x = a, \quad x = b.$$

Разделим отрезок $[a, b]$ на n равных отрезков длиной Δx :

$$\Delta x = \frac{b - a}{n}.$$

Координата правого конца i -го отрезка определяется по формуле

$$x_i = x_0 + i \cdot \Delta x,$$

где $x_0 = a$, $i = \overline{0, n}$.

Простейшая оценка площади кривой может быть получена как сумма площадей прямоугольников, одна из сторон которого равна длине отрезка $[x_i, x_{i+1}]$, а высота равна значению $f(x_i)$ – метод левых прямоугольников (рис. 1), или $f(x_{i+1})$ – метод правых прямоугольников (рис. 2).

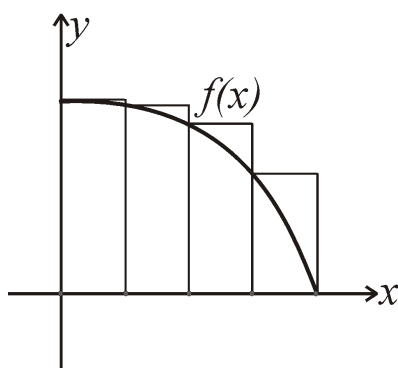


Рис. 1. – Геометрическая интерпретация метода левых прямоугольников.

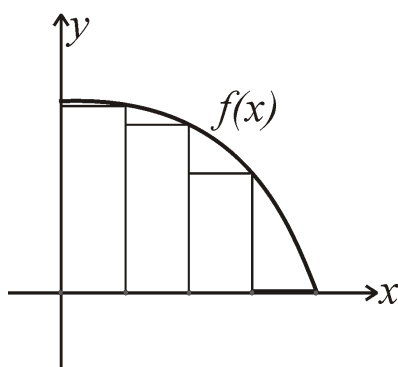


Рис. 2. – Геометрическая интерпретация метода правых прямоугольников.

Тогда для левых прямоугольников определенный интеграл вычисляется по формуле

$$F_L = \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \cdot \Delta x, \quad (3)$$

а для правых прямоугольников – по формуле

$$F_R = \sum_{i=1}^n f(x_i) \cdot \Delta x. \quad (4)$$

Погрешность метода левых и правых прямоугольников пропорциональна n^{-1} .

Численное интегрирование методом трапеций

Заменим функцию на каждом интервале $[x_i, x_{i+1}]$, $i = \overline{0, n-1}$ отрезком прямой, проходящей через точки $(x_i, f(x_i))$ и $(x_{i+1}, f(x_{i+1}))$. Тогда фигура, ограниченная графиком функции и прямыми $x = x_i$, $x = x_{i+1}$, является трапецией.

Тогда определенный интеграл определяется как сумма площадей всех трапеций по формуле:

$$F_n = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} (f(x_{i+1}) + f(x_i)) \cdot \Delta x = \left[\frac{1}{2} f(a) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{1}{2} f(b) \right] \cdot \Delta x. \quad (5)$$

Полная погрешность формулы трапеций на отрезке $[a, b]$ по порядку величины равна $O(n^{-2})$.

Численное интегрирование методом Симпсона

Искомый определенный интеграл находится как площадь всех параболических сегментов:

$$F_n = \frac{1}{3} [f(a) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \dots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(b)] \cdot \Delta x.$$

В формуле Симпсона число n должно быть четным.

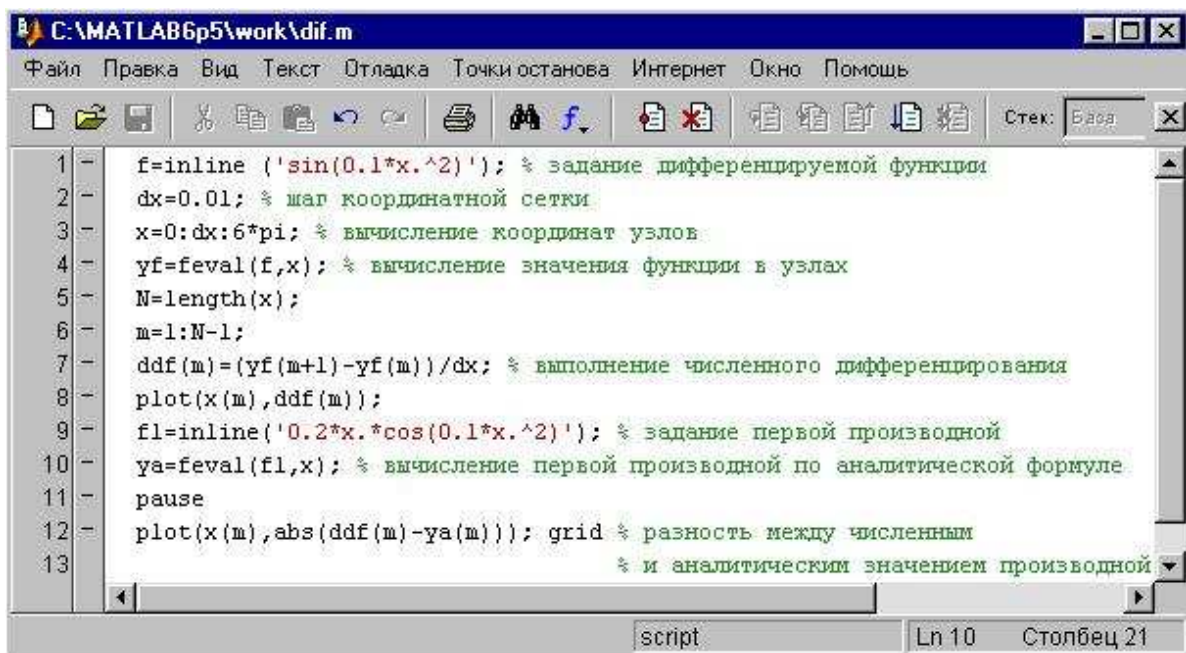
Полная погрешность формулы Симпсона на отрезке $[a, b]$ по порядку величины составляет $O(n^{-4})$.

3. Численные примеры. Реализация в Matlab

Пример 1. Вычислить значение производной функции на отрезке $[0, 6\pi]$.

$$f(x) = \sin(0.1 \cdot x^2) \quad (*)$$

Листинг программы, численно дифференцирующей аналитически заданную функцию (*), представлен в следующем окне.

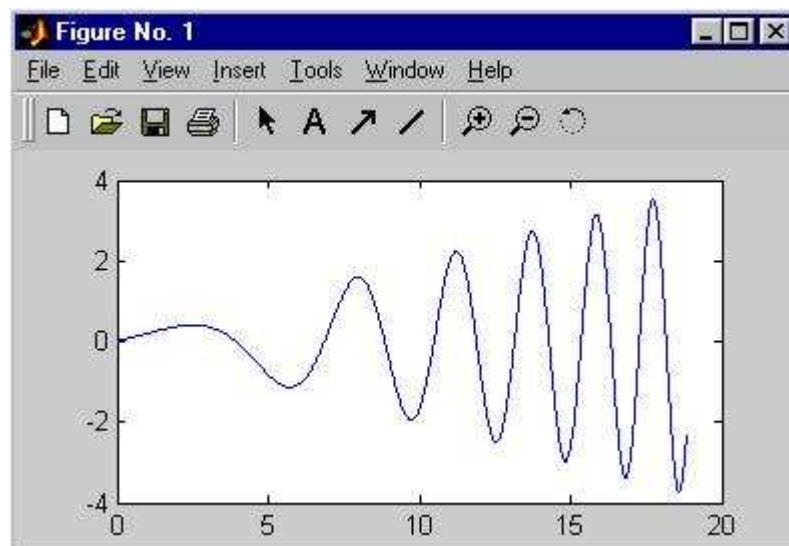


```
C:\MATLAB6p5\work\dif.m
Файл  Правка  Вид  Текст  Отладка  Точки останова  Интернет  Окно  Помощь
[Icons]
Стек: Базис

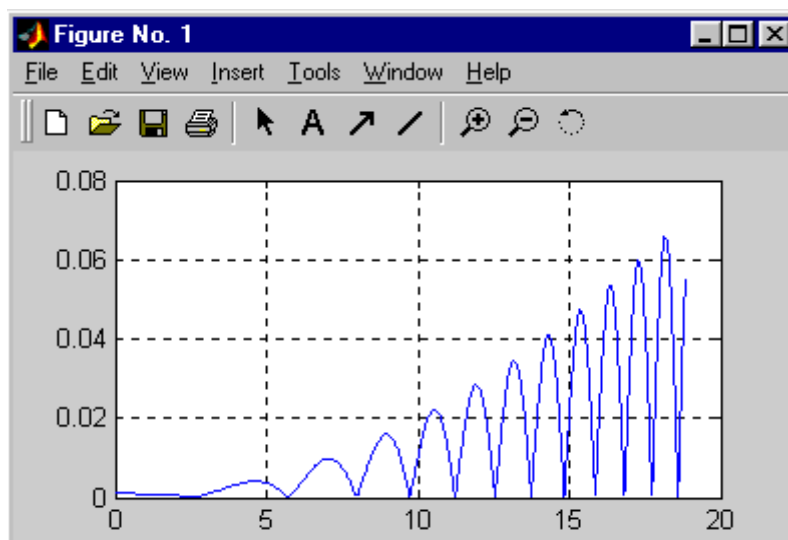
1 - f=inline('sin(0.1*x.^2)'); % задание дифференцируемой функции
2 - dx=0.01; % шаг координатной сетки
3 - x=0:dx:6*pi; % вычисление координат узлов
4 - yf=feval(f,x); % вычисление значения функции в узлах
5 - N=length(x);
6 - m=1:N-1;
7 - ddf(m)=(yf(m+1)-yf(m))/dx; % выполнение численного дифференцирования
8 - plot(x(m),ddf(m));
9 - fl=inline('0.2*x.*cos(0.1*x.^2)'); % задание первой производной
10 - ya=feval(fl,x); % вычисление первой производной по аналитической формуле
11 - pause
12 - plot(x(m),abs(ddf(m)-ya(m))); grid % разность между численным
13 - % и аналитическим значением производной

script Ln 10 Столбец 21
```

Визуализация производной функции (*) и разность между численными и аналитическими значениями первой производной с шагом сетки $dx = 0.01$ изображены на рис. 3, 4, а разность между численными и аналитическими значениями производной с шагом сетки $dx = 0.0001$ на рис. 5.



Puc. 3.



Puc. 4.

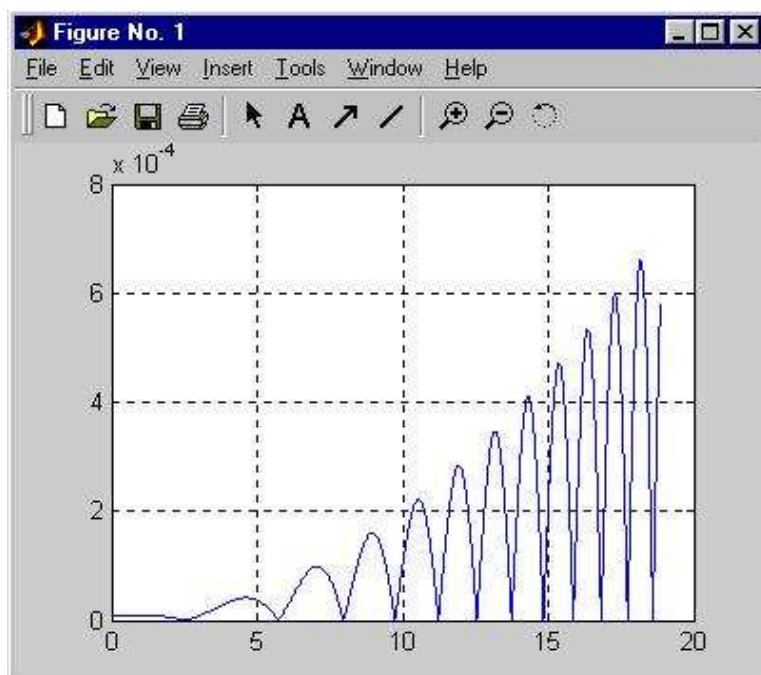


Рис. 5.

Для аппроксимации производных конечными разностями в пакете Matlab существует функция **diff()**:

$\text{diff}(x)$ – возвращает конечные разности, вычисленные по смежным элементам вектора x ;

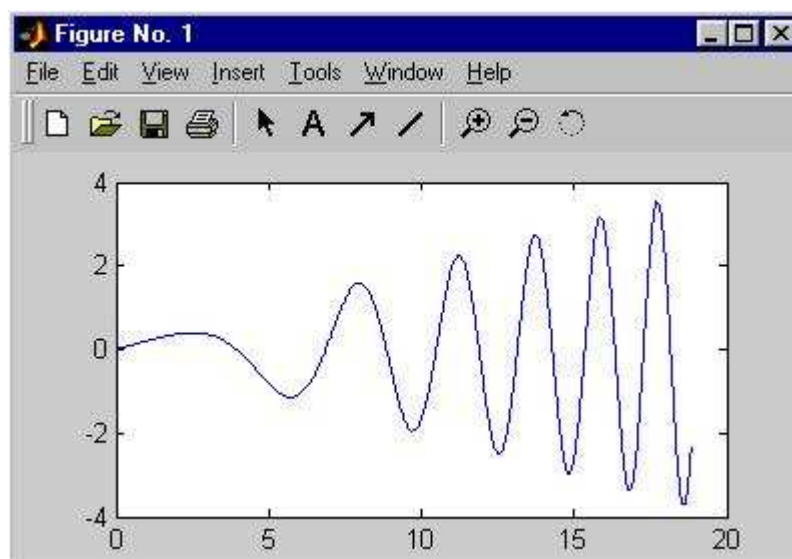
$\text{diff}(x, n)$ – возвращает конечные разности n -го порядка, вычисленные по смежным элементам вектора x .

Пример 2. Вычислить значение производной функции (*) на отрезке $[0, 6\pi]$ с использованием соответствующей функции Matlab.

