С. Л. Ахназарова
В. В. Кафаров

Методы оптимизации эксперимента в химической технологии

учебное пособие для студентов химико-технологических специальностей вузов

С.Л.Ахназарова
В.В.Кафаров

Методы оптимизации эксперимента в химической технологии

ИЗДАНИЕ 2-е, ПЕРЕРАБОТАННОЕ
И ДОПОЛНЕННОЕ

Допущено
Министерством высшего и среднего
специального образования СССР
в качестве учебного пособия
для студентов
химико-технологических
специальностей
высших учебных заведений



Москва
«Высшая школа» 1985

ББК. 24.1 + 35
А 95
УДК 54:66.01

Рецензент: доц. Еникеев Ш. К. (Казанский химико-технологический институт им. С. М. Кирова)

Ахназарова С. Л., Кафаров В. В.

А95 Методы оптимизации эксперимента в химической технологии: Учеб. пособие для хим.-технол. спец. вузов. — 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Высш. шк., 1985. — 327 с., ил.

В пер.: 1 р. 20 к.

Учебное пособие посвящено статистическим методам оптимизации экспериментальных исследований в химии и химической технологии. Излагаются способы определения параметров законов распределения, проверки статистических гипотез, методы дисперсионного, корреляционного и регрессионного анализов и планирования экстремального эксперимента. В отличие от предыдущего издания (1978) несколько изменено название, расширены примеры использования рассматриваемых методов, переработан и дополнен раздел, посвященный корреляционному и регрессионному анализу, рассмотрены методы планирования промышленных экспериментов.

А $\frac{1502000000-086}{001(01)-85}$ 56–85

ББК.24.1 + 35
540 + 6П7

© *Издательство «Высшая школа»*, 1978
© Издательство «Высшая школа», 1985, с изменениями

ПРЕДИСЛОВИЕ

Методы оптимизации экспериментальных исследований за прошедшие годы получили дальнейшее развитие и стали одним из ведущих курсов при подготовке специалистов в области кибернетики, моделирования и вычислительной техники.

Интерес к науке об эксперименте связан с широкими масштабами экспериментальных исследований и значительным экономическим эффектом от оптимальной организации эксперимента.

В связи с важностью практического применения методов оптимального эксперимента в новом издании расширены примеры конкретного использования рассматриваемых методов в тех отраслях химической технологии, где экспериментально-статистическое моделирование является мощным средством для повышения эффективности эксперимента.

В гл. I включен раздел, посвященный системе двух случайных величин, в гл. IV – раздел, посвященный методу группового учета аргументов, методу главных компонент; в гл. V даны методы планирования промышленных экспериментов.

В книгу внесен ряд исправлений и уточнений в связи с изданием ее на английском и польском языках. Авторы выражают глубокую признательность рецензентам и всем читателям, замечания которых по первому изданию способствовали улучшению содержания книги.

Авторы

ВВЕДЕНИЕ

Для реализации решений XXVI съезда КПСС и июньского (1983 г.) Пленума ЦК КПСС по повышению эффективности научных исследований в химии и химической технологии необходимо максимальное сокращение сроков перехода от лабораторных исследований к промышленной реализации. Методы кибернетики позволяют не только сократить этот путь, но и резко уменьшить число необходимых опытов, быстро выявить оптимальный вариант осуществления процесса. Использование методов кибернетики и вычислительной техники изменяет старые традиционные методы проведения эксперимента — от ручного управления, контроля, сбора и обработки информации дает возможность перейти к диалоговой системе: экспериментатор — электронная управляющая машина.

Система автоматизированного эксперимента включает в себя следующие элементы: экспериментальное оборудование, измерительное оборудование, методики планирования, проведения и обработки результатов эксперимента.

В системе автоматизированного эксперимента экспериментатор выполняет следующие функции: 1) введение исходной информации для проведения экспериментов; 2) введение априорных директив для выполнения этапов экспериментирования; 3) внесение изменений в ходе процесса экспериментирования; 4) контроль правильности хода процесса; 5) контроль достоверности получаемой количественной информации.

Многогранность изучаемых явлений, сложность и высокая стоимость оборудования, острая нехватка времени — все это вынуждает исследователя продумывать план предстоящих экспериментов. Эксперимент становится объектом изучения, объектом оптимизации.

Оптимальный эксперимент — это путь к экономии времени и средств, увеличению надежности и достоверности результатов. Вопрос об оптимальности эксперимента тесно связан с предлагаемой (или предполагаемой) исследователем математической моделью объекта.

Процедура построения математической модели во многом зависит от ее целевого назначения, свойств объекта, от количества и качества имеющейся информации. Наличие достаточной информации о механизме процесса позволяет составить детерминированную математическую модель процесса. Детерминированную математическую модель составляют на основе теоретического анализа физико-химических процессов, происходящих в объекте. При выводе уравнений

математических моделей технологических процессов учитывают гидродинамические режимы перемещения веществ, скорости химических реакций, диффузии, теплопередачи и т. д., материальный и тепловой балансы, фазовые превращения. Все это требует углубленного изучения объекта моделирования.

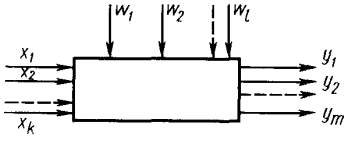


Рис. 1. Схема объекта

Современная химическая промышленность выпускает несколько десятков тысяч наименований продуктов. В лабораториях разрабатываются сотни новых технологических процессов. Ставить задачу изучения механизма протекания всех этих процессов нереально, между тем задачу оптимизации и управления этими процессами решать необходимо. Для этих целей успешно применяются экспериментально-статистические методы, с помощью которых составляют математическую модель, при неизвестном механизме протекающих в объекте процессов, изучая зависимость отклика системы на изменения входов.

На рис. 1 $x_1,...,x_k$ — входные измеряемые и регулируемые параметры объекта; $w_1,...,w_l$ — неконтролируемые, случайным образом изменяющиеся параметры, «шум» объекта; $y_1,..., y_m$ — выходные параметры. В качестве случайных рассматриваются обычно параметры, которые по тем или иным причинам невозможно (или очень трудно) учесть, например, падение активности катализатора, изменение состояния поверхности теплообменной аппаратуры, колебания наружной температуры воздуха и т. п. Комплекс параметров $x_1,...,x_k$ называют основным, он определяет условия эксперимента. Такое подразделение входных параметров на основные и случайные условно. Случайным будет любой параметр, не вошедший в основной комплекс входных параметров, даже если он хорошо изучен. В зависимости от постановки задачи и технических возможностей некоторые измеряемые параметры относят к «шуму» объекта. Однако при этом уменьшается точность математической модели. В качестве выходных величин рассматривают любые технологические или экономические показатели процесса.

Математической моделью объекта служит функция отклика, связывающая выходной параметр, характеризующий результаты эксперимента, с переменными, которые варьируют при проведении опытов:

$$y = \varphi(x_1, x_2, \ldots, x_k). \tag{1}$$

Принято называть независимые переменные $x_1, x_2,...,x_k$ факторами, пространство с координатами $x_1, x_2,...,x_k$ — факторным пространством, а геометрическое изображение функции отклика в факторном пространстве — поверхностью отклика.

При использовании статистических методов математическая модель статики процесса часто представляется в виде полинома: отрезка ряда Тейлора, в который разлагается неизвестная функция (1):

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^{k} \beta_j x_j + \sum_{\substack{u,\ j=1 \\ u \neq j}}^{k} \beta_{uj} x_u x_j + \sum_{j=1}^{k} \beta_{jj} x_j^2 + \ldots, \tag{2}$$

где

$$\beta_0 = \varphi(0);\ \beta_j = \frac{\partial \varphi(0)}{\partial x_j};\ \beta_{uj} = \frac{\partial^2 \varphi(0)}{\partial x_u \partial x_j};\ \beta_{jj} = \frac{\partial^2 \varphi(0)}{2\partial x_j^2} \cdots .$$

Результат эксперимента на сложном объекте обычно есть величина случайная. Существует много причин, приводящих к тому, что результаты наблюдения и измерения, сделанные в экспериментах, оказываются случайными величинами. Иногда случайность предопределяется самой физической сущностью явлений: процессы происходят на молекулярном или атомном уровнях, а измеряются макроскопическими приборами. Неучтенные факторы, «шум» объекта также приводят к тому, что в результате повторных измерений в большинстве реальных экспериментов получаются отличающиеся друг от друга значения измеряемых величин. Поэтому при обработке и анализе экспериментальных данных используют методы математической статистики. Так, для полиномиальной модели (2) получают так называемые выборочные коэффициенты регрессии b_0, b_j, b_{uj}, b_{jj}, являющиеся оценками теоретических коэффициентов β_0, β_j, β_{uj}, β_{jj}. Уравнение регрессии, полученное на основании экспериментальных данных, запишется следующим образом:

$$y = b_0 + \sum_{j=1}^{k} b_j x_j + \sum_{\substack{u,\ j=1 \\ u \neq j}}^{k} b_{uj} x_u x_j + \sum_{j=1}^{k} b_{jj} x_j^2 + \\ + \sum_{\substack{i,u,j=1 \\ i \neq j \neq u}}^{k} b_{iuj} x_i x_j x_u + \ldots, \qquad (3)$$

где b_0 — свободный член уравнения регрессии; b_j — линейные эффекты, $j = 1,2,\ldots,k$; b_{jj} — квадратичные эффекты; b_{uj} — эффекты парного взаимодействия; b_{uji} — эффекты тройного взаимодействия.

С познавательной точки зрения полиномиальная (регрессионная) модель не представляет особого интереса. Зная оценки коэффициентов отрезка ряда Тейлора, нельзя восстановить исходную функцию, аналитическое выражение которой остается неизвестным исследователю, и, следовательно, невозможно получить информацию о механизме процесса. Полиномиальные модели справедливы только для объекта, на котором проводился эксперимент. В практическом отношении полиномиальные модели очень полезны и широко используются при решении задач оптимизации и управления химико-технологическими процессами.

Следует также иметь в виду при применении экспериментально-статистических методов, что в ряде случаев экспериментатор располагает определенной априорной информацией о физической сущности исследуемого процесса, пользуясь которой можно получить представление о структуре модели.

Эффективность экспериментов в большой степени зависит от методов их проведения. Различают пассивный и активный эксперименты. Пассивный эксперимент является традиционным методом, когда

ставится большая серия опытов с поочередным варьированием каждой из переменных. К пассивному эксперименту относится также сбор исходного статистического материала в режиме нормальной эксплуатации на промышленном объекте. Обработка опытных данных для получения математической модели проводится статистическими методами. Методы математической статистики позволяют в этом случае извлечь максимум информации из имеющихся экспериментальных данных — оптимизировать процедуру обработки и анализа эксперимента. Используя активный эксперимент (планирование эксперимента), можно достичь существенно большего — оптимизировать и стадию постановки эксперимента.

Планирование эксперимента — это оптимальное управление экспериментом в условиях неполной информации о механизме процесса. Развитие концепции планирования эксперимента связано с работами английского статистика Р. Фишера. В концепции Фишера главная цель планирования эксперимента состоит в раздельной оценке эффектов в многофакторной ситуаций. Широко применяемое в настоящее время планирование эксперимента при поиске оптимальных условий процесса связано с работой американских ученых Бокса и Уилсона, предложивших последовательную стратегию решения экстремальных задач. Работы Бокса и его школы нашли широкое применение в практике. Одновременно с эмпирико-интуитивным подходом Бокса стало развиваться чисто теоретическое направление в планировании эксперимента. Наибольший вклад в развитие этого направления внес американский математик Кифер. Среди предложенных критериев оптимальности планов наиболее распространен критерий D-оптимальности, связанный с минимизацией ошибок всех коэффициентов модели.

В нашей стране применение и развитие идей и методов планирования эксперимента связано с работами В. В. Налимова и его школы. В настоящее время методы планирования эксперимента, широко применяемые для изучения процессов в лабораторных и полузаводских условиях, в промышленных условиях применяются редко. Однако развитие методов планирования эксперимента применительно к промышленным условиям и технический прогресс производства несомненно создадут предпосылки оптимизации эксперимента на всех стадиях изучения процесса.

часть 1 Методы статистического анализа эксперимента

ГЛАВА I
ОСНОВНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СЛУЧАЙНЫХ ВЕЛИЧИН

1. Случайные величины. Аксиомы теории вероятностей. Законы распределения. Под *случайной величиной* понимают величину, принимающую в результате испытания значение, которое принципиально нельзя предсказать, исходя из условий опыта. Случайная величина обладает целым набором допустимых значений, но в результате каждого отдельного опыта принимает лишь какое-то одно из них. В отличие от неслучайных величин, изменяющих свое значение лишь при изменении условий испытания, случайная величина может принимать различные значения даже при неизменном комплексе основных факторов. Изменение случайной величины от опыта к опыту связано с неучитываемыми (случайными) факторами.

Чтобы охарактеризовать случайную величину, нужно прежде всего задать набор ее допустимых значений. Различают *дискретные* и *непрерывные* случайные величины. Возможные значения дискретных случайных величин можно заранее перечислить. Значения непрерывной случайной величины не могут быть заранее перечислены, они непрерывно заполняют некоторый промежуток. Набор допустимых значений сам по себе слабо характеризует случайную величину. Чтобы полностью охарактеризовать случайную величину, необходимо не только указать, какие значения она может принимать, но и как часто.

Пусть дискретная случайная величина X может принимать в результате опыта значения $x_1, x_2, \ldots, x_k$. Отношение числа опытов m_i, в результате которых случайная величина X приняла значение x_i, к общему числу произведенных опытов n называется *частотой появления события* $X = x_i$. Частота m_i/n сама является случайной величиной и меняется в зависимости от количества произведенных опытов. Но при большом числе опытов она имеет тенденцию стабилизироваться около некоторого значения p_i, называемого *вероятностью события* $X = x_i$ (статистическое определение):

$$p_i = P(X = x_i) \approx m_i/n. \tag{I.1}$$

Можно доказать (теорема Бернулли), что каково бы ни было наперед заданное положительное число ε, вероятность того, что частота события отличается от его вероятности больше, чем на ε, стремится к нулю при неограниченном числе испытаний. Следующие аксиомы теории вероятностей были сформулированы А. Н. Колмогоровым.

1. Вероятность появления случайного события A является неотрицательным числом:

$$P(A) \geqslant 0. \tag{1.2}$$

2. Вероятность достоверного события U равна единице:

$$P(U) = 1, \tag{1.3}$$

а вероятность невозможного события V — нулю:

$$P(V) = 0. \tag{1.4}$$

Таким образом,

$$0 \leqslant P \leqslant 1. \tag{1.5}$$

Суммой нескольких событий $(A_1 + A_2 + \ldots + A_n)$ называют событие, состоящее в появлении хотя бы одного из этих событий.

3. Вероятность того, что наступит хотя бы одно из нескольких несовместных событий A_1, $A_2, \ldots, A_n$, равна сумме вероятностей этих событий (теорема сложения вероятностей):

$$P(A_1 + A_2 + \ldots + A_n) = P(A_1) + P(A_2) + \ldots + P(A_n). \tag{1.6}$$

Произведением нескольких событий $(A_1 \cdot A_2 \cdot \ldots \cdot A_n)$ называется событие, состоящее в совместном появлении всех этих событий.

Случайные события A_1, $A_2, \ldots, A_n$ называются *независимыми*, если вероятность любого из них не зависит от того, произойдет или нет любое из остальных событий. Вероятность произведения нескольких независимых событий равна произведению вероятностей этих событий:

$$P(A_1 \cdot A_2 \ldots A_n) = P(A_1) P(A_2) \ldots P(A_n). \tag{1.7}$$

Событие A называется *зависимым от события* B, если вероятность события A меняется в зависимости от того, произошло событие B или нет. Вероятность события A, вычисленная при условии, что произошло другое событие B, называется *условной вероятностью события* A и обозначается $P(A/B)$. Для зависимых событий вероятность произведения двух событий равна произведению вероятности одного из них на условную вероятность другого, вычисленную при условии, что первое произошло:

$$P(AB) = P(A) P(B/A). \tag{1.8}$$

Аналогично, если событие B предшествует событию A и определенным образом влияет на него, то

$$P(AB) = P(B) P(A/B). \tag{1.9}$$

Пример 1. Вероятность безотказной работы вычислительного устройства зависит от трех узлов, соединенных последовательно, каждый из которых независимо от других может выйти из строя. Вероятность безотказной работы первого узла равна $P(A_1)=0{,}9$, второго $P(A_2)=0{,}8$ и третьего $P(A_3)=0{,}8$. Найти надежность вычислительного устройства в целом.

Р е ш е н и е. По теореме умножения для независимых событий (1.7)

$$P(A)=P(A_1)\,P(A_2)\,P(A_3)=0{,}9\cdot 0{,}8\cdot 0{,}8=0{,}576.$$

Сумма вероятностей всех возможных значений случайной величины равна единице:

$$\sum_{i=1}^{n} p_i = 1, \qquad (1.10)$$

так как тот факт, что случайная величина примет в результате опыта одно из своих значений, есть достоверное событие. Эта суммарная вероятность распределена определенным образом между отдельными значениями.

Дискретную случайную величину можно полностью задать *вероятностным рядом,* указав вероятность p_i для каждого значения x_i:

x_i	x_1	x_2	x_3	...	x_n
p_i	p_1	p_2	p_3	...	p_n

Всякое соотношение, устанавливающее связь между возможными значениями случайной величины и соответствующими им вероятностями, называется *законом распределения.* Вероятностный ряд является одним из видов законов распределения случайной величины.

Распределение непрерывной случайной величины нельзя задавать при помощи вероятностей отдельных значений. Число значений так велико, что для большинства из них вероятность принять эти значения равна нулю, т. е. событие может произойти, а вероятность его равна нулю. Для непрерывных случайных величин изучается вероятность того, что в результате опыта значение случайной величины попадет в некоторый интервал.

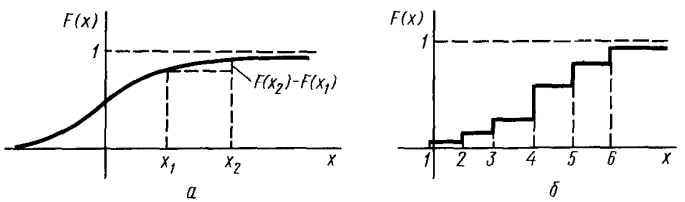


Рис. 2. Функция распределения непрерывной случайной величины *(а)* и дискретной случайной величины *(б)*

Удобно пользоваться вероятностью событий $X<x$, где x — произвольное действительное число, а X — случайная величина. Эта вероятность является функцией от x:

$$P(X<x)=F(x) \qquad (1.11)$$

и называется *функцией распределения* случайной величины.

В виде функции распределения можно задать распределение как непрерывной, так и дискретной случайной величины. Как видно из определения, $F(x)$ есть неубывающая функция x; если $x_1 \leqslant x_2$, то $F(x_1) \leqslant F(x_2)$ (рис. 2, *а*). Ордината этой кривой, соответствующая точке x_1, представляет собой вероятность того, что случайная величина X при испытании окажется $< x_1$. Разность двух ординат, соответствующая точкам x_1 и x_2, дает вероятность того, что значения случайной величины будут лежать в интервале между x_1 и x_2:

$$P(x_1 \leqslant X \leqslant x_2) = F(x_2) - F(x_1). \qquad (I.12)$$

Значения функции распределения при предельных значениях аргумента соответственно равны 0 и 1:

$$F(-\infty) = 0, \quad F(+\infty) = 1. \qquad (I.13)$$

Функция распределения дискретной случайной величины всегда есть разрывная ступенчатая функция, скачки которой происходят в точках, соответствующих возможным значениям случайной величины, и равны вероятностям этих значений (рис. 2, *б*). Сумма всех скачков равна 1.

Для непрерывной случайной величины наиболее часто употребляется производная функции распределения — *плотность распределения* случайной величины X. Если $F(x)$ непрерывна и дифференцируема, то

$$f(x) = \frac{\mathrm{d}F(x)}{\mathrm{d}x}. \qquad (I.14)$$

Задание $f(x)$ тоже полностью определяет случайную величину. Плотность распределения является неотрицательной функцией (рис. 3). Площадь, ограниченная осью x, прямыми $x = x_1$ и $x = x_2$ и кривой плотности распределения, равна вероятности того, что случайная величина примет значения из интервала $x_1 \div x_2$:

$$P(x_1 \leqslant X \leqslant x_2) = \int_{x_1}^{x_2} f(x)\,\mathrm{d}x = F(x_2) - F(x_1), \qquad (I.15)$$

в частности

$$F(x) = P(-\infty \leqslant X \leqslant x) = \int_{-\infty}^{x} f(x)\,\mathrm{d}x. \qquad (I.16)$$

Отсюда же выводится еще одно важное свойство плотности распределения:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\mathrm{d}x = 1, \qquad (I.17)$$

так как попадание случайной величины в интервал $-\infty < X < +\infty$ есть достоверное событие.

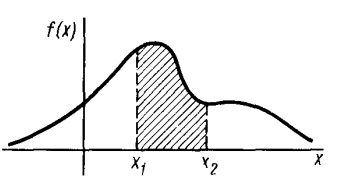


Рис. 3. Плотность распределения непрерывной случайной величины

2. Числовые характеристики. Вместо полного определения случайной величи-

ны в виде законов распределения вероятностей в прикладных задачах ее часто определяют при помощи *числовых характеристик* — чисел (вещественных), выражающих характерные особенности случайной величины, называемых *моментами случайной величины*. Для дискретной случайной величины *начальный момент* k-го порядка определяется формулой

$$m_k = \sum_{i=1}^{n} x_i^k p_i, \quad k = 1, 2, \ldots, \tag{I.18}$$

для непрерывной случайной величины — формулой

$$m_k = \int_{-\infty}^{\infty} x^k f(x)\, dx. \tag{I.19}$$

Начальный момент первого порядка ($k = 1$) называется *математическим ожиданием (средним значением)* случайной величины. Математическое ожидание принято обозначать различным образом:

$$M[X], \quad m_x, \quad m.$$

Для дискретных случайных величин

$$m_1 = M[X] = \sum_{i=1}^{n} x_i p_i. \tag{I.20}$$

Для непрерывных случайных величин математическое ожидание выражается интегралом:

$$m_x = M[X] = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x)\, dx. \tag{I.21}$$

Чаще, чем начальные моменты, применяются *центральные моменты*. Центральный момент k-го порядка для дискретной случайной величины определяется формулой

$$\mu_k = \sum_{i=1}^{n} (x_i - m_x)^k p_i, \tag{I.22}$$

для непрерывной случайной величины — формулой

$$\mu_k = \int_{-\infty}^{\infty} (x - m_x)^k f(x)\, dx. \tag{I.23}$$

Первый центральный момент всегда равен 0, $\mu_1 = 0$. Второй центральный момент называется *дисперсией*. Дисперсией случайной величины называется математическое ожидание квадрата отклонения случайной величины от ее математического ожидания, т. е.

$$D[X] = M[(X - m_x)^2]. \tag{I.24}$$

Для дискретной случайной величины

$$D[X] = \mu_2 = \sum_{i=1}^{n} (x_i - m_x)^2 p_i, \tag{I.25}$$

для непрерывной

$$D[X] = \int_{-\infty}^{\infty} (x - m_x)^2 f(x)\,dx. \qquad (I.26)$$

Другие обозначения для дисперсии D_x, σ_x^2, σ^2. Корень квадратный из второго центрального момента называется *средним квадратичным отклонением* (или *стандартом*):

$$\sigma_x = \sqrt{D[X]} = \sqrt{\mu_2}. \qquad (I.27)$$

Третий центральный момент, разделенный на σ_x^3, называется *коэффициентом асимметрии:*

$$\gamma_1 = \mu_3/\sigma_x^3. \qquad (I.28)$$

Через начальные моменты μ_3 выражается следующим образом:

$$\mu_3 = m_3 - 3m_1m_2 + 2m_1^3. \qquad (I.29)$$

Четвертый центральный момент вычисляется по формуле

$$\mu_4 = m_4 - 4m_1m_3 + 6m_1^2 m_2 - 3m_1^4. \qquad (I.30)$$

Величина

$$\gamma_2 = (\mu_4/\sigma_x^4) - 3 \qquad (I.31)$$

называется *коэффициентом эксцесса.*

На рис. 4 приведены примеры плотностей распределений с ненулевыми коэффициентами асимметрии и эксцесса. Для сравнения штриховой линией изображена кривая с тем же математическим ожиданием m_x и дисперсией σ_x^2, но с нулевыми значениями коэффициентов эксцесса и асимметрии.

Моменты существуют, если соответствующие интегралы или ряды для дискретных величин сходятся. Для случайных величин, значения которых ограничены, моменты всегда существуют. Если у случайной величины X существуют первый и второй моменты, то можно построить *нормированную случайную величину:*

$$X_0 = (X - m_x)/\sigma_x. \qquad (I.32)$$

Для нормированной случайной величины

$$M[X_0] = 0, \quad D[X_0] = 1. \qquad (I.33)$$

Многие таблицы распределений построены именно для нормированных случайных величин. Существуют следующие соотношения между функциями распределения, соответ-

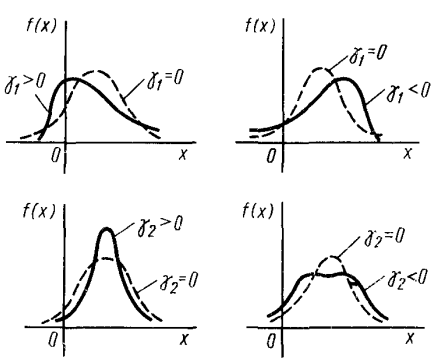


Рис. 4. Плотность распределения с ненулевыми коэффициентами асимметрии и эксцесса

ствующими нормированной величине X_0 и ненормированной X:

$$f(x)=\frac{1}{\sigma_x} f_1(x_0)=\frac{1}{\sigma_x} f_1\left(\frac{x-m_x}{\sigma_x}\right), \tag{I.34}$$

$$f_1(x_0)=\sigma_x f(x)=\sigma_x f(m_x+\sigma_x x_0), \tag{I.35}$$

$$F(x)=F_1(x_0)=F_1\left(\frac{x-m_x}{\sigma_x}\right), \tag{I.36}$$

$$F_1(x_0)=F(x)=F(m_x+\sigma_x x_0). \tag{I.37}$$

Моменты являются общими (интегральными) характеристиками распределения. Вторая группа параметров характеризует отдельные значения функции распределения. К ним относятся *квантили.* Квантилем x_p распределения случайной величины X с функцией распределения $F(x)$ называется решение уравнения

$$F(x_p)=p, \tag{I.38}$$

т. е. x_p есть такое значение случайной величины, что

$$P(X<x_p)=p. \tag{I.39}$$

Если известны два квантиля x_p и x_q, то

$$P(x_p \leqslant X \leqslant x_q)=q-p. \tag{I.40}$$

Наиболее важное значение имеет квантиль $x_{1/2}$, называемый *медианой распределения* (рис. 5). Ордината медианы рассекает площадь между кривой плотности вероятности и осью абсцисс пополам. Если распределение симметрично,

$$x_{1/2}=m_x. \tag{I.41}$$

Квантили x_p и x_{1-p} называются *симметричными.* Для симметричного относительно нуля распределения всегда

$$x_p=-x_{1-p}. \tag{I.42}$$

Наиболее часто в приложениях математической статистики используют математическое ожидание (характеристику положения значений случайной величины на числовой оси) и дисперсию (или среднее квадратичное отклонение), определяющую характер разброса значений случайной величины.

3. Свойства математического ожидания и дисперсии. Примем без доказательства следующие свойства математического ожидания и дисперсии случайных величин:

1. Математическое ожидание неслучайной величины равно значению этой величины:

$$M[c]=c. \tag{I.43}$$

2. Неслучайную величину можно выносить за знак математического ожидания:

$$M[cX]=cM[X]. \tag{I.44}$$

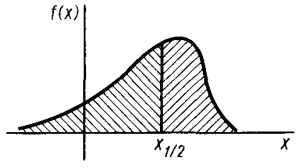


Рис. 5. Медиана распределения

3. Математическое ожидание суммы случайных величин равно сумме математических ожиданий этих случайных величин:

$$M[X_1 + X_2 + \ldots + X_n] = M[X_1] + M[X_2] + \ldots + M[X_n]. \quad (I.45)$$

4. Математическое ожидание произведения независимых случайных величин равно произведению математических ожиданий сомножителей:

$$M[X_1 \cdot X_2 \ldots X_n] = M[X_1] \cdot M[X_2] \ldots M[X_n]. \quad (I.46)$$

Случайные величины называются независимыми, если каждая из них имеет самостоятельное распределение, не зависящее от возможных значений других величин.

Свойства дисперсии:

1. Дисперсия неслучайной величины равна нулю:

$$D[c] = 0. \quad (I.47)$$

2. Неслучайную величину можно выносить за знак дисперсии, возведя ее в квадрат:

$$D[cX] = c^2 D[X]. \quad (I.48)$$

3. Дисперсия случайной величины равна математическому ожиданию квадрата случайной величины минус квадрат ее математического ожидания:

$$D[X] = M[X^2] - m_x^2. \quad (I.49)$$

4. Дисперсия суммы независимых случайных величин равна сумме дисперсий этих величин:

$$D[X_1 + X_2 + \ldots + X_n] = D[X_1] + D[X_2] + \ldots + D[X_n]. \quad (I.50)$$

Используя свойства математического ожидания и дисперсии, покажем, что для нормированной случайной величины справедливо утверждение (I.33), т. е. если $X_0 = (X - m_x)/\sigma_x$, то

$$M[X_0] = 0, \quad D[X_0] = 1,$$

$$M[X_0] = M\left(\frac{X - m_x}{\sigma_x}\right) = \frac{1}{\sigma_x} M(X - m_x) = \frac{1}{\sigma_x}\left[M(X) - m_x\right] = 0,$$

$$D[X_0] = D\left(\frac{X - m_x}{\sigma_x}\right) = \frac{1}{\sigma_x^2} D(X - m_x) = \frac{1}{\sigma_x^2}\left[D(X) - 0\right] = \frac{D[X]}{\sigma_x^2} = 1.$$

Пример 2. В результате испытаний двух расходомеров установлена вероятность наблюдения помех, оцениваемых по двухбалльной системе:

Уровень помех, балл	Вероятность наблюдения помех данного уровня	
	расходомер 1	расходомер 2
1	0,20	0,03
2	0,065	0,15

По приведенным данным выбрать расходомер, который в среднем имеет меньший уровень помех и более устойчивые показания.

Р е ш е н и е. Обозначим через X случайный уровень помех расходомера. Определим средний уровень помех для каждого расходомера по формуле (I.20):

$$M_1[X] = 0{,}20 \cdot 1 + 0{,}065 \cdot 2 = 0{,}33,$$

$$M_2[X] = 0{,}03 \cdot 1 + 0{,}15 \cdot 2 = 0{,}33.$$

Таким образом, средний уровень помех у обоих расходомеров одинаков и по этому показателю нельзя выбрать лучший прибор. Определим устойчивость показаний, для этого по формуле (I.25) посчитаем дисперсии уровня помех для каждого расходомера:

$$D_1[X] = (1 - 0{,}33)^2 \cdot 0{,}2 + (2 - 0{,}33)^2 \cdot 0{,}065 = 0{,}11;$$

$$D_2[X] = (1 - 0{,}33)^2 \cdot 0{,}03 + (2 - 0{,}33)^2 \cdot 0{,}15 = 0{,}43.$$

Следовательно, лучшим является первый расходомер.

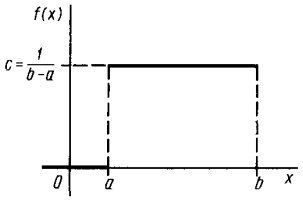


Рис. 6. Плотность вероятности равномерного распределения

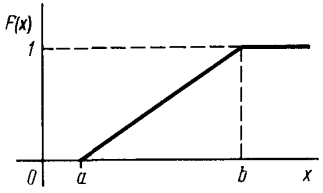


Рис. 7. График функции $F(x)$ равномерного распределения

4. Равномерное распределение. Определим основные числовые характеристики одного из простейших непрерывных распределений — *равномерного распределения.* Равномерным распределением называется распределение, для которого плотность вероятности постоянна в определенных пределах и равна нулю вне этих пределов (рис. 6). Плотность $f(x)$ постоянна и равна c на отрезке $[a, b]$; вне этого отрезка она равна нулю:

$$f(x) = \begin{cases} c \text{ при } a \leqslant x \leqslant b, \\ 0 \text{ при } x < a \text{ или } x > b. \end{cases}$$

Так как площадь, ограниченная кривой распределения, равна единице: $c(b - a) = 1$, то $c = 1/(b - a)$, и плотность распределения $f(x)$ имеет вид

$$f(x) = \frac{1}{b - a} \text{ при } a \leqslant x \leqslant b,$$

$$f(x) = 0 \text{ при } x < a \text{ или } x > b. \qquad (I.51)$$

Функция распределения выражается площадью кривой распределения, лежащей левее точки x. Следовательно,

$$F(x) = \begin{cases} 0 \text{ при } x < a, \\ \dfrac{x - a}{b - a} \text{ при } a \leqslant x \leqslant b, \\ 1 \text{ при } x > b. \end{cases} \qquad (I.52)$$

График функции $F(x)$ приведен на рис. 7. Математическое ожидание случайной величины X, имеющей равномерное распределение на отрезке $[a, b]$, равно

$$m_x = \int_a^b \frac{x}{b-a}\,dx = \frac{a+b}{2}\,. \qquad (I.53)$$

В силу симметричности равномерного распределения медиана величины X также равна $(a+b)/2$.