Программа, вычисляющая значение производной с помощью конечных разностей представлена в окне.

```
1 - f=inline('sin(0.1*x.^2)'); % задание дифференцируемой функции
2 - dx=0.01; % шаг координатной сетки
3 - x=0:dx:6*pi; % вычисление координат узлов
4 - yf=feval(f,x); % вычисление значения функции в узлах
5 - ddf1=diff(yf)/dx;
6 - N=length(x);
7 - m=1:N-1;
8 - plot(x(m),ddf1(m));
```

Визуализация первой производной функции (*), полученной с помощью функции $\text{diff}()$.

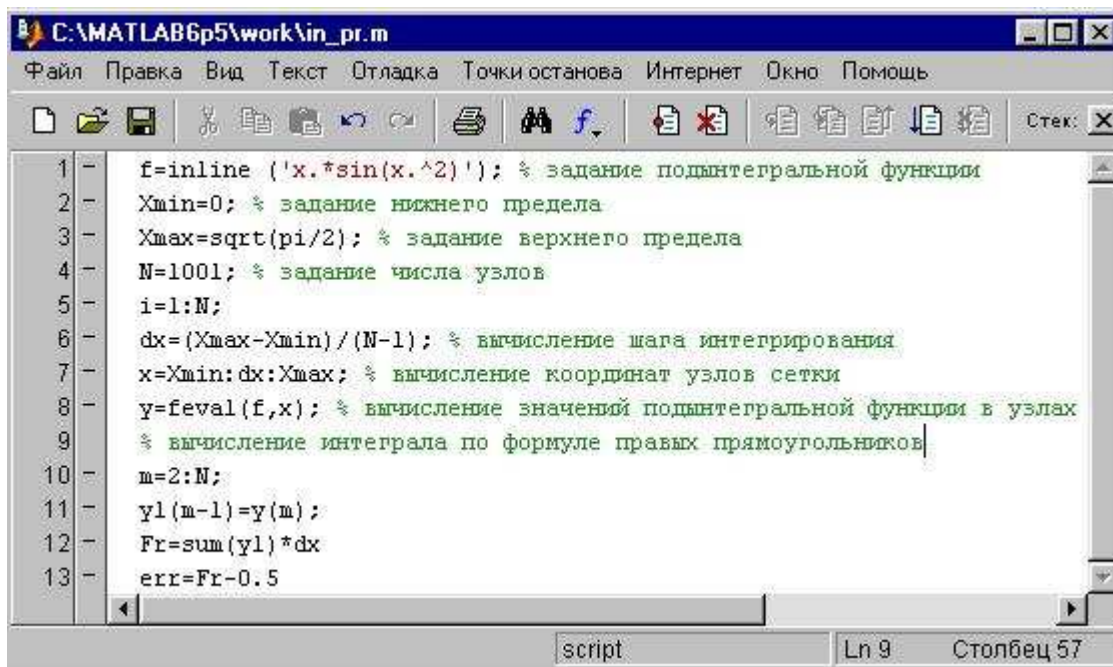


Пример 3. Вычислить значение определенного интеграла

$$\int_0^{\sqrt{\frac{\pi}{2}}} x \cdot \sin(x^2) dx$$

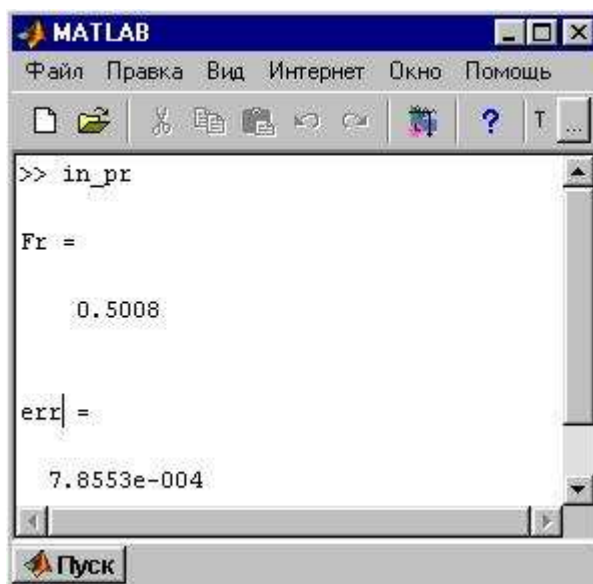
(**)

методом правых прямоугольников.



```
1 - f=inline ('x.*sin(x.^2)'); % задание подынтегральной функции
2 - Xmin=0; % задание нижнего предела
3 - Xmax=sqrt(pi/2); % задание верхнего предела
4 - N=1001; % задание числа узлов
5 - i=1:N;
6 - dx=(Xmax-Xmin)/(N-1); % вычисление шага интегрирования
7 - x=Xmin:dx:Xmax; % вычисление координат узлов сетки
8 - y=feval(f,x); % вычисление значений подынтегральной функции в узлах
9 - % вычисление интеграла по формуле правых прямоугольников
10 - m=2:N;
11 - y1(m-1)=y(m);
12 - Fr=sum(y1)*dx
13 - err=Fr-0.5
```

В результате работы программы получаем значение интеграла **Fr** и значение ошибки **err** между точным значением интеграла и значением, полученным методом правых прямоугольников.



```
>> in_pr

Fr =

    0.5008

err =

    7.8553e-004
```

Для вычисления значений определенных интегралов в пакете Matlab применяются функции **quad ()**, **quad1 ()**, **trapz ()**.

Функция **quad (fun, a, b)** – возвращает значение интеграла от функции *fun* на отрезке $[a, b]$, при вычислении используется метод Симпсона.

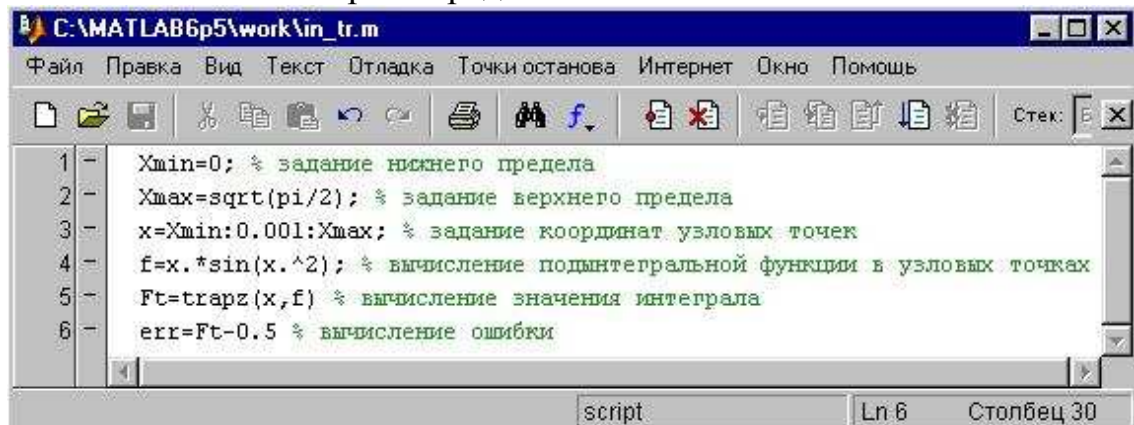
Функция **quad1 (fun, a, b)** – возвращает значение интеграла от функции *fun* на отрезке $[a, b]$, используя для вычисления метод Лоббато.

Функция **trapz (y)** – возвращает значение определенного интеграла в предположении, что $x = 1:length(y)$.

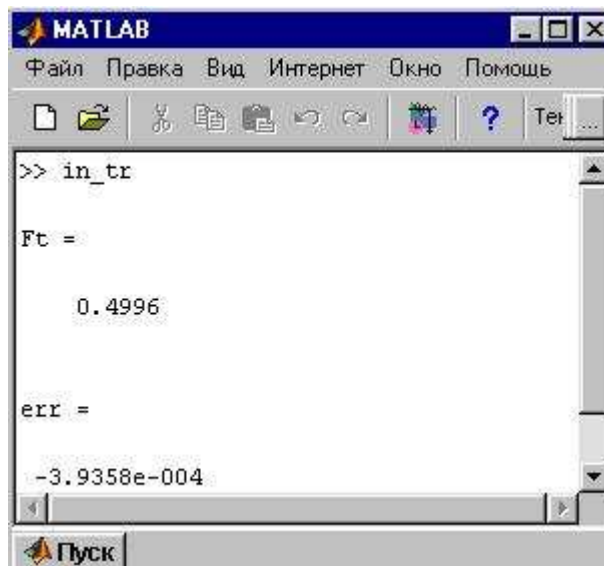
Функция **trapz** (x, y) – возвращает значение определенного интеграла на отрезке $[x(1), x(n)]$.

Пример 6. Вычислить значение определенного интеграла (***) с помощью встроенной функции Matlab trapz ().

Результат вычисления интеграла представлен в окне:



```
C:\MATLAB6p5\work\in_tr.m
Файл Правка Вид Текст Отладка Точки останова Интернет Окно Помощь
1 - Xmin=0; % задание нижнего предела
2 - Xmax=sqrt(pi/2); % задание верхнего предела
3 - x=Xmin:0.001:Xmax; % задание координат узловых точек
4 - f=x.*sin(x.^2); % вычисление подынтегральной функции в узловых точках
5 - Ft=trapz(x,f) % вычисление значения интеграла
6 - err=Ft-0.5 % вычисление ошибки
script Ln 6 Столбец 30
```



```
MATLAB
Файл Правка Вид Интернет Окно Помощь
>> in_tr
Ft =
    0.4996
err =
-3.9358e-004
Пуск
```

*Индивидуальные задания**

4. Найти и графически отобразить графики первой и второй производных по аргументу, используя встроенные возможности пакета (либо самостоятельно запрограммировать формулы численного дифференцирования). Сравнить данные с аналитическим выражением первой и второй производных, используя результаты лабораторной работы №2, т.е. выполнив аппроксимацию экспериментальных данных некоторой аналитической зависимостью. Провести анализ полученных результатов в зависимости от шага численного дифференцирования.

5. Используя результаты лабораторной работы №2, вычислить и графически отобразить функциональную зависимость $I(x) = \int_0^x f(x)dx$. Провести

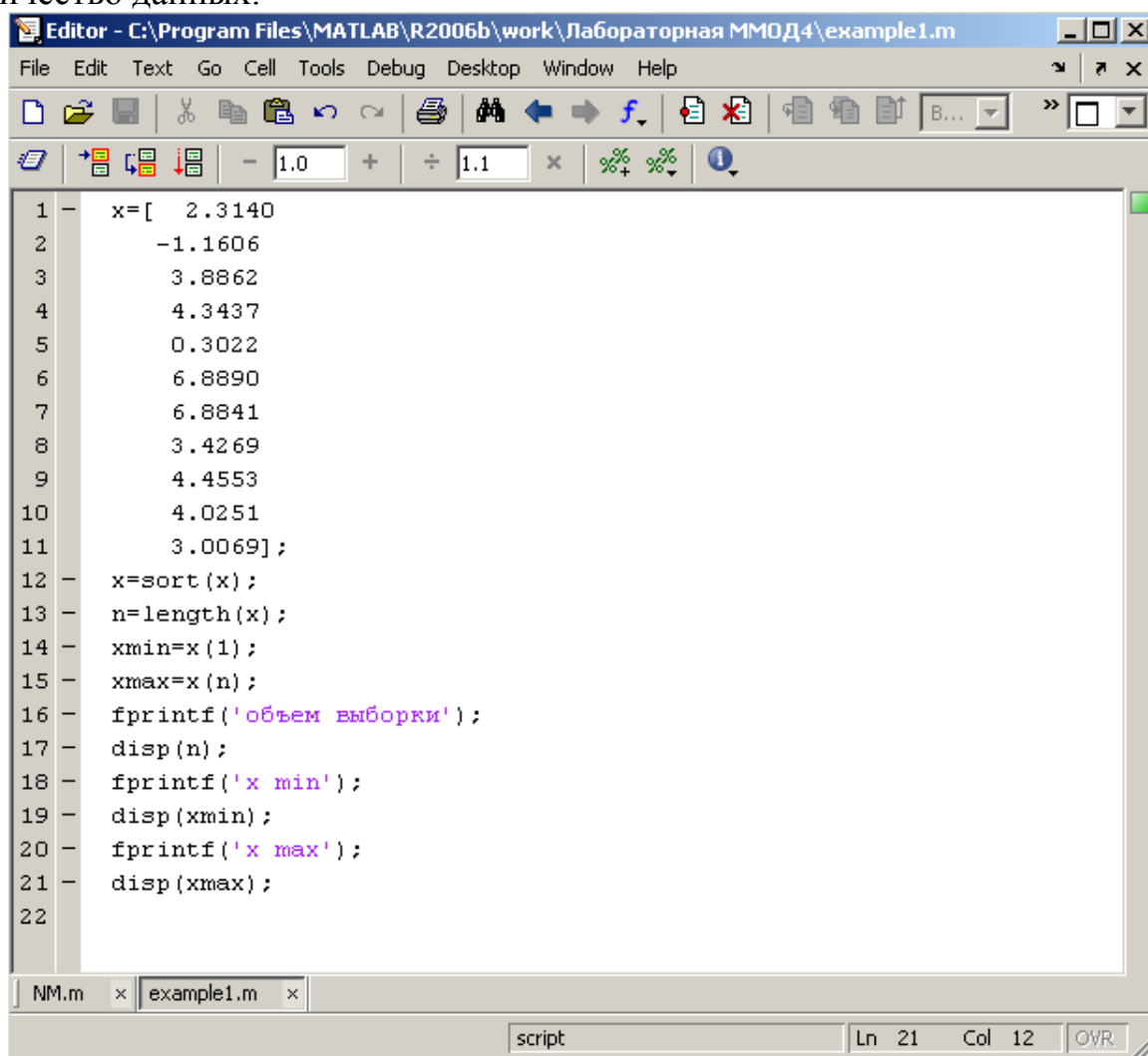
анализ расчетов при различных значениях n и точек разбиения отрезка интегрирования.

6. Оформить отчет по лабораторной работе.

*Исходные данные – см. лабораторную работу №2.

Лабораторная работа № 4 СТАТИСТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА МАССИВА ДАННЫХ

Предлагается n измерений одной и той же случайной величины X . Введем данные в программу и обозначим их идентификатором x . После ввода переформирует их в вектор-столбец. Рассортируем данные в порядке возрастания, найдем минимальное и максимальное значения. Определим количество данных.



```
Editor - C:\Program Files\MATLAB\R2006b\work\Лабораторная ММОД4\example1.m
File Edit Text Go Cell Tools Debug Desktop Window Help
+ [Icons]
- 1.0 + 1.1 x [Icons]
1 - x=[ 2.3140
2 -     -1.1606
3 -     3.8862
4 -     4.3437
5 -     0.3022
6 -     6.8890
7 -     6.8841
8 -     3.4269
9 -     4.4553
10 -    4.0251
11 -    3.0069];
12 - x=sort(x);
13 - n=length(x);
14 - xmin=x(1);
15 - xmax=x(n);
16 - fprintf('объем выборки');
17 - disp(n);
18 - fprintf('x min');
19 - disp(xmin);
20 - fprintf('x max');
21 - disp(xmax);
22
NM.m x example1.m x
script Ln 21 Col 12 OVR
```

Результат на экране:

```
объем выборки      11
x min      -1.1606
x max      6.8890
```

Вычислим параметры нашей выборки, используя встроенные функции Matlab:

```
21 - disp(xmax);
22 - %параметры выборки
23 - f=n-1;
24 - Mx=mean(x);
25 - Dx=var(x);
26 - Sx=std(x);
27 - fprintf('число степеней свободы выборки');
28 - disp(f);
29 - fprintf('Мат ожидание');
30 - disp(Mx);
31 - fprintf('Дисперсия');
32 - disp(Dx);
33 - fprintf('Среднеквадратичное отклонение');
34 - disp(Sx);
35
36
```

Результат на экране:

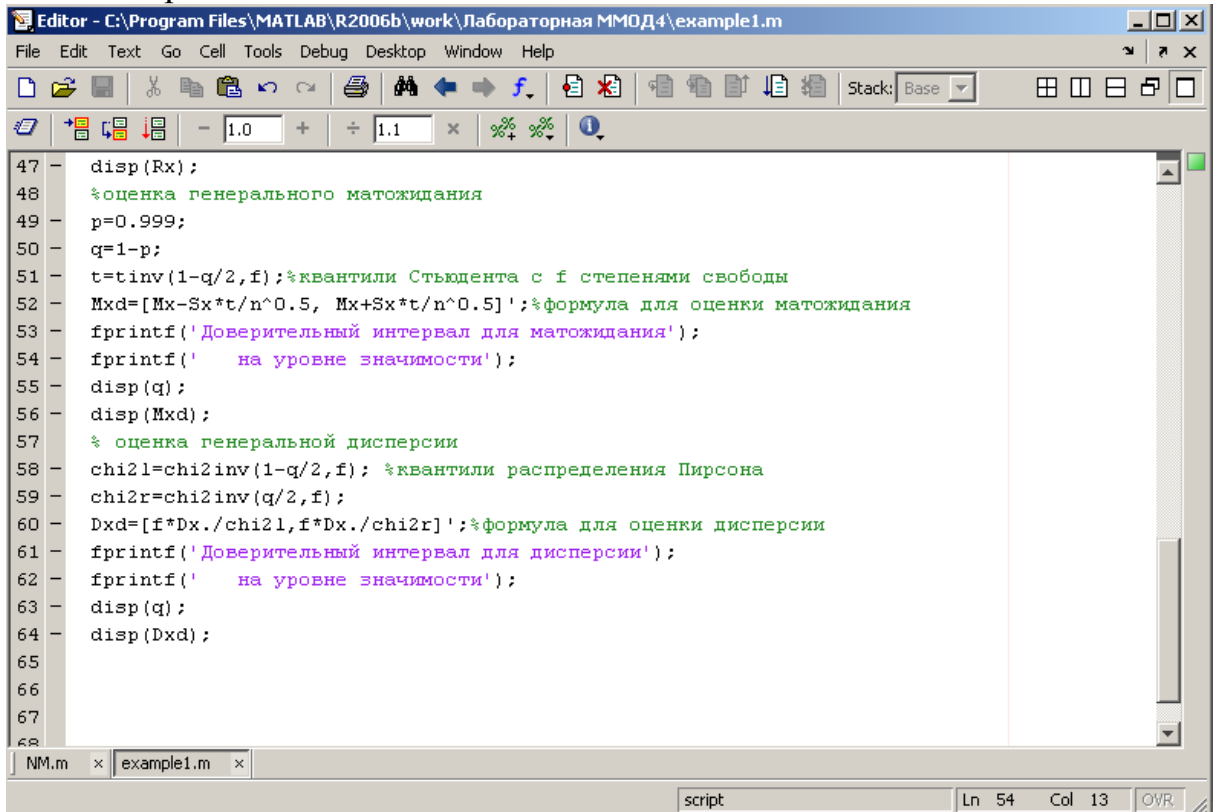
```
число степеней свободы выборки      10
Мат ожидание      3.4884
Дисперсия      5.8587
Среднеквадратичное отклонение      2.4205
```

```
33 - fprintf('Среднеквадратичное отклонение');
34 - disp(Sx);
35 - %другие выборочные параметры
36 - Ax=skewness(x);
37 - Ex=kurtosis(x);
38 - Medx=median(x);
39 - Rx=range(x);
40 - fprintf('асимметрия');
41 - disp(Ax);
42 - fprintf('эксцесс');
43 - disp(Ex);
44 - fprintf('медиана');
45 - disp(Medx);
46 - fprintf('размах');
47 - disp(Rx);
48
```

Результат на экране:

асимметрия -0.4019
эксцесс 2.6931
медиана 3.8862
размах 8.0496

Вычислим доверительные интервалы для генерального математического ожидания и генеральной дисперсии с доверительной вероятностью $p=0.999$ для той же выборки данных.



```
47 - disp(Rx);  
48 %оценка генерального матожидания  
49 p=0.999;  
50 q=1-p;  
51 t=tinv(1-q/2,f);%квантили Стьюдента с f степенями свободы  
52 Mxd=[Mx-Sx*t/n^0.5, Mx+Sx*t/n^0.5]';%формула для оценки матожидания  
53 fprintf('Доверительный интервал для матожидания');  
54 fprintf(' на уровне значимости');  
55 disp(q);  
56 disp(Mxd);  
57 % оценка генеральной дисперсии  
58 chi2l=chi2inv(1-q/2,f); %квантили распределения Пирсона  
59 chi2r=chi2inv(q/2,f);  
60 Dxd=[f*Dx./chi2l,f*Dx./chi2r]';%формула для оценки дисперсии  
61 fprintf('Доверительный интервал для дисперсии');  
62 fprintf(' на уровне значимости');  
63 disp(q);  
64 disp(Dxd);  
65  
66  
67  
68
```

Результат на экране:

Доверительный интервал для матожидания на уровне
значимости 0.0010
 0.1409
 6.8360
Доверительный интервал для дисперсии на уровне значимости
0.0010
 1.8647
 46.3149

Построим гистограмму для нашего распределения:

```

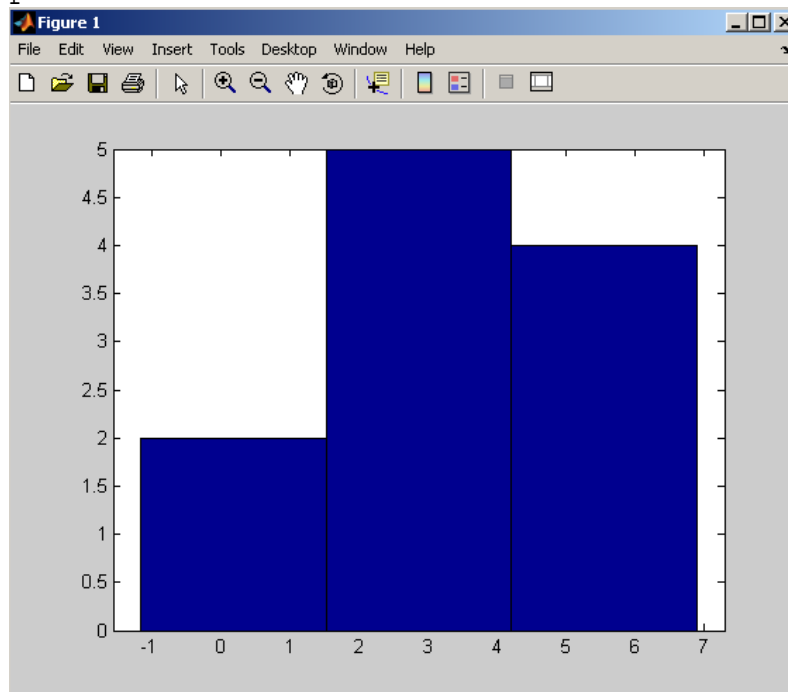
Editor - C:\Program Files\MATLAB\R2006b\work\Лабораторная ММОД4\example1.m
File Edit Text Go Cell Tools Debug Desktop Window Help
[Icons] B...
[Icons] 1.0 1.1 [Icons]
65 %строим гистограмму
66 k=round(n^0.5);%число интервалов для построения гистограммы
67 d=(xmax-xmin)/k;%ширина каждого интервала
68 del=(xmax-xmin)/20;%добавки влево и вправо
69 x1=xmin-del;%границы интервала для построения графиков
70 xr=xmax+del;
71 fprintf('Число интервалов');
72 disp(k);
73 fprintf('Ширина интервала');
74 disp(d);
75 hist(x,k);
76 xlim([x1 xr]);
77
NM.m x example1.m x
script Ln 77 Col 1 OVR

```

Результат на экране:

Число интервалов 3

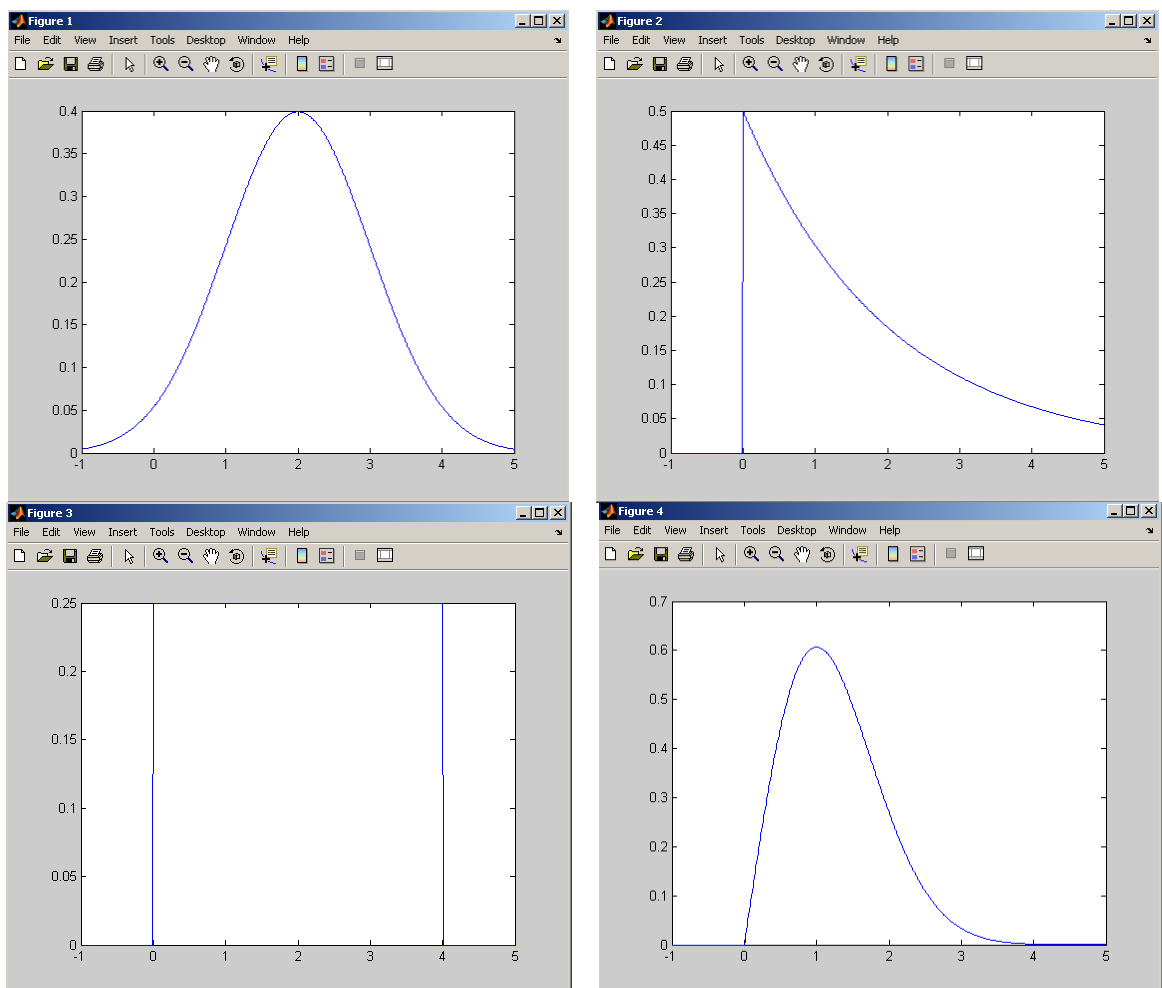
Ширина интервала 2.6832



Продемонстрируем на примере как выглядят функции распределений законов: нормального, показательного, равномерного, рэлеевского.

```
Editor - C:\Program Files\MATLAB\R2006b\work\Лабораторная ММОД...
File Edit Text Go Cell Tools Debug Desktop Window Help
%графики плотности распределений
1  x=-1:0.01:5;
2  ypdf1=pdf('norm',x,2,1);
3  figure
4  plot(x,ypdf1)
5  ypdf2=pdf('exp',x,2,0);
6  figure
7  plot(x,ypdf2)
8  ypdf3=pdf('unif',x,0,4);
9  figure
10 plot(x,ypdf3)
11 ypdf4=pdf('rayl',x,1,0);
12 figure
13 plot(x,ypdf4)
14
15
```

Результат – в графических окнах.



На практике могут встретиться и другие виды распределений (β , χ^2 , логнормальное, Вейбулла и др.). Многие из них реализованы в Matlab.

Параметры распределений могут быть вычислены по методы моментов:

Для нормального распределения: $m = m_x^*$; $\sigma = \sigma_x^*$.

Для показательного распределения: $\alpha = \frac{1}{m_x^*}$.