По формуле (I.26) определим дисперсию случайной величины X:

$$D_x = \frac{1}{b-a}\int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 dx = \frac{(b-a)^2}{12}\,. \qquad (I.54)$$

Коэффициент асимметрии $\gamma_1 = \mu_3/\sigma_x^3$ равен нулю (распределение симметрично).

Для определения коэффициента эксцесса найдем четвертый центральный момент:

$$\mu_4 = \frac{1}{b-a}\int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^4 dx = \frac{(b-a)^4}{80}\,,$$

отсюда

$$\gamma_2 = \frac{\mu_4}{\sigma_x^4} - 3 = -1{,}2.$$

Вероятность попадания равномерно распределенной случайной величины X на отрезок $[\alpha, \beta]$, представляющий собой часть отрезка $[a, b]$ (рис. 8), определяется отношением длины отрезка $[\alpha, \beta]$ к длине всего отрезка $[a, b]$:

$$P(\alpha < X < \beta) = \frac{\beta - \alpha}{b-a}\,. \qquad (I.55)$$

5. Нормальное распределение. Непрерывная случайная величина X называется распределенной по *нормальному закону*, если ее плотность распределения имеет вид

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_x}\, e^{-\frac{(x-m_x)^2}{2\sigma_x^2}} \quad (-\infty < x < \infty), \qquad (I.56)$$

где m_x и σ_x^2 — математическое ожидание и дисперсия случайной величины X.

Функция распределения равна:

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_x}\int_{-\infty}^{x} e^{-\frac{(x-m_x)^2}{2\sigma_x^2}}\,dx \qquad (I.57)$$

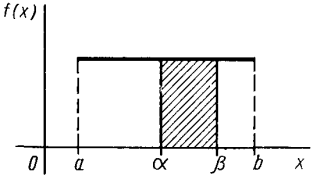


Рис. 8. Определение вероятности попадания равномерно распределенной случайной величины на заданный участок

Нормальное распределение наиболее часто встречается на практике и теоретически наиболее полно разработано. Нормальный закон при некоторых условиях является предельным законом для суммы большого числа n независимых случайных величин, каждая из которых подчинена какому угодно закону распределения (теорема Ляпунова). Основное ограничение состоит в том, чтобы все слагаемые играли в общей сумме относительно малую роль. Множество событий происходит случайно вследствие воздействия на них большого числа независимых (или слабо зависимых) возмущений. У таких явлений закон распределения близок к нормальному. Нормальный закон распределения широко используется при обработке наблюдений. Пользуясь методами теории информации, можно показать, что нормальное распределение содержит минимум информации о случайной величине по сравнению с любыми распределениями с той же дисперсией. Следовательно, замена некоторого распределения эквивалентным нормальным не может привести к переоценке точности наблюдений. График плотности нормального распределения называется *нормальной кривой* или *кривой Гаусса* (рис. 9).

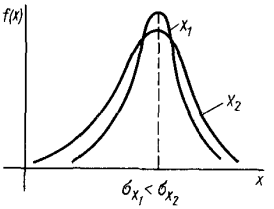


Рис. 9. Кривая Гаусса

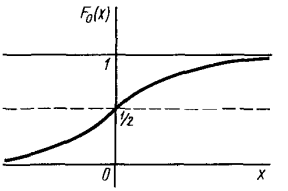


Рис. 10. График функции $F_0(x)$ стандартного нормального распределения

Нормальное распределение нормированной случайной величины называется *стандартным*. Его функция распределения имеет вид

$$F_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x} e^{-x^2/2}\,dx. \qquad (I.58)$$

График этой функции представлен на рис. 10. Для такой величины

$$P(x_1 < X_0 < x_2) = F_0(x_2) - F_0(x_1). \qquad (I.59)$$

Функция

$$\Phi(x) = F_0(x) - \frac{1}{2} \qquad (I.60)$$

называется *функцией Лапласа:*

$$\Phi(x) = F_0(x) - F_0(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{0}^{x} e^{-x^2/2}\,dx. \qquad (I.61)$$

Значения этой функции приводятся в табл. 1 приложения. Функция Лапласа — нечетная функция, т. е.

$$\Phi(-x) = -\Phi(x), \tag{I.62}$$

поэтому таблицы значений $\Phi(x)$ составлены лишь для $x>0$.

Для нормированной случайной величины, учитывая (I.59) и (I.60), имеем

$$P(x_1 < X_0 < x_2) = \Phi(x_2) + {}^1/_2 - \Phi(x_1) - {}^1/_2 = \Phi(x_2) - \Phi(x_1). \tag{I.63}$$

В общем случае

$$P(x_1 < X < x_2) = P\left(\frac{x_1 - m_x}{\sigma_x} < X_0 < \frac{x_2 - m_x}{\sigma_x}\right) =$$

$$= \Phi\left(\frac{x_2 - m_x}{\sigma_x}\right) - \Phi\left(\frac{x_1 - m_x}{\sigma_x}\right). \tag{I.64}$$

Во многих практических задачах x_1 и x_2 симметричны относительно математического ожидания, в частности в задаче об абсолютном отклонении. *Абсолютным отклонением* называется величина

$$\Delta X = |X - m_x|. \tag{I.65}$$

Требуется найти вероятность того, что абсолютное отклонение случайной величины не превзойдет некоторого заданного числа ε:

$$P(\Delta X < \varepsilon) = P(m_x - \varepsilon < X < m_x + \varepsilon). \tag{I.66}$$

В частности, для нормированной случайной величины

$$P(\Delta X_0 < \varepsilon) = P(-\varepsilon < X_0 < +\varepsilon) = \Phi(\varepsilon) - \Phi(-\varepsilon) = 2\Phi(\varepsilon). \tag{I.67}$$

Для случайной величины, имеющей нормальное распределение с параметрами m_x и σ_x,

$$P(\Delta X < \varepsilon) = P\left(\Delta X_0 < \frac{\varepsilon}{\sigma_x}\right) = 2\Phi\left(\frac{\varepsilon}{\sigma_x}\right). \tag{I.68}$$

Обозначив $\varepsilon/\sigma_x = k$, получим из (I.68) следующее соотношение:

$$P(\Delta X < k\sigma_x) = 2\Phi(k), \tag{I.69}$$

отсюда

$$P(\Delta X < \sigma_x) = 2\Phi(1) = 0{,}6826,$$

$$P(\Delta X < 2\sigma_x) = 2\Phi(2) = 0{,}9544, \tag{I.70}$$

$$P(\Delta X < 3\sigma_x) = 2\Phi(3) = 0{,}9973.$$

Таким образом, отклонения больше чем утроенный стандарт (среднеквадратическое отклонение) практически невозможны. Нормальное распределение обладает свойством линейности: если независимые случайные величины X_1 и X_2 имеют нормальные распределения, то для произвольных чисел α и β величина

$$Y = \alpha X_1 + \beta X_2 \tag{I.71}$$

также имеет нормальное распределение, причем из свойств математического ожидания и дисперсии следует

$$m_y = \alpha m_{x_1} + \beta m_{x_2} \tag{I.72}$$

и

$$\sigma_y = \sqrt{\alpha^2 \sigma_{x_1}^2 + \beta^2 \sigma_{x_2}^2}\,. \tag{I.73}$$

Пример 3. Толщину керамической глазурованной плитки h можно считать нормально распределенной случайной величиной со стандартом $\sigma = 0{,}3$ мм. Какова вероятность брака, если бракуются плитки, толщина которых отклоняется от номинала (математического ожидания) более чем на 0,5 мм.

Р е ш е н и е. Определение вероятности брака сводится к решению задачи об абсолютном отклонении для случайной величины h — толщины плитки. Необходимо определить $P(\Delta h \geqslant 0{,}5)$. Найдем вероятность противоположного события по формуле (I.68):

$$P(\Delta h < 0{,}5) = 2\Phi(0{,}5/0{,}3) = 2\Phi(1{,}67) = 2 \cdot 0{,}4525 = 0{,}905,$$

откуда

$$P(\Delta h \geqslant 0{,}5) = 1 - 0{,}905 = 0{,}095.$$

6. Системы случайных величин. В практических приложениях теории вероятностей и математической статистики очень часто приходится иметь дело с задачами, в которых результат эксперимента описывается не одной случайной величиной, а двумя или более случайными величинами, образующими систему.

Свойства системы нескольких случайных величин не исчерпываются свойствами отдельных величин ее составляющих: помимо этого, они определяются также взаимными связями (зависимостями) между случайными величинами. Информация о случайных величинах содержится в законах распределения. Рассмотрим систему из двух случайных величин (X, Y).

Функцией распределения системы двух случайных величин (X, Y) называется вероятность совместного выполнения двух неравенств:

$$F(x, y) = P(X < x, Y < y). \tag{I.74}$$

В § 1 приведены основные свойства функции распределения $F(x)$ для одной случайной величины. Сформулируем аналогичные свойства для функции распределения системы (X, Y).

1. Функция распределения $F(x, y)$ есть неубывающая функция обоих аргументов, т. е.

$$\begin{aligned} &\text{при } x_2 > x_1 \quad F(x_2, y) \geqslant F(x_1, y); \\ &\text{при } y_2 > y_1 \quad F(x, y_2) \geqslant F(x, y_1). \end{aligned} \tag{I.75}$$

2. Всюду на $-\infty$ функция распределения равна нулю:

$$F(x, -\infty) = F(-\infty, y) = F(-\infty, -\infty) = 0. \tag{I.76}$$

3. При одном из аргументов, равном $+\infty$, функция распределения системы превращается в функцию распределения случайной величины, соответствующей другому аргументу:

$$\begin{aligned} F(x, +\infty) &= F_1(x), \\ F(+\infty, y) &= F_2(y), \end{aligned} \tag{I.77}$$

где $F_1(x)$, $F_2(y)$ — соответственно функции распределения случайных величин X и Y.

4. Если оба аргумента равны $+\infty$, то функция распределения системы равна единице:

$$F(+\infty, +\infty) = 1. \tag{I.78}$$

Зная функцию распределения системы $F(x, y)$, можно определить вероятность попадания случайной точки (X, Y) в прямоугольник R, ограниченный абсциссами α и β и ординатами γ и δ (рис. 11):

$$P[(X, Y) \subset R] = F(\beta, \delta) - F(\alpha, \delta) - F(\beta, \gamma) + F(\alpha, \gamma). \tag{I.79}$$

Если функция $F(x, y)$ непрерывна и дифференцируема, то можно определить *плотность распределения* системы $f(x, y)$ как вторую смешанную производную функции $F(x, y)$:

$$f(x, y) = \frac{\partial^2 F(x, y)}{\partial x \partial y}. \tag{I.80}$$

Вероятность попадания случайной точки (X, Y) в произвольную область D выражается интегралом от элементов вероятности $f(x, y)$ по области D:

$$P[(X, Y) \subset D] = \iint\limits_{(D)} f(x, y)\, dx\, dy. \tag{I.81}$$

В соответствии с (I.81) вероятность попадания в прямоугольник R определяется следующим образом:

$$P[(X, Y) \subset R] = \int\limits_{\alpha}^{\beta} \int\limits_{\gamma}^{\delta} f(x, y)\, dx\, dy. \tag{I.82}$$

Плотность распределения системы есть функция неотрицательная:

$$f(x, y) \geqslant 0. \tag{I.83}$$

Двойной интеграл в бесконечных пределах от плотности распределения системы равен единице

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x, y)\, dx\, dy = 1 \tag{I.84}$$

и представляет собой вероятность попадания на всю координатную плоскость, т. е. вероятность достоверного события. Функция распределения $F(x, y)$ выражается через плотность распределения следующим образом:

$$F(x, y) = \int\limits_{-\infty}^{x} \int\limits_{-\infty}^{y} f(x, y)\, dx\, dy. \tag{I.85}$$

Зная плотность распределения системы, можно получить плотности распределения каждой из величин:

$$F(x) = F(x, \infty) = \int\limits_{-\infty}^{x} \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x, y)\, dx\, dy, \tag{I.86}$$

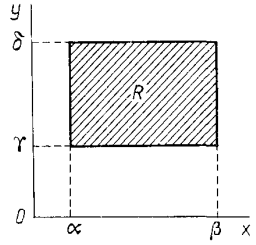


Рис. 11. Прямоугольник R

откуда, дифференцируя по x, имеем

$$f_1(x) = \frac{dF_1(x)}{dx} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y)\, dy, \tag{I.87}$$

аналогично

$$f_2(y) = \frac{dF_2(y)}{dy} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y)\, dx. \tag{I.88}$$

Формулы (I.77) и (I.86) – (I.88) дают возможность по известному закону распределения системы найти законы распределения отдельных величин, входящих в систему.

В то же время для того чтобы исчерпывающим образом охарактеризовать систему, получить ее закон распределения, недостаточно знать распределение каждой из величин, нужно еще знать зависимость между величинами, входящими в систему. Наиболее полно эта зависимость может быть охарактеризована с помощью так называемых *условных законов распределения*.

Условным законом распределения величины Y, входящей в систему (X, Y), называется ее закон распределения, вычисленный при условии, что другая случайная величина X приняла определенное значение x. Условная функция распределения обозначается $F(y \mid x)$, условная плотность распределения $f(y \mid x)$.

Можно показать, что плотность распределения системы двух величин равна плотности распределения одной из величин, входящих в систему, умноженной на условную плотность распределения другой величины, вычисленную при условии, что первая величина приняла заданное значение:

$$f(x, y) = f_1(x)\, f(y \mid x) \tag{I.89}$$

или

$$f(x, y) = f_2(y)\, f(x \mid y). \tag{I.90}$$

Формулы (I.89) и (I.90) часто называют *теоремой умножения законов распределения*. Из (I.89) и (I.90) следует:

$$f(y \mid x) = \frac{f(x, y)}{f_1(x)}, \tag{I.91}$$

$$f(x \mid y) = \frac{f(x, y)}{f_2(y)}, \tag{I.92}$$

или, с учетом (I.87) и (I.88),

$$f(y \mid x) = \frac{f(x, y)}{\int_{-\infty}^{\infty} f(x, y)\, dy}, \tag{I.93}$$

$$f(y \mid x) = \frac{f(x, y)}{\int_{-\infty}^{\infty} f(x, y)\, dx}. \tag{I.94}$$

7. Стохастическая связь. Между случайными величинами обычно существует такая связь, при которой с изменением одной величины меняется распределение другой. Такая связь называется стохастической.

В отличие от функциональной зависимости, при которой, зная значение одной из величин, можно точно указать значение другой, при стохастической связи с изменением величины X величина Y лишь имеет тенденцию также изменяться (например, возрастать или убывать при возрастании X). Эта тенденция соблюдается лишь в среднем, в общих чертах и в каждом отдельном случае от нее возможны отступления.

Стохастическая связь может быть более или менее тесной, по мере увеличения тесноты стохастической зависимости она все более приближается к функциональной. Таким образом, функциональную зависимость можно рассматривать как предельный случай наиболее тесной стохастической связи. Другой крайний случай — полная независимость случайных величин.

Для непрерывных случайных величин условие независимости может быть записано в виде

$$f(y|x) = f_2(y) \tag{I.95}$$

или

$$f(x|y) = f_1(x). \tag{I.96}$$

Для независимых непрерывных случайных величин теорема умножения законов распределения принимает вид

$$f(x, y) = f_1(x) f_2(y), \tag{I.97}$$

т. е. плотность распределения системы независимых случайных величин равна произведению плотностей распределения отдельных величин, входящих в систему. Условие (I.97) может рассматриваться как необходимое и достаточное условие независимости случайных величин.

Изложенный выше критерий суждения о независимости или зависимости случайных величин исходит из предположения, что закон распределения системы нам известен. На практике обычно закон распределения системы не известен. Задача выявления и оценки тесноты стохастической связи решается с помощью некоторых показателей, оценивающих те или иные стороны стохастической связи. Из них важнейшим в силу простоты его определения по экспериментальным данным является *коэффициент корреляции.*

Если две случайные величины Y и X независимы, то дисперсия суммы этих величин равна сумме дисперсий (см. I.50):

$$D(X+Y) = D(X) + D(Y).$$

Если данное равенство не соблюдается, это признак зависимости. Из определения дисперсии (I.24) и свойств математического ожидания (I.45) следует:

$$\begin{aligned} D\{X+Y\} &= M[X+Y-M(X+Y)]^2 = M[X-M(X)]^2 + \\ &+ 2M\{[X-M(X)][Y-M(Y)\} + M[Y-M(Y)]^2 = \\ &= D(X) + 2M\{[X-M(X)][Y-M(Y)]\} + D(Y). \end{aligned} \tag{I.98}$$

Зависимость между X и Y существует, если

$$M[(X-m_x)(Y-m_y)] \neq 0. \tag{I.99}$$

Величина (I.99) называется *корреляционным моментом, моментом связи* или *ковариацией* cov $\{XY\}$, (cov_{xy}) случайных величин X и Y.

Из (I.99) видно, что ковариация характеризует не только зависимость величин, но и их рассеяние. Действительно, если одна из величин X, Y мало отклоняется от своего математического ожидания, то ковариация будет мала, какой бы тесной зависимостью ни были связаны величины X и Y. Поэтому для характеристики связи между случайными величинами X и Y в чистом виде переходят от cov_{xy} к безразмерному показателю:

$$r_{xy} = \frac{\mathrm{cov}_{xy}}{\sigma_x \sigma_y} = \frac{M[(X-m_x)(Y-m_y)]}{\sigma_x \sigma_y}, \tag{I.100}$$

где σ_x, σ_y — средние квадратичные отклонения величин X и Y. Этот показатель называется *коэффициентом корреляции* величин X и Y.

Для независимых случайных величин коэффициент корреляции равен нулю, однако обратное утверждение несправедливо — коэффициент корреляции (и ковариация) могут быть равны нулю, а случайные величины зависимы: связь, не сказываясь на дисперсиях, проявляется в моментах более высокого порядка. В общем случае справедливо более слабое утверждение: случайные величины, для которых ковариация (а значит, и коэффициент корреляции) равна нулю, называются *некоррелированными*.

Таким образом, независимые случайные величины всегда являются некоррелированными, однако из некоррелированности величин в общем случае еще не следует их независимость. И только в случае нормального распределения равенство нулю коэффициента корреляции однозначно свидетельствует об отсутствии связи между случайными величинами.

Плотность нормального распределения двух случайных величин выражается формулой

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi \sigma_x \sigma_y \sqrt{1-r^2}} \exp\left\{ -\frac{1}{2(1-r^2)} \left[\frac{(x-m_x)^2}{\sigma_x^2} - \right.\right.$$
$$\left.\left. - \frac{2r(x-m_x)(y-m_y)}{\sigma_x \sigma_y} + \frac{(y-m_y)^2}{\sigma_y^2} \right] \right\}, \tag{I.101}$$

где r — коэффициент корреляции. Предположим, что случайные величины X, Y, подчиняющиеся закону распределения (I. 101), некоррелированы, т. е. $r=0$. Получим

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi \sigma_x \sigma_y} \exp\left[-\frac{(x-m_x)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y-m_y)^2}{2\sigma_y^2} \right] =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_x} \exp\left[-\frac{(x-m_x)^2}{2\sigma_x^2} \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_y} \exp\left[-\frac{(y-m_y)^2}{2\sigma_x^2} \right] =$$

$$= f_1(x)\, f_2(y), \qquad (I.102)$$

т. е. плотность распределения системы равна произведению плотностей распределения отдельных величин, входящих в систему, а это значит, что случайные величины X и Y независимы. Таким образом, для системы случайных величин, подчиненных нормальному закону, равенство нулю коэффициента корреляции свидетельствует не только о некоррелированности, но и о независимости случайных величин, поэтому важность роли коэффициента корреляции как показателя связи в этом случае существенно возрастает.

Отметим следующие свойства коэффициента корреляции. Коэффициент корреляции не меняется от прибавления к X и Y каких-либо неслучайных слагаемых, от умножения X и Y на положительные числа. Если одну из величин, не меняя другой, умножить на -1, то на -1 умножится и коэффициент корреляции.

Поэтому коэффициент корреляции r_{xy} не изменится, если от исходных случайных величин перейти к нормированным:

$$X_0 = \frac{X - m_x}{\sigma_x}, \quad Y_0 = \frac{Y - m_y}{\sigma_y}, \quad r_{x_0 y_0} = r_{xy}.$$

На основании (I.98) и (I.100) имеем

$$D(X+Y) = D(X) + D(Y) + 2r_{yx}\sqrt{D(X)\,D(Y)}. \qquad (I.103)$$

Аналогично для дисперсии разности двух случайных величин можно записать

$$D(X-Y) = D(X) + D(Y) - 2r_{yx}\sqrt{D(X)\,D(Y)}. \qquad (I.104)$$

Выражения (I.101) и (I.102) для нормированных случайных величин с учетом того, что $D(X_0)=D(Y_0)=1$, примут вид

$$D(X_0+Y_0) = 2 + 2r_{yx}, \quad D(X-Y_0) = 2 - 2r_{yx}. \qquad (I.105)$$

Так как дисперсия — величина неотрицательная, имеем

$$2 + 2r_{yx} \geqslant 0; \qquad 2 - 2r_{yx} \geqslant 0;$$

$$r_{yx} \geqslant -1; \qquad r_{yx} \leqslant +1;$$

и окончательно

$$-1 \leqslant r_{yx} \leqslant +1. \qquad (I.106)$$

Крайние значения коэффициента корреляции $r_{yx} = \pm 1$ соответствуют линейной функциональной зависимости

$$y = b_0 + b_1 x,$$

причем знак коэффициента b_1 соответствует знаку коэффициента корреляции.

В общем случае, когда величины X и Y связаны произвольной стохастической зависимостью, коэффициент корреляции может иметь значение в пределах $-1 < r_{xy} < 1$.

При $r_{xy}>0$ существует положительная корреляционная связь между величинами X и Y, при $r_{xy}<0$ — отрицательная.

Коэффициент корреляции характеризует не всякую зависимость, а только линейную. Линейная вероятностная зависимость случайных величин заключается в том, что при возрастании одной случайной величины другая имеет тенденцию возрастать (или убывать) по линейному закону. Коэффициент корреляции характеризует степень тесноты линейной зависимости.

Определим условные законы распределения $f(y \mid x)$ и $f(x \mid y)$ по формулам (I.91) и (I.92) для системы случайных величин, подчиняющихся нормальному закону распределения (I.101):

$$f(y \mid x) = \frac{1}{\sigma_y \sqrt{1-r^2}\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2(1-r^2)}\left(\frac{y-m_y}{\sigma_y} - r\frac{x-m_x}{\sigma_x}\right)^2\right], \tag{I.107}$$

$$f(x \mid y) = \frac{1}{\sigma_x \sqrt{1-r^2}\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2(1-r^2)}\left(\frac{x-m_x}{\sigma_x} - r\frac{y-m_y}{\sigma_y}\right)^2\right]. \tag{I.108}$$

Из (I.107) имеем

$$f(y \mid x) = \frac{1}{\sigma_y \sqrt{1-r^2}\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2(1-r^2)\sigma_y^2}\left[y - m_y - r\frac{\sigma_y}{\sigma_x}(x-m_x)\right]^2\right\}. \tag{I.109}$$

Очевидно, (I.109) есть выражение для плотности нормального закона распределения с математическим ожиданием

$$m_{y|x} = m_y + r\frac{\sigma_y}{\sigma_x}(x-m_x) \tag{I.110}$$

и средним квадратичным отклонением

$$\sigma_{y|x} = \sigma_y(1-r^2). \tag{I.111}$$

Величина $m_{y|x}$ называется *условным математическим ожиданием* величины Y при данном X. Линейная зависимость (I.110) называется регрессией Y на X. Аналогично, прямая

$$m_{x|y} = m_x + r\frac{\sigma_x}{\sigma_y}(y-m_y) \tag{I.112}$$

есть регрессия X на Y. Линии регрессии совпадают только при наличии линейной функциональной зависимости Y от X. При независимых X и Y линии регрессии параллельны координатным осям.

В этой главе были рассмотрены основные характеристики случайных величин. Полная информация о случайных величинах содержится в законах распределения. Рассмотрены равномерный и нормальный законы распределения вероятностей.

Во многих прикладных задачах нет необходимости использовать законы распределения. Вместо них можно воспользоваться числовыми

характеристиками случайной величины, в сжатой форме выражающими наиболее существенные особенности распределения. В теории вероятностей и математической статистике применяется большое количество числовых характеристик. В настоящей главе введены понятия о моментах распределения, отмечены свойства наиболее часто применяемых моментов — математического ожидания и дисперсии.

Введено понятие о стохастической связи между случайными величинами и коэффициенте корреляции, характеризующем тесноту линейной зависимости между случайными величинами. Исследование зависимости между случайными величинами — важная прикладная задача.

Упражнения

1. Сто стержней из нового полимера подвергаются выборочному контролю на прочность. Условием непригодности всей партии является наличие хотя бы одного недостаточно прочного стержня среди пяти проверяемых. Какова вероятность для данной партии быть непринятой, если она содержит 5% недостаточно прочных стержней?

2. Случайная величина X подчинена закону распределения, плотность вероятности которого имеет вид

$$f(x) = \begin{cases} ax \text{ при } 0 < x < 1 \\ 0 \text{ при } x < 0 \text{ и } x > 1 \end{cases}$$

Определить математическое ожидание, дисперсию, среднее квадратичное отклонение и асимметрию распределения.

3. Функция распределения непрерывной случайной величины X задана выражением

$$F(x) = \begin{cases} 0 \text{ при } x \leqslant 0 \\ ax^2 \text{ при } 0 < x \leqslant 1 \\ 1 \text{ при } x > 1 \end{cases}$$

Найти: а) коэффициент a; б) плотность распределения $f(x)$; в) вероятность попадания величины X в интервал $(0{,}25; 0{,}5)$.

4. Ошибки измерения есть случайная величина, подчиненная нормальному закону с параметрами $m = 1{,}2$; $\sigma \approx 0{,}8$. Найти вероятность попадания этой величины в интервал $(-1{,}6; +1{,}6)$.

5. В результате проверки точности работы прибора установлено, что 80% ошибок не выходит за пределы $\pm 5°C$. Определить среднюю квадратичную ошибку прибора, если известно, что систематических ошибок прибор не имеет, а случайные ошибки распределены по нормальному закону.

ГЛАВА II
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

1. Генеральная совокупность и случайная выборка. На практике исследователь всегда располагает лишь ограниченным числом значений случайной величины, представляющим собой некоторую *выборку* из генеральной совокупности. Под *генеральной совокупностью* понимают все допустимые значения случайной величины. При анализе какой-либо технологической случайной величины, непрерывно изменяющейся по времени (например, температура, давление и т. п.), под наблюдаемыми значениями случайной величины понимают значения технологического

параметра в дискретные моменты времени, разделенные таким интервалом, при котором соседние значения можно считать полученными из независимых опытов.

Выборка называется *репрезентативной* (представительной), если она дает достаточное представление об особенностях генеральной совокупности. Если о генеральной совокупности ничего не известно, единственной гарантией репрезентативности может служить случайный отбор. В очень многих исследованиях случайный отбор или случайное перемешивание (*рандомизация*) данных необходима. Для имитации случайного отбора можно использовать таблицы случайных чисел. Допустим, необходимо отобрать 10 элементов из совокупности, содержащей 100 элементов. Для этого надо пронумеровать элементы генеральной совокупности от 00 до 99. Затем, начиная с любого места таблиц, выписать две последние цифры десяти идущих подряд чисел. Например, начиная с первого числа получились номера

82 49 18 48 09 50 17 10 37 51

(если числа повторяются, их надо опустить). Полученные номера показывают, какие элементы надо отобрать. Выбранную последовательность изменять нельзя. Нарушение случайности, как правило, ведет к искажению результатов. Аналогично отбору производится рандомизация элементов. При этом нужно выписывать случайные номера до тех пор, пока они не охватят все заданные элементы.

Из случайного характера выборок немедленно вытекает, что любое суждение о генеральной совокупности по выборке само случайно. Предположим, что в результате эксперимента получена выборка x_1, x_2, ..., x_n значений случайной величины X. Пусть x — некоторая точка числовой оси x; обозначим через n_x число выборочных значений, расположенных левее x на той же оси. Отношение n_x/n представляет собой частоту полученных в выборке значений случайной величины X, меньших x. Эта частота есть функция от x. Обозначим ее $F_n(x)$:

$$F_n(x) = n_x/n. \qquad \text{(II.1)}$$

Функция распределения $F_n(x)$, получаемая по выборке, называется *эмпирической* или *выборочной функцией распределения* (в отличие от распределения генеральной совокупности, или теоретического распределения). Для каждой выборки эмпирическая функция распределения будет своей, но все эмпирические функции распределения одной и той же случайной величины будут иметь нечто общее, что является информацией о функции распределения этой случайной величины.

Можно доказать (теорема Гливенко), что с вероятностью 1 при $n \longrightarrow \infty$ максимальная разность между функциями распределения случайных величин $F_n(x)$ и $F(x)$ стремится к 0:

$$P\left(\sup_{n\to\infty} \left| F(x) - F_n(x) \right| \to 0\right) = 1, \qquad \text{(II.2)}$$

Практически это означает, что при достаточно большой выборке функцию распределения генеральной совокупности приближенно можно заменять выборочной функцией распределения. Пусть $x_1 < x_2 < x_3 < \ldots < x_n$ — упоря-

доченная по величине выборка из генеральной совокупности случайной величины X, или *вариационный ряд*. Все элементы выборки имеют одинаковую вероятность, равную $1/n$. Поэтому, согласно определению функции $F_n(x)$, имеем:

$$F_n(x) = 0 \quad \text{при} \quad x < x_1;$$
$$F_n(x) = \frac{k}{n} \quad \text{при} \quad x_k \leqslant x \leqslant x_{k+1}, \; k = 1,2, \ldots, n-1; \tag{II.3}$$
$$F_n(x) = 1 \quad \text{при} \quad x > x_n.$$

На рис. 12 приведен график функции $F_n(x)$. Все элементы выборки оказываются точками разрыва этой функции. В точке разрыва $x = x_k$ функция $F_n(x)$ скачком переходит от значения $(k-1)/n$ (в интервале $x_{k-1} \leqslant x < x_k$) к значению k/n, удерживая последнее значение в следующем интервале.

При обработке выборок больших объемов используют метод «сгруппированных данных»: выборка объема n преобразуется в статистический ряд. Для этого весь диапазон изменения случайной величины в выборке $x_{\min} \div x_{\max}$ делится на k равных интервалов. Число интервалов можно выбирать по полуэмпирической формуле

$$k = 1 + 3{,}2 \lg n \tag{II.4}$$

с округлением до ближайшего целого. Длина интервала h равна

$$h = (x_{\max} - x_{\min})/k. \tag{II.5}$$

Число элементов выборки, попавших в i-й интервал, обозначим через n_i. Величина, равная

$$p_i^* = n_i/n, \tag{II.6}$$

определяет относительную частоту попадания случайной величины в i-й интервал. Все точки, попавшие в i-й интервал, относят к его середине x_i^*:

$$x_i^* = (x_{i-1} + x_i)/2. \tag{II.7}$$

Статистический ряд записывается в виде табл. 1.

График, построенный по данным табл. 1 (рис. 13), называется *гистограммой эмпирического* или *выборочного распределения*. На рис. 14 приведен график функции $F_n(x)$, построенный по сгруппированным данным.

При обработке наблюдений обычно не удается получить эмпирическую функцию распределения. Даже простейший анализ условий проведения опытов позволяет с достаточной степенью уверенности определять тип неизвестной функции распределения. Окончательное уточнение неизвестной функции распределения сводится к определению некоторых числовых параметров распределения. По выборке могут быть

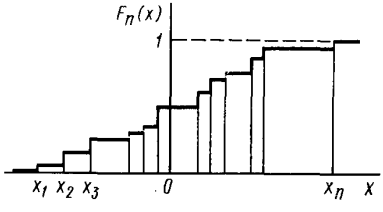


Рис. 12. Выборочная функция распределения

рассчитаны выборочные статистические характеристики (выборочное среднее, дисперсия и т. д.), которые являются *оценками* соответствующих генеральных параметров. Оценки, получаемые по выборке, сами являются величинами случайными, но нужная точность при этом достигается при меньших n, чем при непосредственном использовании теоремы

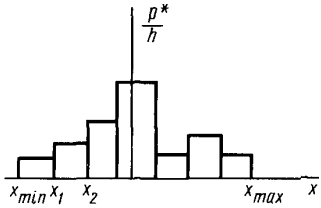


Рис. 13. Гистограмма распределения

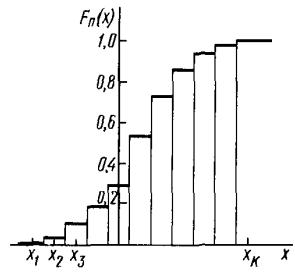


Рис. 14. График функции $F_n(x)$, построенный по сгруппированным данным

Гливенко. К оценкам обычно предъявляются требования *состоятельности* и *несмещенности*. Оценка $a^*(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ называется состоятельной, если с увеличением объема выборки n она стремится (по вероятности) к оцениваемому параметру a. Эмпирические (выборочные) моменты являются состоятельными оценками теоретических моментов. Оценка называется несмещенной, если ее математическое ожидание при любом объеме выборки равно оцениваемому параметру $M[a^*] = a$. Еще одной важной характеристикой оценок генеральных параметров является их *эффективность*, которая для различных несмещенных оценок одного и того же параметра при фиксированном объеме выборок обратно пропорциональна дисперсиям этих оценок.