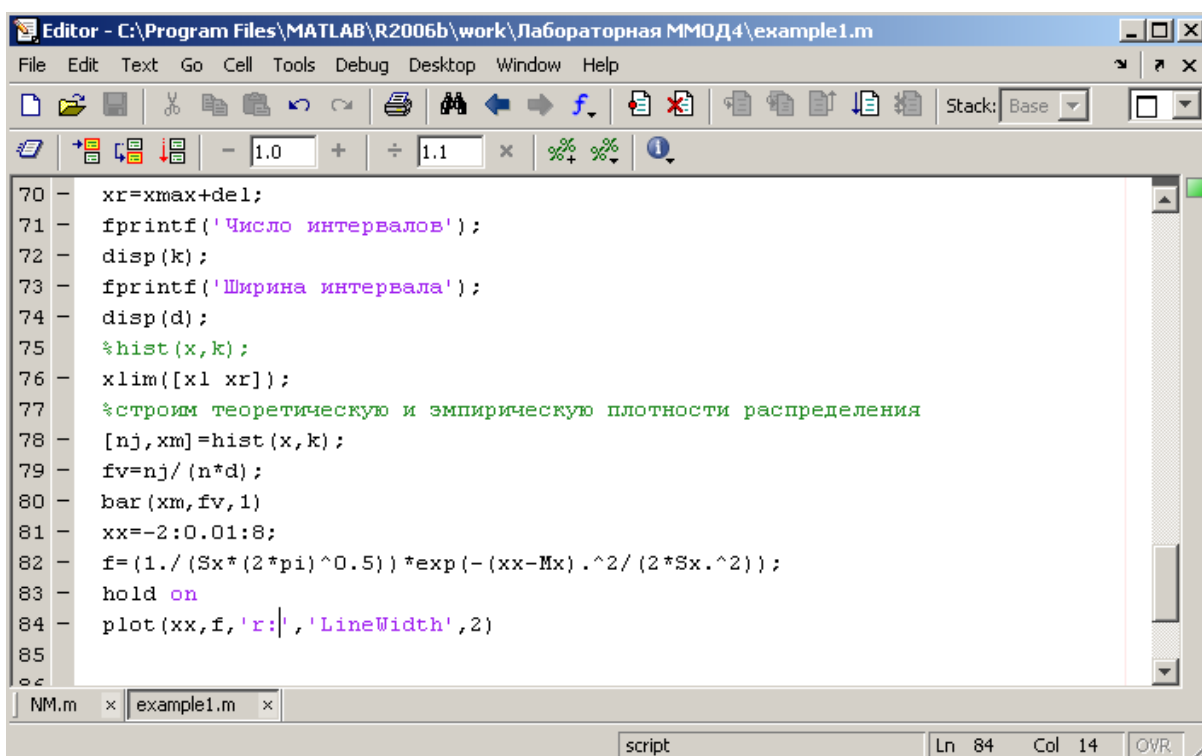
Для равномерного распределения: $a = m_x^* - \sigma_x^* \sqrt{3}$; $b = m_x^* + \sigma_x^* \sqrt{3}$.

Для рэлеевского распределения: $\sigma = m_x^* \sqrt{\frac{2}{\pi}}$.

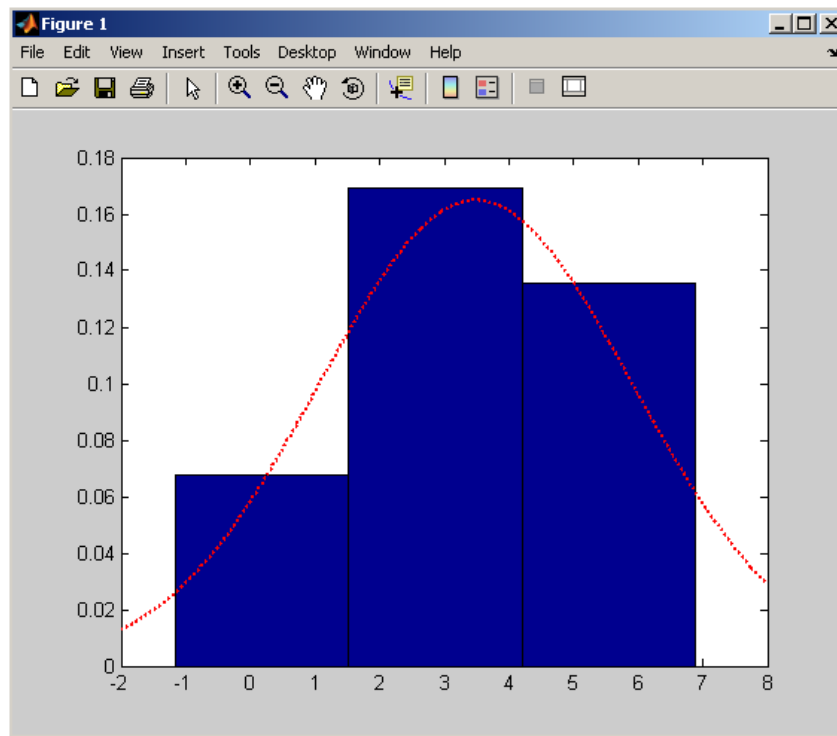
Подбор параметров предлагается осуществить самостоятельно по указанным соотношениям.

Для примера будем считать, что подобрано нормальное распределение.

Построим на одном графике теоретическую и эмпирическую плотности распределения. Для построения эмпирического распределения необходимо масштаб по оси ординат изменить таким образом, чтобы площадь под кривой стала равна 1. Для этого все метки по оси ординат в гистограмме нужно разделить на nh .



```
70 - xr=xmax+dell;
71 - fprintf('Число интервалов');
72 - disp(k);
73 - fprintf('Ширина интервала');
74 - disp(d);
75 - %hist(x,k);
76 - xlim([x1 xr]);
77 - %строим теоретическую и эмпирическую плотности распределения
78 - [nj, xm]=hist(x,k);
79 - fv=nj/(n*d);
80 - bar(xm,fv,1)
81 - xx=-2:0.01:8;
82 - f=(1./ (Sx*(2*pi)^0.5)) *exp(-(xx-Mx).^2/(2*Sx.^2));
83 - hold on
84 - plot(xx,f,'r|', 'LineWidth',2)
85
```



В Matlab проверка критерия согласия Колмогорова может быть проведена с помощью функции `kstest`.

При этом выбираем такое распределение, для которого q максимальное (вероятность p разницы между функциями распределения минимальная). График выборочной функции распределения строит функция `cdfplot`.

Для примера ограничимся проверкой критерия Колмогорова-Смирнова только для двух видов распределений: нормального и рэлеевского.

```

Editor - C:\Program Files\MATLAB\R2006b\work\Лабораторная ММОД4\example1.m
File Edit Text Go Cell Tools Debug Desktop Window Help
plot(xx,f,'r','LineWidth',2)
%критерий Колмогорова
[h,p1,k,c]=kstest(x,[x cdf('norm',x,Mx,Sx)],0.05,0);
%проверяем нормальное распределение
fprintf('критический уровень значимости для норм распр');
disp(p1);
[h,p2,k,c]=kstest(x,[x cdf('rayl',x,Sx)],0.05,0);
%проверяем рэлеевское распределение
fprintf('критический уровень значимости для рэл распр');
disp(p2);
figure
cdfplot(x);%график выборочной функции распределения
hold on;
plot(xx,normcdf(xx,Mx,Sx),'r-')%график теоретической функции распределения

```

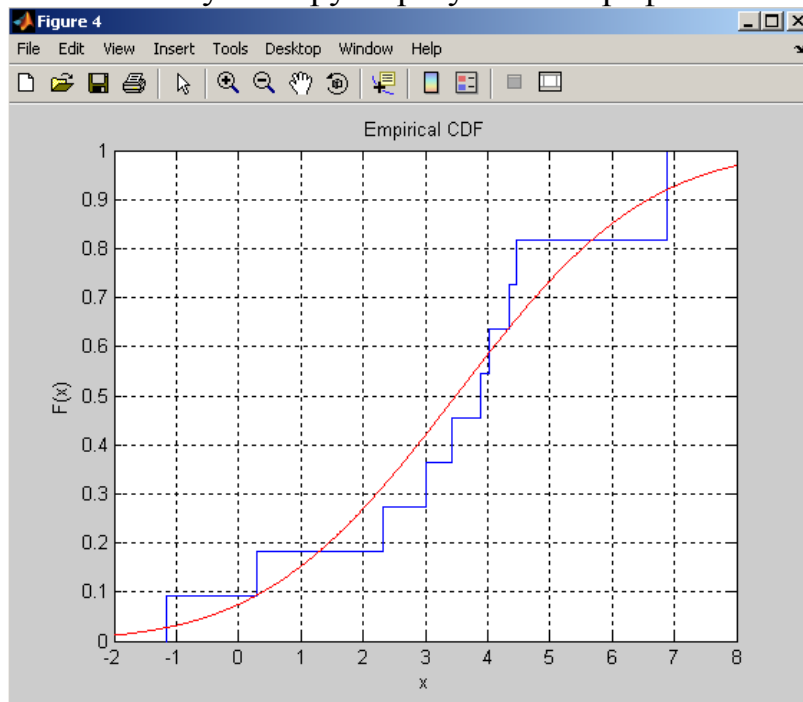
Результат на экране:

критический уровень значимости для норм распр 0.9065

критический уровень значимости для рэл распр 0.3444

Выбираем максимальное значение.

Поэтому из рассмотренных видов распределений наиболее подходящим оказалось нормальное. Визуализируем результат в графическом окне.



Индивидуальные задания

Дано n измерений одной и той же случайной величины (см. вариант).

Задание 1.

Для данного массива экспериментальных данных найти объем выборки, отсортировать в порядке возрастания, найти минимальное и максимальное значения выборки.

Задание 2. Вычислить выборочное математическое ожидание, выборочную дисперсию и среднеквадратичное отклонение, используя встроенные функции пакета. Вычислить асимметрию, эксцесс, медиану и размах выборочного распределения.

Задание 3. Задать несколько значений доверительных вероятностей в виде вектор-столбца p (0.999, 0.99, 0.9). Вычислить по ним уровни значимости $q=1-p$. Для этих уровней значимости найти доверительные интервалы для генерального матожидания m_x . Найти доверительные интервалы для генеральной дисперсии D_x .

Задание 4. Подобрать теоретический вид распределения (нормальное, показательной, релеевское, равномерное), параметры распределения. Проверить правильность подбора, используя критерий согласия Колмогорова-Смирнова.

Варианты

1	2.6385	2	0.1807	3	0.8031	4	3.8752
	2.3984		5.1749		2.1401		12.1081
	5.0640		1.7647		1.2852		6.2131
	2.5864		2.5494		2.3511		19.1666
	-0.1921		0.4066		7.1929		3.6450
	2.1118		0.9599		0.7702		9.8490
	-1.0145		2.7707		-1.4517		1.5283
	1.2121		14.0959		3.9967		1.6035
	1.1475		0.6951		-0.1208		5.2860
	1.2561		2.8630		2.6966		7.0945
	0.5408		1.7150		0.7070		1.0703
	3.7198		0.8242		4.1947		1.9910
	-2.9605		0.2876		4.2471		4.4452
	2.2194		1.0724		1.9781		2.0362
	3.2712		6.1324		-3.5719		4.2073
	2.9007		3.1872		2.9865		10.8741
	2.5562		0.2357		7.3662		12.5542
	1.3467		0.3065		5.6432		10.8971
	2.7795		3.1477		-2.1506		6.3562
	2.5360		0.3973		2.3531		3.2294
	0.6808		10.0662		0.5447		11.8920
	0.4067		3.6802		-0.4836		1.7851
	0.5903		0.7307		-1.1128		5.7308
	-2.0631		16.3194		3.4551		10.0644
	0.7295		6.9744		1.3015		3.5750
	1.5225		5.6376		2.7563		6.1219
	1.9643		5.7088		1.4857		8.2080
	4.5039		1.7825		1.1945		3.6935
	0.4663		4.5974		3.7015		4.8230
	2.6583		5.7072		4.7731		2.3272
	3.0539		14.7736		8.9234		0.4471
	3.3730		1.0316		-1.4815		6.5765
	-0.9762		2.8598		-0.4778		1.2938
	1.7331		0.2495		5.7015		17.7823
	1.7912		2.6977		1.4200		0.2074
	-1.0115		3.0763		-1.5534		13.2146
	-0.4136		0.5899		3.5353		13.9547
	3.6912		2.2755		7.2472		1.3446
	0.9601		5.6397		4.7120		3.0884
	2.1332		1.4036		8.4592		20.1798
	1.4540		0.6239		4.1021		45.0287
	-0.1738		13.8854		8.1807		1.1367
	-0.0030		1.3559		1.5699		16.3538
	2.2542		3.4233		-0.8292		12.2443
	-0.8813		0.6507		1.9558		4.1887

	3.0137		2.4291		6.1585		12.7419
	2.5362		1.2126		-0.7585		7.6681
	-0.5929		2.9909		4.4942		27.7341
	0.6584		4.1997		0.7854		0.1189
	-1.4165		5.8738		4.2420		5.4716
	-3.6992		5.8041		-0.7094		8.7072
5	1.6345	6	3.0734	7	3.1578	8	3.3153
	-0.8324		12.0587		-0.0473		2.5471
	0.9512		7.1622		-1.1550		2.9658
	2.0782		5.8254		1.5504		2.0901
	1.1542		3.9393		4.3245		3.5874
	2.9921		12.9056		2.0079		4.3514
	0.7881		5.3710		-0.2249		3.3759
	-1.2107		12.7257		6.5558		3.8443
	0.0797		8.9965		1.5263		2.0187
	2.7787		14.3113		3.5012		2.7412
	1.3994		9.5128		3.5307		4.4486
	1.9805		6.9192		2.8301		4.0149
	2.6472		6.4442		4.6505		3.0851
	-0.9691		9.8136		2.7890		3.5367
	0.7723		11.9328		-1.1562		4.4946
	0.7019		10.1065		0.6333		1.3844
	0.3316		8.1894		4.2180		3.6850
	1.3181		1.6588		-0.0081		1.3467
	3.3278		1.1307		2.5546		2.8916
	1.4876		2.3472		0.8802		2.4246
	2.9814		6.8025		0.2231		4.8338
	0.7115		6.5505		0.6554		1.1975
	1.5419		10.2153		2.4011		4.3835
	0.6092		7.2786		4.0224		5.2420
	2.2256		14.1779		3.2058		5.3234
	1.2366		3.8243		6.5317		4.4720
	2.0996		7.5590		2.8415		2.9901
	2.3214		4.3771		-0.7434		3.2426
	1.4406		4.6988		3.5604		2.0394
	2.5822		10.5643		3.7341		3.8569
	4.2580		15.1953		4.4250		2.4882
	2.1521		7.4386		4.9415		5.1966
	1.5191		3.8448		7.1346		4.2087
	2.6105		8.2856		1.9893		2.8771
	1.5990		4.3032		4.2680		4.2846
	0.2267		6.5017		3.4959		2.2678
	2.1059		9.6570		1.8978		2.9955
	1.5271		2.5020		9.5531		5.0835
	1.2071		4.3031		2.8070		4.0255
	3.0392		4.5773		-0.4391		2.0334
	3.7318		5.6724		8.5211		4.6852
	0.9164		1.4415		4.4504		3.7946
	1.6550		8.0504		0.3795		1.7000
	0.5800		7.3193		5.2811		2.0105
	2.3359		2.9507		7.1112		3.7033
	-1.2572		10.6179		1.0080		3.7993