2. Метод максимального правдоподобия. Для получения оценок используют различные методы. Широко применяется *метод максималь-*

Таблица 1. **Статистический ряд**

Интервал	Длина интервала	Середина интервала	Число точек в интервале	Относительная частота
1	$(x_{\min}, x_1)$	x_1^*	n_1	p_1^*
2	(x_1, x_2)	x_2^*	n_2	p_2^*
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
i	(x_{i-1}, x_i)	x_i^*	n_i	p_i^*
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
k	$(x_{k-1}, x_{\max})$	x_k^*	n_k	p_k^*
Σ			n	1

ного правдоподобия. Оценки, полученные при помощи этого метода, отвечают большинству изложенных требований. Сущность метода максимального правдоподобия заключается в нахождении таких оценок неизвестных параметров, для которых функция правдоподобия при случайной выборке объема n будет иметь максимальное значение. Пусть известен общий вид плотности вероятности $f(x, a)$ теоретического распределения; a — неизвестный параметр, входящий в выражение закона распределения. На опыте получена выборка значений случайной величины $x_1, x_2, \ldots, x_n$. Окружим каждую точку x_i окрестностью длины ε.

Вероятность попасть в интервал с границами $x_i - \frac{\varepsilon}{2}$, $x_i + \frac{\varepsilon}{2}$ приближенно равна $f(x_i, a)\varepsilon$. Если произведено n наблюдений, то вероятность того, что одновременно первое наблюдение попадает в первый интервал, второе — во второй и т. д., есть вероятность совместного осуществления событий и в силу независимости событий равна произведению вероятностей:

$$P(x, a) = f(x_1) f(x_2) \ldots f(x_n) \varepsilon^n. \tag{II.8}$$

Событие с вероятностью P осуществилось на самом деле. Естественно ожидать, что событию, осуществившемуся при первом же испытании, соответствует максимальная вероятность. Поэтому в качестве оценки для a следует взять то значение a^* из области допустимых значений параметра a, для которого эта вероятность принимает наибольшее возможное значение, т. е. корень уравнения

$$\left| \frac{\partial P(x, a)}{\partial a} \right|_{a=a^*} = 0, \tag{II.9}$$

представляющего собой необходимое условие экстремума вероятности P. Достаточным условием максимума при этом является выполнение неравенства

$$\frac{\partial^2 P(x, a)}{\partial a^2} < 0. \tag{II.10}$$

Если максимумов несколько, необходимо выбрать среди них наибольший. Решение проще получить, если перейти к функции

$$L(x, a) = \ln \frac{P(x, a)}{\varepsilon^n} = \sum_{i=1}^{n} \ln f(x_i, a), \tag{II.11}$$

которая называется *функцией правдоподобия.* Вероятность P и функция L имеют максимумы при одних и тех же значениях определяемых параметров, так как

$$\frac{\partial}{\partial a} \ln P = \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial a}, \quad P > 0. \tag{II.12}$$

В общем случае требуется оценить одновременно несколько параметров одномерного или многомерного распределения. Если a и x понимать как векторы, то формулировка принципа максимального правдоподобия сохранится: надо найти такую совокупность допустимых значений параметров $a_1^*, a_2^*, \ldots, a_k^*$, которая обращает функцию правдо-

подобия в максимум. Необходимые условия экстремума дает система уравнений

$$\frac{\partial L(x,\ a_1,\ \ldots,\ a_k)}{\partial a_j} = 0,\quad j = 1,2,\ \ldots, \tag{II.13}$$

а неотрицательная определенность матрицы

$$\left(\frac{\partial^2 L}{\partial a_i\, \partial a_j}\right),\quad i,\ j = 1,2,\ \ldots, k, \tag{II.14}$$

является достаточным условием того, чтобы локальный экстремум был максимумом функции правдоподобия.

Найдем методом максимального правдоподобия оценку параметра λ показательного распределения с плотностью

$$f(x) = \lambda e^{-\lambda x},\quad 0 < x < \infty$$

по выборке $x_1, x_2, \ldots, x_n$.

Для этого распределения функция правдоподобия имеет вид

$$L = \sum_{i=1}^{n} \ln\left(\lambda e^{-\lambda x_i}\right) = n \ln \lambda - \sum_{i=1}^{n} \lambda x_i. \tag{II.15}$$

Дифференцируя (II.15) по λ и приравнивая производную нулю, получим уравнение

$$\frac{n}{\lambda} - \sum_{i=1}^{n} x_i = 0,$$

откуда находим оценку λ^* параметра λ:

$$\lambda^* = \frac{n}{\sum_{i=1}^{n} x_i}, \tag{II.16}$$

или $\lambda^* = 1/\bar{x}$, где $\bar{x}$ — среднее выборки.

Пусть распределение случайной величины X подчинено нормальному закону:

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

Тогда вероятность совместного осуществления n независимых событий $X = x_j (j = 1, 2, \ldots, n)$ равна

$$P(x,\ m,\ \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(x_i - m)^2\right\} \varepsilon^n \tag{II.17}$$

и функция правдоподобия

$$L(x,\ m,\ \sigma^2) = \ln \frac{P}{\varepsilon_n} = -\frac{n}{2}\ln 2\pi - \frac{n}{2}\ln\sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(x_i - m)^2. \tag{II.18}$$

Продифференцируем (II.18) по m и σ^2:

$$\frac{\partial L}{\partial m} = \frac{2}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{n} (x_i - m) = 0. \qquad \text{(II.19)}$$

Так как $1/\sigma^2 \neq 0$, из (II.19) имеем $\sum_{i=1}^{n} (x_i - m) = 0$, откуда находим оценку $\bar{x}$ для параметра m:

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i.$$

Дифференцируя функцию правдоподобия по σ^2, получим

$$\frac{\partial L}{\partial \sigma^2} = -\frac{n}{2}\frac{1}{\sigma^2} + \frac{1}{2(\sigma^2)^2} \sum_{i=1}^{n} (x_i - m)^2 = 0, \qquad \text{(II.20)}$$

$$-\frac{1}{2\sigma^2}\left[n - \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^{n} (x_i - m)^2\right] = 0.$$

Так как $1/(2\ \sigma^2) \neq 0$, имеем

$$n - \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^{n} (x_i - m)^2 = 0,$$

откуда находим оценку s^2:

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}{n}. \qquad \text{(II.21)}$$

3. Оценка математического ожидания и дисперсии. Метод максимального правдоподобия всегда приводит к состоятельным, хотя иногда и смещенным оценкам, имеющим наименьшую возможную дисперсию при неограниченном возрастании объема выборки. Для нормально распределенной случайной величины получают оценки следующего вида: среднее арифметическое $\bar{x}$ для математического ожидания m_x

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i/n$$

и выборочную дисперсию s_1^2 для дисперсии $D[X]$

$$s_1^2 = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2/n.$$

Последняя оценка получается несколько смещенной:

$$M[s_1^2] = \frac{n-1}{n} D[X]. \qquad \text{(II.22)}$$

Для получения несмещенной оценки s_1^2 надо умножить на $n/(n-)$:

$$s^2 = s_1^2 \frac{n}{n-1} = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2/(n-1). \qquad (II.23)$$

Уменьшение знаменателя в (II.23) на единицу непосредственно связано с тем, что величина $\bar{x}$, относительно которой берутся отклонения, сама зависит от элементов выборки. Каждая величина, зависящая от элементов выборки и входящая в формулу выборочной дисперсии, называется *связью*. Можно доказать, что знаменатель выборочной дисперсии всегда равен разности между объемом выборки n и числом связей l, наложенных на эту выборку. Эа разность

$$f = n - l \qquad (II.24)$$

называется числом *степеней свободы выборки*. В практических вычислениях для дисперсии s^2 часто удобна формула

$$s^2 = \frac{1}{n-1}\left[\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}{n}\right], \qquad (II.25)$$

легко вытекающая из (II.23):

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}{n-1} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i^2 - 2x_i\bar{x} + \bar{x}^2) =$$

$$= \frac{1}{n-1}[(x_1^2 - 2x_1\bar{x} + \bar{x}^2) + (x_2^2 - 2x_2\bar{x} + \bar{x}^2) + \cdots +$$

$$+ (x_n^2 - 2x_n\bar{x} + \bar{x}^2)] = \frac{1}{n-1}[(x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2) -$$

$$- 2\bar{x}(x_1 + x_2 + \cdots + x_n) + (\bar{x}^2 + \bar{x}^2 + \cdots + \bar{x}^2)] =$$

$$= \frac{1}{n-1}\left[\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 2\frac{\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}{n} + n\frac{\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}{n^2}\right] =$$

$$= \frac{1}{n-1}\left[\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}{n}\right].$$

Преимущество формулы (II.25) в том, что в ней нет операций вычитания близких чисел, как в формуле (II.23), что приводит к потере точности. В формуле (II.25) эта операция применяется только один раз. Среднее и дисперсию выборки по сгруппированным данным табл. 1 вычисляют по формулам

$$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{k} n_i x_i^* = \sum_{i=1}^{k} p_i^* x_i^*, \qquad (II.26)$$

$$s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{k} n_i (x_i^* - \bar{x})^2 - \frac{h}{12} = \frac{n}{n-1}\sum_{i=1}^{k} (x_i^* - \bar{x})^2 p_i^* - \frac{h^2}{12}. \quad (II.27)$$

Величина $h^2/12$ называется поправкой Шеппарда, она связана со смещением дисперсии при группировании.

4. Классификация ошибок измерения. Каждый результат измерения — случайная величина. Отклонение реального результата от истинного называется *ошибкой наблюдения*. Ошибка наблюдения также есть случайная величина — она является результатом действия только случайных (неучитываемых) факторов. Если обозначить истинный результат через a, ошибку — через ΔX, результат измерения — через X, то

$$X - a = \Delta X. \quad (II.28)$$

Различают ошибки трех видов.

1. *Грубые ошибки* возникают вследствие нарушения основных условий измерения. Результат, содержащий грубую ошибку, резко отличается по величине от остальных измерений. На этом основаны некоторые критерии исключения грубых ошибок.

2. *Систематические ошибки* постоянны во всей серии измерений или изменяются по определенному закону. Выявление их требует специальных исследований, но как только систематические ошибки обнаружены, они могут быть легко устранены введением соответствующих поправок в результаты измерения.

3. *Случайные ошибки* — ошибки измерения, остающиеся после устранения всех выявленных грубых и систематических ошибок. При таком определении к случайным факторам, порождающим случайную ошибку, не относят факторы с постоянным действием (систематические ошибки) и факторы с однократным, но очень сильным действием (грубые ошибки). Случайные ошибки вызываются большим количеством таких факторов, эффекты действия которых столь незначительны, что их нельзя выделить в отдельности (при данном уровне техники измерения). При этом распределение случайных ошибок симметрично относительно нуля: ошибки, противоположные по знаку, но равные по абсолютной величине, встречаются одинаково часто. Из симметрии распределения ошибок следует, что истинный результат наблюдения есть математическое ожидание соответствующей случайной величины. Так как из (II.28) $X = a + \Delta X$ и при отсутствии грубых и систематических ошибок

$$M[\Delta X] = 0, \quad (II.29)$$

то

$$M[X] = a. \quad (II.30)$$

В дальнейшем будут рассматриваться только случайные ошибки измерений.

5. Закон сложения ошибок. Для независимых случайных величин свойством аддитивности обладают дисперсии, а не среднеквадратичные ошибки. Если $X_1, X_2, \ldots, X_n$ — независимые случайные величины; $a_1, a_2, \ldots, a_n$ — неслучайные величины и

$$Z = a_1 X_1 + a_2 X_2 + \cdots + a_n X_n, \quad (II.31)$$

то выборочная дисперсия величины Z определится следующим образом:

$$s_Z^2 = a_1^2 s_{X_1}^2 + a_2^2 s_{X_2}^2 + \cdots + a_n^2 s_{X_n}^2. \qquad (II.32)$$

Если положить $a_1 = a_2 = \ldots = a_n = 1/n$, то

$$Z = \frac{X_1 + X_2 + \cdots + X_n}{n} = \overline{X}.$$

В этом случае

$$s_{\overline{X}}^2 = \frac{s_{X_1}^2 + s_{X_2}^2 + \cdots + s_{X_n}^2}{n^2} = \frac{\overline{s_X^2}}{n}, \qquad (II.33)$$

где $\overline{s_X^2} = \dfrac{\sum_{i=1}^{n} s_{X_i}^2}{n}$.

Если величины X_1, X_2, ..., X_n интерпретировать как n независимых наблюдений одной и той же случайной величины X, то $s_{X_1}^2 = s_{X_2}^2 = \ldots = s_{X_n}^2 = s_X^2$. Тогда получим

$$s_{\overline{X}}^2 = s_X^2/n. \qquad (II.34)$$

Из выражения (II.34) следует практический вывод: при оценке точности двух методов следует учитывать длительность анализа. Применяя менее точный экспресс-метод, можно сделать за то же время значительно большее число опытов и добиться более высокой точности, чем дает трудоемкий точный метод.

6. Ошибки косвенных измерений. Измерения делят на *прямые* и *косвенные*. В первом случае непосредственно измеряется определяемая величина, при косвенных измерениях она задается некоторой функцией от непосредственно измеряемых величин. Пусть случайная величина z зависит от наблюдений x_1, ..., x_n по известному закону:

$$z = f(x_1, x_2, \ldots, x_n).$$

Истинное значение величины z может не совпадать с математическим ожиданием M_z, а определяться тем же законом:

$$a_z = f(m_{x_1}, m_{x_2}, \ldots, m_{x_n}).$$

Величина a_z называется средним косвенного измерения.

Дисперсия косвенного измерения σ_z^2 определяется так же, как обычная дисперсия, только отклонения берутся от среднего косвенного измерения a_z. Ее можно найти, зная дисперсии отдельных наблюдений и вид функции f. На практике определяют выборочные дисперсии $s_{x_i}^2$ и по ним выборочную дисперсию косвенного измерения s_z^2, которая служит оценкой генеральной дисперсии σ_z^2. Чтобы найти s_z^2, разложим функцию $z = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ в ряд Тейлора в точке $(m_{x_1}, m_{x_2}, \ldots, m_{x_n})$, ограничиваясь членами первого порядка

$$z \approx f(m_{x_1}, m_{x_2}, \ldots, m_{x_n}) + \frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1 - m_{x_1}) + \frac{\partial f}{\partial x_2}(x_2 - m_{x_2}) + \cdots + \frac{\partial f}{\partial x_n}(x_n - m_{x_n}), \qquad (II.35)$$

и определим s_z^2 по закону сложения дисперсий:

$$s_z^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^2 s_{x_i}^2 . \qquad (II.36)$$

Выражение (II.36) называют *законом накопления ошибок.*

Пример 1. Оценить ошибку определения линейной скорости движения газа в трубопроводе v, пользуясь следующими результатами измерений: количество газа $G = 3000$ м³/ч; ошибка измерения $s_G = 10$ м³/ч; сечение трубопровода $F = 0{,}1$ м²; ошибка измерения $s_F = 1$ см².

Р е ш е н и е. Рассматривая линейную скорость как результат косвенного измерения

$$v = \frac{G}{F} = \frac{3000}{0{,}1} = 30\,000 \text{ м/ч} = 8{,}82 \text{ м/с},$$

определим s_v по формуле (II.36):

$$s_v = \sqrt{\left(\frac{\partial v}{\partial G}\right)^2 s_G^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial F}\right)^2 s_F^2} = \sqrt{\frac{1}{F^2} s_G^2 + \frac{G^2}{F^4} s_F^2} =$$

$$= \frac{\sqrt{1 \cdot 10^{-2} \cdot 10^2 + 9 \cdot 10^6 \cdot 10^{-8}}}{1 \cdot 10^{-2} \cdot 3600} = 0{,}03 \text{ м/с}.$$

7. Определение дисперсии по текущим измерениям. Математическое ожидание (среднее) и дисперсия генеральной совокупности оцениваются средним и дисперсией выборки тем точнее, чем больше объем выборки. При этом среднее характеризует результат измерений, а дисперсия — точность этого результата (*дисперсия воспроизводимости*) (см. гл. II, §4). Если проделано m параллельных опытов (опытов, проведенных при неизменном комплексе основных факторов) и получена выборка y_1, y_2, ..., y_m значений измеряемой величины, то дисперсия воспроизводимости равна

$$s^2_{\text{воспр}} = \frac{\sum_{u=1}^{m} (y_u - \bar{y})^2}{m-1}, \text{ где } \bar{y} = \frac{\sum_{u=1}^{m} y_u}{m},$$

и ошибка опыта (*ошибка воспроизводимости*)

$$s_{\text{воспр}} = \sqrt{s^2_{\text{воспр}}} .$$

Часто для оценки точности применяемой методики ставят специальную серию опытов, многократно повторяя анализ одной и той же пробы. На проведение большой серии опытов требуется много времени, в течение которого может неконтролируемым образом измениться среднее значение результатов анализа. Значительно проще и удобнее определять ошибку воспроизводимости по текущим измерениям.

Предположим, анализируются n проб. При анализе каждой пробы делается различное число параллельных опытов: m_1, m_2, ..., m_n. Вычислим частные дисперсии s_1^2, s_2^2, ..., s_n^2 для каждой такой выборки в отдельности. Число степеней свободы частных дисперсий соответственно

равно: $f_1 = m_1 - 1$, $f_2 = m_2 - 1$, ..., $f_n = m_n - 1$. Общая дисперсия воспроизводимости всех опытов будет равна средневзвешенному значению частных дисперсий (в качестве весов берутся степени свободы):

$$s^2_{\text{воспр}} = \frac{f_1 s_1^2 + f_2 s_2^2 + \cdots + f_n s_n^2}{f_1 + f_2 + \cdots + f_n} =$$

$$= \frac{(m_1 - 1)\, s_1^2 + (m_2 - 1)\, s_2^2 + \cdots + (m_n - 1)\, s_n^2}{m_1 + m_2 + \cdots + m_n - n}. \qquad \text{(II.37)}$$

Число степеней свободы общей дисперсии равно общему числу измерений минус число связей, использованных для определения n средних:

$$f_{\text{воспр}} = m_1 + m_2 + \cdots + m_n - n = \sum_{i=1}^{n} m_i - n. \qquad \text{(II.38)}$$

Учитывая, что частные дисперсии определяются по результатам параллельных опытов по формуле

$$s_i^2 = \frac{\sum_{u=1}^{m_i} (y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{m_i - 1}, \quad i = 1, 2, \ldots, n,$$

из (II.37) имеем

$$s^2_{\text{воспр}} = \frac{(m_1 - 1)\, s_1^2 + (m_2 - 1)\, s_2^2 + \cdots + (m_n - 1)\, s_n^2}{m_1 + m_2 + \cdots + m_n - n} =$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n} (m_i - 1)\, s_i^2}{\sum_{i=1}^{n} m_i - n} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (m_i - 1) \dfrac{\sum_{u=1}^{m_i} (y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{m_i - 1}}{\sum_{i=1}^{n} m_i - n} =$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n} \sum_{u=1}^{m_i} (y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n} m_i - n}. \qquad \text{(II.39)}$$

Если число параллельных опытов при анализе каждой пробы одинаково $m_1 = m_2 = \ldots = m_n = m$, формулы для расчета дисперсии воспроизводимости упрощаются. При этом

$$s^2_{\text{воспр}} = \frac{(m - 1)\left(s_1^2 + s_2^2 + \cdots + s_n^2\right)}{mn - n} = \frac{(m - 1) \sum_{i=1}^{n} s_i^2}{n(m - 1)} = \frac{\sum_{i=1}^{n} s_i^2}{n}. \qquad \text{(II.40)}$$

Таким образом, при равном числе параллельных опытов общая дисперсия воспроизводимости равна среднеарифметическому значению частных дисперсий. Число степеней свободы общей дисперсии при

этом равно

$$f_{\text{воспр}} = n(m-1). \qquad \text{(II.41)}$$

И окончательно

$$s^2_{\text{воспр}} = \frac{\sum_{i=1}^{n}\sum_{u=1}^{m}(y_{iu}-\bar{y}_i)^2}{n(m-1)}. \qquad \text{(II.42)}$$

Число степеней свободы у общей дисперсии воспроизводимости, определяемой по формулам (II.39) и (II.42), гораздо больше, чем у каждой частной дисперсии в отдельности. Поэтому общая дисперсия воспроизводимости намного точнее оценивает дисперсию генеральной совокупности $\sigma^2_{\text{воспр}}$.

При вычислении дисперсии воспроизводимости по текущим измерениям объединяют между собой только те пробы, которые можно рассматривать как выборки из генеральных совокупностей с равными дисперсиями. При этом каждое из значений s_1^2, s_2^2, ..., s_n^2 можно рассматривать как оценку одной и той же генеральной дисперсии.

Пример 2. Результаты определения концентрации (%) P_2O_5 в системе $(NH_4)_2HPO_4$ – K_2CO_3 – H_2O колориметрическим методом приведены в таблице.

Определить ошибку колориметрического метода по текущим измерениям.

Номер опыта	Номер пробы							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	27,9	19,3	4,5	22,3	10,8	16,3	8,8	12,6
2	27,2	19,7	5,2	23,5	8,9	15,8	8,7	13,5
3	26,8	–	4,8	21,7	–	17,2	9,2	13,3
Σy_u	81,9	39,0	14,5	67,5	19,7	49,3	26,7	39,4
Σy_u^2	2236,49	760,58	70,69	1520,43	195,85	811,17	237,77	517,90
m_i	3	2	3	3	2	3	3	3

Р е ш е н и е. По данным таблицы вычислим s_i^2 по формуле

$$s_i^2 = \frac{1}{m_i - 1}\left[\sum_{u=1}^{m_i} y_u^2 - \frac{\left(\sum_{u=1}^{m_i} y_u\right)^2}{m_i}\right].$$

Для вычисления общей дисперсии по формуле (II.37) понадобятся слагаемые вида

$$s_i^2(m_i - 1) = \left[\sum_{u=1}^{m_i} y_u^2 - \frac{\left(\sum_{u=1}^{m_i} y_u\right)^2}{m_i}\right].$$

Для первой пробы имеем

$$(m_1 - 1)\, s_1^2 = 2236{,}49 - \frac{6707{,}61}{3} = 0{,}62.$$

Аналогично

$$(m_2 - 1)\, s_2^2 = 0{,}08; \quad (m_3 - 1)\, s_3^2 = 0{,}61; \quad (m_4 - 1)\, s_4^2 = 1{,}68;$$

$$(m_5 - 1)\, s_5^2 = 1{,}805; \quad (m_6 - 1)\, s_6^2 = 1{,}01; \quad (m_7 - 1)\, s_7^2 = 0{,}14;$$

$$(m_8 - 1)\, s_8^2 = 0{,}045.$$

Число степеней свободы общей дисперсии воспроизводимости равно

$$f_{\text{воспр}} = \sum_{i=1}^{8} f_i = \sum_{i=1}^{8} m_i - 8 = 22 - 8 = 14.$$

И дисперсия воспроизводимости

$$s^2_{\text{воспр}} = \frac{\sum_{i=1}^{8} s_i^2 f_i}{f_{\text{воспр}}} = \frac{5{,}99}{14} = 0{,}4279.$$

Ошибка колориметрического метода, определенная по текущим измерениям, равна

$$s_{\text{воспр}} = \sqrt{s^2_{\text{воспр}}} = \sqrt{0{,}4279} = 0{,}654.$$

8. Доверительные интервалы и доверительная вероятность. Выборочные параметры являются случайными величинами, их отклонения от генеральных (погрешности) также будут случайными. Оценка этих отклонений носит вероятностный характер — можно лишь указать вероятность той или иной погрешности. Для этого в математической статистике пользуются *доверительными интервалами* и *доверительными вероятностями.*

Пусть для генерального параметра a получена из опыта несмещенная оценка a^*. Нужно оценить возможную при этом ошибку. Назначим достаточно большую вероятность β — такую, что событие с вероятностью β можно считать практически достоверным, и найдем такое значение $\varepsilon = f(\beta) = \varepsilon_\beta$, для которого

$$P(|a^* - a| < \varepsilon_\beta) = \beta. \qquad \text{(II.43)}$$

При этом диапазон практически возможных значений ошибки, возникающей при замене a на a^*, будет $\pm\, \varepsilon_\beta$, большие по абсолютной величине ошибки будут появляться только с малой вероятностью

$$p = 1 - \beta, \qquad \text{(II.44)}$$

называемой *уровнем значимости.* Уровень значимости часто выражают в процентах. Иначе выражение (II.43) может быть интерпретировано как вероятность того, что истинное значение параметра a лежит в пределах

$$a^* - \varepsilon_\beta < a < a^* + \varepsilon_\beta. \qquad \text{(II.45)}$$

Вероятность β называется *доверительной вероятностью*, она характеризует надежность полученной оценки. Интервал $i_\beta = a^* \pm \varepsilon_\beta$ называется *доверительным интервалом*. Границы интервала $a' = a^* - \varepsilon_\beta$ и $a'' = a^* + \varepsilon_\beta$ называются *доверительными границами*. Доверительный интервал при данной доверительной вероятности определяет точность оценки. Величина доверительного интервала зависит от доверительной вероятности, с которой гарантируется нахождение параметра a внутри доверительного интервала: чем больше величина β, тем больше и величина ε_β (т. е. чем с большей надежностью хотим гарантировать полученный результат, тем в большем интервале значений он может находиться). Увеличение числа опытов проявляется в сокращении доверительного интервала при постоянной доверительной вероятности или в повышении доверительной вероятности при сохранении доверительного интервала. Обычно на практике фиксируют на определенном уровне значение доверительной вероятности (0,9, 0,95 или 0,99) и исходя из этого определяют доверительный интервал результата I_β. При построении доверительного интервала решается задача об абсолютном отклонении:

$$P(|a^* - a| < \varepsilon_\beta) = P(\Delta a < \varepsilon_\beta) = F(\varepsilon_\beta) - F(-\varepsilon_\beta) = \int_{-\varepsilon_\beta}^{+\varepsilon_\beta} f(x)\,dx = \beta. \tag{II.46}$$

Таким образом, если бы был известен закон распределения оценки a^*, задача определения доверительного интервала решалась бы просто. Рассмотрим в качестве такого примера построение доверительного интервала для математического ожидания нормально распределенной случайной величины X с известным генеральным стандартом, равным σ_x.

Пусть имеется выборка объема n значений этой случайной величины. Наилучшей оценкой для m_x является среднее выборки $\bar{x}$:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n}.$$

Для построения доверительного интервала необходимо знать распределение этой оценки. Для выборок из генеральной совокупности, распределенной нормально, можно показать (например, используя свойство линейности нормального распределения), что $\bar{x}$ также имеет нормальное распределение с математическим ожиданием m_x и средним квадратическим отклонением $\sigma_{\bar{x}} = \sigma_x / \sqrt{n}$. Тогда, используя функцию Лапласа согласно (I.68), получим

$$P(|\bar{x} - m_x| < \varepsilon_\beta) = \beta = 2\Phi\left(\frac{\varepsilon_\beta}{\sigma_{\bar{x}}}\right). \tag{II.47}$$

Задавшись доверительной вероятностью β, определим по таблицам функции Лапласа $k_\beta = \varepsilon_\beta / \sigma_{\bar{x}}$. Тогда доверительный интервал для математического ожидания будет иметь вид

$$\bar{x} - k_\beta \sigma_{\bar{x}} < m_x < \bar{x} + k_\beta \sigma_{\bar{x}},$$

или

$$\bar{x} - k_\beta \frac{\sigma_x}{\sqrt{n}} < m_x < \bar{x} + k_\beta \frac{\sigma_x}{\sqrt{n}}. \qquad (II.48)$$

Из этой оценки видно, что уменьшение доверительного интервала обратно пропорционально корню квадратному из числа наблюдений. Следовательно, если надо уменьшить возможную ошибку в два раза, необходимо увеличить число наблюдений в четыре раза.

Знание генеральной дисперсии σ_x^2 позволяет оценивать математическое ожидание даже по одному наблюдению. Если для нормально распределенной случайной величины X в результате эксперимента получено значение x_1, то доверительный интервал для математического ожидания с доверительной вероятностью $\beta = 1 - p$ имеет вид

$$x_1 - \sigma u_{1-p/2} < m_x < x_1 + \sigma u_{1-p/2}, \qquad (II.49)$$

где $u_{1-p/2}$—квантиль стандартного нормального распределения. Стандартное нормальное распределение симметрично относительно нуля, поэтому $u_{p/2} = -u_{1-p/2}$.

Пример 3. Среднее значение температуры печи, полученное по четырем независимым измерениям оптическим пирометром, 2250°С. Ошибка при этом методе измерения 10°С. Найти с надежностью 95% доверительные границы, внутри которых лежит истинное значение измеряемой температуры.

Р е ш е н и е. Полагая, что ошибка измерения — это известный генеральный стандарт $\sigma_x = 10$°С и что случайная величина X (температура печи) распределена нормально, по формуле (II.49) имеем

$$2250 - k_\beta \frac{10}{\sqrt{4}} < m_x < 2250 + k_\beta \frac{10}{\sqrt{4}}. \qquad (II.50)$$

При $\beta = 95\%$ $k_\beta = 1{,}96$ и, следовательно, истинное значение измеряемой температуры находится с надежностью 95% в следующих доверительных границах:

$$2240{,}2 < m_x < 2259{,}8.$$

Закон распределения оценки a^* зависит от закона распределения случайной величины X, в частности от самого параметра a. Чтобы обойти это затруднение, в математической статистике применяют обычно два метода: 1) приближенный — при $n \geqslant 50$ заменяют в выражении для ε_β неизвестные параметры их оценками; 2) от случайной величины a^* переходят к другой случайной величине, закон распределения которой не зависит от оцениваемого параметра a, а зависит только от объема выборки n и от вида закона распределения величины X. Такого рода величины наиболее подробно изучены для нормального распределения случайной величины X. В качестве доверительных границ a' и a'' берут обычно симметричные квантили

$$a^*_{(1-\beta)/2} < a < a^*_{(1+\beta)/2}, \qquad (II.51)$$

или с учетом (II.44)

$$a^*_{p/2} < a < a^*_{1-p/2}. \qquad (II.52)$$

9. Проверка статистических гипотез. Под *статистическими гипотезами* понимаются некоторые предположения относительно распределений генеральной совокупности той или иной случайной величины. Проверка гипотезы заключается в сопоставлении некоторых статистических показателей, *критериев проверки (критериев значимости)*, вычисляемых по выборке, со значениями этих показателей, определенными в предположении, что проверяемая гипотеза верна. При проверке гипотез подвергается испытанию некоторая гипотеза H_0 в сравнении с *альтернативной гипотезой* $\bar{H}$, которая формулируется или подразумевается. Альтернативных гипотез может быть несколько.

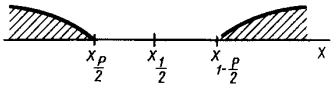


Рис. 15. Критическая область гипотезы

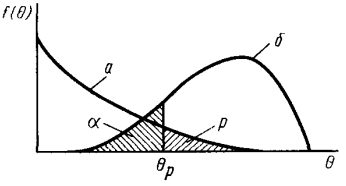


Рис. 16. Проверка статистических гипотез

Чтобы принять или отвергнуть гипотезу, еще до получения выборки задаются уровнем значимости p. Наиболее употребительны уровни значимости 0,05; 0,02; 0,01; 0,10; 0,001. Уровню значимости соответствует доверительная вероятность $\beta = 1 - p$. По этой вероятности, используя гипотезу о распределении оценки θ^* (критерия значимости), находят квантильные доверительные границы, как правило, симметричные $\theta_{p/2}$ и $\theta_{1-p/2}$. Числа $\theta_{p/2}$ и $\theta_{1-p/2}$ называются *критическими значениями гипотезы*; значения θ^*, меньшие $\theta_{p/2}$ и большие $\theta_{1-p/2}$, образуют критическую область гипотезы, или область непринятия гипотезы (рис. 15). Если найденное по выборке значение θ_0 попадает между $\theta_{1/2}$ и $\theta_{1-p/2}$, то гипотеза допускает такое значение в качестве случайного, и поэтому нет оснований ее отвергать. Если же найденное значение θ_0 попадает в критическую область, то по данной гипотезе оно является практически невозможным. Но так как оно все-таки появилось, то отвергается гипотеза.

При проверке гипотез можно совершать ошибки двух типов. *Ошибка первого рода* состоит в том, что отвергается гипотеза, которая на самом деле верна. Вероятность такой ошибки не больше принятого уровня значимости. Например, при $p = 0{,}05$ можно совершить ошибку первого рода в пяти случаях из ста. *Ошибка второго рода* состоит в том, что гипотеза принимается, а на самом деле она неверна. Вероятность ошибки второго рода зависит от характера проверяемой гипотезы, от способов проверки и от многих других причин, что сильно усложняет ее оценку.

Эта вероятность тем меньше, чем выше уровень значимости, так как при этом увеличивается число отвергаемых гипотез. Одну и ту же статистическую гипотезу можно исследовать при помощи различных критериев значимости. Если вероятность ошибки второго рода равна α, то $1 - \alpha$ называют *мощностью критерия*. На рис. 16 приведены две кривые плотности вероятности случайной величины θ, соответствующие двум конкурирующим гипотезам *H(a)* и $\bar{H}$*(б)*. Если из опыта получается значение $\theta > \theta_p$, отвергается гипотеза H и принимается альтернативная гипотеза $\bar{H}$, и наоборот, если $\theta < \theta_p$. Площадь под кривой плотности вероятности, соответствующей справедливости гипотезы H вправо от θ_p, равна уровню

значимости p, т. е. вероятности ошибки первого рода. Площадь под кривой вероятности, соответствующей справедливости $\bar{H}$ влево от θ_p, равна вероятности ошибки второго рода α, а вправо от θ_p — мощности критерия. Таким образом, чем больше p, тем больше $1-\alpha$. Для проверки гипотезы стремятся из всех возможных критериев выбрать тот, у которого при заданном уровне значимости меньше вероятность ошибки второго рода. Например, найдены два значения a_1^* и a_2^* некоторого выборочного параметра. Эти значения можно рассматривать как оценки генеральных параметров a_1 и a_2. Высказывается гипотеза, что различие между a_1^* и a_2^* случайное и что генеральные параметры равны между собой, т. е. $a_1 = a_2$. Такая гипотеза называется *нулевой* или *нуль-гипотезой* по терминологии Р. Фишера. Для проверки этой гипотезы нужно выяснить, значимо ли расхождение между a_1^* и a_2^* в условиях нулевой гипотезы. Для этого обычно исследуют случайную величину $\Delta a^* = a_1^* - a_2^*$ и проверяют, значимо ли ее отличие от нуля. Иногда удобнее рассматривать величину a_1^* / a_2^*, сравнивая ее с единицей.

Отвергая нулевую гипотезу, тем самым принимают альтернативную. Альтернативная гипотеза распадается на две: $a_1^* > a_2^*$ и $a_1^* < a_2^*$. Если одно из этих неравенств заведомо невозможно, то альтернативная гипотеза называется *односторонней* и для ее проверки применяются *односторонние критерии значимости* (в отличие от обычных, *двусторонних*). При проверке гипотез очень важно учесть априорную информацию о возможных значениях оцениваемых параметров, выяснить, что один из сравниваемых параметров не может быть больше другого. Иногда этот факт вытекает из постановки задачи. Например, изучая изменение чистоты реактива, заранее знаем, что в связи с разложением на свету чистота его с течением времени может только уменьшиться. Такая информация даст возможность при проверке гипотезы применить односторонний критерий значимости, который имеет меньшую вероятную ошибку второго рода, чем соответствующий двусторонний.

Если известно, что одно из неравенств $a_1^* > a_2^*$ или $a_1^* < a_2^*$ заведомо невозможно, то и рассматривать необходимо лишь одну из половин критической области (см. рис. 15). Например, $p = 0{,}05$ при двустороннем критерии соответствуют критические значения $\theta_{0,025}$ и $\theta_{0,975}$, т. е. значимыми (неслучайными) считаются θ^*, принявшие значения $\theta^* < \theta_{0,025}$ и $\theta^* > \theta_{0,975}$. При одностороннем критерии значимости одно из этих неравенств (например, $\theta^* < \theta_{0,025}$) заведомо невозможно и значимыми будут лишь $\theta^* > \theta_{0,975}$. Вероятность последнего неравенства равна 0,025, и, следовательно, уровень значимости будет равен 0,025. Таким образом, если при одностороннем критерии значимости использовать те же критические числа, что и при двустороннем, этим значениям будет соответствовать вдвое меньший уровень значимости. Обычно для одностороннего критерия берут тот же уровень значимости, что и для двустороннего. При этих условиях оба критерия обеспечивают одинаковую ошибку первого рода. Для этого односторонний критерий надо выводить из двустороннего, соответствующего вдвое большему уровню значимости, чем тот, что принят. Чтобы сохранить для одностороннего критерия уровень значимости $p = 0{,}05$, для двустороннего необходимо взять $p = 0{,}10$, что дает критические значения $\theta_{0,05}$ и $\theta_{0,95}$. Из этих критических

значений для одностороннего критерия останется какое-нибудь одно, например $\theta_{0,95}$. Уровень значимости для одностороннего критерия равен при этом 0,05. Этому же уровню значимости для двустороннего критерия соответствует критическое значение $\theta_{0,975}$. Но $\theta_{0,95} < \theta_{0,975}$, значит, при одностороннем критерии большее число гипотез будет отвергнуто и, следовательно, меньше будет ошибка второго рода.

10. Оценка математического ожидания нормально распределенной случайной величины. При отсутствии грубых и систематических ошибок математическое ожидание случайной величины совпадает с истинным результатом наблюдений. Поэтому оценка математического ожидания имеет важное значение при обработке наблюдений. Легче всего оценить математическое ожидание при известной дисперсии генеральной совокупности (см. гл. II. 8). Генеральную дисперсию σ^2 нельзя получить из наблюдений, ее можно только оценить при помощи выборочной дисперсии s^2. Ошибка от замены генеральной дисперсии выборочной будет тем меньше, чем больше объем выборки n. На практике эту погрешность не учитывают при $n \geqslant 50$ и в формуле (II.49) для доверительного интервала генеральный параметр σ_x заменяют выборочным стандартом. В дальнейшем предполагается, что наблюдаемая случайная величина имеет нормальное распределение.

При небольших объемах выборок для построения доверительного интервала математического ожидания используют распределение Стьюдента, или t-распределение. Распределение Стьюдента имеет случайная величина t:

$$t = \frac{\bar{x} - m_x}{s_x} \sqrt{n}. \qquad \text{(II.53)}$$

Плотность вероятности ее имеет вид

$$\varphi(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi f}} \frac{\Gamma\left(\frac{f+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{f}{2}\right)} \left(1 + \frac{t^2}{f}\right)^{\frac{f+1}{2}}, \quad -\infty < t < +\infty, \qquad \text{(II.54)}$$

где $\Gamma(f)$ — гамма-функция; f — число степеней свободы выборки.

Если дисперсия s_x^2 и среднее $\bar{x}$ определяются по одной и той же выборке, то $f = n - 1$.

Таким образом, распределение Стьюдента зависит только от числа степеней свободы f, с которым была определена выборочная дисперсия (рис. 17). На рис. 17 приведены графики плотности t-распределения для $f=1$, $f=5$ и нормальная кривая. Кривые t-распределения по своей форме напоминают нормальную кривую, но при малых f они медленнее сближаются с осью абсцисс при $|t| \to \infty$. При $f \to \infty$ дисперсия выборочная $s^2 \to \sigma^2$, поэтому распределение Стьюдента сближается с нормальным; $f = \infty$ соответствует нормальному распределению. Вероятность того, что случайная величина попадет в некоторый интервал $(t_{p/2}\,;\, t_{1-p/2})$, определяется выражением

$$P\left(t_{p/2} \leqslant t \leqslant t_{1-p/2}\right) = 1 - p = \beta. \qquad \text{(II.55)}$$

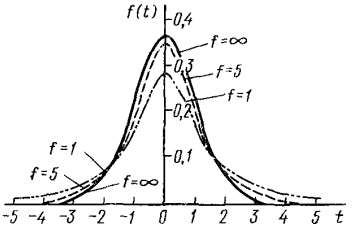


Рис. 17. Плотность распределения Стьюдента

Распределение Стьюдента симметрично относительно нуля, поэтому

$$t_{p/2} = -t_{1-p/2}. \qquad (II.56)$$

Учитывая симметрию t-распределения, часто пользуются обозначением $t_{p,f}$, где f — число степеней свободы, а p — вероятность того, что t находится за пределами интервала $(t_{p/2}, t_{1-p/2})$. Подставляя в (II.56) выражение (II.53) для t, получим неравенство

$$-t_{1-p/2} \leqslant \frac{\bar{x} - m_x}{s_x}\sqrt{n} \leqslant t_{1-p/2}, \qquad (II.57)$$

откуда после преобразований получим

$$\bar{x} - \frac{s_x}{\sqrt{n}} t_{1-p/2} \leqslant m_x \leqslant \bar{x} + \frac{s_x}{\sqrt{n}} t_{1-p/2}. \qquad (II.58)$$

Значения квантилей $t_{1-p/2}$ для различных чисел степеней свободы f и уровней значимости p приведены в табл. 3 приложения.

В некоторых задачах требуется найти одностороннюю оценку математического ожидания, т. е. оценку только сверху или только снизу. При доверительной вероятности $\beta = 1 - p$ оценка для случайной величины t сверху имеет вид

$$t \leqslant t_{1-p},$$

если

$$\frac{\bar{x} - m_x}{s_x}\sqrt{n} \leqslant t_{1-p}; \qquad (II.59)$$

оценка для t снизу имеет вид

$$t \geqslant -t_{1-p},$$

или

$$\frac{\bar{x} - m_x}{s_x}\sqrt{n} \geqslant -t_{1-p}. \qquad (II.60)$$

Из неравенств (II.59) и (II.60) получим односторонние доверительные оценки для математического ожидания сверху:

$$m_x \leqslant \bar{x} + \frac{s_x}{\sqrt{n}} t_{1-p} \qquad (II.61)$$

и снизу:

$$m_x \geqslant \bar{x} - \frac{s_x}{\sqrt{n}} t_{1-p}. \qquad (II.62)$$

Пример 4. Вредной примесью в кормовых фосфатах является фтор. Необходимо найти возможный верхний предел содержания фтора в фосфатах по следующим результатам анализов в 100 кг готового продукта (F, %): 0,18; 0,12; 0,13; 0,15. Доверительная вероятность $\beta = 0{,}95$.

Решение. Обозначим через X результат анализа содержания фтора в 100 кг кормовых фосфатов. Среднее содержание фтора по четырем параллельным определениям равно $\bar{x} = 0{,}15\%$. Ошибка воспроизводимости $s_x = 0{,}03\%$. Число степеней свободы ошибки воспроизводимости равно 3. Для определения возможного верхнего предела содержания фтора в готовом продукте (m_x) воспользуемся формулой (II.61). При $\beta = 0{,}95$ и $f = 3$ по табл. 3 приложения для $2p = 0{,}10$ имеем $t_{0,95} = 2{,}35$. Отсюда

$$m_x \leqslant 0{,}15 + 0{,}03 \cdot 2{,}35/4 = 0{,}1676.$$

Пример 5. Диаммонийфосфат «ч.д.а.» должен содержать не менее 99% основного вещества. Требуется проверить гипотезу статистической значимости различия между паспортными данными и следующими результатами трех определений содержания диаммонийфосфата в реактиве: 98,3; 97,3; 97,8%.

Решение. Обозначим через X результат анализа. Среднее значение трех параллельных измерений равно $\bar{x} = 97{,}8\%$. Ошибка воспроизводимости s_x равна 0,5%. Число степеней свободы ошибки воспроизводимости $f = 2$. В качестве нулевой гипотезы рассмотрим гипотезу H^0: $m_x = 99\%$, т.е. исследуемый реактив доброкачественный. Альтернативная гипотеза $\overline{H}$: $m_x \neq 99\%$. Используя распределение Стьюдента, определим вначале критическую область при двустороннем критерии. При $\beta = 0{,}95$ $p = 0{,}05$ и квантиль $t_{1-p/2} = 4{,}30$ при $f = 2$ (табл. 3 приложения). Критические значения нулевой гипотезы согласно (II.58) будут

$$\bar{x} \leqslant m_x - t_{1-p/2}\, s_x/\sqrt{n},$$

$$\bar{x} \geqslant m_x + t_{1-p/2}\, s_x/\sqrt{n}.$$

Физический смысл имеет только первое неравенство:

$$\bar{x} \leqslant 99 - 4{,}30 \cdot 0{,}5/\sqrt{3} = 97{,}76.$$

Значение $\bar{x} = 97{,}8$ не попадает в эту критическую область, следовательно, двусторонний критерий не позволяет отвергнуть нулевую гипотезу и считать реактив недоброкачественным. По физическому смыслу задачи здесь можно применить односторонний критерий — диаммонийфосфат разлагается при хранении на свету, поэтому выборочную оценку нужно сравнивать только с теми значениями, которые меньше 99%.

При $\beta = 0{,}95$ и $f = 2$ по табл. 3 приложения для $2p = 0{,}10$ имеем $t_{0,95} = 2{,}92$. Критическое значение нулевой гипотезы

$$\bar{x} \leqslant m_x - t_{1-p}\, s_x/\sqrt{n},$$

$$\bar{x} \leqslant 99 - 2{,}92 \cdot 0{,}5/\sqrt{3} = 98{,}16.$$

Значение $\bar{x} = 97{,}8$, меньше критического значения и, следовательно, попадает в критическую область. Таким образом, односторонний критерий как более точный сумел при тех же исходных данных выявить недоброкачественность реактива.

11. Оценка дисперсии нормально распределенной случайной величины.

Дисперсию генеральной совокупности σ_x^2 нормально распределенной случайной величины можно оценить, если известно распределение ее оценки — выборочной дисперсии s_x^2. Распределение выборочной дисперсии можно получить при помощи распределения Пирсона или χ^2-распределения. Если имеется выборка n независимых наблюдений x_1, x_2, ..., x_n над нормально распределенной случайной величиной, то можно показать, что сумма

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{x_i - \bar{x}}{\sigma_x} \right)^2 \qquad (II.63)$$

имеет распределение χ^2 с $f = n - 1$ степенями свободы.

Плотность χ^2 распределения зависит только от числа степеней свободы f:

$$\varphi(\chi^2) = \frac{1}{2^{f/2}\Gamma(f/2)} (\chi^2)^{\frac{f-2}{2}} e^{-\frac{\chi^2}{2}}, \quad 0 \leqslant \chi^2 < \infty, \qquad (II.64)$$

где $\Gamma(f)$ — гамма-функция.

На рис. 18 приведены кривые плотности вероятности χ^2-распределения при некоторых значениях f. Кривые асимметричны, степень асимметрии уменьшается с увеличением f. При доверительной вероятности $\beta = 1 - p$ двусторонняя доверительная оценка для χ^2 имеет вид

$$\chi^2_{p/2} < \chi^2 < \chi^2_{1-p/2}, \qquad (II.65)$$

односторонние оценки имеют вид

$$\chi^2 < \chi^2_{1-p}, \quad \chi^2 > \chi^2_p. \qquad (II.66)$$

Квантили χ^2_{1-p} при различных p и f приведены в табл. 4 приложения. Так как выборочная дисперсия s_x^2 через элементы выборки определяется по формуле

$$s_x^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}{f};$$

из (II.63) имеем

$$\chi^2 = f s_x^2 / \sigma_x^2. \qquad (II.67)$$

Подставляя (II.67) в (II.65), получим

$$\chi^2_{p/2} < \frac{f s_x^2}{\sigma_x^2} < \chi^2_{1-p/2}. \qquad (II.68)$$

Решая неравенство относительно σ_x^2, получим доверительные двусторонние границы для генеральной дисперсии σ_x^2:

$$\frac{f s_x^2}{\chi^2_{1-p/2}} < \sigma_x^2 < \frac{f s_x^2}{\chi^2_{p/2}}. \qquad (II.69)$$

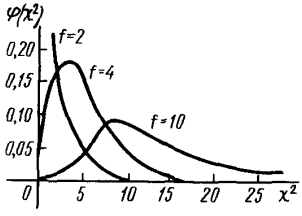


Рис. 18. Плотность χ^2-распределения

Аналогично получаются односторонние доверительные оценки:

$$\sigma_x^2 < \frac{f s_x^2}{\chi^2_p}, \quad \sigma_x^2 > \frac{f s_x^2}{\chi^2_{1-p}}. \qquad (II.70)$$

Пример 6. Оценить ошибку воспроизводимости определения усвояемой P_2O_5 в сложном удобрении сернокислотным методом по результатам трех параллельных опытов: 17,2; 16,3; 15,5.

Р е ш е н и е. Выборочная оценка для дисперсии воспроизводимости равна

$$s_x^2 = \frac{\sum_{i=1}^{3} (x_i - \bar{x})^2}{3-1} = 0{,}73.$$

Число степеней свободы дисперсии воспроизводимости $f_x = 2$. Задавшись доверительной вероятностью $\beta = 0{,}90$, по табл. 4 приложения при числе степеней свободы $f = 2$ находим $\chi^2_{0{,}05} = 6{,}0$ и $\chi^2_{0{,}95} = 0{,}103$. По формуле (II.69) определим двустороннюю доверительную оценку для дисперсии воспроизводимости:

$$\frac{0{,}73 \cdot 2}{6{,}0} \leqslant \sigma_x^2 \leqslant \frac{0{,}73 \cdot 6}{0{,}103},$$

$$0{,}24 \leqslant \sigma_x^2 \leqslant 14{,}1.$$

Извлекая из всех частей неравенств квадратный корень, получим оценку для ошибки воспроизводимости $0{,}49 \leqslant \sigma_x \leqslant 3{,}61$. В связи с малым числом степеней свободы доверительные границы получились резко асимметричными.

С ростом числа степеней свободы асимметрия кривых распределения уменьшается, соответственно уменьшается и асимметрия доверительных границ. Можно показать, что при $n \geqslant 30$ выборочный стандарт s распределен приближенно нормально с математическим ожиданием $m_s = \sigma$ и среднеквадратичной ошибкой

$$\sigma_s = \sigma_x / \sqrt{2f}. \qquad \text{(II.71)}$$

Неизвестный генеральный стандарт в выражении (II.71) при $n \geqslant 30$ заменяют выборочным:

$$\sigma_s \approx s_x / \sqrt{2f}. \qquad \text{(II.72)}$$

В соответствии с (II.50) доверительные границы для генерального стандарта определяются неравенством

$$s_x - \frac{s_x}{\sqrt{2f}} u_{1-p/2} \leqslant \sigma_x \leqslant s_x + \frac{s_x}{\sqrt{2f}} u_{1-p/2}. \qquad \text{(II.73)}$$

Пример 7. Оценить ошибку воспроизводимости σ_x для выборки из 31 наблюдения с выборочным стандартом $s_x = 0{,}85$. Доверительную вероятность β принять равной 0,9.

Р е ш е н и е. Построим доверительный интервал для ошибки воспроизводимости, используя χ^2-распределение. По табл. 4 приложения при числе степеней свободы $f = 30$ и доверительной вероятности $\beta = 0{,}9$ находим $\chi^2_{0{,}05} = 43{,}8$ и $\chi^2_{0{,}95} = 18{,}5$.

По формуле (II.69) определим двустороннюю доверительную оценку для дисперсии воспроизводимости:

$$\frac{0{,}85^2 \cdot 30}{43{,}8} \leqslant \sigma_x^2 \leqslant \frac{0{,}85^2 \cdot 30}{18{,}5},$$

$$0{,}48 \leqslant \sigma_x^2 \leqslant 1{,}13.$$

Доверительные границы для ошибки воспроизводимости определятся неравенством $0{,}69 \leqslant \sigma_x \leqslant 1{,}05$.

Определим доверительные границы для σ_x, воспользовавшись нормальным распределением. По формуле (II.72) определим σ_s:

$$\sigma_s \approx \frac{s_x}{\sqrt{2f}} = \frac{0,85}{\sqrt{2 \cdot 30}} = 0,11.$$

По табл. 2 приложения для доверительной вероятности $\beta = 0,9$ находим $u_{0,95} = 1,64$. В соответствии с (II.73) доверительные границы для ошибки воспроизводимости определяются неравенством

$$0,85 - 0,11 \cdot 1,64 \leqslant \sigma_x \leqslant 0,85 + 0,11 \cdot 1,64;$$

окончательно $0,67 \leqslant \sigma_x \leqslant 1,03$. Полученные с использованием нормального распределения доверительные границы мало отличаются от приведенных выше.

12. Сравнение двух дисперсий. При обработке наблюдений часто возникает необходимость сравнить две или несколько выборочных дисперсий. Основная гипотеза, которая при этом проверяется: можно ли считать сравниваемые выборочные дисперсии оценками одной и той же генеральной дисперсии. Рассмотрим две выборки

$$x_1', \quad x_2', \quad \ldots, \quad x_{n_1}',$$

$$x_1'', \quad x_2'', \quad \ldots, \quad x_{n_2}'',$$

средние значения которых соответственно равны $\bar{x}_1$ и $\bar{x}_2$. Выборочные дисперсии

$$s_1^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n_1} (x_i' - \bar{x}_1)^2}{n_1 - 1}, \qquad s_2^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n_2} (x_i'' - \bar{x}_2)^2}{n_2 - 1}$$

определяются со степенями свободы

$$f_1 = n_1 - 1, \quad f_2 = n_2 - 1.$$

Требуется выяснить, являются ли выборочные дисперсии s_1^2 и s_2^2 значимо различными или же полученные выборки можно рассматривать как взятые из генеральных совокупностей с равными дисперсиями. Предположим, что первая выборка сделана из генеральной совокупности с дисперсией σ_1^2, а вторая — из генеральной совокупности с дисперсией σ_2^2. Проверяется нулевая гипотеза о равенстве генеральных дисперсий $H_0: \sigma_1^2 = \sigma_2^2$. Чтобы отвергнуть эту гипотезу, нужно доказать значимость различия между s_1^2 и s_2^2 при выбранном уровне значимости p. В качестве критерия значимости обычно используется критерий Фишера. *Распределением Фишера* (F-распределение, v^2-распределение) называется распределение случайной величины:

$$F = (s_1^2/\sigma_1^2) : (s_2^2/\sigma_2^2). \tag{II.74}$$

Плотность вероятности F-распределения определяется выражением

$$\varphi(F) = \frac{\Gamma\left(\frac{f_1 + f_2}{2}\right)}{\Gamma(f_1/2)\,\Gamma(f_2/2)}\, f_1^{f_2/2} f_2^{f_1/2}\, \frac{F^{(f_1-2)/2}}{(f_2 + f_1 F)^{(f_1+f_2)/2}}, \tag{II.75}$$

где $\Gamma(f)$ — гамма-функция.

F-Распределение зависит только от числа степеней свободы f_1 и

f_2. На рис. 19 приведены кривые плотности вероятности F-распределения для некоторых значений f_1 и f_2. Кривые имеют асимметричную форму. В табл. 5 приложения приведены квантили F_{1-p} для уровня значимости $p=0{,}05$ и чисел степеней свободы f_1 и f_2. Для определения квантилей F_p для значений p используется соотношение

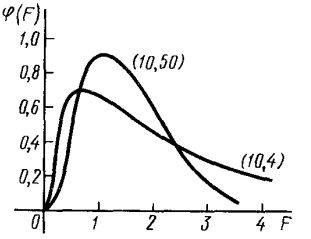


Рис. 19. Плотность F-распределения

$$F_p(f_1, f_2) = \frac{1}{F_{1-p}(f_2, f_1)}. \qquad (II.76)$$

В условиях нулевой гипотезы $\sigma_1^2 = \sigma_2^2$ и $\sigma_1^2 / \sigma_2^2 = 1$, и, следовательно, F-распределение может быть непосредственно использовано для оценки отношения выборочных дисперсий s_1^2 / s_2^2. При доверительной вероятности $1-p$ двусторонняя доверительная оценка величины F имеет вид

$$F_{p/2}(f_1, f_2) \leqslant F \leqslant F_{1-p/2}(f_1, f_2).$$

С учетом (II.76)

$$\frac{1}{F_{1-p/2}(f_2, f_1)} \leqslant F \leqslant F_{1-p/2}(f_1, f_2). \qquad (II.77)$$

В условиях нулевой гипотезы $F = s_1^2 / s_2^2$, следовательно, с вероятностью $1-p$ должно выполняться двустороннее неравенство

$$\frac{1}{F_{1-p/2}(f_2, f_1)} \leqslant \frac{s_1^2}{s_2^2} \leqslant F_{1-p/2}(f_1, f_2) \qquad (II.78)$$

или одно из односторонних неравенств:

$$\begin{aligned} &s_1^2 / s_2^2 \leqslant F_{1-p}(f_1, f_2) \text{ (оценка сверху)}, \\ &s_1^2 / s_2^2 \geqslant 1/F_{1-p}(f_2, f_1) \text{ (оценка снизу)}. \end{aligned} \qquad (II.79)$$

Вероятность неравенств, противоположных (II.78) и (II.79), равна уровню значимости p, они образуют критическую область для нулевой гипотезы. Если полученное дисперсионное отношение попадает в критическую область, различие между дисперсиями надо считать значимым. Будем для удобства обозначать через s_1^2 большую выборочную дисперсию. При проверке нулевой гипотезы $\sigma_1^2 = \sigma_2^2$ односторонний критерий применяется, если альтернативной гипотезой является гипотеза $\sigma_1^2 > \sigma_2^2$, т. е. если большей выборочной дисперсии s_1^2 заведомо не может соответствовать меньшая генеральная. При этом различие между дисперсиями согласно (II.79) следует считать значимым, если

$$s_1^2 / s_2^2 > F_{1-p}(f_1, f_2). \qquad (II.80)$$

Значение $F_{1-p}(f_1, f_2)$ для $p=0{,}05$ можно определить по табл. 5 приложения.

Двусторонний критерий значимости (II.78) применяется для альтернативной гипотезы $\sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$, т. е. когда соотношение между генеральными дисперсиями неизвестно. При этом в неравенстве (II.78) надо проверять только правую часть, так как левая часть всегда выполняется: по условию

$$\frac{s_1^2}{s_2^2} > 1, \text{ а } \frac{1}{F_{1-p/2}(f_2, f_1)} < 1$$

для небольших p. При этом различие между дисперсиями следует считать значимым, если

$$s_1^2 / s_2^2 > F_{1-p/2}(f_1, f_2). \qquad \text{(II.81)}$$

Пример 8. При оценке точности определения содержания усвояемой P_2O_5 в сложном удобрении сернокислотным методом дисперсия воспроизводимости составила $s_1^2 = 0{,}73$; $f = 2$. Требуется сравнить этот метод анализа усвояемой P_2O_5 с более точным цитратным методом по результатам четырех параллельных определений P_2O_5: 16,5; 15,9; 16,6; 15,8.

Р е ш е н и е. *Дисперсия воспроизводимости цитратного метода*

$$s_2^2 = \frac{\sum_{i=1}^{4} (x_i - \bar{x})^2}{4-1} = 0{,}16$$

при числе степеней свободы $f_2 = 3$. *По условиям задачи для оценки значимости различия между дисперсиями* s_1^2 и s_2^2 можно использовать односторонний критерий значимости (II.80). Дисперсионное отношение $F = 0{,}73/0{,}16 = 4{,}5$ надо сравнить с табличным для уровня значимости $p = 0{,}05$ и чисел степеней свободы $f_1 = 2$ и $f_2 = 3$ $F_{1-p}(f_1, f_2) = 9{,}6$. Таким образом, выборочное дисперсионное отношение меньше табличного и данные опытов не позволяют считать точность методов значимо различной.

Критерий Фишера можно использовать для сравнения дисперсий, если одна из дисперсий является генеральной. Число степеней свободы генеральной дисперсии считается равным ∞.

13. Сравнение нескольких дисперсий. При определении оценки дисперсии по текущим измерениям по формуле

$$s_y^2 = \frac{f_1 s_1^2 + f_2 s_2^2 + \cdots + f_n s_n^2}{f_1 + f_2 + \cdots + f_n} = \frac{\sum_{i=1}^{i} f_i s_i^2}{f}$$

была принята нулевая гипотеза равенства соответствующих генеральных дисперсий. Проверить эту гипотезу для выборок разного объема можно по *критерию Бартлета*. Бартлет показал, что в условиях нулевой гипотезы отношение B/C, где

$$B = 2{,}303 \left(f \lg s_y^2 - \sum_{i=1}^{n} f_i \lg s_i^2 \right),$$

$$C = 1 + \frac{1}{3(n-1)} \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{f_i} - \frac{1}{f} \right), \qquad \text{(II.82)}$$

распределено приближенно как χ^2 с $n-1$ степенями свободы, если все $f_i > 2$.

Гипотеза равенства генеральных дисперсий принимается, если

$$B/C < \chi^2_{1-p} \tag{11.83}$$

при выбранном уровне значимости p. Различие между выборочными дисперсиями можно считать незначимым, а сами выборочные дисперсии — однородными. Так как всегда $C > 1$, если окажется $B \leqslant \chi^2_{1-p}$, нулевую гипотезу следует принять; если $B > \chi^2_{1-p}$, критерий Бартлета вычисляют полностью.

Пример 9. При получении фосфора возгонкой из фосфатов измерялась степень восстановления фосфата при четырех различных температурах. В таблице приведены результаты статистического анализа однородности дисперсий воспроизводимости результатов при разных температурах.

Температура	s_i^2	f_i	$f_i s_i^2$	$\lg s_i^2$	$f_i \lg s_i^2$	$\frac{1}{f_i}$
T_1	1,72	5	8,60	0,2355	1,177	0,200
T_2	1,60	4	6,40	0,2041	0,816	0,250
T_3	1,97	6	11,82	0,2945	1,767	0,167
T_4	2,37	8	18,96	0,3747	2,995	0,125
Σ		23	45,78		6,755	0,742

Определить, не меняется ли точность анализа с температурой.

Р е ш е н и е. По данным таблицы дисперсия воспроизводимости равна

$$s_y^2 = 45,78/23 = 1,99, \quad \lg s_y^2 = 0,2889,$$

$$f \lg s_y^2 = 23 \cdot 0,2889 = 6,874, \quad 1/f = 1/23 = 0,0435.$$

$$B = 2,303\,(6,874 - 6,755) = 0,278,$$

$$C = \frac{0,742 - 0,0435}{3\,(4-1)} = 1 + 0,077 = 1,077.$$

По табл. 4 приложения находим при трех степенях свободы и уровне значимости $p = 0,05$, $\chi^2_{0,95} = 7,8$. Величина $B < \chi^2_{0,95}$ и, следовательно, на уровне значимости $p = 0,05$ можно принять гипотезу о равенстве генеральных дисперсий. Величину C можно было не вычислять.

Таким образом, критерий Бартлета позволяет считать, что точность анализа не зависит от температуры. Выборочные дисперсии однородны, поэтому в качестве оценки для дисперсии воспроизводимости можно взять средневзвешенную дисперсию s_y^2 с числом степеней свободы f, равным 23.

Если выборочные дисперсии получены по выборкам одинаковых объемов $m_1 = m_2 = \ldots = m_n = m$, для их сравнения используют более удобный и точный *критерий Кохрена*. Кохрен исследовал распределение максимальной выборочной дисперсии к сумме всех дисперсий:

$$G = s^2_{\max} \Big/ \sum_{i=1}^{n} s_i^2. \tag{11.84}$$

Распределение случайной величины G зависит только от числа суммируемых дисперсий n и числа степеней свободы f, с которым определена каждая дисперсия: $f = m - 1$. В табл. 6 приложения приведены квантили G_{1-p} для уровней значимости $p = 0{,}05$. Если найденное по выборочным дисперсиям значение критерия Кохрена окажется меньше табличного

$$G < G_{1-p}(n, f), \tag{II.85}$$

где n — число суммируемых дисперсий; $f = m - 1$, расхождение между дисперсиями нужно считать случайным при выбранном уровне значимости p. Если при этом определяется оценка для дисперсии воспроизводимости, однородные дисперсии можно усреднить. Число степеней свободы f среднеарифметической дисперсии равно $f = n(m-1)$.

14. Сравнение двух средних. Для сравнения между собой двух средних, полученных по выборкам из нормально распределенных генеральных совокупностей, применяется критерий Стьюдента, или t-критерий. Пусть заданы две случайные выборки: $x_1, x_2, \ldots, x_{n_1}$ и $y_1, y_2, \ldots, y_{n_2}$. Первая выборка взята из нормально распределенной генеральной совокупности с параметрами m_x и σ_x^2, вторая — из генеральной совокупности с параметрами m_y и σ_y^2. По выборкам получены оценки для этих параметров: $\overline{x}$, s_x^2 и $\overline{y}$, s_y^2. Требуется проверить нулевую гипотезу: $m_x = m_y$ при условии $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma^2$. Рассмотрим случайную величину

$$z = \overline{x} - \overline{y}. \tag{II 86}$$

По свойству линейности нормального распределения (см. гл. I, 5) z распределена нормально с параметрами:

$$m_z = m_x - m_y,$$

$$\sigma_z^2 = \sigma_{\overline{x}}^2 + \sigma_{\overline{y}}^2 = \frac{\sigma_x^2}{n_1} + \frac{\sigma_y^2}{n_2} = \sigma^2\left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}\right). \tag{II.87}$$

Составим нормированную случайную величину

$$\frac{z - m_z}{\sigma_z} = \frac{(\overline{x} - \overline{y}) - (m_x - m_y)}{\sigma\sqrt{1/n_1 + 1/n_2}}, \tag{II.88}$$

которая имеет стандартное нормальное распределение.