2.7013	2.9922	3.9139	2.7016
1.7913	7.0285	3.1412	3.5677
1.8418	10.3065	0.2546	3.0442
2.9649	4.6716	6.8687	1.3197
1.2089	4.4702	3.4895	1.2490

Лабораторная работа № 5 СРАВНЕНИЕ ДВУХ ВЫБОРОК

Пусть дан исходный набор двух выборок, которые подлежат сравнению. Введем их. Найдем объем каждой выборки, число степеней свободы. Вычислим средние и дисперсии.

```

14     1.7168
15     0.8509
16    -5.4132
17     2.3575
18     0.4755
19     2.9408
20     3.3950
21     0.6559
22     2.3012];
23 -   x1=sort(x1);
24 -   x2=sort(x2);
25 -   n1=length(x1);
26 -   n2=length(x2);
27 -   %параметры выборки
28 -   f1=n1-1;
29 -   f2=n2-1;
30 -   Mx2=mean(x2);
31 -   Dx2=var(x2);
32 -   Mx1=mean(x1);
33 -   Dx1=var(x1);
34 -   fprintf('число степеней свободы 1 выборки');
35 -   disp(f1);
36 -   fprintf('число степеней свободы 2 выборки');
37 -   disp(f2);
38 -   fprintf('Мат ожидание 1 выборки');
39 -   disp(Mx1);
40 -   fprintf('Мат ожидание 2 выборки');
41 -   disp(Mx2);
42 -   fprintf('Дисперсия 1 выборки');
43 -   disp(Dx1);
44 -   fprintf('Дисперсия 2 выборки');
45 -   disp(Dx2);
46
example2.m x example1.m x
script Ln 45 Col 9 OVR.

```

Результат на экране:

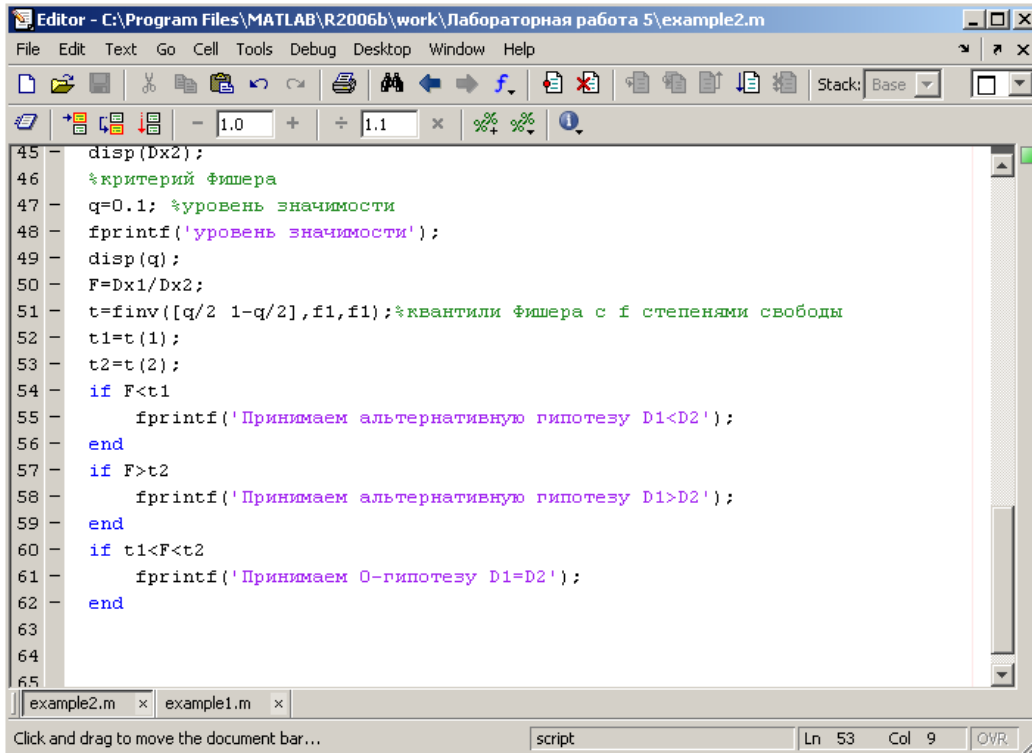
```

число степеней свободы 1 выборки    10
число степеней свободы 2 выборки    10
Мат ожидание 1 выборки    -0.9042
Мат ожидание 2 выборки    1.2504

```

Дисперсия 1 выборки 8.2700
Дисперсия 2 выборки 5.7583

Зададим уровень значимости. Посчитаем отношение $\frac{D_1^*}{D_2^*}$ и квантили F -распределения Фишера. Проверим выполнение $F_{\frac{q}{2}}(f_1, f_2) \leq \frac{D_1^*}{D_2^*} \leq F_{1-\frac{q}{2}}(f_1, f_2)$ и сделаем вывод.



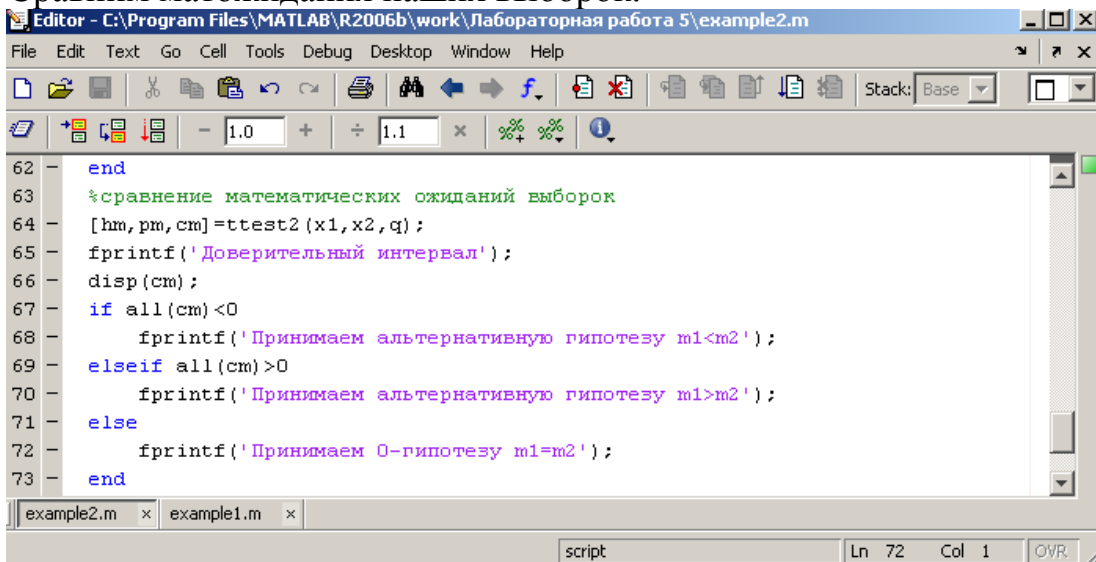
```
45 - disp(Dx2);
46 - %критерий Фишера
47 - q=0.1; %уровень значимости
48 - fprintf('уровень значимости');
49 - disp(q);
50 - F=Dx1/Dx2;
51 - t=finv([q/2 1-q/2],f1,f1);%квантили Фишера с f степенями свободы
52 - t1=t(1);
53 - t2=t(2);
54 - if F<t1
55 -     fprintf('Принимаем альтернативную гипотезу D1<D2');
56 - end
57 - if F>t2
58 -     fprintf('Принимаем альтернативную гипотезу D1>D2');
59 - end
60 - if t1<F<t2
61 -     fprintf('Принимаем 0-гипотезу D1=D2');
62 - end
63
64
65
```

Результат на экране:

уровень значимости 0.1000
Принимаем 0-гипотезу D1=D2>>

В Matlab сравнение двух средних проводит функция ttest2.

Сравним матожидания наших выборок.



```
62 - end
63 - %сравнение математических ожиданий выборок
64 - [hm, pm, cm]=ttest2(x1,x2,q);
65 - fprintf('Доверительный интервал');
66 - disp(cm);
67 - if all(cm)<0
68 -     fprintf('Принимаем альтернативную гипотезу m1<m2');
69 - elseif all(cm)>0
70 -     fprintf('Принимаем альтернативную гипотезу m1>m2');
71 - else
72 -     fprintf('Принимаем 0-гипотезу m1=m2');
73 - end
```

Результат на экране:

Доверительный интервал

-4.1023

-0.2068

Принимаем альтернативную гипотезу $m_1 > m_2$

Индивидуальные задания

Дано n измерений одной и той же случайной величины (см. вариант) в двух выборках.

Для данных массивов экспериментальных данных сравнить дисперсии и математические ожидания.

Вариант	X_1	X_2	Вариант	X_1	X_2
1	2.3140	3.5331	2	3.4114	2.1528
	-1.1606	2.6373		1.9569	4.6959
	3.8862	6.6187		-1.5287	-4.0936
	4.3437	-1.7479		-1.1630	-0.6862
	0.3022	4.7396		3.6705	0.2686
	6.8890	6.0569		-3.0436	-4.3120
	6.8841	5.5928		5.2967	-4.8240
	3.4269	5.1614		4.2743	6.0196
	4.4553	3.6466		-2.4260	1.5872
	4.0251	5.4410		0.2533	-1.5753
	3.0069	5.1362		-4.1897	5.4150
	5.5783	2.8126		-9.0778	2.6490
	1.8751	2.4693		6.2852	-3.2357
	9.6852	2.6992		-0.9658	7.9871
	3.1486	-0.6239		3.1103	2.9278
	3.8541	2.8736		2.6607	8.6584
	6.5392	3.8668		1.6364	7.0160
	3.7001	4.4201		-3.3040	-1.7632
	3.2635	7.6008		-3.0303	-4.6915
	1.1874	2.5440		-0.2710	1.1816
4.3626	5.2893	-4.1806	-0.0598		
-0.2324	5.7847	-3.5543	-2.5316		
5.5460	6.1844	8.6274	3.9313		
8.1082	0.7373	1.8016	8.7045		
1.5836	4.1305	-4.3320	-1.0999		
5.9508	4.2034	1.3344	-2.5467		
7.0668	0.6931	-3.9034	0.3462		
-0.9581	1.4419	-4.9678	4.7275		
-0.5276	6.5829	0.2750	-2.5825		
5.1425	3.1624	6.1268	-4.2549		
3	-0.1593	-2.0574	4	-5.3128	5.8550
	0.1409	2.5403		-22.2521	0.9499
	3.1691	4.5056		-11.3164	-1.7622
	-2.7752	12.1169		11.5565	13.7645
	-0.3232	-6.9651		-0.1322	19.6340
	-1.8911	-5.1244		4.7922	-4.2256
	0.0637	6.2081		10.4420	2.0342
	8.9433	-1.6439		-20.2043	-7.0765

	-2.8357	-7.0970		-5.4468	7.8044
	-6.9105	2.2355		-6.0430	-22.6459
	3.0816	9.0428		-9.1814	10.9011
	-4.4696	4.3934		-0.8208	3.1890
	0.6973	11.2656		16.2101	3.6166
	-2.9514	3.2750		0.6156	13.1344
	3.4447	10.7549		13.2745	-1.7467
	3.5409	-1.3690		-5.9620	-0.3313
	-0.6203	-5.7688		1.0752	-11.7050
	-10.7988	-0.6612		-6.8289	-15.6361
	1.2291	7.0463		6.8694	-6.0355
	9.2612	-5.6391		-1.5121	3.8088
	6.1013	3.9940		5.8014	-4.4121
	-8.1922	-2.8078		7.6816	-12.3353
	0.0674	3.5315		0.2168	11.7269
	-3.2491	-5.5491		9.8917	-6.1209
	-5.1350	0.9729		24.0929	0.8871
	-6.2889	-10.5251		6.2464	0.9918
	2.0884	-2.2120		0.8821	-1.4944
	-1.8612	3.0413		10.1314	4.9658
	0.8069	-1.2655		1.5594	-1.6401
	-1.5233	7.3011		-10.0707	-15.6401
5	-2.0580	-1.7921	6	4.0574	-4.9060
	0.4862	0.2704		3.1817	-3.4424
	-2.5132	-0.2781		6.5504	6.6974
	-0.6944	-2.3268		1.6355	-4.5462
	-1.8827	2.3674		-3.3650	-2.0643
	-2.3491	-0.0309		-0.7466	-2.5308
	-2.0423	1.0724		-12.2451	8.0987
	-0.8033	-1.4329		2.3664	0.4045
	0.3473	-1.3111		0.5847	-5.4053
	-0.2322	0.6287		-2.9555	-5.6226
	2.1282	0.2136		-3.2735	8.6784
	-0.4908	3.6964		-5.4033	9.6873
	-3.0351	-0.5502		-0.2387	8.1753
	0.0195	4.4251		1.8967	-6.2797
	0.1427	3.0171		-1.6518	-1.0677
	0.6331	-3.8902		-2.4995	-0.9947
	0.9997	-3.3611		-0.1799	1.5375
	2.5562	-1.1471		-0.8738	-2.8616
	-1.0956	-0.3716		-4.7863	-4.8882
	0.5216	0.0179		6.4627	-2.2340
	-0.0264	1.6739		2.2045	5.4105
	-1.1605	-1.4445		6.4047	11.8632
	4.2726	-1.4430		-2.4886	1.1464
	-0.5152	-0.4024		-5.5936	-1.3331
	-2.8191	-0.0409		4.0382	3.5084
	3.5402	0.5578		0.2060	-2.4380
	0.6511	2.1166		-3.7810	9.3124
	-2.2381	1.2433		-0.4456	5.5343
	1.2407	-3.5012		-10.0443	-6.1378
	2.5396	1.3947		5.4196	-3.3494