Если генеральный стандарт σ заменить выборочным, получится величина, имеющая распределение Стьюдента

$$t = \frac{(\overline{x} - \overline{y}) - (m_x - m_y)}{s\sqrt{1/n_1 + 1/n_2}}, \tag{II.89}$$

с числом степеней свободы f, равным $f = n_1 + n_2 - 2$.

Однородность выборочных дисперсий s_x^2 и s_y^2 можно проверить по критерию Фишера. При доверительной вероятности $\beta = 1 - p$ имеем двустороннюю оценку для разности $m_x - m_y$:

$$\bar{x}-\bar{y}-t_{1-p/2}\,s\sqrt{\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}}\leqslant m_x-m_y\leqslant\bar{x}-\bar{y}+t_{1-p/2}\,s\sqrt{\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}} \tag{II.90}$$

или односторонние оценки:

$$m_x-m_y\leqslant\bar{x}-\bar{y}+t_{1-p}\,s\sqrt{1/n_1+1/n_2}\,, \tag{II.91}$$

$$m_x-m_y\geqslant\bar{x}-\bar{y}-t_{1-p}\,s\sqrt{1/n_1+1/n_2}\,. \tag{II.92}$$

В условиях нулевой гипотезы $m_x=m_y$, и неравенства (II.91) и (II.92) дают критерий проверки этой гипотезы. Нулевая гипотеза отвергается при двустороннем критерии, если

$$|\bar{x}-\bar{y}|\geqslant t_{1-p/2}\,s\sqrt{1/n_1+1/n_2}\,; \tag{II.93}$$

при одностороннем критерии, если

$$|\bar{x}-\bar{y}|\geqslant t_{1-p}\,s\sqrt{1/n_1+1/n_2}\,. \tag{II.94}$$

Приведенными критериями нельзя пользоваться, если генеральные дисперсии σ_x^2 и σ_y^2 не равны между собой. Для этого случая существует несколько приближенных критериев для сравнения двух средних. При $n_1=n_2=n$ можно воспользоваться приближенным t-критерием

$$t\simeq\frac{(\bar{x}-\bar{y})\sqrt{n}}{\sqrt{s_x^2+s_y^2}} \tag{II.95}$$

с числом степеней свободы

$$f=\frac{n-1}{c^2-(1-c)^2}\,, \tag{II.96}$$

где

$$c=s_x^2/(s_x^2+s_y^2). \tag{II.97}$$

Если число степеней свободы s_x^2 равно $f_1=n_1-1$, а s_y^2 равно $f_2=n_2-1$, можно использовать другой приближенный критерий. Вычислим отношения $v_1=s_x^2/n_1$, $v_2=s_y^2/n_2$. По табл. 3 приложения найдем квантили $t_{1-p/2}(f_1)$ и $t_{1-p/2}(f_2)$. Вычислим величину

$$T=\frac{v_1t_{1-p/2}(f_1)+v_2t_{1-p/2}(f_2)}{\sqrt{v_1+v_2}}\,. \tag{II.98}$$

Нулевая гипотеза $m_x=m_y$ отвергается, если

$$|\bar{x}-\bar{y}|>T. \tag{II.99}$$

Сформулированный критерий является двусторонним, он превращается в односторонний при замене $p/2$ на p.

Пример 10. Исследовался процесс радикальной полимеризации солей на основе 4-винилпиридина и двух различных галоидных алкилов: иодистого бутила — C_4H_9I и бромистого этила — C_2H_5Br. Сравнить реакционную способность галоидных алкилов, если средний ($n=8$) выход полимера при проведении синтеза с C_4H_9I составил

67,72% ($\bar{x}$), а средний выход ($n=8$) с C_2H_5Br – 91,61% ($\bar{y}$). Ошибка воспроизводимости процесса полимеризации равна $s=16{,}6\%$.

Решение. В качестве нулевой гипотезы рассматривается гипотеза равенства реакционных способностей галоидных алкилов. Число степеней свободы дисперсии воспроизводимости равно $f=8+8-2=14$. Поскольку средние данные позволяют предположить, что реакционная способность бромистого этила выше, можно применить для оценки значимости различия односторонний критерий (II.95). При $f=14$ и $p=0{,}05$ $t_{0,95}=1{,}76$. Поэтому

$$t_{1-p}\, s\sqrt{1/n_1+1/n_2}=1{,}76\cdot 16{,}6\sqrt{1/8+1/8}=14{,}15;$$

$\bar{y}-\bar{x}=23{,}89>14{,}15$. Следовательно, при 5%-ном уровне значимости нулевая гипотеза отвергается и разницу реакционных способностей галоидных алкилов следует считать значимой. Если не делать предположения, что реакционная способность бромистого этила выше, для проверки нулевой гипотезы надо использовать двустороннийий критерий (II.94). При $f=14$ и $p=0{,}05$ $t_{0,975}=2{,}15$. Поэтому

$$t_{1-p/2}\, s\sqrt{1/n_1+1/n_2}=2{,}15\cdot 16{,}6\sqrt{1/8+1/8}=17{,}2;$$

$$\bar{y}-\bar{x}=23{,}89>17{,}2.$$

Таким образом, и при двустороннем критерии нулевая гипотеза отвергается.

Нередко на практике выборка наблюдений составляется из нескольких подгрупп, полученных в том или ином порядке (например, из различных частей генеральной совокупности). Для объединения таких подгрупп в одну выборку необходимо убедиться в однородности средних по подгруппам. Для этого проверяют значимость различия между средними подгрупп и общим средним всей выборки по критерию Стьюдента.

Пусть имеется k подгрупп значений случайной величины X объемом m_1, $m_2,\ldots,m_k$. По этим данным определены средние подгрупп $\bar{x}_1$, $\bar{x}_2,\ldots,\bar{x}_j,\ldots,\bar{x}_k$, среднее всей выборки $\bar{x}$ и среднее квадратичное отклонение всей выборки s:

$$\bar{x}_j=\frac{\sum_{i=1}^{m_j}x_{j_i}}{m_j},\qquad \bar{x}=\frac{\sum_{i=1}^{n}x_i}{n},$$

где $n=m_1+m_2+\ldots+m_k$;

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

Обозначим

$$y_j=(\bar{x}_j-\bar{x})/s. \qquad \text{(II.100)}$$

Можно доказать, что величина

$$t_j=\frac{y_j\sqrt{m_j(n-2)}}{\sqrt{n-m_j-m_jy_j^2}} \qquad \text{(II.101)}$$

имеет распределение Стьюдента с $f=n-2$ степенями свободы. При помощи этого критерия проверяется нулевая гипотеза H^0 равен-

ства математического ожидания в j-й подгруппе m_j и математического ожидания всей выборки m:

$$H^0: m_j = m.$$

Нулевая гипотеза отвергается, если не выполняются неравенства (II 55) для двустороннего критерия или неравенства (II 59) и (II 60) для одностороннего. Обычно в качестве среднего $\bar{x}_j$ рассматривают наибольшее (наименьшее) среднее среди средних подгрупп.

15. Сравнение нескольких средних. При сравнении нескольких средних можно использовать t-критерий, проводя сравнение попарно. Однако для использования при сравнении полной информации о всех средних такое сравнение проводят при помощи *множественного рангового критерия Дункана.* Пусть по k выборкам разного объема получено k средних значений:

$$\bar{x}_1, \bar{x}_2, \ldots, \bar{x}_j, \ldots, \bar{x}_k,$$

$$\bar{x}_j = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} x_{j_i}}{n_j}.$$

Генеральные дисперсии равны между собой, т. е.

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \cdots = \sigma_k^2 = \cdots = \sigma_x^2.$$

При применении критерия Дункана следует: 1) проранжировать k средних значений, расположив их в порядке возрастания; 2) определить ошибку воспроизводимости результатов s_x с соответствующим числом степеней свободы f_x; 3) определить ошибку для каждого среднего:

$$s_{\bar{x}_j} = \sqrt{s_x^2/n_j}, \quad j = 1, 2, \ldots, k;$$

4) выписать из таблицы Дункана (табл. 7 приложения) $(k-1)$ значений рангов с выбранным уровнем значимости, числом $n_D = f_x$ и $p = 2,3,\ldots,k$; 5) умножить эти значения рангов на $s_{\bar{x}_j}$ и таким образом определить $(k-1)$ наименьших значимых рангов; 6) проверить значимость различия между средними, начиная с крайних в ранжировочном ряду; разность максимального и минимального значений среднего сравнить с наименьшим значимым рангом при $p = k$, затем найти разность максимального среднего и второго среднего в ранжировочном ряду и сравнить ее с наименьшим значимым рангом при $p = k-1$ и т. д. Это сравнение продолжить для второго по величине среднего, которое сравнивается с наименьшим, и т. д., пока не будут исследованы на значимость различия между всеми $k(k-1)/2$ парами.

Пример 11. Исследовался процесс радикальной полимеризации солей на основе 4-винилпиридина и различных галоидных алкилов: CH_3I, C_2H_5I, C_3H_7I, C_4H_9I, C_2H_5Br, C_3H_7Br, C_4H_9Cl, C_3H_7Cl. Средний выход полимера по восьми параллельным опытам для каждого галоидного алкила приведен ниже:

№ п/п . . .	0	1	2	3	4	5	6	7
Галоидные алкилы	CH_3I	C_2H_5I	C_3H_7I	C_4H_9I	C_2H_5Br	C_3H_7Br	C_4H_9Cl	C_3H_7Cl
Средний выход, %	95,12	85,46	87,77	67,72	91,61	76,04	13,28	11,72

Ошибка воспроизводимости при измерении выхода полимера $s_x = 16{,}83$. Число степеней свободы $f_x = 56$. *В соответствии с правилом применения критерия Дункана расположим* средние результаты в порядке возрастания:

11,72	13,28	67,72	76,04	85,46	87,77	91,61	95,12
(7)	(6)	(3)	(5)	(1)	(2)	(4)	(0)

Ошибка среднего равна $s_{\bar{x}} = 16{,}3/\sqrt{8} = 5{,}95$.

Выпишем из таблицы Дункана (табл. 7 приложения) для $n_2 = 56$ и уровня значимости 0,05 значимые ранги:

p	2	3	4	5	6	7	8
Ранги . . .	2,85	3,0	3,09	3,12	3,21	3,25	3,29

Наименьшие значимые ранги (НЗР), умноженные на ошибку среднего, равны:

p	2	3	4	5	6	7	8
НЗР · $s_{\bar{x}}$	16,96	17,85	18,39	18,56	19,1	19,34	19,58

(0) — (7) = 95,12 — 11,72 = 83,4 > 19,58 — различие значимое
(0) — (6) = 95,12 — 13,28 = 81,84 > 19,34 — различие значимое
(0) — (3) = 95,12 — 67,72 = 27,4 > 19,1 — различие значимое
(0) — (5) = 95,12 — 76,04 = 19,08 > 18,56 — различие значимое
(0) — (1) = 95,12 — 85,46 = 9,66 < 18,39 — различие незначимое
(0) — (2) = 95,12 — 87,77 < 17,85 — различие незначимое
(0) — (4) = 95,12 — 91,61 < 16,96 — различие незначимое
(4) — (7) = 79,89 > 19,34 — различие значимое
(4) — (6) = 78,33 > 19,1 — различие значимое
(4) — (3) = 23,89 > 18,56 — различие значимое
(4) — (5) = 13,57 < 18,39 — различие незначимое
(4) — (1) = 6,16 < 17,85 — различие незначимое
(4) — (2) = 3,84 < 16,96 — различие незначимое
(2) — (7) = 76,05 > 19,1 — различие значимое
(2) — (6) = 74,49 > 18,56 — различие значимое
(2) — (3) = 20,05 > 18,39 — различие значимое
(2) — (5) = 11,76 < 17,85 — различие незначимое
(2) — (1) = 2,31 < 16,96 — различие незначимое
(1) — (7) = 73,74 > 18,56 — различие значимое
(1) — (6) = 72,18 > 18,39 — различие значимое
(1) — (3) = 17,74 < 17,85 — различие незначимое
(1) — (5) = 9,42 < 16,96 — различие незначимое
(5) — (7) = 64,32 > 18,39 — различие значимое
(5) — (6) = 62,76 > 17,85 — различие значимое
(5) — (3) = 8,32 < 16,96 — различие незначимое
(3) — (7) = 56,00 > 17,85 — различие значимое
(3) — (6) = 54,44 > 16,96 — различие значимое
(6) — (7) = 1,56 < 16,96 — различие незначимое

16. Проверка однородности результатов измерений. Грубые измерения являются результатом поломки прибора или недосмотра экспериментатора, и результат, содержащий грубую ошибку, резко отличается по величине. На этом основаны статистические критерии оценки и исключения грубых измерений. Наличие грубой ошибки в выборке значений случайной величины X нарушает характер распределения, изменяет его параметры, т. е. нарушается однородность наблюдений. Поэтому выявление грубых ошибок можно трактовать как проверку однородности наблюдений, т. е. проверку гипотезы о том, что все элементы выборки $x_1, x_2,\ldots,x_n$ получены из одной и той же генеральной совокупности. Будем по-прежнему полагать, что случайная величина подчиняется нормальному распределению. Для решения этой задачи предложено несколько методов.

Имеется выборка $x_1, x_2,\ldots,x_n$ значений случайной величины X. Пусть $x_{\max}(x_{\min})$ — наибольший (наименьший) результат измерения. Величины

$$v = \frac{x_{\max} - \bar{x}}{s_x \sqrt{\frac{n-1}{n}}}, \qquad (11.102)$$

или

$$v' = \frac{\bar{x} - x_{\min}}{s_x \sqrt{\frac{n-1}{n}}} \qquad (11.103)$$

имеют специальное распределение, которое зависит только от числа степеней свободы $f = n-2$. В табл. 2 приведены значения $v(v')$ для уровней значимости $p = 0{,}10$; 0,05; 0,025 и 0,01 при числе степеней свободы от 1 до 23.

Величина $x_{\max}$ $(x_{\min})$ исключается из выборки как грубое измерение (на уровне значимости p), если определенное по формулам (II.102) и (II.103) значение v или v' окажется больше табличного.

Таблица 2. **Значения v (v') для различных уровней значимости**

Число степеней свободы f	Уровни значимости p				Число степеней свободы f	Уровни значимости p			
	0,10	0,05	0,025	0,01		0,10	0,05	0,025	0,01
1	1,406	1,412	1,414	1,414	13	2,326	2,493	2,638	2,800
2	1,645	1,689	1,710	1,723	14	2,354	2,523	2,670	2,837
3	1,791	1,869	1,917	1,955	15	2,380	2,551	2,701	2,871
4	1,894	1,996	2,067	2,130	16	2,404	2,577	2,728	2,903
5	1,974	2,093	2,182	2,265	17	2,426	2,600	2,754	2,932
6	2,041	2,172	2,273	2,374	18	2,447	2,623	2,778	2,959
7	2,097	2,237	2,349	2,464	19	2,467	2,644	2,801	2,984
8	2,146	2,294	2,414	2,540	20	2,486	2,664	2,823	3,008
9	2,190	2,343	2,470	2,606	21	2,504	2,683	2,843	3,030
10	2,229	2,387	2,519	2,663	22	2,520	2,701	2,862	3,051
11	2,264	2,426	2,562	2,714	23	2,537	2,717	2,880	3,071
12	2,297	2,461	2,607	2,759					

Если сомнение вызывают два или три элемента выборки, поступают следующим образом: Для всех сомнительных элементов вычисляют $v(v')$, и исследование начинается с элемента, имеющего наименьшее значение $v(v')$. Остальные сомнительные элементы из выборки исключаются. Для этой уменьшенной выборки определяют $\overline{x}$, s и новое значение $v(v')$ для исследуемого элемента. Если исследуемый элемент является грубым измерением, еще с большим основанием можно считать грубыми измерениями ранее исключенные элементы. Если исследуемый элемент не является грубым измерением, его присоединяют к выборке и начинают исследовать следующий по величине $v(v')$ элемент выборки, при этом снова вычисляют новые значения $\overline{x}$, s и т. п.

Пример 12. При пятикратном определении степени извлечения алкалоидов из растительного сырья получено среднее значение степени извлечения $\bar{x} = 85\%$, причем $s_x = 2\%$. Максимальное значение 92%, полученное в одном из параллельных опытов, вызывает сомнение. Проверить, не является ли значение степени извлечения, равное 92%, грубым измерением.

Р е ш е н и е. По формуле (11.102) определены v для сомнительного элемента:

$$v = \frac{92 - 85}{2\sqrt{4/5}} = \frac{7}{2 \cdot 0{,}895} = 3{,}9.$$

По табл. 2 находим для $f = n - 2 = 3$ $v_{0,95} = 1{,}869$ и $v = 3{,}9 > v_{0,95}$.

Следовательно, на уровне значимости $p = 0{,}05$ значение степени извлечения, равное 92%, надо считать ошибочным, его следует из выборки исключить и заново пересчитать $\bar{x}$ и s_x.

17. Сравнение выборочного распределения и распределения генеральной совокупности. Проверку гипотез относительно параметров распределения генеральной совокупности проводили в предположении нормального распределения наблюдаемой случайной величины. Гипотезу о нормальности изучаемого распределения в математической статистике называют *основной гипотезой*. Проверку этой гипотезы по выборке проводят при помощи *критериев согласия*. Критерии согласия применяют для проверки гипотезы о предполагаемом виде закона распределения. Критерии согласия позволяют определить вероятность того, что при гипотетическом законе распределения наблюдающееся в рассматриваемой выборке отклонение вызывается случайными причинами, а не ошибкой в гипотезе. Если эта вероятность велика, то отклонение от гипотетического закона распределения следует признать случайным и считать, что гипотеза о предполагаемом законе распределения не опровергается.

Вероятностный характер критериев не позволяет однозначно принять или отвергнуть проверяемую гипотезу. Критерий позволяет утверждать, что гипотеза не противоречит опытным данным, если вероятность наблюдаемого отклонения от гипотетического закона велика, или что гипотеза не согласуется с опытными данными, если эта вероятность мала. Чаще всего используется один из двух критериев согласия: *критерий Пирсона* (критерий χ^2) и *критерий Колмогорова*.

Для применения критерия χ^2 (хи-квадрат) весь диапазон изме-

нения случайной величины в выборке объема n разбивается на k интервалов. Число интервалов k берут обычно в зависимости от объема выборки в пределах от 8 до 20. Число интервалов можно определить по полуэмпирической формуле (II 24). Число элементов выборки, попавших в i-й интервал, обозначим через n_i. Построенная гистограмма (см. гл. II 1) выборочного распределения или общие соображения о механизме возникновения случайной величины служат основанием для выбора типа закона распределения. Параметры этого закона могут быть определены или из теоретических соображений, или нахождением их оценок по выборке. На основании принятого закона распределения вычисляются вероятности p_i попадания случайной величины X в i-й интервал. Величина, характеризующая отклонение выборочного распределения от предполагаемого, определяется формулой

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{k} \frac{(n_i - np_i)^2}{np_i}, \qquad (II.104)$$

где k — число интервалов; n — объем выборки.

Сумма (II 104) имеет приближенно χ^2-распределение с $f = k - c - 1$ степенями свободы, где c — число параметров гипотетического закона распределения, определяемых по выборке.

Для нормального распределения $c = 2$, если и $\overline{x}$, и s_x определяются по данной выборке. Гипотеза о принятом типе закона распределения принимается на данном уровне значимости p, если

$$\chi^2 < \chi^2_{1-p}, \qquad (II.105)$$

где χ^2_{1-p} определяются по табл. 4 приложения для выбранного уровня значимости и числа степеней свободы f. Если $\chi^2 > \chi^2_{1-p}$, делается вывод, что гипотеза не согласуется с выборочным распределением.

При использовании критерия χ^2 желательно, чтобы объем выборки был достаточно велик: $n \geqslant 50 \div 150$, а количество элементов $n_i \geqslant 5 \div 8$. Если какое-либо из $n_i < 5$, то два или несколько соседних интервалов должны быть объединены в один. При этом соответственно уменьшается число степеней свободы.

Вероятности p_i попадания значений случайной величины в i-й интервал для нормального закона распределения можно определить по формуле (I.64):

$$P(a \leqslant X \leqslant b) = \Phi\left(\frac{b - \overline{x}}{s}\right) - \Phi\left(\frac{a - \overline{x}}{s}\right). \qquad (II.106)$$

При подсчете теоретических вероятностей p_i нужно считать, что крайний левый интервал простирается до $-\infty$; крайний правый — до $+\infty$.

Для применения критерия согласия Колмогорова необходимо определить наибольшее абсолютное отклонение выборочной функции распределения $F_n(x)$ от генеральной $F(x)$:

$$D = \max | F_n(x) - F(x) | . \qquad (II.107)$$

Затем вычисляется величина λ:

$$\lambda = \sqrt{n}\, D. \qquad (II.108)$$

В табл. 3 приведены квантили λ_{1-p} распределения Колмогорова.

Таблица 3. **Квантили распределения Колмогорова**

p	λ_{1-p}	p	λ_{1-p}	p	λ_{1-p}
0,99	0,44	0,50	0,83	0,15	1,14
0,90	0,57	0,40	0,89	0,10	1,22
0,80	0,64	0,30	0,97	0,05	1,36
0,70	0,71	0,25	1,02	0,02	1,52
0,60	0,77	0,20	1,07	0,01	1,63

Если вычисленное значение λ меньше табличного λ_{1-p}, то гипотеза о совпадении теоретического закона распределения $F(x)$ с выборочным $F_n(x)$ не отвергается. При $\lambda \geqslant \lambda_{1-p}$ гипотеза отклоняется (или считается сомнительной). Уровень значимости p при применении критерия Колмогорова выбирают обычно равным $0,2 \div 0,3$. Критерий Колмогорова может быть применен также для проверки гипотезы о том, принадлежат ли две выборки объемов n_1 и n_2 одной генеральной совокупности. При этом величина D_{n_1,n_2} определяется из выражения

$$D_{n_1,n_2} = \max | F_{n_1}(x) - F_{n_2}(x) |, \qquad (II.109)$$

где $F_{n_1}(x)$ и $F_{n_2}(x)$ — выборочные функции распределения, построенные для первой и второй выборок соответственно, а величина λ — по формуле

$$\lambda = \sqrt{\frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2}}\, D_{n_1,n_2}. \qquad (II.110)$$

Для нормального распределения функция $F(x)$ определяется по формуле

$$F(x) = \frac{1}{2} + \Phi\left(\frac{x - \bar{x}}{s}\right). \qquad (II.111)$$

В случае выборок небольшого объема $n < 20$ для проверки гипотезы о законе распределения можно использовать простые критерии, основанные на сравнении генеральных параметров распределения и их оценок, полученных по выборке. В качестве оцениваемых параметров удобнее всего брать моменты.

Нормальное распределение полностью определяется двумя параметрами — математическим ожиданием m_x и стандартом σ_x. Все остальные моменты нормального распределения выражаются через математическое ожидание и стандарт. Для нормального распределения коэффициент асимметрии, определяемый по формуле (I.28), равен

$$\gamma_1 = \mu_3 / \sigma_x^2 = 0, \tag{II.112}$$

так как $\mu_3 = 0$

Коэффициент эксцесса, определяемый по формуле (I.24), также равен нулю

$$\gamma_2 = \frac{\mu_4}{\sigma_x^4} - 3 = 0, \tag{II.113}$$

так как для нормального распределения

$$\mu_4 = 3\sigma_x^4. \tag{II.114}$$

Выборочные коэффициенты эксцесса и асимметрии определяются по формулам:

$$\gamma_1^* = \frac{\mu_3^*}{s_x^3} = \frac{1}{ns_x^3} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^3, \tag{II.115}$$

$$\gamma_2^* = \frac{\mu_4^*}{s_x^4} = \frac{1}{ns_x^4} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^4 - 3. \tag{II.116}$$

Распределения этих оценок сложны и мало изучены. Однако известны дисперсии этих величин:

$$D(\gamma_1^*) = \frac{6(n-1)}{(n+1)(n+3)}, \tag{II.117}$$

$$D(\gamma_2^*) = \frac{24n(n-2)(n-3)}{(n+1)^2(n+3)(n+5)}, \tag{II.118}$$

где n — объем выборки.

Зная дисперсии $D(\gamma_1^*)$ и $D(\gamma_2^*)$, можно оценить, значимо ли выборочные коэффициенты асимметрии и эксцесса отличаются от нуля. Если

$$|\gamma_1^*| \leqslant 3\sqrt{D(\gamma_1^*)}, \tag{II.119}$$

$$|\gamma_2^*| \leqslant 5\sqrt{D(\gamma_2^*)}, \tag{II.120}$$

то наблюдаемое распределение можно считать нормальным.

Пример 13. Размер частицы никелевого катализатора замерен с точностью до 1 мкм. На выборке объема $n = 200$ проверить, подчиняется ли распределение размеров частиц нормальному закону. В таблице приведены отклонения размеров частиц катализатора от номинального. Результаты сгруппированы в 10 интервалов длиной $h = 5$ мкм.

Интервал h	Границы интервалов $x_{i+1} \div x_i$	Середина интервала x_i	Число точек в интервале n_i	Относительная частота p^*	Интервал h	Границы интервалов $x_{i+1} \div x_i$	Середина интервала x_i	Число точек в интервале n_i	Относительная частота p^*
1	−20÷−15	−17,5	7	0,035	6	5 ÷ 10	7,5	41	0,205
2	−15÷−10	−12,5	11	0,055	7	10÷15	12,5	26	0,130
3	−10÷−5	−7,5	15	0,075	8	15÷20	17,5	17	0,085
4	5÷−0	−2,5	24	0,120	9	20 ÷ 25	22,5	7	0,035
5	0 ÷5	2,5	49	0,245	10	25 ÷ 30	27,5	3	0,015

Р е ш е н и е. Проверим гипотезу нормального распределения размера частиц катализатора (случайная величина X), определив коэффициенты асимметрии и эксцесса. Даниые таблицы служат для определения выборочных среднего, дисперсии, третьего и четвертого центрального моментов случайной величины X для сгруппированных данных по формулам:

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^{10} p_i^* x_i, \quad s_x^2 = \sum_{i=1}^{10} p_i^* (x_i - \bar{x})^2, \quad \mu_3^* = \sum_{i=1}^{10} p_i^* (x_i - \bar{x})^3,$$

$$\mu_4^* = \sum_{i=1}^{10} p_i^* (x_i - \bar{x})^4,$$

где p_i^* — относительная частота, определяемая по формуле (II.6). Необходимые для расчета данные (суммы) приведены в таблице.

i	x_i	$p_i^* x_i$	$x_i - \bar{x}$	$(x_i - \bar{x})^2$	$(x_i - \bar{x})^3$	$(x_i - \bar{x})^4$	$p_i^*(x_i - \bar{x})^2$	$p_i^*(x_i - \bar{x})^3$	$p_i^*(x_i - \bar{x})^4$
1	−17,5	−0,6125	−21,8	475,2	−10360	225853	17,43	−362,6	7904,9
2	−12,5	−0,6875	−16,8	282,2	−4742	79659	15,52	−260,8	4381,2
3	−7,5	−0,5675	−11,8	139,2	−1643	19388	10,44	−123,2	1454,1
4	−2,5	−0,3000	−6,8	46,2	−314	2138	5,54	−37,7	256,6
5	2,5	−0,6125	−1,8	3,2	−6	10	0,78	−1,5	2,4
6	7,5	1,5375	3,2	10,2	30	105	2,09	6,2	21,5
7	12,5	1,6250	8,2	67,2	551	4125	8,74	71,6	587,7
8	17,5	1,4875	13,2	174,2	2300	30300	14,81	195,5	2580,6
9	22,5	0,7875	18,2	331,2	6029	109720	11,59	211,0	3840,2
10	27,5	0,4125	23,2	532,2	12487	289702	7,98	187,3	4345,5
Суммы:		4,295					94,92	−114,2	25375

В результате получим $\bar{x} = 4{,}30$ мкм, $s_x = 9{,}71$ мкм, $\mu_3^* = -114{,}2$ мкм^3, $\mu_4^* = 25\,375$ мкм^4. Определим коэффициенты асимметрии и эксцесса по формулам (II.115) и (II.116):

$$\gamma_1^* = \frac{\mu_3^*}{s_x^3} = -0{,}1247, \qquad \gamma_2^* = \frac{\mu_4^*}{s_x^4} - 3 = -0{,}1455$$

и их дисперсии — по формулам (II.117) и (II.118):

$$D(\gamma_1^*) = \frac{6(200-1)}{(200+1)(200+3)} = 0{,}029; \quad \sqrt{D(\gamma_1^*)} \cong 0{,}17;$$

$$D(\gamma_2^*) = \frac{24 \cdot 200 (200-2)(200-3)}{(200+1)^2 (200+3)(200+5)} = 0{,}113;$$

$$\sqrt{D(\gamma_2^*)} \cong 0{,}34.$$

Таким образом, имеем

$$3\sqrt{D(\gamma_1^*)} = 0{,}51 \quad \text{и} \quad |\gamma_1^*| = 0{,}1247 < 3\sqrt{D(\gamma_1^*)},$$

$$5\sqrt{D(\gamma_2^*)} = 1{,}70 \quad \text{и} \quad |\gamma_2^*| = 0{,}1455 < 5\sqrt{D(\gamma_2^*)}.$$

Следовательно, наблюдаемое распределение можно считать нормальным.

Проверим полученный вывод при помощи критериев Пирсона и Колмогорова Составим для вычисления этих критериев таблицу.

i	Границы интервалов	n_i	np_i	$nF_n(x)$	$nF(x)$	$\lvert nF_n(x) - F(x)\rvert$	$\frac{(n_i - np_i)^2}{np_i}$
1	$-\infty \div -15$	7	4,7	7	4,7	2,3	1,12
2	$-15 \div -10$	11	9,50	18	14,2	3,8	
3	$-10 \div -5$	15	19,5	33	33,7	0,7	1,18
4	$-5 \div 0$	24	31,6	57	65,3	8,3	1,81
5	$0 \div 5$	49	40,3	106	105,6	0,4	1,87
6	$5 \div 10$	41	38,9	147	144,5	2,5	0,11
7	$10 \div 15$	26	29,2	173	173,7	0,7	0,20
8	$15 \div 20$	17	15,6	190	189,3	0,7	0,002
9	$20 \div 25$	7	7,7	197	197,0	0,0	0,001
10	$25 \div +\infty$	3	3,0	200	200	0,0	

Вероятности p_i вычислены по формуле (I.64). В качестве параметров взяты их оценки: $\bar{x} = 4{,}3$ мкм, $s_x = 2{,}71$ мкм. Например, для второго интервала имеем

$$p_2 = \Phi\left(\frac{-10-4{,}3}{9{,}71}\right) - \Phi\left(\frac{-15-4{,}3}{9{,}71}\right) = \Phi\left(-\frac{14{,}3}{9{,}71}\right) - \Phi\left(-\frac{19{,}3}{9{,}71}\right) =$$

$$= \Phi(-1{,}472) - \Phi(-1{,}987) = -0{,}4292 + 0{,}4767 = 0{,}0475,$$

и после умножения $np_2 = 200 \cdot 0{,}0475 = 9{,}5$. Так как для первого и последнего интервалов $np_i < 5$, первых два и последних два интервала объединены в один. Величина χ^2 определяется следующим образом:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{8} \frac{(n_i - np_i)^2}{np_i} = 6{,}296.$$

Число степеней свободы $f = 8 - 3 = 5$. По табл. 4 приложения $\chi^2_{0,95} = 11{,}1$. Так как найденное по выборке $\chi^2 = 6{,}296 < \chi^2_{0,95}$, то критерий Пирсона позволяет наблюдаемое распределение считать нормальным.

Для применения критерия Колмогорова определены разности $n\lvert F_n(x) - F(x)\rvert$. Для данного случая $nD = \max n\lvert F_n(x) - F(x)\rvert = 8{,}3$. По формуле (II.108) находим $\lambda = nD/\sqrt{n} = 0{,}59$. По табл. 3 для уровня значимости $p = 0{,}2$, $\lambda_{0,8} = 1{,}07$. Таким образом, найденное по выборке $\lambda = 0{,}59 < \lambda_{0,8}$, и критерий Колмогорова также позволяет считать рассматриваемое распределение нормальным.

18. Критерий согласия ω^2. В отличие от критерия χ^2 Пирсона критерий ω^2 (омега-квадрат) основывается на непосредственно полученных в эксперименте (несгруппированных) значениях случайной величины X.

Пусть имеется выборка объема n случайной величины X. Проверяется гипотеза о том, что функция распределения случайной величины есть $F(x)$. Построим эмпирическую функцию распределения $F_n(x)$. Для сравнения эмпирического распределения $F_n(x)$ с предполагаемым теоретическим $F(x)$ рассмотрим величину

$$\omega^2 = \int_{-\infty}^{\infty} [F_n(x) - F(x)]^2 \, dF(x), \qquad \text{(II.121)}$$

предполагая, что $F(x)$ имеет производную, т. е. плотность вероятности

$$dF(x) = F'(x)\,dx = f(x)\,dx. \qquad \text{(II.122)}$$

Преобразуем выборку в вариационный ряд

$$x_1 < x_2 < x_3 < \ldots < x_n$$

и разобьем всю область интегрирования на интервалы:

$$(-\infty,\ x_1),\quad (x_1,\ x_2),\ \ldots\ ,\ (x_{n-1},\ x_n)\ (x_n,\ +\infty).$$

Тогда, принимая во внимание (II.121), получим

$$\omega^2 = \int_{-\infty}^{x_1} [0 - F(x)]^2\, dF + \sum_{k=1}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \left[\frac{k}{n} - F(x)\right]^2 dF + \int_{x_n}^{+\infty} [1 - F(x)]^2\, dF, \tag{II.123}$$

$$\int_{-\infty}^{x_1} F^2(x)\, dF = \frac{F^3(x)}{3}\Bigg|_{-\infty}^{x_1} = \frac{F^3(x_1)}{3};\quad \int_{x_k}^{x_{k+1}} \left[\frac{k}{n} - F(x)\right]^2 dF =$$

$$= \frac{\left[F(x) - \frac{k}{n}\right]^3}{3}\Bigg|_{x=x_k}^{x=x_{k+1}} = \frac{\left[F(x_{k+1}) - \frac{k}{n}\right]^3}{3} - \frac{\left[F(x_k) - \frac{k}{n}\right]^3}{3};$$

$$\int_{x_n}^{+\infty} [1 - F(x)]^2\, dF = \frac{[1 - F(x_n)]^3}{3}.$$

Таким образом, имеем

$$\omega^2 = \frac{F^3(x_1)}{3} + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{\left[F(x_{k+1}) - \frac{k}{n}\right]^3}{3} - \sum_{k=1}^{n-1} \frac{\left[F(x_k) - \frac{k}{n}\right]^3}{3} + \frac{[1 - F(x_n)]^3}{3}. \tag{II.124}$$

Объединяя члены, зависящие от $F(x_k)$ (с данным $k = 1, 2, \ldots, n$), находящиеся в двух суммах (II.124), получим

$$\omega^2 = \frac{1}{12n^2} + \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \left[F(x_k) - \frac{2k-1}{2n}\right]^2. \tag{II.125}$$

Равенство (II.125) показывает, каким образом критерий ω^2 зависит от отдельных членов вариационного ряда. Точное распределение ω^2 очень сложно, но исследования показали, что уже при $n > 40$ распределение произведения $n\omega_n^2$ близко к некоторому предельному распределению, для которого составлены таблицы. По этим таблицам определены критические значения для величины $n\omega^2$. В табл. 4 приведены квантили $(n\omega^2)_{1-p}$.

Если вычисленное значение $n\omega^2$ меньше табличного $(n\omega^2)_{1-p}$, то гипотеза о совпадении теоретического закона распределения $F(x)$

Таблица 4. **Квантили распределения $n\omega^2$**

p	$(n\omega^2)_{1-p}$	p	$(n\omega^2)_{1-p}$
0,5	0,1184	0,05	0,4614
0,4	0,1467	0,03	0,5489
0,3	0,1843	0,02	0,6198
0,2	0,2412	0,01	0,7435
0,1	0,3473	0,001	1,1679

с выборочным $F_n(x)$ не отвергается. При $n\omega^2 > (n\omega^2)_{1-p}$ гипотеза отклоняется. Уровень значимости p выбирают обычно равным 0,5. Критерий ω^2 полнее, чем критерий Пирсона, использует информацию, заключающуюся в данных выборки. В группировке данных, которая производится при применении критерия Пирсона, имеется определенный произвол. Сама группировка приводит к некоторой потере информации, содержащейся в выборке. Кроме того, распределение $n\omega^2$ значительно быстрее, чем χ^2, сходится к предельному закону, особенно в области больших значений ω^2, которые только и существенны для вероятностной оценки.

19. Критерий Вилькоксона. *Критерий Вилькоксона* применяется для проверки гипотезы принадлежности двух выборок одной и той же генеральной совокупности. Пусть имеются выборки случайных величин X и Y объема m и n. Преобразуем выборки в вариационные ряды:

$$x_1 < x_2 < \ldots < x_m,$$

$$y_1 < y_2 < \ldots < y_n.$$

Нулевая гипотеза H^0 заключается в равенстве функций распределения $F(x) = F(y)$. Альтернативная гипотеза H формулируется в виде неравенства $F(x) < F(y)$.

Критерий Вилькоксона основан на распределении общего числа инверсий, под которым понимается следующее: элементы обеих выборок располагаются в общую возрастающую последовательность, например:

$$y_1 x_1 y_2 y_3 x_2 y_4 x_3 x_4 y_5 \ldots x_m y_n. \qquad \text{(II.126)}$$

Если какому-либо значению x предшествует некоторый y, то эта пара дает инверсию. Так, в последовательности (II.126) x_1 дает одну инверсию с y_1, x_2 дает три инверсии (с y_1, y_2 и y_3) и т. д.

При $m > 10$ и $n > 0$ общее число инверсии u распределено приблизительно нормально с математическим ожиданием

$$m_u = mn/2 \qquad \text{(II.127)}$$

и дисперсией

$$\sigma_u^2 = \frac{mn}{12}(m+n-1). \qquad \text{(II.128)}$$

При уровне значимости $p = 0{,}05$, согласно (II.50), критическими значениями для нулевой гипотезы будут

$$u \leqslant m_u - 1{,}96\sigma_u,$$
$$u \geqslant m_u + 1{,}96\sigma_u. \qquad \text{(II.129)}$$

Пример 14. Одним из наиболее распространенных методов идентификации математических моделей процессов химической технологии является получение и обработка кривых отклика при нанесении импульсных возмущений для получения так называемых *C*-кривых.

Исследовался гидродинамический режим работы промышленного экстрактора. С этой целью была использована *C*-кривая распределения времени пребывания частиц твердой фазы в реакторе, полученная сотрудниками НИУИФа импульсным методом на Воскресенском химическом комбинате в цехе производства экстракционной фосфорной кислоты дигидратным методом. Объектом исследования являлся 8-секционный экстрактор, на входе которого в твердую фазу (апатитовый концентрат) вводили индикатор. В качестве индикатора использовано радиоактивное золото 198 ($g = 350$ мкр). Перемешивание осуществляется двухъярусными мешалками (с шестью лопастями в каждом ярусе). Из последней секции часть пульпы возвращается в первую.

Объем первых четырех секций $V_1 = V_2 = V_3 = V_4 = 76$ м³. Объем последних четырех секций $V_5 = V_6 = V_7 = V_8 = 109$ м³. Экспериментальная *C*-кривая снималась при нагрузке по пульпе $G_п = 111{,}5$ м³/ч, и величине рецикла $R = 9{,}7$. Время пребывания в 1—4 секциях $\tau_1 = \tau_2 = \tau_3 = \tau_4 = V/G_п = 76/111{,}5 = 0{,}68$ ч. Время пребывания в 5—8 секциях $\tau_5 = \tau_6 = \tau_7 = \tau_8 = 109/111{,}5 = 0{,}98$ ч.

Экспериментальная *C*-кривая (рис. 20), снятая на выходе пульпы из экстрактора, построена по следующим экспериментальным данным.

t, ч	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
C, мкр/м³	50	40	33,8	30	26,2	22,8	19,8	17,2	14,7	12,6	10,9	9,2	7,8	6,6
t, ч	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28
C, мкр/м³	5,8	5,0	4,6	4,2	3,8	3,4	3,0	2,8	2,4	2,3	1,8	1,4	1,2	1,0

Р е ш е н и е. Было проведено сравнение экспериментальной *C*-кривой с решением системы дифференциальных уравнений для ячеечной модели с рециклом. Организацию потока в реакторе можно представить в виде структурной схемы (рис. 21). Система дифференциальных уравнений по концентрации индикатора в твердой фазе имеет вид:

$$\begin{aligned}
\frac{dc_1}{dt} &= [c_н + Rc_8 - (1+R)c_1]\frac{1}{\tau_1},\\
\frac{dc_2}{dt} &= [(1+R)c_1 - (1+R)c_2]\frac{1}{\tau_1},\\
\frac{dc_3}{dt} &= [(1+R)c_2 - (1+R)c_3]\frac{1}{\tau_1},\\
\frac{dc_4}{dt} &= [(1+R)c_3 - (1+R)c_4]\frac{1}{\tau_1},\\
\frac{dc_5}{dt} &= [(1+R)c_4 - (1+R)c_5]\frac{1}{\tau_2},\\
\frac{dc_6}{dt} &= [(1+R)c_5 - (1+R)c_6]\frac{1}{\tau_2},\\
\frac{dc_7}{dt} &= [(1+R)c_6 - (1+R)c_7]\frac{1}{\tau_2},\\
\frac{dc_8}{dt} &= [(1+R)c_7 - (1+R)c_8]\frac{1}{\tau_2},
\end{aligned} \qquad \text{(II.130)}$$

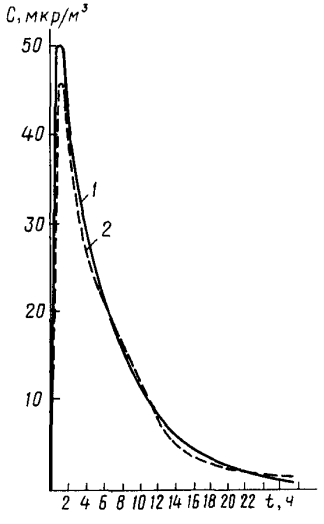


Рис. 20. Экспериментальная *C*-кривая

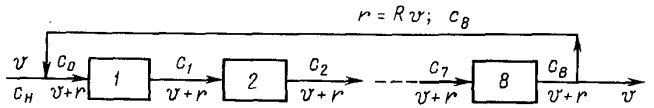


Рис. 21. Структурная схема реактора

где C – концентрация индикатора, мкр/м³; R – величина рецикла.

Начальные условия для системы

$$t = 0 \begin{cases} c_1 = \dfrac{g}{V_1} = \dfrac{350 \text{ мкр}}{76} = 4{,}005 \text{ мкр/м}^3; \\ c_{2 \div 8} = 0. \end{cases}$$

Система уравнений (II.130) была решена методом Рунге – Кутта на ЦВМ «Минск-22». Полученные результаты представлены в виде графика (см. рис. 20, кривая *1*).

t, ч	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
$C_{\text{расч}}$, мкр/м³	47,0	41,9	35,7	30,6	26,1	22,3	19,1	16,3	13,9	11,9	10,1	8,7	7,4	6,4
t, ч	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28
$C_{\text{расч}}$, мкр/м³	5,4	4,64	4,0	3,4	2,9	2,5	2,1	1,8	1,5	1,3	1,1	0,96	0,8	0,7

Сравнение двух C-кривых: экспериментальной (y) и расчетной (x) – производилось по критерию Вилькоксона. Проверялась гипотеза H^0 принадлежности двух выборок (y) и (x) одной и той же генеральной совокупности. Для этого элементы обеих выборок были расположены в общую возрастающую последовательность:

x	x	x	y	x	y	x	y	x	y	x
0,7	0,8	0,96	1,0	1,1	1,2	1,3	1,4	1,5	1,8	1,8
x	y	y	x	y	x	y	x	y	y	x
2,1	2,3	2,4	2,5	2,8	2,9	3,0	3,4	3,4	3,8	4,0
y	y	x	y	x	y	x	y	x	y	x
4,2	4,6	4,64	5,0	5,4	5,8	6,35	6,6	7,4	7,8	8,7
y	x	y	x	y	x	y	x	y	x	y
9,1	10,1	10,9	11,9	12,6	13,9	14,7	16,3	17,2	19,1	19,8
x	y	x	y	y	x	y	x	y	x	x
22,3	22,8	26,1	26,2	30	30,6	33,8	35,7	40	41,9	50

Определялось общее число инверсий:

$$u = 1 + 2 + 3 + 4 + 4 + 6 + 7 + 8 + 10 + 12 + 13 + 14 + 15 + 16 + 17 + \\ + 18 + 19 + 20 + 21 + 22 + 23 + 25 + 26 + 27 + 27 = 360.$$

Гипотеза H^0 не отвергается, если число инверсий не попадает в критическую область, определяемую формулами (II.129).

Случайная величина u распределена приблизительно нормально с математическим ожиданием

$$m_u = mn/2 = 28 \cdot 28/2 = 392$$

и стандартом

$$\sigma_u = \sqrt{\frac{mn}{12}(m+n-1)} = \sqrt{\frac{28 \cdot 28}{12}(28 + 28 - 1)} = 59{,}94.$$

При уровне значимости $p = 0{,}05$ критическими значениями для нулевой гипотезы, согласно (II.129), будут:

$$u < 392 - 1{,}96 \cdot 59{,}94; \quad u < 274{,}5;$$

$$u \geqslant 391 + 1{,}96 \cdot 59{,}94; \quad u \geqslant 509{,}48.$$

Следовательно, число инверсий, равное 360, не попадает в критическую область, и можно считать разницу между сравниваемыми C-кривыми статистически незначимой. Таким образом, гидродинамический режим в каждой секции реактора близок к идеальному перемешиванию.

20. Проверка гипотезы нормальности по совокупности малых выборок. Пусть имеется достаточно большое число n независимых выборок одного и того же объема m. Требуется проверить гипотезу нормальности генеральных совокупностей, из которых взяты выборки, при условии, что параметры этих совокупностей могут иметь разные значения. Рассмотрим относительное отклонение

$$\tau = \frac{x_{ik} - \bar{x}_k}{s_k}, \tag{II.131}$$

где x_{ik} — i-й элемент k-й выборки; $\bar{x}_k$, s_k — среднее и среднеквадратичное отклонение k-й выборки.

Можно показать, что распределение величины τ не зависит от параметров генеральной совокупности m и σ, а зависит только от объема выборки m. Плотность вероятности величины τ равна

$$f(\tau) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{\pi}} \dfrac{1}{\sqrt{f+1}} \dfrac{\Gamma\left(\dfrac{f+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\dfrac{f}{2}\right)} \left(1 - \dfrac{\tau^2}{f+1}\right)^{\frac{f-2}{2}} & \text{при } |\tau| < \sqrt{f+1}, \\ 0 & \text{при } |\tau| \geqslant \sqrt{f+1}, \end{cases} \tag{II.132}$$

где число степеней свободы $f = m - 2$. Из (II.132) при разных значениях m получим:

$$\begin{aligned} m = 3, \quad & f(\tau) = \frac{1}{\pi \sqrt{2\left(1 - \dfrac{\tau^2}{2}\right)}}, && |\tau| < \sqrt{2}; \\ m = 4, \quad & f(\tau) = \frac{1}{2\sqrt{3}}, && |\tau| < \sqrt{3}; \\ m = 5, \quad & f(\tau) = \frac{\sqrt{1 - \dfrac{\tau^2}{4}}}{\pi}, && |\tau| < 2; \\ m = 6, \quad & f(\tau) = \frac{3\left(1 - \dfrac{\tau^2}{5}\right)}{4\sqrt{5}}, && |\tau| < \sqrt{5}. \end{aligned} \tag{II.133}$$

Из (II.133) следует, что при $m = 4$ относительные отклонения в отдельных выборках подчиняются равномерному распределению, если исходные совокупности нормальны. Этим можно воспользоваться для

проверки гипотезы нормальности, если число выборок достаточно велико.

При $m \neq 4$ из-за отсутствия нужных таблиц приходится переходить от величины τ к величине η:

$$\eta = \frac{\tau \sqrt{f}}{\sqrt{f + 1 - \tau^2}} . \qquad \text{(II.134)}$$

Можно доказать, что при исходных нормальных совокупностях величина η имеет распределение Стьюдента с $f = m - 2$ степенями свободы. При проверке гипотезы нормальности по большому числу малых выборок из каждой выборки случайным образом отбирается по одному значению. Здесь возможно некоторое упрощение — можно отобрать только первые измерения, только вторые и т. д. Такой отбор также можно рассматривать как случайный. Если число элементов в выборках велико, например $m > 10$, то может быть сделано несколько самостоятельных проверок гипотезы, например, по первым и последним элементам каждой выборки. Затем, если $m = 4$, для каждого отобранного значения по формуле (II.131) вычисляется τ, если $m \neq 4$, по формуле (II.134) η. После перехода к величинам τ и η для проверки гипотезы равномерного распределения τ или распределения Стьюдента η (и, следовательно, нормальности исходного распределения) может быть применен любой из рассмотренных ранее критериев согласия.

Пример 15. Требуется проверить гипотезу нормального распределения концентрации (г/л) аммиачной селитры во вторичном паре после реакционного аппарата в производстве аммиачной селитры по результатам четырехкратного определения в 40 пробах (таблица ниже).

Номер пробы	x_1	x_2	x_3	x_4	Номер пробы	x_1	x_2	x_3	x_4
1	5,97	6,39	6,05	5,64	21	4,09	4,19	3,96	4,18
2	5,56	6,02	5,14	5,46	22	4,87	5,10	4,38	4,20
3	4,51	5,32	5,06	4,30	23	2,93	4,60	2,93	4,03
4	5,28	4,40	4,88	4,83	24	3,86	4,40	4,92	4,17
5	5,36	5,52	4,60	5,49	25	5,74	5,06	4,81	5,52
6	4,82	4,99	5,42	5,34	26	5,26	6,01	6,09	6,07
7	5,61	4,83	5,37	5,27	27	6,45	5,99	5,77	6,05
8	4,79	4,51	5,54	5,75	28	5,13	5,19	5,08	5,35
9	4,69	5,62	6,77	6,19	29	5,18	4,59	4,90	5,26
10	5,30	5,60	6,16	6,11	30	4,94	4,44	4,66	5,01
11	4,28	4,47	4,10	4,53	31	4,56	4,12	4,63	4,24
12	4,32	4,03	4,49	4,04	32	3,84	3,22	3,28	3,16
13	3,17	4,85	4,43	4,39	33	2,86	3,78	3,75	3,03
14	4,41	4,04	4,01	3,82	34	4,00	3,48	4,00	4,35
15	5,66	6,24	5,95	5,49	35	3,95	4,05	4,20	4,40
16	5,19	5,45	5,14	5,08	36	3,98	5,06	3,94	4,52
17	5,02	4,45	5,22	4,82	37	3,87	3,09	3,86	3,49
18	4,35	4,43	4,32	4,26	38	4,64	4,33	3,94	4,40
19	5,10	4,67	4,57	4,79	39	4,63	4,16	4,24	4,50
20	5,17	4,83	4,68	4,79	40	4,14	5,24	4,11	4,44

Р е ш е н и е. Возьмем из результатов четырех параллельных определений каждой пробы первое (x_1) и вычислим для каждого из 40 значений величину τ по формуле (II.131). Результаты вычислений сведены в таблицу:

Номер пробы	$\bar{x}$	s_x	$x_1 - \bar{x}$	$\tau = \frac{x_1 - \bar{x}}{s_x}$	Номер пробы	$\bar{x}$	s_x	$x_1 - \bar{x}$	$\tau = \frac{x_1 - \bar{x}}{s_x}$
1	6,01	0,31	−0,04	−0,137	21	4,11	0,11	−0,02	−0,141
2	5,55	0,36	0,01	0,0413	22	4,64	0,42	0,23	0,557
3	4,96	0,34	0,45	−1,316	23	3,62	0,83	−0,69	−0,831
4	4,93	0,24	0,35	1,467	24	4,34	0,45	−0,48	−1,067
5	5,24	0,43	0,12	0,272	25	5,28	0,42	0,46	1,083
6	5,14	0,28	−0,32	−1,131	26	5,86	0,40	−0,60	−1,493
7	5,27	0,33	0,34	1,044	27	6,07	0,28	0,39	1,358
8	5,15	0,59	−0,36	−0,603	28	5,19	0,12	−0,06	−0,486
9	5,82	0,89	−1,13	−1,272	29	4,98	0,30	0,2	0,652
10	5,79	0,41	−0,49	−1,189	30	4,76	0,26	0,18	0,677
11	4,35	0,19	−0,07	−0,334	31	4,39	0,25	0,17	0,702
12	4,22	0,22	0,10	0,445	32	3,38	0,31	0,47	1,481
13	4,21	0,72	−1,04	−1,437	33	3,36	0,48	−0,50	−1,035
14	4,07	0,25	0,34	1,378	34	3,96	0,36	−0,04	0,120
15	5,84	0,33	−0,18	−0,531	35	4,15	0,20	−0,2	−1,022
16	5,22	0,16	−0,03	−0,153	36	4,38	0,53	−0,4	−0,749
17	4,88	0,33	0,14	0,436	37	3,58	0,37	0,29	0,792
18	4,34	0,71	0,01	0,141	38	4,33	0,29	0,31	1,078
19	4,78	0,23	0,32	1,391	39	4,38	0,22	0,25	1,129
20	4,87	0,21	0,30	1,444	40	4,48	0,53	−0,34	−0,651

Из формулы (II.133) следует, что при $m = 4$ плотность распределения величины τ равна

$$f(\tau) = \frac{1}{2\sqrt{3}} \quad \text{при} \quad |\tau| < \sqrt{3},$$

если исходные совокупности подчиняются нормальному закону. Проверим эту гипотезу при помощи критерия ω^2. Расположим полученные значения τ в вариационный ряд, и для каждого элемента ряда определим значения эмпирической функции распределения $F_n(\tau)$ по формуле

$$F_n(\tau) = \frac{2k-1}{2n}, \qquad \text{(II.135)}$$

где $n = 40$; $k = 1,2,\ldots,n$, и теоретической функции $F(\tau)$. Результаты расчета сведены в таблице. В этой таблице значения τ расположены в порядке возрастания.

Номер опыта	τ	$F(\tau)$	$F_n(\tau)$	$F(\tau) - F_n(\tau)$	$[F(\tau) - F_n(\tau)]^2$
1	−1,494	0,0687	0,0125	0,0562	0,003161
2	−1,437	0,0852	0,0375	0,0477	0,002273
3	−1,316	0,1201	0,0625	0,0576	0,003318
4	−1,272	0,1328	0,0875	0,0453	0,002053
5	−1,189	0,1568	0,1125	0,0443	0,001959
6	−1,131	0,1735	0,1375	0,0360	0,001297
7	−1,067	0,1920	0,1625	0,0295	0,000869
8	−1,035	0,2012	0,1875	0,0137	0,000188
9	−1,022	0,2050	0,2125	−0,0075	0,000057
10	−0,831	0,2601	0,2375	0,0226	0,000511

Продолжение

Номер опыта	τ	$F(\tau)$	$F_n(\tau)$	$F(\tau) - F_n(\tau)$	$[F(\tau) - F_n(\tau)]^2$
11	−0,749	0,2838	0,2625	0,0213	0,000455
12	−0,651	0,3122	0,2875	0,0247	0,000609
13	−0,603	0,3259	0,3125	0,0134	0,000179
14	−0,531	0,3467	0,3375	0,0092	0,000084
15	−0,480	0,3613	0,3625	−0,0012	0,000001
16	−0,334	0,4037	0,3875	0,0162	0,000263
17	−0,153	0,4557	0,4125	0,0432	0,001868
18	−0,141	0,4594	0,4375	0,0219	0,000478
19	−0,137	0,4605	0,4625	−0,002	0,000004
20	−0,041	0,5119	0,4875	0,0244	0,000596
21	0,12	0,5346	0,5125	0,0221	0,000489
22	0,141	0,5408	0,5375	0,0033	0,000011
23	0,272	0,5785	0,5625	0,0160	0,000257
24	0,404	0,6165	0,5875	0,0290	0,000842
25	0,445	0,6285	0,6125	0,0160	0,000257
26	0,557	0,6608	0,6375	0,0233	0,000543
27	0,652	0,6881	0,6625	0,0256	0,000657
28	0,677	0,6954	0,6875	0,0079	0,000063
29	0,702	0,7027	0,7125	−0,0099	0,000097
30	0,792	0,7287	0,7375	−0,0088	0,000077
31	1,044	0,8014	0,7625	0,0389	0,001511
32	1,078	0,8112	0,7875	0,0237	0,000561
33	1,083	0,8126	0,8125	0,0001	0,000000
34	1,129	0,8259	0,8375	−0,0016	0,000134
35	1,358	0,8920	0,8525	0,0295	0,000871
36	1,378	0,8978	0,8875	0,0103	0,000106
37	1,391	0,9015	0,9125	−0,0110	0,000120
38	1,444	0,9168	0,9375	−0,0207	0,000427
39	1,467	0,9235	0,9625	−0,0390	0,001522
40	1,481	0,9275	0,9875	−0,0600	0,003597
Σ					0,032057

Принимая во внимание, что

$$f(\tau) = 0 \quad \text{при} \quad \tau < -\sqrt{3},$$

имеем

$$F(\tau) = \int_{-\sqrt{3}}^{\tau_k} \frac{1}{2\sqrt{3}}\, d\tau = \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(\tau_k + \sqrt{3}\right), \quad k = 1, 2, \ldots, n. \qquad (II.136)$$

Так, при $\tau_1 = -1{,}494$

$$F(-1{,}494) = \frac{-1{,}494 + \sqrt{3}}{2\sqrt{3}} = 0{,}0687.$$

Значения эмпирической функции распределения определены по формуле (II.135). Так, при $\tau = \tau_1$ имеем

$$F_n(\tau_1) = \frac{2 \cdot 1 - 1}{2 \cdot 40} = 0{,}0125.$$

Для определения критерия $n\omega^2$ в формулу

$$n\omega^2 = \frac{1}{12n} + \sum_{k=1}^{n}\left[F(\tau_k) - \frac{2k-1}{2n}\right]^2 \qquad (II.137)$$

подставим значение $n = 40$ и полученную в таблице сумму. В результате имеем

$$n\omega^2 = \frac{1}{12 \cdot 40} + 0{,}032057 = 0{,}03414.$$

Для уровня значимости $p = 0{,}05$ табличное значение $(n\omega^2)_{1-p} = 0{,}4614$ (см. табл. 4). Вычисленное значение $n\omega^2$ меньше табличного. Следовательно, гипотеза нормального распределения концентрации аммиачной селитры в соковом паре не отклоняется.

В главе описаны основные понятия математической статистики: генеральная совокупность и случайная выборка, оценки и их свойства, методы проверки статистических гипотез и построения доверительных интервалов для математического ожидания и дисперсии. Для получения оценок используется метод максимального правдоподобия, приводящий к получению состоятельных, эффективных, хотя иногда и смещенных оценок.

Проверка гипотез относительно параметров распределения генеральной совокупности проводится в предположении нормального распределения наблюдаемой случайной величины.

Гипотеза о нормальности распределения проверяется с помощью критериев согласия Пирсона, Колмогорова, критерия ω^2, Вилькоксона, по совокупности малых выборок.

Упражнения

1. При изготовлении эталона большим количеством измерений в нем было надежно установлено среднее содержание вещества, равное 2%, с квадратичной ошибкой единичного измерения, равной 0,1%. Определить, с какой вероятностью можно ожидать, что при повторном анализе средний результат девяти параллельных измерений будет варьировать в пределах $1{,}9 \div 2{,}1\%$.

2. Построить доверительный интервал для математического ожидания нормально распределенной случайной величины X при доверительной вероятности $\beta = 0{,}95$, если среднее выборочное $\bar{x} = 20{,}5$ получено по четырем измерениям, считая дисперсию, *равную 0,81*: а) *генеральной*; б) *выборочной*.

3. Оценить ошибку определения плотности вещества, используя следующие результаты измерений: масса 420,2 г, ошибка измерения массы 0,22 г, объем 50,15 см³, ошибка определения объема 0,12 см³.

4. Оценить ошибку воспроизводимости σ_x по выборке из 31 наблюдения с выборочным стандартом $s_x = 0{,}85$, используя χ^2-распределение и нормальное распределение. Доверительную вероятность β принять равной 0,9.

5. В результате анализа дистиллята на двух параллельно работающих ректификационных колоннах получены следующие данные о содержании бензола (мол. доли, %):

колонна № 1 94,0; 95,0; 95,0; 97,0; 94,0; 97,5; 98,0;

колонна № 2 99,0; 97,0; 95,0; 98,0; 95,0.

Является ли значимым различие в содержании бензола в дистилляте этих колонн?

6. При постоянном режиме были проведены измерения потерь со вторичным паром связанного азота при производстве аммиачной селитры (в г/л): 5,0; 5,3; 5,8; 4,9; 4,6; 7,5; 5,2. Следует ли отбросить значение 7,5 как грубое измерение?

ГЛАВА III
ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ

1. Задача дисперсионного анализа. В любом эксперименте средние значения наблюдаемых величин меняются в связи с изменением основных факторов (качественных и количественных), определяющих условия опыта, а также и случайных факторов. Исследование влияния тех

или иных факторов на изменчивость средних является задачей дисперсионного анализа.

В дисперсионном анализе используется рассмотренное в гл. I,3 свойство аддитивности дисперсии изучаемой случайной величины, обусловленной действием независимых факторов. Р. А. Фишер в 1938 г. впервые определил дисперсионный анализ как «отделение дисперсии, приписываемой одной группе причин, от дисперсии, приписываемой другим группам». В зависимости от числа источников дисперсии различают однофакторный и многофакторный дисперсионный анализ.

Дисперсионный анализ особенно эффективен при изучении нескольких факторов. При классическом методе исследования варьируют только один фактор, а остальные оставляют постоянными. При этом для каждого фактора проводится своя серия наблюдений, не используемая при изучении других факторов. Кроме того, при таком методе исследования не удается определить взаимодействие факторов при одновременном их изменении. При дисперсионном анализе каждое наблюдение служит для одновременной оценки всех факторов и их взаимодействий.

Дисперсионный анализ состоит в выделении и оценке отдельных факторов, вызывающих изменчивость изучаемой случайной величины. Для этого производится разложение суммарной выборочной дисперсии на составляющие, обусловленные независимыми факторами. Каждая из этих составляющих представляет собой оценку дисперсии генеральной совокупности. Чтобы решить, значимо ли влияние данного фактора, необходимо оценить значимость соответствующей выборочной дисперсии в сравнении с дисперсией воспроизводимости, обусловленной случайными факторами. Проверка значимости оценок дисперсий проводится по критерию Фишера (см. гл. II, 11). Если рассчитанное значение критерия Фишера окажется меньше табличного, то влияние рассматриваемого фактора нет оснований считать значимым. Если же рассчитанное значение критерия Фишера окажется больше табличного, то рассматриваемый фактор влияет на изменчивость средних. В дальнейшем будем полагать, что выполняются следующие допущения: 1) случайные ошибки наблюдений имеют нормальное распределение; 2) факторы влияют только на изменение средних значений, а дисперсия наблюдений остается постоянной; эксперименты равноточны.

Требование нормального распределения определяет выбор основных факторов при исследовании процесса методом дисперсионного анализа. Если нужно получить нормальное распределение выходной величины, к случайным желательно относить только те факторы, влияние которых на выходную величину очень мало. Исключение можно делать лишь для тех факторов, которые сами по себе (из каких-либо других соображений) дают нормальное распределение результатов.

Факторы, рассматриваемые в дисперсионном анализе, бывают двух родов: 1) со случайными уровнями и 2) с фиксированными. В первом случае предполагается, что выбор уровней производится из бесконечной совокупности возможных уровней и сопровождается рандомизацией. При этом результаты эксперимента имеют большее

значение, поскольку выводы по эксперименту можно распространить на всю генеральную совокупность. Если все уровни выбираются случайным образом, математическая модель эксперимента называется *моделью со случайными уровнями факторов (случайная модель).* Когда все уровни фиксированы, модель называется *моделью с фиксированными уровнями факторов.* Когда часть факторов рассматривается на фиксированных уровнях, а уровни остальных выбираются случайным образом, модель называется *моделью смешанного типа.* Иногда отсутствует различие в критериях, применяемых для разных моделей, и единственное различие состоит в общности выводов, в других случаях существует различие в критериях.

Дисперсионный анализ может применяться в различных формах в зависимости от структуры исследуемого процесса; выбор соответствующей формы является обычно одной из главных трудностей в практическом применении анализа.

2. Однофакторный дисперсионный анализ. Рассмотрим действие единичного фактора A (количественного или качественного), который принимает k различных значений (уровней фактора). На i-м уровне производится n_i наблюдений, результаты которых можно записать следующим образом:

$$y_{11} \quad y_{21} \cdots y_{k_1},$$

$$y_{12} \quad y_{22} \cdots y_{k_2},$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$y_{1n_1} \quad y_{2n_2} \cdots y_{kn_k}.$$

Будем предполагать, что результат любого наблюдения можно представить в виде модели

$$y_{ij} = \mu + d_i + \varepsilon_{ij}, \tag{III.1}$$

где μ — суммарный эффект во всех опытах; d_i — эффект фактора A на i-м уровне ($i = 1,2 \ldots, k$); ε_{ij} — ошибка измерения на i-м уровне. Предположим также, что наблюдения на фиксированном уровне фактора нормально распределены относительно среднего значения $\mu + d_i$ с общей дисперсией σ^2. Общее число опытов равно N:

$$N = n_1 + n_2 + \ldots + n_k. \tag{III.2}$$

Проверяется нулевая гипотеза равенства средних значений на различных уровнях фактора A:

$$m_1 = m_2 = \ldots = m_k = m.$$

Наиболее простые расчеты получаются при равном числе опытов на каждом уровне фактора A: $n_1 = n_2 = \ldots = n_k = n$ (табл. 5).