7	5.0228	5.1423	8	0.7607	-5.9295
	2.1642	4.9595		1.5886	0.4509
	2.1792	-1.7283		-0.3535	1.2684
	-4.1220	-5.9168		-0.9447	-0.1314
	1.6836	6.3662		2.5737	0.5115
	3.0569	2.1724		-0.1207	-3.2879
	-0.9104	1.0610		1.7645	-2.1664
	-2.0078	-0.2179		-1.6825	-1.2635
	0.4431	-3.6047		0.6765	2.1632
	-2.1621	1.6641		3.2592	-0.5997
	0.7854	-3.1234		-1.4824	5.5585
	1.8376	-1.5179		1.5033	1.5062
	5.1198	0.3741		0.4152	-4.3020
	1.5395	3.2677		0.8812	-0.2172
	-0.6260	2.1272		0.0601	-0.7910
	5.9026	-3.0362		-4.9251	1.3996
	3.4756	5.4456		0.6837	0.4602
	1.6923	1.0982		5.1407	0.2908
	3.0149	6.6114		2.9902	-1.0276
	-0.5242	-2.6270		0.0063	0.9129
	3.5691	-1.3479		-0.8182	-3.0876
	1.8055	-1.3019		1.8220	2.8758
	2.8749	0.6784		-0.0122	-2.7382
	-2.1420	-1.9312		-0.4326	-0.8186
	5.6070	-1.8920		1.2606	0.6763
	2.3033	-6.1375		4.7359	1.8194
	-4.7514	-1.5146		-6.2080	0.8778
	2.4098	1.7720		2.7961	6.1407
	4.8231	0.4485		-1.8234	5.8037
	2.9156	0.4972		3.8384	2.9167
9	2.2764	-0.4380	10	-2.4434	6.6380
	-1.4112	-4.2443		0.3054	8.4837
	0.0085	1.6936		0.0259	7.7263
	-3.8645	4.1674		-3.7121	-1.9114
	0.3644	2.2423		4.1102	3.4920
	-0.0307	8.3678		2.5789	5.5999
	9.0803	0.5438		-0.0790	-3.3334
	4.9882	5.1601		5.5144	2.4079
	2.1665	-1.3177		8.6023	4.9329
	0.6997	-3.2788		-3.4868	-4.2968
	2.2396	4.6333		1.3833	-2.7883
	5.0414	-3.8098		-3.4978	5.0018
	11.0711	-3.4323		4.8788	1.4715
	3.2402	-0.5806		3.7508	3.8602
	5.4395	-4.2031		-0.8277	7.6392
	4.6855	4.1900		-1.0164	3.6692
	4.1745	0.7628		-1.8902	-2.0418
	6.0067	-3.4041		5.6662	4.8840
	7.0634	-1.7426		0.3817	0.7490
	2.0810	-2.1447		0.8257	-2.1730
	0.6120	1.6064		-4.1629	10.9233
	2.8295	-7.9998		2.9068	1.8607

	5.9864	-0.9468		13.6062	-2.7178
	6.8852	-3.8047		2.8036	4.3608
	-0.3251	3.2516		-4.9026	9.0691
	5.6401	4.3540		2.6105	4.1714
	1.1942	2.5034		-4.9610	5.0557
	0.5226	1.4841		2.1686	1.9736
	4.1201	-8.9034		-6.1188	0.7864
	5.7217	2.0150		4.7363	5.4191

Лабораторная работа № 6 ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ

В Matlab задачу 1-факторного дисперсионного анализа решает функция `anova1`.

Дано n измерений одной и той же случайной величины в двух выборках. Считая, что экспериментальные данные получены для двух уровней некоторого фактора A , проведем 1-факторный дисперсионный анализ.

Выберем уровень значимости. Функция `anova1` возвращает критический уровень значимости, если он выше заданного, то H_0 -гипотезу нужно принять, иначе – отвергнуть.

```

Editor - C:\Program Files\MATLAB\R2006b\work\Лабораторная работа 6\example3.m
File Edit Text Go Cell Tools Debug Desktop Window Help
x y z
Stack: Base
- 1.0 + ÷ 1.1 × %>% %>%
1 - x=[0.2210 1.3019 -1.1065 -1.7419 -0.0736 -3.7534 1.9943 1.4098 0.8360 -7.9903 -1.0431;
2   1.9970 2.4768 1.7168 0.8509 -5.4132 2.3575 0.4755 2.9408 3.3950 0.6559 2.3012]';
3 - disp(x)
4 - p=anova1(x)
5 - if p>=q
6     fprintf('фактор A влияет незначимо');
7 - else
8     fprintf('фактор A влияет значимо');
9 - end
example3.m x example1.m x
script Ln 1 Col 1 OVR

```

Результат на экране

```

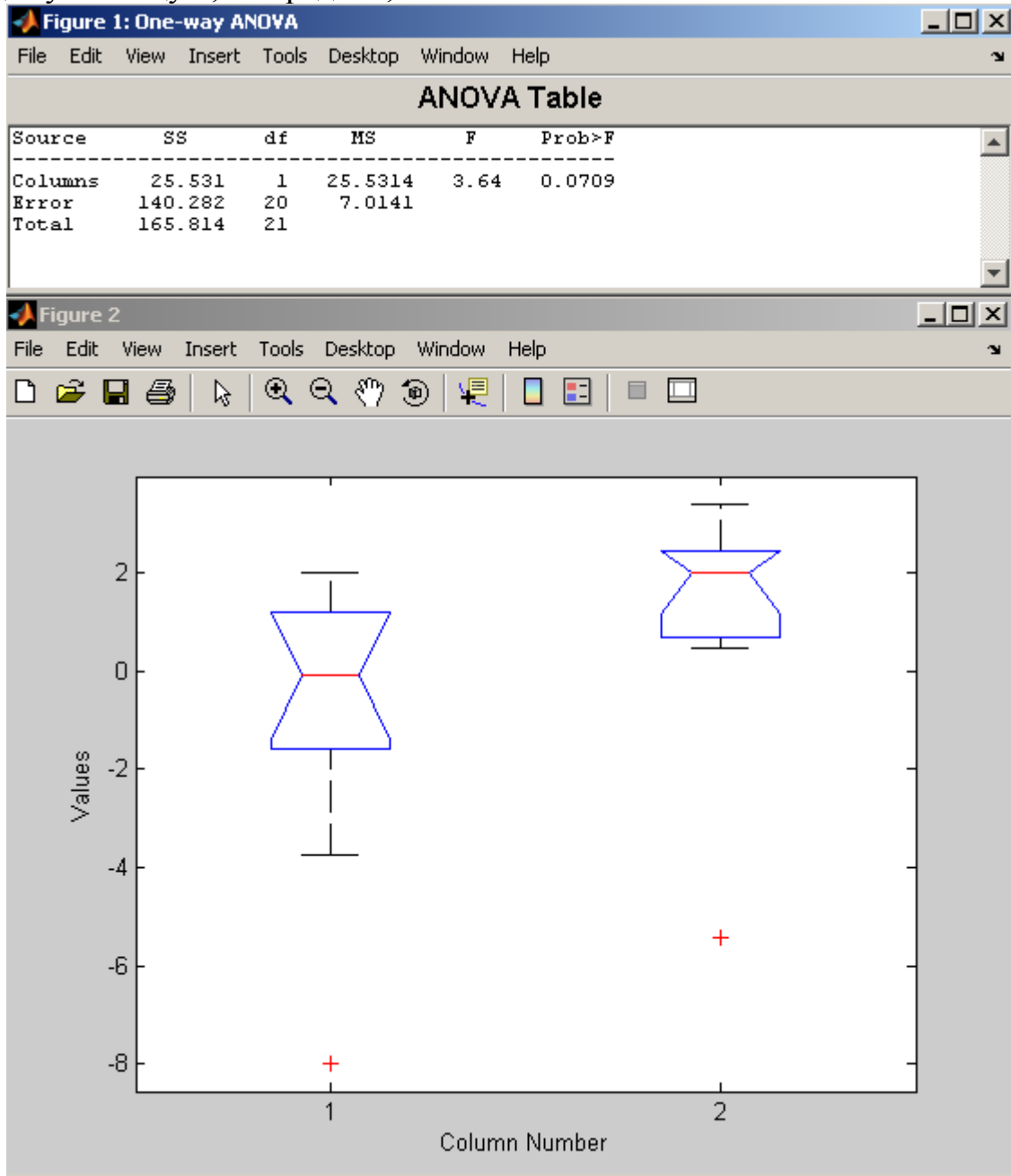
0.2210    1.9970
1.3019    2.4768
-1.1065    1.7168
-1.7419    0.8509
-0.0736   -5.4132
-3.7534    2.3575
1.9943    0.4755
1.4098    2.9408
0.8360    3.3950
-7.9903    0.6559
-1.0431    2.3012

```


$p = 0.0709$

Фактор А влияет значимо>>

По умолчанию функция `anova1` возвращает таблицу статистических характеристик и график данных. На графике показаны границы данных по каждому столбцу и, их средние, а также 25% и 75% квантили.



В Matlab задачу 2-факторного дисперсионного анализа решает функция `anova2`. Входными данными являются матрица X и различные параметры настройки.

В результате получаем критические значения p , которые сравниваем с заданным уровнем значимости q . Превышение p над q свидетельствует о незначимом влиянии фактора.

```

Editor - C:\Program Files\MATLAB\R2006b\work\Лабораторная работа 6\example4.m
File Edit Text Go Cell Tools Debug Desktop Window Help
Stack: Base
1 - x=normrnd(1,4,11,4);
2 - [k,m]=size(x);
3 - disp(k);
4 - disp(m);
5 - %уровень значимости
6 - q=0.1;
7 - fprintf('критический уровень значимости');
8 - disp(q);
9 - p=anova2(x,1,'off');
10 - if p(1)>=q
11 -     fprintf('Столбцы различаются незначимо: фактор В не влияет');
12 - else
13 -     fprintf('Столбцы различаются незначимо: фактор В влияет');
14 - end
15 - if p(2)>=q
16 -     fprintf('Строки различаются незначимо: фактор А не влияет');
17 - else
18 -     fprintf('Строки различаются незначимо: фактор А влияет');
19 - end
example3.m x example1.m x example4.m x NM.m x
script Ln 4 Col 3 OVR

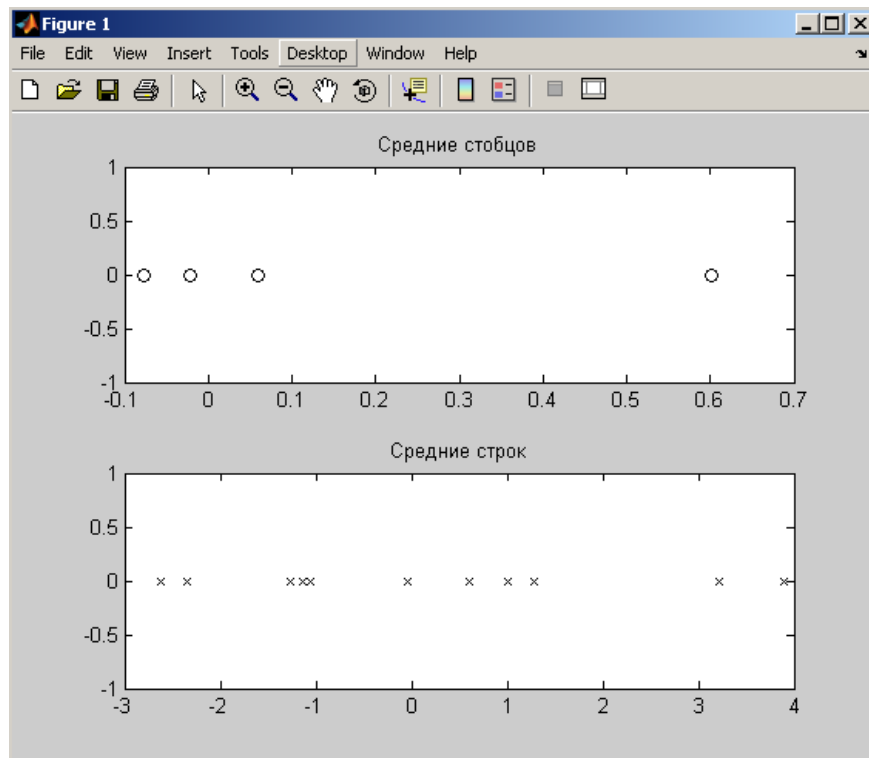
```

Результат на экране

```

критический уровень значимости      0.1000
Столбцы различаются незначимо: Фактор В не влияет
Строки различаются незначимо: Фактор А не влияет>>
Нарисуем на одной фигуре 2 графика: средние столбцов и средние строк.

```



Индивидуальные задания

Задание 1.

Дано n измерений одной и той же случайной величины (см. вариант) в двух выборках. Считая, что экспериментальные данные получены для двух уровней некоторого фактора A , провести 1-факторный дисперсионный анализ.