При этом общее число наблюдений N равно kn. Обозначим через $\bar{y}_i$ среднее значение наблюдений на i-м уровне

$$\bar{y}_i = \frac{\sum_{j=1}^{n} y_{ij}}{n} = \frac{A_i}{n}, \tag{III.3}$$

Таблица 5. **Исходные данные для однофакторного дисперсионного анализа с равным числом повторений опытов**

Номер наблюдения	Уровни фактора A			
	a_1	a_2	...	a_k
1	y_{11}	y_{21}		y_{k1}
2	y_{12}	y_{22}		y_{k2}
.	.	.		.
.	.	.		.
.	.	.		.
n	y_{1n}	y_{2n}		y_{kn}
Итоги	$A_1 = \sum_{j=1}^{n} y_{1j}$	$A_2 = \sum_{j=1}^{n} y_{2j}$		$A_k = \sum_{j=1}^{n} y_{kj}$

а общее среднее значение для всей выборки из N наблюдений

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n} y_{ij} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} \bar{y}_i . \qquad \text{(III.4)}$$

Для проведения дисперсионного анализа необходимо общую выборочную дисперсию s^2

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n} (y_{ij} - \bar{y})^2}{N-1} = \frac{1}{N-1} \left[\sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n} y_{ij}^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n} y_{ij} \right)^2}{N} \right] \qquad \text{(III.5)}$$

разложить на составляющие, которые характеризовали бы вклад фактора A и фактора случайности. Фактор случайности при этом легко оценить благодаря наличию повторных опытов на каждом уровне. Определим выборочную дисперсию на каждом уровне:

$$s_i^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^{n} (y_{ij} - \bar{y}_i)^2 = \frac{1}{n-1} \left[\sum_{j=1}^{n} y_{ij}^2 - \frac{\left(\sum_{j=1}^{n} y_{ij} \right)^2}{n} \right], \qquad \text{(III.6)}$$

$$i = 1, 2, \ldots, k.$$

Если нет уверенности в равноточности экспериментов, однородность дисперсий $s_1^2, s_2^2, \ldots, s_k^2$ можно проверить по критерию Кохрена (см. гл. II,13).

Если между дисперсиями нет значимых различий, для оценки генеральной дисперсии σ^2, характеризующей фактор случайности, используют выборочную дисперсию $s_{\text{ош}}^2$:

$$s_{\text{ош}}^2 = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} s_i^2 = \frac{1}{k(n-1)} \left[\sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n} y_{ij}^2 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{k} \left(\sum_{j=1}^{n} y_{ij} \right)^2 \right]. \qquad \text{(III.7)}$$

Число степеней свободы дисперсии $s^2_{\text{ош}}$ равно $k(n-1)=N-k$. Приближенную оценку для дисперсии фактора A можно получить следующим образом:

$$\sigma_A^2 \approx s^2 - s^2_{\text{ош}} \ . \tag{III.8}$$

Более точную оценку для σ_A^2 можно получить, рассматривая отклонения средних $\bar{y}_i$ на отдельных уровнях от общего среднего всей выборки $\bar{y}$. Действительно,

$$\frac{1}{k-1}\sum_{i=1}^{k}(\bar{y}_i-\bar{y})^2 \approx \sigma_A^2+\frac{\sigma^2}{n}\approx \sigma_A^2+\frac{s^2_{\text{ош}}}{n} \ . \tag{III.9}$$

Отсюда

$$\sigma_A^2 \approx \frac{1}{k-1}\sum_{i=1}^{k}(\bar{y}_i-\bar{y})^2-\frac{s^2_{\text{ош}}}{n} \ . \tag{III.10}$$

Дисперсия фактора A для модели с фиксированными уровнями (σ_A^2) не связана ни с какой случайной величиной, это условное название для математического ожидания среднего квадрата отклонений, обусловленного влиянием фактора A. Такое обозначение удобно, так как определяет рассеяние, вызванное влиянием фактора A аналогично показателю влияния случайного фактора, что позволяет непосредственно сравнить фактор A с эффектом случайности. Введем также следующее обозначение:

$$s_A^2=\frac{n}{k-1}\sum_{i=1}^{k}(y_i-\bar{y})^2 \approx n\sigma_A^2+s^2_{\text{ош}} \ . \tag{III.11}$$

Эта дисперсия имеет $k-1$ степеней свободы. Если дисперсия s_A^2 значимо отличается от $s^2_{\text{ош}}$, нулевая гипотеза $m_1=m_2=\ldots=m_k=m$ отвергается и влияние фактора A считается существенным. Проверяется нулевая гипотеза по критерию Фишера. Так как альтернативой $\sigma_A^2=\sigma^2_{\text{ош}}$ является неравенство $\sigma_A^2>\sigma^2_{\text{ош}}$, для проверки гипотезы применяется односторонний критерий Фишера. Влияние фактора A считается значимым, если

$$\frac{s_A^2}{s^2_{\text{ош}}} > F_{1-p}(f_1,\ f_2),\ f_1=k-1,\ f_2=k(n-1)=N-k. \tag{III.12}$$

Дисперсионный анализ можно провести по следующему алгоритму: подсчитывают 1) итоги по столбцам

$$A_i=\sum_{j=1}^{n} y_{ji}; \tag{III.13}$$

2) сумму квадратов всех наблюдений

$$SS_1=\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{n} y_{ij}^2 ; \tag{III.14}$$

3) сумму квадратов итогов по столбцам, деленную на число наблюдений в столбце,

$$SS_2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{k} A_i^2 ; \qquad \text{(III.15)}$$

4) квадрат общего итога, деленный на число всех наблюдений (корректирующий член),

$$SS_3 = \frac{1}{N}\left(\sum_{i=1}^{k} A_i\right)^2 ; \qquad \text{(III.16)}$$

5) сумму квадратов для столбца

$$SS_A = SS_2 - SS_3; \qquad \text{(III.17)}$$

6) $SS_{\text{общ}}$ — общую сумму квадратов, равную разнице между суммой квадратов всех наблюдений и корректирующим членом,

$$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_3; \qquad \text{(III.18)}$$

7) $SS_{\text{ост}}$ — остаточную сумму квадратов для оценки ошибки эксперимента

$$SS_{\text{ост}} = SS_1 - SS_2; \qquad \text{(III.19)}$$

8) дисперсию s_A^2

$$s_A^2 = \frac{SS_A}{k-1} ; \qquad \text{(III.20)}$$

9) дисперсию $s_{\text{ош}}^2$

$$s_{\text{ош}}^2 = \frac{SS_{\text{ост}}}{k(n-1)} . \qquad \text{(III.21)}$$

Результаты расчета обычно представляются в виде таблицы дисперсионного анализа (табл. 6).

Таблица 6. **Однофакторный дисперсионный анализ (с равным числом повторений опытов)**

Источник дисперсии	Число степеней свободы	Сумма квадратов	Средний квадрат	Математическое ожидание среднего квадрата
A	$k-1$	$SS_A = SS_2 - SS_3$	$s_A^2 = \frac{SS_A}{k-1}$	$n\sigma_A^2 + \sigma_{\text{ош}}^2$
Остаток	$k(n-1)$	$SS_{\text{ост}} = SS_1 - SS_2$	$s_{\text{ош}}^2 = \frac{SS_{\text{ост}}}{k(n-1)}$	$\sigma_{\text{ош}}^2$
Общая сумма	$kn-1$	$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_3$	$\frac{SS_{\text{общ}}}{kn-1}$	

Если отношение $s_A^2 / s_{ош}^2 \leqslant F_{1-p}$, то влияние фактора A следует считать незначимым. При этом общая дисперсия s^2 связана только с фактором случайности и может служить оценкой для дисперсии воспроизводимости. Такая оценка лучше, чем (III.7), так как имеет большее число степеней свободы, равное $kn-1$. При интерпретации результатов дисперсионного анализа необходимо иметь в виду, что очень низкое значение дисперсионного отношения может быть связано с тем, что влияние какого-то важного неконтролируемого в ходе эксперимента фактора не было рандомизировано. Это может увеличить дисперсию внутри уровней, а дисперсию между уровнями оставить неизменной, что уменьшает дисперсионное отношение. Результаты экспериментов при этом не подчиняются модели (III.1).

Если же справедливо неравенство (III.12), различие между дисперсиями s_A^2 и $s_{ош}^2$ значимо и, следовательно, значимо влияние фактора A. Определим оценку влияния фактора A из (III.11):

$$\sigma_A^2 \approx \frac{s_A^2 - s_{ош}^2}{n}. \qquad \text{(III.22)}$$

При этом нулевая гипотеза $m_1 = m_2 = ... m_k = m$ отвергается и различие между средними m_1, m_2,...,m_k следует считать значимым. Для выяснения вопроса, какие именно средние различны, применяются критерии Стьюдента, Фишера или ранговый критерий Дункана (см. гл. II.14).

При интерпретации результатов дисперсионного анализа для модели со случайными уровнями обычно интересуются не проверкой гипотез относительно средних, а оценкой компонент дисперсий. В отличие от модели с фиксированными уровнями выводы по случайной модели распространяются на всю генеральную совокупность уровней.

Рассмотрим схему вычислений для разного числа параллельных наблюдений. Пусть на уровне a_i проведено n_i параллельных наблюдений. Общее число всех наблюдений равно

$$N = \sum_{i=1}^{k} n_i.$$

Определим: 1) итоги по столбцам

$$A_i = \sum_{j=1}^{n_i} y_{ji}, \quad i = 1, 2, \ldots, k; \qquad \text{(III.23)}$$

2) суммы квадратов всех наблюдений

$$SS_1 = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} y_{ij}^2; \qquad \text{(III.24)}$$

3) сумму квадратов итогов по столбцам, деленных на число наблюдений в соответствующем столбце,

$$SS_2 = \sum_{i=1}^{k} \frac{A_i^2}{n_i}; \qquad \text{(III.25)}$$

4) квадрат общего итога, деленный на число всех наблюдений,

$$SS_3 = \frac{1}{N}\left(\sum_{i=1}^{k} A_i\right)^2. \qquad \text{(III.26)}$$

Дальнейшие расчеты проводятся по формулам (III.17) — (III.21). Если дисперсии s_A^2 и $s_{ош}^2$ значимо отличаются друг от друга, дисперсию фактора A вычисляют по формуле

$$\sigma_A^2 \approx \frac{(k-1)N}{N^2 - \sum_{i=1}^{k} n_i}\left(s_A^2 - s_{ош}^2\right). \qquad \text{(III.27)}$$

Пример 1. Рассмотрим применение однофакторного дисперсионного анализа для выяснения влияния вида галоидного алкила (фактор A) на процесс радикальной полимеризации. Изучалось влияние на выход полимера (y, %) пяти различных галогеналкилов: CH_3I(a_1), C_3H_7I(a_2), C_4H_9I(a_3), C_2H_5Br (a_4), C_3H_7Br(a_5). Результаты эксперимента с различными галоидными алкилами (фиксированные уровни фактора A) приведены в таблице.

Номер наблюдения	Уровни фактора A				
	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5
1	79,80	87,30	42,45	76,0	70,70
2	86,30	69,60	64,3	83,5	64,65
3	86,50	81,75	78,9	72,80	38,50
4	92,30	77,95	61,00	89,00	77,00
5	76,50	83,65	31,30	76,50	91,50
6	87,05	64,80	72,85	87,45	68,00
7	82,50	67,30	58,65	74,50	38,05
8	90,00	75,45	52,50	93,15	79,95
Итоги	$A_1 = 680{,}95$	$A_2 = 607{,}8$	$A_3 = 461{,}95$	$A_4 = 652{,}9$	$A_5 = 528{,}35$

Определим средние значения выхода для каждого галоидного алкила:

$$\bar{y}_1 = \frac{680{,}95}{8} = 85{,}1;\ \bar{y}_2 = \frac{607{,}8}{8} = 75{,}97;\ \bar{y}_3 = \frac{461{,}95}{8} = 57{,}74;$$

$$\bar{y}_4 = \frac{652{,}9}{8} = 81{,}61;\ \bar{y}_5 = \frac{528{,}35}{8} = 66{,}04$$

и общее среднее для всех результатов

$$\bar{\bar{y}} = \frac{1}{5}\sum_{i=1}^{5} \bar{y}_i = 73{,}2.$$

Для облегчения вычислений будем вместо значений y рассматривать отклонения y_i этих значений от величины, близкой к общему среднему всех результатов, равной 73 (см. таблицу).

Номер наблюдения	Уровни фактора A				
	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5
1	6,8	14,3	−30,55	3,0	−2,3
2	13,3	−3,4	−8,7	10,5	−8,35
3	13,5	8,75	5,9	−0,2	−34,5
4	19,3	4,95	−12,0	16,0	4,0
5	3,5	10,65	−41,7	3,5	18,5
6	14,05	−8,2	−0,15	14,45	−5,0
7	9,5	−5,7	−14,35	1,5	−34,95
8	17,0	2,45	−20,5	20,15	6,95
Итоги	96,95	23,8	−122,05	68,9	−55,65

По данным таблицы проведем вычисления по формулам (III.14) − (III.21) в соответствии с вышеприведенной схемой. Результаты расчета представлены в таблице.

Источник дисперсии	Число степеней свободы	Сумма квадратов	Средний квадрат
A	4	4084,5	1021
Ошибка	35	5281,46	150,9
Общая сумма	39	9365,96	

Полученные в результате расчета дисперсии сравним по критерию Фишера:

$$F = s_A^2 / s_{\text{ош}}^2 = 1021/150,9 = 6,9.$$

По табл. 5 приложения находим $F_{0,95}(4,35) = 2,65$. Так как $F > 2,65$, различие галогеналкилов следует признать значимым. Установив при помощи дисперсионного анализа тот факт, что средние значения выходов полимера в целом существенно различаются между собой, перейдем к сравнению влияния отдельных галогеналкилов. Проведем это сравнение по критерию Дункана (см. гл. II, 14) с доверительной вероятностью $\beta = 0,95$. Нормированная ошибка среднего равна

$$s_{\bar{y}} = \sqrt{150,9/8} = 4,35.$$

Расположим средние значения в порядке возрастания их величин и выпишем из табл. 7 приложения значимые ранги для $f = 35$ и $p = 0,05$:

$\bar{y}_3$ (C_4H_9I)	$\bar{y}_5$ (C_3H_7Br)	$\bar{y}_2$ (C_3H_7I)	$\bar{y}_4$ (C_2H_5Br)	$\bar{y}_1$ (CH_3I)
57,74	66,04	75,97	81,61	85,1

p	2	3	4	5
Ранги, r	2,875	3,025	3,11	3,185
$r \cdot s_{\bar{y}}$	12,5	13,2	13,52	13,9

$\bar{y}_1 - \bar{y}_3 = 27,3 > 13,9$ — различие значимо

$\bar{y}_1 - \bar{y}_5 = 19,05 > 13,52$ — различие значимо

$\bar{y}_1 - \bar{y}_2 = 9,13 < 13,2$ — различие незначимо

$\bar{y}_1 - \bar{y}_4 = 3,49 < 12,5$ — различие незначимо

$\bar{y}_4 - \bar{y}_3 = 23,81 > 13,52$ — различие значимо

$\bar{y}_4 - \bar{y}_5 = 15{,}56 > 13{,}2$ — различие значимо

$\bar{y}_4 - \bar{y}_2 = 5{,}64 < 12{,}5$ — различие незначимо

$\bar{y}_2 - \bar{y}_3 = 18{,}17 > 13{,}2$ — различие значимо

$\bar{y}_2 - \bar{y}_5 = 9{,}92 < 12{,}5$ — различие незначимо

$\bar{y}_5 - \bar{y}_3 = 8{,}25 < 12{,}5$ — различие незначимо

3. Двухфакторный дисперсионный анализ. Изучается влияние на процесс одновременно двух факторов A и B. Фактор A исследуется на уровнях a_1, a_2,...,a_k, фактор B — на уровнях b_1, b_2,...,b_m. Допустим, что при каждом сочетании уровней факторов A и B проводится n параллельных наблюдений (табл. 7).

Таблица 7. **Данные для двухфакторного дисперсионного анализа с повторениями**

B	A						Итоги
	a_1	a_2	...	a_i	...	a_k	
b_1	y_{111}, y_{112} ..., y_{11n}	y_{211}, y_{212} ..., y_{21n}	...	y_{i11}, y_{i12} ..., y_{i1n}	...	y_{k11}, y_{k12} ..., y_{k1n}	B_1
b_2	y_{121}, y_{122} ..., y_{12n}	y_{221}, y_{222} ..., y_{22n}	...	y_{i21}, y_{i22} ..., y_{i2n}	...	y_{k21}, y_{k22} ..., y_{k2n}	B_2
b_j	y_{1j1}, y_{1j2} ..., y_{1jn}	y_{2j1}, y_{2j2} ..., y_{2jn}	...	y_{ij1}, y_{ij2} ..., y_{ijn}	...	y_{kj1}, y_{kj2} ..., y_{kjn}	Bj
⋮	⋮	⋮	...	⋮	...	⋮	⋮
b_m	y_{1m1}, y_{1m2} ..., y_{1mn}	y_{2m1}, y_{2m2} ..., y_{2mn}	...	y_{im1}, y_{im2} ..., y_{imn}	...	y_{km1}, y_{km2} ..., y_{kmn}	Bm
Итоги	A_1	A_2	...	A_i	...	A_k	

Общее число наблюдений равно $N = nkm$. Результат наблюдения можно представить в виде следующей модели:

$$y_{ijq} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \alpha_i\beta_j + \varepsilon_{ijq}, \qquad \text{(III.28)}$$

где μ — общее среднее; α_i — эффект фактора A на i-м уровне, $i = 1,2,...,k$; β_j — эффект фактора B на j-м уровне, $j = 1,2,...,m$; $\alpha_i\beta_j$ — эффект взаимодействия факторов.

Эффект взаимодействия представляет собой отклонение среднего по наблюдениям в (ij)-й серии от суммы первых трех членов в модели (III.28), а ε_{ijq} $(q = 1,2,...,n)$ учитывает вариацию внутри серии

наблюдений (ошибка воспроизводимости). Будем полагать, как и прежде, что ε_{ijq} распределена нормально с нулевым математическим ожиданием и дисперсией $\sigma^2_{\text{ош}}$. Если предположить, что между факторами нет взаимодействия, то можно принять линейную модель:

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ij}. \qquad \text{(III.29)}$$

Эта модель обычно применяется при отсутствии параллельных наблюдений (табл. 8):

Таблица 8. **Данные для двухфакторного дисперсионного анализа без повторений**

B	A				Итоги
	a_1	a_2	...	a_k	
b_1	y_{11}	y_{21}	...	y_{k1}	B_1
b_2	y_{12}	y_{22}	...	y_{k2}	B_2
.	.	.		.	.
.	.	.		.	.
.	.	.		.	.
b_m	y_{1m}	y_{2m}	...	y_{km}	B_m
Итоги	A_1	A_2	.	A_k	

Рассмотрим вначале линейную модель (III.29). Через $\bar{y}_i$ и $\bar{y}_j$ обозначим средние, соответственно, по столбцам и по строчкам:

$$\bar{y}_i = \frac{A_i}{m}, \qquad \text{(III.30)}$$

$$\bar{y}_j = \frac{B_j}{k}, \qquad \text{(III.31)}$$

через $\bar{\bar{y}}$ — среднее всех результатов:

$$\bar{\bar{y}} = \frac{1}{km} \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{m} y_{ij}. \qquad \text{(III.32)}$$

Рассеяние в средних по столбцам $\bar{y}_1$, $\bar{y}_2$,...,$\bar{y}_k$ относительно общего среднего $\bar{\bar{y}}$ не зависит от фактора B, так как все уровни фактора B усреднены. Это рассеяние связано с влиянием фактора A и случайного фактора. Так как дисперсия среднего (см. гл. II, 5) в m раз меньше дисперсии единичного измерения, имеем

$$\frac{1}{k-1} \sum_{i=1}^{k} (\bar{y}_i - \bar{\bar{y}})^2 \approx \sigma_A^2 + \frac{\sigma^2}{m}. \qquad \text{(III.33)}$$

В свою очередь, рассеяние в средних по строчкам не зависит от фактора A и связано с влиянием фактора B:

$$\frac{1}{m-1}\sum_{j=1}^{m}(\bar{y}'_j-\bar{\bar{y}})^2\approx\sigma_B^2+\frac{\sigma^2}{k}. \qquad \text{(III.34)}$$

Равенства (III.33) и (III.34) позволяют оценить влияние факторов A и B, если известна оценка дисперсии σ^2. Чтобы оценить фактор случайности при отсутствии параллельных наблюдений, поступим следующим образом. Найдем дисперсию наблюдений по i-му столбцу:

$$s_i^2=\frac{1}{m-1}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\bar{y}_i)^2. \qquad \text{(III.35)}$$

Эта дисперсия обусловлена влиянием фактора B и фактора случайности

$$s_i^2\approx\sigma_B^2+\sigma^2.$$

Равенство станет более точным, если вместо s_i^2 использовать средневзвешенную дисперсию по всем столбцам:

$$\sigma_B^2+\sigma^2\approx\frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}s_i^2=\frac{1}{k(m-1)}\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\bar{y}_i)^2. \qquad \text{(III.36)}$$

Вычитая (III.35) из (III.34), получим

$$\sigma^2-\frac{\sigma^2}{k}\approx\frac{1}{k(m-1)}\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\bar{y}_i)^2-\frac{1}{m-1}\sum_{j=1}^{m}(\bar{y}'_j-\bar{\bar{y}})^2. \qquad \text{(III.37)}$$

Отсюда

$$\sigma^2\cong\frac{1}{(k-1)(m-1)}\left[\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\bar{y}_i)^2-k\sum_{j=1}^{m}(\bar{y}'_j-\bar{\bar{y}})^2\right]. \qquad \text{(III.38)}$$

Обозначим полученную оценку (III.38) для дисперсии σ^2 через $s^2_{ош}$. Число степеней свободы $s^2_{ош}$ равно $(k-1)(m-1)$. Введем также следующие обозначения:

$$s_A^2=\frac{m}{k-1}\sum_{i=1}^{k}(\bar{y}_i-\bar{\bar{y}})^2\approx m\sigma_A^2+s^2_{ош}, \qquad \text{(III.39)}$$

$$s_B^2=\frac{k}{m-1}\sum_{j=1}^{m}(\bar{y}'_j-\bar{\bar{y}})^2\approx k\sigma_B^2+s^2_{ош}. \qquad \text{(III.40)}$$

Величины s_A^2 и s_B^2 можно считать выборочными дисперсиями с $(k-1)$ и $(m-1)$ степенями свободы соответственно. Проверяют нулевые гипотезы о незначимости влияния факторов A и B по критерию Фишера. Если дисперсионное отношение

$$F=\frac{s_A^2}{s^2_{ош}}<F_{1-p}(f_1,f_2),\quad f_1=k-1;\quad f_2=(k-1)(m-1), \qquad \text{(III.41)}$$

принимается гипотеза $H^0: \alpha_i = 0$. Если

$$F = \frac{s_A^2}{s_{\text{ош}}^2} > F_{1-p}(f_1, f_2), \tag{III.42}$$

нулевая гипотеза отвергается и влияние фактора A считается значимым. Аналогично, если

$$F = \frac{s_B^2}{s_{\text{ош}}^2} < F_{1-p}(f_1, f_2),$$

$$f_1 = m - 1; \quad f_2 = (k-1)(m-1), \tag{III.43}$$

принимается гипотеза $H^0: \beta_j = 0$. При справедливости неравенства

$$F = \frac{s_B^2}{s_{\text{ош}}^2} > F_{1-p} \tag{III.44}$$

влияние фактора B считается значимым. При проверке нулевых гипотез применяется односторонний критерий Фишера, так как альтернативой равенству $\sigma_A^2 = \sigma_{\text{ош}}^2$ служит неравенство $\sigma_A^2 > \sigma_{\text{ош}}^2$. При проведении дисперсионного анализа в условиях линейной модели (III.29) удобно использовать следующий алгоритм расчета. Находят: 1) итоги по столбцам

$$A_i = \sum_{j=1}^{m} y_{ij}, \quad i = 1, 2, \ldots, k; \tag{III.45}$$

2) итоги по строкам

$$B_j = \sum_{i=1}^{k} y_{ij}, \quad j = 1, 2, \ldots, m; \tag{III.46}$$

3) сумму квадратов всех наблюдений

$$SS_1 = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{m} y_{ij}^2; \tag{III.47}$$

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

$$SS_2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{k} A_i^2; \tag{III.48}$$

5) сумму квадратов итогов по строкам, деленную на число наблюдений в строке,

$$SS_3 = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^{m} B_j^2; \tag{III.49}$$

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

$$SS_4 = \frac{1}{mk} \left(\sum_{i=1}^{k} A_i \right)^2 = \frac{1}{mk} \left(\sum_{j=1}^{m} B_j \right)^2; \tag{III.50}$$

7) сумму квадратов для столбца

$$SS_A = SS_2 - SS_4; \qquad \text{(III.51)}$$

8) сумму квадратов для строки

$$SS_B = SS_3 - SS_4; \qquad \text{(III.52)}$$

9) общую сумму квадратов, равную разнице между суммой квадратов всех наблюдений и корректирующим членом,

$$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_4; \qquad \text{(III.53)}$$

10) остаточную сумму квадратов

$$SS_{\text{ост}} = SS_{\text{общ}} - SS_A - SS_B = SS_1 - SS_2 - SS_3 + SS_4; \qquad \text{(III.54)}$$

11) дисперсию s^2_A

$$s^2_A = SS_A/(k-1); \qquad \text{(III.55)}$$

12) дисперсию s^2_B

$$s^2_B = SS_B/(m-1); \qquad \text{(III.56)}$$

13) дисперсию $s^2_{\text{ош}}$

$$s^2_{\text{ош}} = \frac{SS_{\text{ост}}}{(k-1)\ (m-1)}. \qquad \text{(III.57)}$$

Результаты расчета удобно представлять в виде табл. 9.

Таблица 9. **Двухфакторный дисперсионный анализ (без повторения опытов)**

Источник дисперсии	Число степеней свободы	Сумма квадратов	Средний квадрат	Математическое ожидание среднего квадрата
A	$k-1$	$SS_A = SS_2 - SS_4$	$s^2_A = \frac{SS_A}{k-1}$	$m\sigma^2_A + \sigma^2_{\text{ош}}$
B	$m-1$	$SS_B = SS_3 - SS_4$	$s^2_B = \frac{SS_B}{m-1}$	$k\sigma^2_B + \sigma^2_{\text{ош}}$
Остаток	$(k-1)(m-1)$	$SS_{\text{ост}} = SS_1 - SS_2 - SS_3 + SS_4$	$s^2_{\text{ош}} = \frac{SS_{\text{ост}}}{(k-1)(m-1)}$	$\sigma^2_{\text{ош}}$
Общая сумма	$km-1$	$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_4$		

Установив при помощи дисперсионного анализа значимость влияния данного фактора, выясняют затем при помощи критерия Стьюдента или рангового критерия Дункана, какие именно средние значения y различны.

Линейная модель (III.29) справедлива, если между факторами A и B нет взаимодействия. В противном случае этому взаимодействию как фактору

присуща своя дисперсия σ^2_{AB}. Взаимодействие AB, σ^2_{AB} служит мерой того, насколько влияние фактора A зависит от уровня фактора B, и наоборот, насколько влияние фактора B зависит от уровня A. В приведенном алгоритме при наличии взаимодействия между факторами σ^2_{AB}, как составная часть, входит в дисперсию $s^2_{\text{ош}}$. Выделить σ^2_{AB} можно только при наличии параллельных наблюдений.

Пусть при каждом сочетании уровней факторов A и B проводится n параллельных опытов. Так, в табл. 7 в ячейке, образованной пересечением i-го столбца и j-й строки, имеется целая серия наблюдений $y_{ij1}, y_{ij2}, \ldots, y_{ijn}$. Сохраним обозначение $\bar{y}_{ij}$ за средним результатом в ячейке. Выборочная дисперсия результатов в каждой ячейке

$$s^2_{ij} = \frac{1}{n-1} \sum_{u=1}^{n} (y_{iju} - \bar{y}_{ij})^2 \qquad \text{(III.58)}$$

имеет $n-1$ степень свободы. Если выборочные дисперсии по всем ячейкам однородны, их можно усреднить и использовать полученную средневзвешенную дисперсию

$$s^2_{\text{ош}} = \frac{1}{mk} \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{m} s^2_{ij} \qquad \text{(III.59)}$$

в качестве оценки для дисперсии воспроизводимости σ^2. Число степеней свободы $s^2_{\text{ош}}$ равно $mk(n-1)$. Более удобная формула для вычисления дисперсии воспроизводимости

$$s^2_{\text{ош}} = \frac{\sum_{j=1}^{k} \sum_{i=1}^{m} \sum_{u=1}^{n} y^2_{iju} - \frac{\sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{m} y^2_{ij}}{n}}{mk(n-1)}, \qquad \text{(III.60)}$$

где y_{ij} — сумма наблюдений в ij-й ячейке.

При проведении дисперсионного анализа для нелинейной модели удобно использовать следующий алгоритм расчета. По табл. 7 находят:
1) суммы наблюдений в каждой ячейке

$$y_{ij} = \sum_{u=1}^{n} y_{iju}, \qquad \text{(III.61)}$$

$$j = 1, 2, \ldots, m; \quad i = 1, 2, \ldots, k;$$

2) квадрат сумм наблюдений в каждой ячейке

$$y^2_{ij} = \left(\sum_{u=1}^{n} y_{iju} \right)^2; \qquad \text{(III.62)}$$

3) итоги по столбцам

$$A_i = \sum_{j=1}^{m} \sum_{u=1}^{n} y_{iju}; \qquad \text{(III.63)}$$

4) итоги по строкам

$$B_j = \sum_{i=1}^{k} \sum_{u=1}^{n} y_{iju}; \qquad \text{(III.64)}$$

5) сумму всех наблюдений (общий итог)

$$\sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{m} \sum_{u=1}^{n} y_{iju} = \sum_{i=1}^{k} A_i = \sum_{j=1}^{m} B_j; \qquad \text{(III.65)}$$

6) сумму квадратов всех наблюдений

$$SS_1 = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{m} \sum_{u=1}^{n} y_{iju}^2; \qquad \text{(III.66)}$$

7) сумму квадратов итогов по столбцам, деленную на число наблюдений в столбце,

$$SS_2 = \frac{1}{mn} \sum_{i=1}^{k} A_i^2; \qquad \text{(III.67)}$$

8) сумму квадратов итогов по строкам, деленную на число наблюдений в строке,

$$SS_3 = \frac{1}{kn} \sum_{j=1}^{m} B_j^2; \qquad \text{(III.68)}$$

9) квадрат общего итога, деленный на число всех наблюдений (корректирующий член),

$$SS_4 = \frac{\left(\sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{m} \sum_{u=1}^{n} y_{iju} \right)^2}{N} = \frac{1}{mkn} \left(\sum_{i=1}^{k} A_i \right)^2 = \frac{1}{mkn} \left(\sum_{j=1}^{m} B_j \right)^2; \qquad \text{(III.69)}$$

10) сумму квадратов для столбца

$$SS_A = SS_2 - SS_4; \qquad \text{(III.70)}$$

11) сумму квадратов для строки

$$SS_B = SS_3 - SS_4; \qquad \text{(III.71)}$$

12) сумму квадратов для дисперсии воспроизводимости

$$SS_{\text{ош}} = SS_1 - \frac{\sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{m} y_{ij}^2}{n}; \qquad \text{(III.72)}$$

13) общую сумму квадратов, равную разнице между суммой квадратов всех наблюдений и корректирующим членом,

$$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_4; \qquad \text{(III.73)}$$

14) остаточную сумму квадратов отклонений для эффекта взаимодействия AB

$$SS_{AB} = SS_{\text{общ}} - SS_A - SS_B - SS_{\text{ош}}; \qquad \text{(III.74)}$$

15) дисперсию s^2_A

$$s_A^2 = SS_A/(k-1); \tag{III.75}$$

16) дисперсию s^2_B

$$s_B^2 = SS_B/(m-1); \tag{III.76}$$

17) дисперсию s^2_{AB}

$$s^2_{AB} = \frac{SS_{AB}}{(k-1)(m-1)}; \tag{III.77}$$

18) дисперсию воспроизводимости

$$s^2_{\text{ош}} = \frac{SS_{\text{ош}}}{mk(n-1)}. \tag{III.78}$$

Проверка гипотезы о значимости взаимодействия факторов A и B проводится по F-критерию одинаково для моделей со случайными и фиксированными уровнями. Однако проверки гипотез о значимости факторов A и B проводят неодинаково для разных моделей. В табл. 10 приведен двухфакторный дисперсионный анализ с повторными опытами для модели со случайными уровнями.