Вариант	X_1	X_2	Вариант	X_1	X_2
1	2.3140	3.5331	2	3.4114	2.1528
	-1.1606	2.6373		1.9569	4.6959
	3.8862	6.6187		-1.5287	-4.0936
	4.3437	-1.7479		-1.1630	-0.6862
	0.3022	4.7396		3.6705	0.2686
	6.8890	6.0569		-3.0436	-4.3120
	6.8841	5.5928		5.2967	-4.8240
	3.4269	5.1614		4.2743	6.0196
	4.4553	3.6466		-2.4260	1.5872
	4.0251	5.4410		0.2533	-1.5753
	3.0069	5.1362		-4.1897	5.4150
	5.5783	2.8126		-9.0778	2.6490
	1.8751	2.4693		6.2852	-3.2357
	9.6852	2.6992		-0.9658	7.9871
	3.1486	-0.6239		3.1103	2.9278
	3.8541	2.8736		2.6607	8.6584
	6.5392	3.8668		1.6364	7.0160
	3.7001	4.4201		-3.3040	-1.7632
	3.2635	7.6008		-3.0303	-4.6915
	1.1874	2.5440		-0.2710	1.1816
	4.3626	5.2893		-4.1806	-0.0598
	-0.2324	5.7847		-3.5543	-2.5316
	5.5460	6.1844		8.6274	3.9313
	8.1082	0.7373		1.8016	8.7045
	1.5836	4.1305		-4.3320	-1.0999
	5.9508	4.2034		1.3344	-2.5467
7.0668	0.6931	-3.9034	0.3462		
-0.9581	1.4419	-4.9678	4.7275		
-0.5276	6.5829	0.2750	-2.5825		
5.1425	3.1624	6.1268	-4.2549		
3	-0.1593	-2.0574	4	-5.3128	5.8550
	0.1409	2.5403		-22.2521	0.9499
	3.1691	4.5056		-11.3164	-1.7622
	-2.7752	12.1169		11.5565	13.7645
	-0.3232	-6.9651		-0.1322	19.6340
	-1.8911	-5.1244		4.7922	-4.2256
	0.0637	6.2081		10.4420	2.0342
	8.9433	-1.6439		-20.2043	-7.0765
	-2.8357	-7.0970		-5.4468	7.8044
	-6.9105	2.2355		-6.0430	-22.6459
	3.0816	9.0428		-9.1814	10.9011
	-4.4696	4.3934		-0.8208	3.1890
	0.6973	11.2656		16.2101	3.6166
	-2.9514	3.2750		0.6156	13.1344
	3.4447	10.7549		13.2745	-1.7467
	3.5409	-1.3690		-5.9620	-0.3313
-0.6203	-5.7688	1.0752	-11.7050		
-10.7988	-0.6612	-6.8289	-15.6361		

	1.2291	7.0463		6.8694	-6.0355
	9.2612	-5.6391		-1.5121	3.8088
	6.1013	3.9940		5.8014	-4.4121
	-8.1922	-2.8078		7.6816	-12.3353
	0.0674	3.5315		0.2168	11.7269
	-3.2491	-5.5491		9.8917	-6.1209
	-5.1350	0.9729		24.0929	0.8871
	-6.2889	-10.5251		6.2464	0.9918
	2.0884	-2.2120		0.8821	-1.4944
	-1.8612	3.0413		10.1314	4.9658
	0.8069	-1.2655		1.5594	-1.6401
	-1.5233	7.3011		-10.0707	-15.6401
5	-2.0580	-1.7921	6	4.0574	-4.9060
	0.4862	0.2704		3.1817	-3.4424
	-2.5132	-0.2781		6.5504	6.6974
	-0.6944	-2.3268		1.6355	-4.5462
	-1.8827	2.3674		-3.3650	-2.0643
	-2.3491	-0.0309		-0.7466	-2.5308
	-2.0423	1.0724		-12.2451	8.0987
	-0.8033	-1.4329		2.3664	0.4045
	0.3473	-1.3111		0.5847	-5.4053
	-0.2322	0.6287		-2.9555	-5.6226
	2.1282	0.2136		-3.2735	8.6784
	-0.4908	3.6964		-5.4033	9.6873
	-3.0351	-0.5502		-0.2387	8.1753
	0.0195	4.4251		1.8967	-6.2797
	0.1427	3.0171		-1.6518	-1.0677
	0.6331	-3.8902		-2.4995	-0.9947
	0.9997	-3.3611		-0.1799	1.5375
	2.5562	-1.1471		-0.8738	-2.8616
	-1.0956	-0.3716		-4.7863	-4.8882
	0.5216	0.0179		6.4627	-2.2340
	-0.0264	1.6739		2.2045	5.4105
	-1.1605	-1.4445		6.4047	11.8632
	4.2726	-1.4430		-2.4886	1.1464
	-0.5152	-0.4024		-5.5936	-1.3331
	-2.8191	-0.0409		4.0382	3.5084
	3.5402	0.5578		0.2060	-2.4380
	0.6511	2.1166		-3.7810	9.3124
	-2.2381	1.2433		-0.4456	5.5343
	1.2407	-3.5012		-10.0443	-6.1378
	2.5396	1.3947		5.4196	-3.3494
7	5.0228	5.1423	8	0.7607	-5.9295
	2.1642	4.9595		1.5886	0.4509
	2.1792	-1.7283		-0.3535	1.2684
	-4.1220	-5.9168		-0.9447	-0.1314
	1.6836	6.3662		2.5737	0.5115
	3.0569	2.1724		-0.1207	-3.2879
	-0.9104	1.0610		1.7645	-2.1664
	-2.0078	-0.2179		-1.6825	-1.2635
	0.4431	-3.6047		0.6765	2.1632
	-2.1621	1.6641		3.2592	-0.5997

	0.7854	-3.1234		-1.4824	5.5585
	1.8376	-1.5179		1.5033	1.5062
	5.1198	0.3741		0.4152	-4.3020
	1.5395	3.2677		0.8812	-0.2172
	-0.6260	2.1272		0.0601	-0.7910
	5.9026	-3.0362		-4.9251	1.3996
	3.4756	5.4456		0.6837	0.4602
	1.6923	1.0982		5.1407	0.2908
	3.0149	6.6114		2.9902	-1.0276
	-0.5242	-2.6270		0.0063	0.9129
	3.5691	-1.3479		-0.8182	-3.0876
	1.8055	-1.3019		1.8220	2.8758
	2.8749	0.6784		-0.0122	-2.7382
	-2.1420	-1.9312		-0.4326	-0.8186
	5.6070	-1.8920		1.2606	0.6763
	2.3033	-6.1375		4.7359	1.8194
	-4.7514	-1.5146		-6.2080	0.8778
	2.4098	1.7720		2.7961	6.1407
	4.8231	0.4485		-1.8234	5.8037
	2.9156	0.4972		3.8384	2.9167
9	2.2764	-0.4380	10	-2.4434	6.6380
	-1.4112	-4.2443		0.3054	8.4837
	0.0085	1.6936		0.0259	7.7263
	-3.8645	4.1674		-3.7121	-1.9114
	0.3644	2.2423		4.1102	3.4920
	-0.0307	8.3678		2.5789	5.5999
	9.0803	0.5438		-0.0790	-3.3334
	4.9882	5.1601		5.5144	2.4079
	2.1665	-1.3177		8.6023	4.9329
	0.6997	-3.2788		-3.4868	-4.2968
	2.2396	4.6333		1.3833	-2.7883
	5.0414	-3.8098		-3.4978	5.0018
	11.0711	-3.4323		4.8788	1.4715
	3.2402	-0.5806		3.7508	3.8602
	5.4395	-4.2031		-0.8277	7.6392
	4.6855	4.1900		-1.0164	3.6692
	4.1745	0.7628		-1.8902	-2.0418
	6.0067	-3.4041		5.6662	4.8840
	7.0634	-1.7426		0.3817	0.7490
	2.0810	-2.1447		0.8257	-2.1730
	0.6120	1.6064		-4.1629	10.9233
	2.8295	-7.9998		2.9068	1.8607
	5.9864	-0.9468		13.6062	-2.7178
	6.8852	-3.8047		2.8036	4.3608
	-0.3251	3.2516		-4.9026	9.0691
	5.6401	4.3540		2.6105	4.1714
	1.1942	2.5034		-4.9610	5.0557
	0.5226	1.4841		2.1686	1.9736
	4.1201	-8.9034		-6.1188	0.7864
	5.7217	2.0150		4.7363	5.4191

Задание 2.

Дана матрица измерений одной и той же случайной величины (см. вариант) при совместном действии двух факторов A и B , провести 2-факторный дисперсионный анализ.

Вариант	Матрица X			
1	-0.7303	3.9032	3.8573	3.8476
	-5.6623	-1.3533	7.4942	6.1610
	1.5013	9.7327	-1.7671	3.6744
	2.1507	0.4544	4.4320	5.7634
	-3.5859	1.4557	6.0160	-3.8098
	5.7637	5.2671	-5.3749	0.9208
	5.7567	1.2371	-4.7639	0.3731
	0.8495	0.6174	3.2846	-5.4163
	2.3092	-2.3294	-0.5995	2.0292
	1.6986	2.1776	3.7600	-3.2259
	0.2532	-4.3447	4.2625	6.6606
2	7.4115	0.6720	-3.9294	5.2823
	1.3425	-3.9389	-3.2795	-3.8391
	3.9494	-9.0116	9.3624	-0.3030
	2.4399	6.9317	2.2787	0.6878
	-1.1773	-0.5932	-4.0866	-4.0658
	-0.7979	3.6368	1.7939	-4.5972
	4.2183	3.1703	-3.6417	6.6561
	-2.7495	2.1073	-4.7464	2.0562
	5.9059	-3.0197	0.6945	-1.2257
	4.8448	-2.7357	6.7673	6.0286
	-2.1086	0.1279	2.6432	3.1581
3	-3.9488	8.4425	0.2517	3.7644
	7.6979	-1.7324	-1.1738	-0.0185
	2.4475	-3.2338	0.6033	-9.2716
	8.3946	-0.2317	8.6758	1.6628
	6.6901	4.3151	-2.0324	8.9647
	-2.4207	-3.2710	-5.7368	6.0921
	-5.4597	-5.0066	3.3469	-6.9020
	0.6354	0.4007	-3.5178	0.6067
	-0.6530	0.6735	1.1794	-2.4083
	-3.2181	3.4265	-2.1377	-4.1228
	3.4888	-1.9775	3.6770	-5.1718
4	0.5776	-0.7796	2.3805	2.4731
	-0.8586	-2.7625	-2.2324	-1.2626
	0.1116	0.6311	1.2705	-4.6504
	-0.7357	3.1065	-1.2028	-2.4633
	-0.9299	1.4158	1.1024	2.1113
	0.7419	3.9148	-2.1997	-0.2264
	1.4566	1.0091	0.1720	0.7584
	4.2243	3.7291	-4.0091	1.8884
	-2.7146	-0.6796	-0.9862	-4.2409
	-2.0452	-2.2796	0.9241	-1.2894
	2.0757	-0.4222	-0.6420	-1.4086
5	-1.9544	3.1045	0.2713	4.7403
	0.5538	0.8650	4.9294	0.2760
	5.6630	3.7675	6.6902	0.7006
	0.9847	8.0279	-0.4677	-2.7115
	4.7823	2.6739	1.4103	-3.8908
	-0.9886	1.0646	-1.3229	-1.0107
	1.1226	3.8394	3.1413	1.9426
	-1.2487	1.2678	-5.9938	-0.5236
	2.8608	-2.2212	4.0703	-2.9006
	0.3464	2.5565	1.7567	4.3181
	2.5404	1.0850	1.8850	-1.0363
6	1.4661	-2.0237	2.9995	-1.8571
	1.4975	-1.5634	5.3343	3.3611

	0.7517 0.2950 -0.1434 5.3093 2.6897 2.0210 2.2824 -1.1881 0.7080 1.1516 1.4605 1.9055 -3.4920 4.6924 -0.2408 1.0829 -1.5869 0.7638 7.9089 -1.9902 2.2293 -3.0526 0.7271 5.0512 -2.2698 1.5292 -2.7286 1.4537 0.4585 1.7141 6.8103 3.1087 -1.3241 2.4496 2.4766 -0.6493
7	-4.5556 2.0893 10.1149 -8.8066 5.1436 10.3695 8.3634 1.5227 3.0681 -5.2227 15.1008 5.7934 20.4822 -5.2149 5.2710 -1.3036 -0.7511 -0.0118 -4.7299 -2.9990 24.1255 1.7954 0.5067 1.6402 17.0853 4.7889 -22.4902 0.2524 -17.4508 12.5829 6.7329 -7.5727 -14.8054 8.2167 3.1695 14.9255 -3.7353 -15.5062 -3.9110 6.4091 0.1418 8.9735 -4.5471 14.8094
8	-0.4886 -2.5462 0.9323 -0.4380 -3.5936 -0.0643 1.0053 11.3124 6.0382 -0.5308 3.5375 7.5343 2.2060 10.0987 -0.8616 -4.1378 -1.7810 2.4045 -2.8882 -1.3494 1.5544 -3.4053 -0.2340 8.7046 -8.0443 -3.6226 7.4105 3.9404 7.4196 10.6784 13.8632 3.9653 -2.9060 11.6873 3.1464 -6.5367 -1.4424 10.1753 0.6669 3.1393 8.6974 -4.2797 5.5084 5.4282
9	0.0896 2.6923 5.8231 2.6641 -1.0078 4.0149 3.9156 -2.1234 1.4431 0.4758 6.1423 -0.5179 -1.1621 4.5691 5.9595 1.3741 1.7854 2.8055 -0.7283 4.2677 2.8376 3.8749 -4.9168 3.1272 6.1198 -1.1420 7.3662 -2.0362 2.5395 6.6070 3.1724 6.4456 0.3740 3.3033 2.0610 2.0982 6.9026 -3.7514 0.7821 7.6114 4.4756 3.4098 -2.6047 -1.6270
10	-2.6958 3.0109 0.5831 -1.1709 -2.6038 -1.0072 1.5472 2.3323 1.3568 -2.2305 -0.1514 9.5226 -3.8623 5.0490 -10.4658 -13.1200 -3.7839 -0.5255 1.1387 5.5091 -12.2750 3.3748 10.3600 -4.0484 -3.0291 -3.7570 5.9108 7.6657 3.5441 1.1237 -0.2628 -12.5437 0.8970 6.4672 -1.9687 0.6570 0.9943 -3.3430 3.4937 2.3484 1.2981 2.8344 -0.3011 -0.5477

Лабораторная работа № 7 КОРРЕЛЯЦИОННЫЙ АНАЛИЗ

Проведем проверку коррелированности двух столбцов данных. Введем массив в программу. Найдем объем выборки.

```

Editor - C:\Program Files\MATLAB\R2006b\work\Лабораторная работа 7\example5.m
File Edit Text Go Cell Tools Debug Desktop Window Help
[Icons] Stack: Base
- 1.0 + 1.1 x [Icons]
1 xy=[0.2210 1.3019 -1.1065 -1.7419 -0.0736 -3.7534 1.9943 1.4098 0.8360 -7.9903 -1.0431;
2 1.9970 2.4768 1.7168 0.8509 -5.4132 2.3575 0.4755 2.9408 3.3950 0.6559 2.3012]';
3 n=size(xy,1);
4 fprintf('Объем выборки');
5 disp(n);
6 q=0.1;%уровень значимости
7 fprintf('уровень значимости');
8 disp(q);
9 [r,p]=corrcoef(xy);
10 fprintf('выборочный коэффициент корреляции');
11 disp(r(1,2));
12 fprintf('статистика');
13 disp(p(1,2));
14 if p(1,2)<q
15     fprintf('корреляция значима');
16 else
17     fprintf('корреляция незначима');
18 end
19 figure
20 plot(xy(:,1),xy(:,2),'b.')
21
22
script Ln 20 Col 27 OVR

```

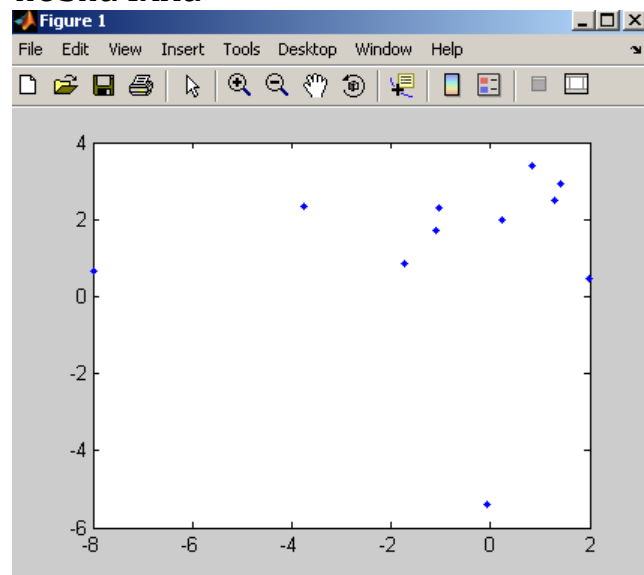
В Matlab функция `corrcoef` вычисляет корреляционную матрицу для массива, состоящего из столбцов данных. На диагонали возвращаются единицы, а внедиагональные элементы представляют собой коэффициент корреляции между соответствующими столбцами. Если затребовать второй входной параметр, то в нем возвращаются (на внедиагональных местах) критические числа для проверки 0-гипотезы. Маленьким числам (меньше заданного уровня значимости) соответствует альтернативная гипотеза, а большим – 0-гипотеза.

Результат на экране:

```

Объем выборки      11
уровень значимости  0.1000
выборочный коэффициент корреляции  0.0661
статистика         0.8469
корреляция незначима>>

```



Индивидуальные задания

Дано n измерений одной и той же случайной величины (см. вариант) в двух выборках.

Для данных массивов экспериментальных данных провести корреляционный анализ.

Вариант	X	Y	Вариант	X	Y
1	0.0396	0.2000	2	0.2006	0.1988
	0.2257	0.1682		0.2008	0.1978
	0.0944	0.3095		0.2009	0.2010
	0.3415	0.0126		0.1990	0.1995
	0.1195	0.2428		0.2002	0.2003
	0.2529	0.2896		0.2002	0.2002
	0.2219	0.2731		0.1990	0.2000
	0.1078	0.2578		0.1993	0.1990
	-0.0171	0.2040		0.2011	0.1991
	0.1941	0.2677		0.1999	0.1996
	0.0989	0.2569		0.2004	0.1988
	0.2614	0.1744		0.2001	0.1989
	0.2508	0.1623		0.1994	0.2015
	0.3692	0.1704		0.1994	0.2001
	0.2591	0.0525		0.2004	0.1988
	0.1356	0.1766		0.1991	0.2000
	0.2380	0.2118		0.2008	0.1989
	0.0991	0.2315		0.2006	0.1987
	0.1980	0.3444		0.1992	0.1997
	0.1952	0.1649		0.1997	0.2010
3	0.2386	0.1008	4	0.2141	0.1861
	0.3969	-0.0531		0.1729	0.2111
	-0.1503	0.3493		0.2011	0.2218
	0.0618	0.6465		0.1812	0.2634
	0.1213	0.0361		0.2161	0.1593
	-0.1639	-0.0540		0.2166	0.1693
	-0.1958	0.1261		0.1939	0.2311
	0.4794	0.3989		0.1384	0.1883
	0.2034	-0.0563		0.2040	0.1586
	0.0065	-0.1604		0.2478	0.2095
	0.4417	0.1640		0.2306	0.2466
	0.2695	0.1804		0.1526	0.2212
	-0.0969	0.3456		0.1976	0.2587
	0.6019	0.0214		0.1796	0.2151
	0.2869	0.1551		0.1693	0.2559
	0.6437	0.0696		0.1630	0.1898
	0.5414	0.1762		0.2087	0.1658
	-0.0052	0.6605		0.1871	0.1937
	-0.1876	0.0181		0.2017	0.2357
	0.1781	-0.2042		0.1890	0.1665
5	0.0835	-0.0818	6	0.0685	-0.0341
	-0.0401	0.0018		0.0195	-0.1134
	0.0751	0.1721		-0.0076	0.1273
	-0.0900	0.0162		0.1476	-0.0512
	0.0286	0.1427		0.2063	0.0189

	-0.1805 -0.0496 -0.0293 0.0208 0.0662 -0.0583 -0.0121 0.0787 0.1437 -0.0051 -0.0431 0.0680 -0.2125 0.0868 -0.1032 0.0122 0.1256 0.1089 0.0087 0.2509 0.0579 0.0725 0.1144 0.0188 -0.1920 0.1113 -0.0445 0.0256 -0.0504 -0.0907		-0.0323 0.0199 0.0303 -0.0049 -0.0608 0.0597 0.0880 -0.0064 -0.2165 -0.1464 0.1190 -0.0829 0.0419 0.0443 0.0462 -0.1057 0.1413 -0.0147 -0.0075 -0.0741 0.0067 -0.0975 -0.1071 -0.0821 -0.1464 -0.0202 -0.0504 0.0374 0.0481 0.0084
7	0.1053 0.0955 0.0988 0.1007 0.0924 0.0993 0.1000 0.0942 0.1004 0.1059 0.1016 0.0999 0.1025 0.1027 0.1064 0.0964 0.0973 0.0967 0.1013 0.1016 0.0999 0.1005 0.0971 0.1092 0.1107 0.0986 0.0987 0.1111 0.0930 0.1075 0.1089 0.0903 0.1016 0.0916 0.0944 0.0971 0.1031 0.0991 0.1063 0.1000	8	0.1042 0.0967 0.0964 0.0946 0.0964 0.0998 0.0990 0.1019 0.0999 0.0983 0.1014 0.0975 0.1053 0.0998 0.1031 0.0991 0.0912 0.0952 0.1035 0.1065 0.1041 0.1022 0.1032 0.1064 0.1066 0.0975 0.1016 0.0944 0.0966 0.1040 0.0993 0.1002 0.0878 0.0962 0.1024 0.0996 0.1006 0.0900 0.0970 0.1054
9	-0.8812 1.1821 -0.5885 2.4726 1.4395 0.3293 -0.8092 -0.1666 -0.3129 0.8017 -0.4062 -0.3876 1.7197 1.9625 0.1809 1.2069 -0.9811 -1.1276 -1.0245 -0.5699 1.8357 1.4409 2.0375 0.4881 1.7351 0.4931 -1.1559 -1.6073 -0.1135 0.3279 -0.0989 0.7856 0.4075 -0.5368	10	0.0285 1.4808 0.3792 1.4198 1.4733 -0.8094 0.2798 -2.2056 -0.4420 1.8887 1.7342 0.4908 0.9252 0.1203 0.3308 -0.3060 0.7716 -1.4349 -0.4081 0.3214 0.9564 -1.2745 0.3685 -0.7393 0.7250 -0.1086 -0.9473 0.8559 1.6357 0.4757 0.5344 -1.2454 -1.8171 1.5819

	-0.4723 -0.9026		0.5699 0.1327
	-0.8776 -0.0856		1.3744 1.9705
	-0.3468 -0.9540		0.7385 -1.1090

4.2. Перечень обязательной (основной) литературы

1. Гонсалес Р., Вудс Р., Эддинс С. Цифровая обработка изображений в среде Matlab. – М.: Техносфера, 2006. – 616с.
2. Колесов Ю.Б., Сениченков Ю.Б. Моделирование систем. Практикум по компьютерному моделированию. СПб.: БХВ-Петербург, 2007. – 352с.
3. Трусов П.В. Введение в математическое моделирование. – М.: Университетская книга, Логос, 2007. – 440 с.
4. Фадеев М.А. Элементарная обработка результатов эксперимента – СПб.: Лань, 2008. – 118с.

4.3. Перечень дополнительной литературы

1. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука, 1986. – 278с.
2. Ануфриев И.Е., Смирнов А.Б., Смирнова Е.Н. Matlab 7. – СПб.: БХВ – Петербург, 2005. – 1104 с.
3. Бордовский Г.А., Кондратьев А.С., Чоудери А.Д.Р. Физические основы математического моделирования. –М.: «Академия», 2005. – 320 с.
4. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика – М.: Высш.шк., 2001. – 479с.
5. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики. – М.: Наука, 1992. – 402 с.
6. Ермаков С.М. Математическая теория планирования эксперимента. – М.: Наука, 1989. – 392с.
7. Иглин С.П. Математические расчеты на базе Matlab. – СПб.: БХВ-Петербург, 2005.– 640 с.
8. Кетков Ю., Кетков А., Шульц М. Matlab 6.x: программирование численных методов – СПб: БХВ – Петербург, 2004. – 660 с.
9. Кулаичев А.П. Компьютерный контроль процессов и анализ сигналов. – М.: Информатика и компьютеры, 1999. – 330с.
10. Кулаичев А.П. Методы и средства комплексного анализа данных. – М.: ФОРУМ: ИНФРА-М, 2006. – 512с.
11. Мещеряков В.В. Задачи по статистике и регрессионному анализу с Matlab. – М.: Диалог-МИФИ, 2009 – 448с.
12. Наследов А.Д. Профессиональный статистический анализ данных. – СПб.: Питер, 2008. – 416с.
13. Палий И.А. Прикладная статистика. – М.: Высшая школа, 2004. – 176с.
14. Плохотников К.Э. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент. – М.: Едиториал УРСС, 2003. – 280 с.

15. Поршнеv С.В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете Matlab. – М.: Телеком, 2003 – 592с.
16. Охорзин В.А. Компьютерное моделирование в системе MathCad. – М.: «Финансы и статистика», 2006. – 144с.
17. Рашиков В.И., Рoшаль А.С. Численные методы решения физических задач: Учеб пособие. – СПб.: Изд-во «Лань», 2005.– 208 с.
18. Семененко М.Г. Математическое моделирование в Mathcad. – М.: Альтекс-А, 2003. – 208 с.
19. Советов Б.Я., Яковлев С.А. Моделирование систем. – М.: Высш. шк., 2007. – 343 с.
20. Советов Б.Я., Яковлев С.А. Моделирование систем. Практикум. – М.: Высш. шк., 2005. – 295 с.
21. Толстова Ю.Н. Основы многомерного шкалирования : учеб. пособие: рек. УМО/ Ю. Н. Толстова. – М.: Книжный дом Университет, 2006. – 158 с.:а-рис.
22. Тарсеvич Ю.Ю. Математическое и компьютерное моделирование. ввoдный курс. М.: Едиториал УРСС, 2004. – 152 с.
23. Хартман К., Лецкий Э., Шеффер В. Планирование эксперимента в исследовании технологических процессов. – М.: Мир, 1987. – 552с.

4.4. Перечень методических пособий

1. Масловская А.Г., Стукова Е.В., Чепак Л.В. Компьютерное моделирование физических процессов. Практикум. Благовещенск, 2009. – 101с.

5. НЕОБХОДИМОЕ ТЕХНИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Лекции проводятся в стандартной аудитории, оснащенной в соответствии с требованиями преподавания теоретических дисциплин, включая мультимедиа проектор.

Для проведения практических работ необходим компьютерный класс на 10-14 посадочных рабочих мест пользователей. В классе должны быть установлены пакеты прикладных программ Matlab 8.0, SPSS, Mathcad 13.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ (ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ) КАРТА ДИСЦИПЛИНЫ

Номер недели	Номер темы	Вопросы, изучаемые на лекции	Занятия (номера)		Используемые нагляд. И метод пособия	Самостоятельная работа студентов		Форма контроля
			Практич. (мин.)	Лабораторные		Содержание	часы	
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	0	1-4		1	лекция, доп. Литература		2	отчет по лабораторной работе №1
2	1	1-5		2	лекция	подготовка к защите лаб. Работы	2	
3	2	1-4		2	лекция		2	отчет по лабораторной работе №2
4	3	1-4		3	лекция	подготовка к защите лаб. Работы	2	
5	4	1-4		3	лекция		2	отчет по лабораторной работе №3
6	5	1-3		4	лекция	подготовка к защите лаб. Работы	2	отчет по лабораторной работе №4
7	6	1-3		5	лекция		2	
8	6	4-6		5	лекция	подготовка к защите лаб. Работы	2	отчет по лабораторной работе №5
9	6	7-10		6	лекция		2	
10	6	11-15		6	лекция	подготовка к защите лаб. Работы	2	отчет по лабораторной работе №6
11	6	16-18		7	лекция		2	
12	6	19-20		7	лекция	подготовка к защите лаб. Работы	2	отчет по лабораторной работе №7
13	7	1-6		8	лекция		2	
14	7	7-10		8	лекция	подготовка к защите лаб. Работы	2	
15	7	11-13		8	лекция		2	отчет по лабораторной работе №8
16	7	14-15		9	лекция	подготовка к защите лаб. Работы	2	отчет по индивидуальной работе
17	7	16-17		9	лекция		2	
18	8	1-3		9	лекция		2	