Таблица 10. **Двухфакторный дисперсионный анализ для модели со случайными уровнями (с повторными опытами)**

Источник дисперсии	Число степеней свободы	Сумма квадратов	Средний квадрат	Математическое ожидание среднего квадрата
A	$k-1$	$SS_A = SS_2 - SS_4$	$s^2_A = \frac{SS_A}{k-1}$	$nm\sigma^2_A + n\sigma^2_{AB} + \sigma^2_{\text{ош}}$
B	$m-1$	$SS_B = SS_3 - SS_4$	$s^2_B = \frac{SS_B}{m-1}$	$nk\sigma^2_B + n\sigma^2_{AB} + \sigma^2_{\text{ош}}$
AB	$(k-1)(m-1)$	$SS_{AB} = SS_1 - SS_2 - SS_3 + SS_4$	$s^2_{AB} = \frac{SS_{AB}}{(k-1)(m-1)}$	$n\sigma^2_{AB} + \sigma^2_{\text{ош}}$
Остаток (ошибка)	$mk(n-1)$	$SS_{\text{ош}} = SS_1 - \frac{\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{m} y_{ij}^2}{n}$	$s^2_{\text{ош}} = \frac{SS_{\text{ош}}}{mk(n-1)}$	$\sigma^2_{\text{ош}}$
Общая сумма	$mkn-1$	$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_4$		

Из табл. 10 видно, что для оценки значимости фактора A необходимо составить дисперсионное отношение вида

$$F = s_A^2 / s_{AB}^2. \qquad \text{(III.79)}$$

Влияние фактора A признается значимым, если

$$s_A^2 / s_{AB}^2 > F_{1-p}(f_1, f_2), \qquad \text{(III.80)}$$

где p — уровень значимости; $f_1 = k - 1$; $f_2 = (k-1)(m-1)$. Аналогично, влияние фактора B считается значимым, если

$$s_B^2 / s_{AB}^2 > F_{1-p}(f_1, f_2), \qquad \text{(III.80а)}$$

где $f_1 = m - 1$, $f_2 = (k-1)(m-1)$.

Если неравенства (III.80) и (III.80а) не выполняются, влияние факторов A и B следует считать незначимым.

Для математической модели с фиксированными уровнями члены, соответствующие взаимодействию, исчезают из сумм квадратов отклонений SS_A и SS_B.

Вследствие этого для оценки значимости фактора A составляют дисперсионное отношение вида

$$F = s_A^2 / s_{\text{ош}}^2, \qquad \text{(III.81)}$$

в знаменателе которого стоит оценка дисперсии воспроизводимости. Полученное дисперсионное отношение сравнивается с табличным $F_{1-p}(f_1, f_2)$ для чисел степеней свободы $f_1 = k - 1$, $f_2 mk\ (n-1)$. Аналогично, для оценки фактора B рассматривают отношение

$$F = s_B^2 / s_{\text{ош}}^2, \qquad \text{(III.81а)}$$

которое сравнивают с табличным $F_{1-p}(f_1, f_2)$ для чисел степеней свободы $f_1 = m - 1$ и $f_2 = mk\ (n-1)$.

Если дисперсионные отношения (III.81) и (III.81а) больше табличных

$$s_A^2 / s_{\text{ош}}^2 > F_{1-p}(f_1, f_2)$$

и $\qquad \text{(III.81б)}$

$$s_B^2 / s_{\text{ош}}^2 > F_{1-p}(f_1, f_2),$$

влияние факторов A и B следует считать значимым. Если же неравенства (III.81б) не выполняются, влияние факторов A и B незначимо. Для проверки значимости эффекта взаимодействия составляют дисперсионное отношение вида

$$F = s_{AB}^2 / s_{\text{ош}}^2$$

и сравнивают его с табличным $F_{1-p}(f_1, f_2)$ при уровне значимости p и числах степеней свободы $f_1 = (k-1)(m-1)$ и $f_2 = mk\ (n-1)$. Если полученное дисперсионное отношение больше табличного $s_{AB}^2 / s_{\text{ош}}^2 > F_{1-p}(f_1, f_2)$, влияние эффекта взаимодействия факторов надо считать значимым. В противном случае, если $s_{AB}^2 / s_{\text{ош}}^2 < F_{1-p}(f_1, f_2)$, влияние эффекта взаимодействия следует считать незначимым.

Пример 2. Исследовалось влияние на процесс органического синтеза двух факторов: A — тип растворителя на уровнях a_1, a_2, a_3, a_4 и B — тип галогеналкила на уровнях b_1, b_2, b_3, b_4. Результаты (выход полимера в процентах) представлены в таблице:

B	A			
	a_1	a_2	a_3	a_4
b_1	13,2 13,9	4,7 5,8	53,4 48,3	13,6 13,2
b_2	18,9 21,0	19,8 17,9	14,0 13,2	9,5 8,6
b_3	7,3 8,5	38,2 37,7	5,1 5,9	54,4 55,2
b_4	20,0 20,8	60,1 60,9	19,6 18,5	58,2 59,7

При каждом сочетании типа растворителя и галогеналкила сделано два параллельных опыта. Требуется оценить значимость влияния типа растворителя и галогеналкила на процесс синтеза.

Р е ш е н и е. Математическая модель эксперимента представляет собой модель с фиксированными уровнями. Уровни факторов A и B выбраны не случайно, поскольку необходимо установить влияние на процесс синтеза только данных четырех типов растворителей и галогеналкилов. Расчет проводится в соответствии с приведенным алгоритмом по формулам (III.61) – (III.78):

1. Определим суммы наблюдений в каждой ячейке (таблица).

B	A				Итоги
	a_1	a_2	a_3	a_4	
b_1	27,1	10,5	101,7	26,8	166,1
b_2	39,1	37,7	27,2	18,1	122,1
b_3	15,8	75,9	11,0	109,6	212,3
b_4	40,8	121	38,1	117,9	317,8
Итоги	122,8	245,1	178,0	272,4	818,3

2. Возведем полученные суммы в квадрат. Результаты y_{ij}^2 представим в виде таблицы:

B	A			
	a_1	a_2	a_3	a_4
b_1	734,41	110,25	10342,89	718,24
b_2	1528,81	1421,29	739,84	327,61
b_3	249,64	5760,81	121,0	12012,16
b_4	1064,64	14641	1451,61	13900,41

3. Подсчитаем итоги по столбцам. Например,

$$A_1 = 27,1 + 39,1 + 15,8 + 40,8 = 122,8.$$

4. Подсчитаем итоги по строчкам. Например,

$$B_2 = 39,1 + 37,7 + 27,2 + 18,1 = 122,1.$$

5. Определим общий итог — сумму всех наблюдений:

$$\sum_{i=1}^{4}\sum_{j=1}^{4}\sum_{u=1}^{2} y_{iju} = \sum_{i=1}^{4} A_i = \sum_{j=1}^{4} B_j = 818,3.$$

6. Определим сумму квадратов всех наблюдений:

$$SS_1 = \sum_{i=1}^{4}\sum_{j=1}^{4}\sum_{u=1}^{2} y_{iju}^2 = 32916,43.$$

7. Определим сумму квадратов итогов по столбцам, деленную на число наблюдений в столбце,

$$SS_2 = \frac{1}{4 \cdot 2}\sum_{i=1}^{4} A_i^2 = \frac{1}{4 \cdot 2}(122,8^2 + 245,1^2 + 178,0^2 + 272,4^2) =$$

$$= \frac{181039,01}{8} = 22262,95.$$

8. Определим сумму квадратов итогов по строкам, деленную на число наблюдений в строке,

$$SS_3 = \frac{1}{4 \cdot 2}\sum_{j=1}^{4} B_j^2 = \frac{1}{4 \cdot 2}(166,1^2 + 122,1^2 + 212,3^2 + 317,8^2) =$$

$$= \frac{188565,75}{8} = 23570,72.$$

9. Определим квадрат общего итога, деленный на число всех наблюдений,

$$SS_4 = \frac{\left(\sum_{i=1}^{4}\sum_{j=1}^{4}\sum_{u=1}^{2} y_{iju}\right)^2}{32} = \frac{818,3^2}{32} = \frac{669617,89}{32} = 20925,47.$$

10. Определим суммы квадратов отклонений для факторов A и B:

$$SS_A = SS_2 - SS_4 = 22262,95 - 20925,47 = 1704,48,$$

$$SS_B = SS_3 - SS_4 = 23570,72 - 20925,47 = 2645,25.$$

11. Определим сумму квадратов для дисперсии воспроизводимости:

$$SS_{\text{ош}} = SS_1 - \frac{\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{m} y_{ij}^2}{n} = 32916,43 - \frac{65724,61}{2} = 54,13.$$

$$\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{m} y_{ij}^2 = \sum_{i=1}^{4}\sum_{j=1}^{4} y_{ij}^2.$$

12. Определим общую сумму квадратов:

$$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_4 = 32916{,}43 - 20925{,}47 = 11990{,}96.$$

13. Определим сумму квадратов отклонений для эффекта взаимодействия:

$$SS_{AB} = SS_{\text{общ}} - SS_A - SS_B - SS_{\text{ош}} = 11990{,}96 - 1704{,}48 - $$
$$- 2645{,}25 - 54{,}13 = 7587{,}11.$$

14. Определим соответствующие дисперсии:

$$s_A^2 = \frac{SS_A}{k-1} = \frac{1704{,}48}{4-1} = 568{,}16,$$

$$s_B^2 = \frac{SS_B}{m-1} = \frac{2645{,}25}{4-1} = 881{,}75,$$

$$s_{\text{ош}}^2 = \frac{SS_{\text{ош}}}{mk\,(n-1)} = \frac{54{,}13}{4 \cdot 4\,(2-1)} = 3{,}38,$$

$$s_{AB}^2 = \frac{SS_{AB}}{(k-1)\,(m-1)} = \frac{7587{,}11}{(4-1)\,(4-1)} = 843{,}01.$$

Результаты расчета сведены в таблицу двухфакторного дисперсионного анализа.

Источник дисперсии	Число степеней свободы	Сумма квадратов	Средний квадрат
A	3	1704,48	568,16
B	3	2645,25	881,75
AB	9	7587,11	843,01
Ошибка	16	54,13	3,38
Общая сумма	31	11990,97	

Значимость линейных эффектов A и B и эффекта взаимодействия проверялась по критерию Фишера. Дисперсионное отношение для эффекта A

$$F = s_A^2 / s_{\text{ош}}^2 = 568{,}16/3{,}38 = 168{,}09.$$

Для эффекта B

$$F = s_B^2 / s_{\text{ош}}^2 = 881{,}75/3{,}38 = 260{,}87.$$

Табличное значение критерия Фишера для уровня значимости $p = 0{,}05$ и числа степеней свободы $f_1 = 3$ и $f_2 = 16$ $F_{0{,}95}(3{,}16) = 3{,}2$.

Поскольку рассчитанные дисперсионные отношения больше табличного, факторы A и B значимы, т.е. выход полимера существенно зависит от типа растворителя и галогеналкила. Для проверки значимости эффекта взаимодействия составлено отношение

$$F = s_{AB}^2 / s_{\text{ош}}^2 = 843{,}01/3{,}38 = 249{,}41.$$

Табличное значение критерия Фишера для $p = 0{,}05$, $f_1 = 9$ и $f_2 = 16$, $F_{0{,}95}(9{,}16) = 2{,}65$,

$$s_{AB}^2 / s_{\text{ош}}^2 > F_{\text{табл}},$$

и, следовательно, эффект взаимодействия следует считать значимым. Таким образом, интенсивность влияния типа растворителя на процесс полимеризации зависит от того, с каким галогеналкилом проводится полимеризация, и наоборот, влияние галогеналкила зависит от выбранного растворителя.

4. Планирование эксперимента при дисперсионном анализе. Латинские и гипер-греко-латинские квадраты. При изучении влияния на процесс двух факторов число необходимых экспериментов N (без повторения опытов) определялось произведением уровней изучаемых факторов. Если число уровней n одинаково, то объем эксперимента при двухфакторном дисперсионном анализе равен $N = n^2$. При таком числе опытов в эксперименте встречаются все возможные сочетания уровней изучаемых факторов. Такой эксперимент называется *полным факторным экспериментом* (ПФЭ). Эксперимент, в котором пропущены некоторые сочетания уровней, называется *дробным факторным экспериментом* (ДФЭ).

Сокращение перебора уровней всегда приводит к потере части информации. Поэтому при ДФЭ важно так спланировать эксперимент, чтобы терялась наименее существенная при данной постановке задачи информация. Особенно широко используется ДФЭ, в котором теряется лишь информация о взаимодействиях изучаемых факторов. Это правомерно в тех случаях, когда эффекты взаимодействия заведомо отсутствуют или настолько малы, что их можно не учитывать. Рассмотрим трехфакторный дисперсионный анализ при одинаковом числе уровней n для каждого фактора. Полный перебор сочетаний уровней факторов потребует N опытов

$$N = n^3. \tag{III.82}$$

Число опытов можно значительно сократить, если воспользоваться ДФЭ по схеме *латинского квадрата*, введенного впервые Фишером. Латинский квадрат $n \times n$ — это квадратная таблица, составленная из n элементов (чисел или букв) таким образом, что каждый элемент повторяется в каждой строке и каждом столбце только один раз. Из трех элементов образуется латинский квадрат 3×3:

$$\begin{array}{ccc} A & B & C \\ B & C & A \\ C & A & B \end{array} \tag{III.83}$$

Из четырех элементов — латинский квадрат 4×4:

$$\begin{array}{cccc} A & B & C & D \\ B & C & D & A \\ C & D & A & B \\ D & A & B & C \end{array} \tag{III.84}$$

Стандартными или *каноническими латинскими квадратами* называются такие квадраты, у которых первая строка и первый столбец построены в алфавитном порядке (элементы квадрата — буквы) или в порядке натурального ряда (элементы квадрата — числа). Квадраты (III.83) и (III.84) являются стандартными. Построены эти квадраты путем одношаговой циклической перестановки: вторая строка строится перестановкой в конец строки первого элемента первой строки, третья строка — перестановкой в конец первого элемента второй строки и т. д. Одношаговая циклическая перестановка — это наиболее простой способ построения латинского квадрата. В общем случае $n \times n$ латинский квадрат может

быть построен при $n-1$ одношаговых циклических перестановках. Число латинских квадратов зависит от размера квадрата и для $n>3$ оно достаточно велико. Так, имеется 576 латинских квадратов 4×4, 161 280 латинских квадратов 5×5.

К планированию эксперимента по схеме латинского квадрата прибегают при исследовании влияния на процесс трех факторов A, B и C. При этом факторы A и B могут быть связаны с самим исследованием, а в качестве фактора C рассматривается неоднородность материала.

Все три фактора в латинском квадрате имеют одинаковое число уровней (a_i, b_i, c_i). Так, в плане (табл. 11) каждый фактор изменяется на двух уровнях.

Таблица 11. **2×2 латинский квадрат**

A	B	
	b_1	b_2
a_1	c_1	c_2
a_2	c_2	c_1

Таблица 12. **План эксперимента $n=2; N=4$**

Номер	A	B	C	y
1	a_1	b_1	c_1	y_1
2	a_1	b_2	c_2	y_2
3	a_2	b_1	c_2	y_3
4	a_2	b_2	c_1	y_4

В табл. 11 представлен факторный эксперимент типа 2^2, на который наложен 2×2 латинский квадрат. Матрица планирования — соответствующий табл. 11 план эксперимента, включающий три столбца и четыре строчки, представлена в табл. 12.

Латинский квадрат является частью плана — по схеме латинского квадрата введен в планирование третий фактор C. Однако весь этот план (табл. 11) принято называть латинским квадратом. В латинском квадрате каждый элемент повторяется только один раз в каждой строчке и в каждом столбце, поэтому каковы бы ни были нарушающие свойства элемента квадрата, они в равной степени скажутся при подсчете средних по столбцам и по строкам. Приведенный в табл. 12 план представляет собой половину — *полуреплику* от ПФЭ 2^3 (табл. 13). Вошедшие в полуреплику опыты отмечены звездочками.

Таблица 13. **Полный факторный эксперимент 2^3**

	a_1		a_2	
	b_1	b_2	b_1	b_2
c_1	*			*
c_2		*	*	

Результат наблюдения, полученного по полному факторному эксперименту, можно представить в виде следующей модели:

$$y_{ijq}=\mu+\alpha_i+\beta_j+\gamma_q+\alpha_i\beta_j+\alpha_i\gamma_q+\beta_j\gamma_q+\alpha_i\beta_j\gamma_q+\varepsilon_{ijq}. \qquad \text{(III.85)}$$

В модель (III.85) помимо линейных эффектов входят три эффекта парного и один тройной эффект взаимодействия. Сокращение числа опытов в дробной реплике (см. табл. 11) приводит к тому, что линейные эффекты оказываются смешанными с эффектами взаимодействия:

эффект A с BC взаимодействием,
эффект B с AC взаимодействием,
эффект C с AB взаимодействием.

При применении латинского квадрата обычно исходят из предположения, что эффекты взаимодействия между факторами незначимы. Тогда результаты эксперимента можно представить в виде линейной модели

$$y_{ijq} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_q + \varepsilon_{ijq}. \qquad \text{(III.86)}$$

В табл. 14 приведен план эксперимента по схеме латинского квадрата 3×3.

Таблица 14. **Латинский квадрат 3×3**

A	B			Итоги
	b_1	b_2	b_3	
a_1	c_1 y_1	c_2 y_2	c_3 y_3	A_1
a_2	c_2 y_4	c_3 y_5	c_1 y_6	A_2
a_3	c_3 y_7	c_1 y_8	c_2 y_9	A_3
Итоги	B_1	B_2	B_3	

Латинский квадрат 3×3 со структурной точки зрения можно рассматривать как $^1/_3$ реплику от полного факторного эксперимента 3^3. В общем случае латинский квадрат $n \times n$ можно рассматривать как $1/n$ реплику от ПФЭ n^3.

При проведении дисперсионного анализа латинского квадрата без повторных опытов удобно использовать следующий алгоритм расчета. Для этого определяют: 1) итоги по строкам A_i, столбцам B_j и латинским буквам C_q. Например, для приведенного в табл. 14 латинского квадрата 3×3 итоги по строкам:

$$A_1 = y_1 + y_2 + y_3, \quad A_2 = y_4 + y_5 + y_6, \quad A_3 = y_7 + y_8 + y_9;$$

итоги по столбцам:

$$B_1 = y_1 + y_4 + y_7, \quad B_2 = y_2 + y_5 + y_8, \quad B_3 = y_3 + y_6 + y_9;$$

итоги по латинским буквам:

$$C_1 = y_1 + y_6 + y_8, \quad C_2 = y_2 + y_4 + y_9, \quad C_3 = y_3 + y_5 + y_7;$$

2) сумму квадратов всех наблюдений

$$SS_1 = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} y_{ij}^2; \qquad \text{(III.87)}$$

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

$$SS_2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A_i^2 ; \qquad \text{(III.88)}$$

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

$$SS_3 = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} B_j^2 ; \qquad \text{(III.89)}$$

5) сумму квадратов итогов по латинским буквам, деленную на число наблюдений, соответствующих каждой букве,

$$SS_4 = \frac{1}{n}\sum_{q=1}^{n} C_q^2 ; \qquad \text{(III.90)}$$

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

$$SS_5 = \frac{1}{n^2}\left(\sum_{i=1}^{n} A_i\right)^2 = \frac{1}{n^2}\left(\sum_{j=1}^{n} B_j\right)^2 = \frac{1}{n^2}\left(\sum_{q=1}^{n} C_q\right)^2 ; \qquad \text{(III.91)}$$

7) сумму квадратов для строки

$$SS_A = SS_2 - SS_5 ; \qquad \text{(III.92)}$$

8) сумму квадратов для столбца

$$SS_B = SS_3 - SS_5 ; \qquad \text{(III.93)}$$

9) сумму квадратов для латинской буквы

$$SS_C = SS_4 - SS_5 ; \qquad \text{(III.94)}$$

10) общую сумму квадратов, равную разнице между суммой квадратов всех наблюдений и корректирующим членом,

$$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_5 ; \qquad \text{(III.95)}$$

11) остаточную сумму квадратов

$$SS_{\text{ост}} = SS_{\text{общ}} - SS_A - SS_B - SS_C = SS_1 - SS_5 - SS_2 + SS_5 - SS_3 + \\ + SS_5 - SS_4 + SS_5 = SS_1 - SS_2 - SS_3 - SS_4 + 2SS_5 . \qquad \text{(III.96)}$$

Остаточная сумма квадратов складывается из дисперсии, обусловленной ошибкой опыта, и дисперсии, обусловленной взаимодействиями факторов, если такие имеются;

12) дисперсию s_A^2

$$s_A^2 = SS_A/(n_\cdot - 1); \qquad \text{(III.97)}$$

13) дисперсию s_B^2

$$s_B^2 = SS_B/(n - 1); \qquad \text{(III.98)}$$

14) дисперсию s^2_C

$$s^2_C = SS_C/(n-1); \qquad \text{(III.99)}$$

15) дисперсию $s^2_{\text{ош}}$

$$s^2_{\text{ош}} = \frac{SS_{\text{ост}}}{(n-1)(n-2)}. \qquad \text{(III.100)}$$

Результаты расчета представляются в виде табл. 15.

Таблица 15. **Дисперсионный анализ латинского квадрата (без повторных опытов)**

Источник дисперсии	Число степеней свободы	Сумма квадратов	Средний квадрат	Математическое ожидание среднего квадрата
A	$n-1$	$SS_A = SS_2 - SS_5$	$s^2_A = \frac{SS_A}{n-1}$	$n\sigma^2_A + \sigma^2_{\text{ош}}$
B	$n-1$	$SS_B = SS_3 - SS_5$	$s^2_B = \frac{SS_B}{n-1}$	$n\sigma^2_B + \sigma^2_{\text{ош}}$
C	$n-1$	$SS_C = SS_4 - SS_5$	$s^2_C = \frac{SS_C}{n-1}$	$n\sigma^2_C + \sigma^2_{\text{ош}}$
Остаток (ошибка)	$(n-1)(n-2)$	$SS_{\text{ост}} = SS_1 - SS_2 - SS_3 - SS_4 + 2SS_5$	$s^2_{\text{ош}} = \frac{SS_{\text{ост}}}{(n-1)(n-2)}$	$\sigma^2_{\text{ош}}$
Общая сумма	n^2-1	$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_5$		

Значимость линейных эффектов проверяют по критерию Фишера. Если дисперсионные отношения удовлетворяют неравенствам

$$\begin{aligned} s^2_A / s^2_{\text{ош}} &< F_{1-p}(f_1, f_2), \\ s^2_B / s^2_{\text{ош}} &< F_{1-p}(f_1, f_2), \\ s^2_C / s^2_{\text{ош}} &< F_{1-p}(f_1, f_2), \end{aligned} \qquad \text{(III.101)}$$

где p — уровень значимости; f_1, f_2 — числа степеней свободы, равные $f_1 = n-1$; $f_2 = (n-1)(n-2)$, принимаются нулевые гипотезы: $\alpha_i = 0$, $\beta_j = 0$; $\gamma_q = 0$. Если какое-нибудь дисперсионное отношение оказывается больше табличного, соответствующая нулевая гипотеза отвергается, и влияние фактора считается значимым. Приняв гипотезу о значимости влияния фактора, т. е. гипотезу о значимости различия в средних, обычно выясняют, какие именно средние значимо различаются между собой при помощи критерия Стьюдента или множественного рангового критерия Дункана. Если же согласно условиям задачи один или два фактора являются источниками неоднородностей, влияние которых надо

исключить при подсчете главного эффекта (это обеспечивается планированием по схеме латинского квадрата), то средние по источникам неоднородностей не подсчитываются и не проверяется значимость их различия по статистическим критериям.

Пример 3. Планирование эксперимента по схеме латинского квадрата было использовано для исследования влияния на процесс органического синтеза трех факторов: A — типа галогеналкила на уровнях a_1, a_2, a_3 и a_4; B — типа растворителя на уровнях b_1, b_2, b_3 и b_4; C — отношения количества мономера к растворителю. Результаты (выход полимера в процентах) представлены в таблице.

Эксперимент проводился без повторных опытов. Требуется оценить значимость влияния рассматриваемых факторов на процесс синтеза.

A	B				Итоги по строкам
	b_1	b_2	b_3	b_4	
a_1	c_1 13,2	c_2 27	c_3 49,1	c_4 7,2	72,2
a_2	c_2 19,0	c_3 8,0	c_4 15,5	c_1 9,5	52,0
a_3	c_3 4,6	c_4 5,9	c_1 31,5	c_2 53,1	95,1
a_4	c_4 14,7	c_1 16,3	c_2 60,9	c_3 55,2	147,1
Итоги по столбцам	51,5	32,9	157,0	125	

Решение Расчет проводится в соответствии с приведенным алгоритмом по формулам (III.88) — (III.100). Итоги по строкам A_1, A_2, A_3, A_4 и итоги по столбцам B_1, B_2, B_3, B_4 приведены в таблице. Определим: 1) итоги по латинским буквам:

$$C_1 = 70,5; \quad C_2 = 135,7; \quad C_3 = 116,9; \quad C_4 = 43,3;$$

2) сумму квадратов всех наблюдений

$$SS_1 = \sum_{i=1}^{4} \sum_{j=1}^{4} y_{ij}^2 = 13,2^2 + 2,7^2 + \cdots + 55,2^2 = 14505,14;$$

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

$$SS_2 = {}^1/_4 (72,2^2 + 52,0^2 + 95,1^2 + 147,1^2) = 9649,82;$$

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

$$SS_3 = {}^1/_4 (51,5^2 + 32,9^2 + 157,0^2 + 125^2) = 11002,16;$$

5) сумму квадратов итогов по латинским буквам, деленную на число наблюдений, соответствующих каждой букве,

$$SS_4 = {}^1/_4 (70,5^2 + 135,7^2 + 116,9^2 + 43,3^2) = 9731,31;$$

6) корректирующий член SS_5 – квадрат общего итога, деленный на число всех наблюдений:

$$SS_5 = \frac{1}{4 \cdot 4}(72{,}2 + 52{,}0 + 95{,}1 + 147{,}1)^2 = \frac{1}{4 \cdot 4}(51{,}5 + 32{,}9 + 157 + 125)^2 =$$

$$= \frac{1}{4 \cdot 4}(70{,}5 + 135{,}7 + 116{,}9 + 43{,}3)^2 = 8390{,}56;$$

7) сумму квадратов для строки

$$SS_A = SS_2 - SS_5 = 9649{,}82 - 8390{,}56 = 1259{,}26;$$

8) сумму квадратов для столбца

$$SS_B = SS_3 - SS_5 = 11002{,}16 - 8390{,}56 = 2611{,}60;$$

9) сумму квадратов для латинской буквы

$$SS_C = SS_4 - SS_5 = 9731{,}31 - 8390{,}56 = 1340{,}75;$$

10) общую сумму квадратов

$$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_5 = 14505{,}14 - 8390{,}56 = 6114{,}58;$$

11) остаточную сумму квадратов

$$SS_{\text{ост}} = SS_{\text{общ}} - SS_A - SS_B - SS_C = 6114{,}58 - 1259{,}26 -$$

$$- 2611{,}60 - 1340{,}75 = 902{,}97;$$

12) дисперсию s_A^2

$$s_A^2 = SS_A / 3 = 1259{,}26/3 = 419{,}75;$$

13) дисперсию s_B^2

$$s_B^2 = 2611{,}60/3 = 870;$$

14) дисперсию s_C^2

$$s_C^2 = 1340{,}75/3 = 446{,}92;$$

15) дисперсию $s_{\text{ош}}^2$

$$s_{\text{ош}}^2 = 902{,}97/6 = 150{,}5.$$

Результаты расчета сведены в таблицу дисперсионного анализа.

Источник дисперсин	Число степеней свободы	Сумма квадратов	Средний квадрат
A	3	1259,28	419,75
B	3	2611,60	870
C	3	1340,75	446,92
Ошибка	6	902,97	150,5
Общая сумма	15	6114,58	

Значимость влияния факторов *A*, *B* и *C* проверяется по критерию Фишера. Дисперсионное отношение для эффекта *A*

$$F = s_A^2 / s_{\text{ош}}^2 = 419{,}75/150{,}5 = 2{,}64;$$

для эффекта *B*

$$F = s_B^2 / s_{\text{ош}}^2 = 870/150{,}5 = 5{,}62;$$

для эффекта C

$$F = s_C^2 / s_{\text{ош}}^2 = 446{,}92/150{,}5 = 2{,}88.$$

Табличное значение критерия Фишера для уровня значимости $p = 0{,}05$ и чисел степеней свободы сравниваемых дисперсий $f_1 = 3$ и $f_3 = 6$ $F_{0{,}95}(3{,}6) = 4{,}8$.

Сравнение полученных дисперсионных отношений с табличным значением критерия Фишера показывает, что влияние факторов A и C следует признать незначимым. Значимо влияет на процесс только фактор B, так как

$$F = s_B^2 / s_{\text{ош}}^2 > F_{\text{табл}}.$$

Проранжируем эффекты фактора B на разных уровнях при помощи множественного рангового критерия Дункана (см. гл. II, 14). Средние значения выхода полимера для различных типов растворителя:

Тип растворителя	b_1	b_2	b_3	b_4
$\bar{y}$	12,87	8,24	39,25	31,25

Расположим средние в порядке возрастания:

b_2	b_1	b_4	b_3
$\bar{y}_2 = 8{,}24$	$\bar{y}_1 = 12{,}87$	$\bar{y}_4 = 31{,}25$	$\bar{y}_3 = 39{,}25$

Дисперсия воспроизводимости $s_y^2 = 150{,}5$ с числом степеней свободы $f = 6$ (см. табл. на с. 101).

Определим нормированную ошибку среднего:

$$s_{\bar{y}} = \sqrt{150{,}5/4} = 6{,}13.$$

Выпишем из табл. 7 приложения значимые ранги для $p = 0{,}05$ и $f = 6$:

Ранги, r	3,46	3,58	3,64
$r \times s_{\bar{y}}$	21,4	21,9	22,3

Определив разницу между средними, оценим значимость различия между растворителями:

$$\bar{y}_3 - \bar{y}_2 = 39{,}25 - 8{,}24 = 31{,}01 > 22{,}3 \text{ — различие значимо}$$

$$\bar{y}_3 - \bar{y}_1 = 39{,}25 - 12{,}87 = 26{,}38 > 21{,}9 \text{ — различие значимо}$$

$$\bar{y}_3 - \bar{y}_4 = 39{,}25 - 31{,}25 = 8{,}00 < 21{,}4 \text{ — различие незначимо}$$

$$\bar{y}_4 - \bar{y}_2 = 31{,}25 - 8{,}24 = 23{,}01 > 21{,}9 \text{ — различие значимо}$$

$$\bar{y}_4 - \bar{y}_1 = 31{,}25 - 12{,}87 = 18{,}38 < 21{,}4 \text{ — различие незначимо}$$

$$\bar{y}_1 - \bar{y}_2 = 12{,}87 - 8{,}24 = 4{,}63 < 21{,}4 \text{ — различие незначимо}$$

Приведенный дисперсионный анализ справедлив в условиях линейной модели. Однако, не имея параллельных (повторных) наблюдений, нельзя проверить адекватность принятой линейной модели. Если в каждой ячейке латинского квадрата проделать одинаковое число параллельных опытов, это позволит оценить значимость взаимодействий между факторами. При этом наличие параллельных наблюдений используется только для оценки ошибки опыта. Если эффекты взаимодействия незначимы (линейная модель), то остаточная дисперсия незначимо отличается от

дисперсии случайности, обусловленной ошибкой опыта. При этом значимость линейных эффектов может быть легко проверена. Если же линейная модель неадекватна и существуют взаимодействия между факторами, невозможно оценить значимость линейных эффектов, так как все они смешаны с эффектами взаимодействия. В этом случае плодотворным может оказаться выдвижение дополнительных гипотез о незначимости некоторых взаимодействий.

Планирование эксперимента по латинскому квадрату позволяет ввести в исследование три фактора. Для четырех факторов хорошими свойствами обладает план эксперимента по схеме *греко-латинского квадрата.* Задача состоит в том, чтобы к трем исследуемым факторам, не меняя общего числа опытов n, добавить четвертый фактор D. Это удастся сделать, если найти такое расположение уровней факторов C и D, при котором в каждой строке и в каждом столбце имеются все n уровней фактора C и все n уровней фактора D и в то же время никакие два уровня факторов C и D не встречаются во всей таблице больше одного раза. Расположение такого типа называется *латинским квадратом второго порядка,* который получается комбинацией двух *ортогональных латинских квадратов.*

Рассмотрим следующие два латинских квадрата, составленных соответственно из латинских и греческих букв:

I					II				
A	B	C	D	E	α	β	γ	δ	ε
C	D	E	A	B	δ	ε	α	β	γ
E	A	B	C	D	β	γ	δ	ε	α
B	C	D	E	A	ε	α	β	γ	δ
D	E	A	B	C	γ	δ	ε	α	β

(III.102)

Если наложить эти два латинских квадрата один на другой и составить третий квадрат, каждая клетка которого содержит как латинскую, так и греческую букву соответствующих клеток исходных квадратов, то получим

$A\alpha$	$B\beta$	$C\gamma$	$D\delta$	$E\varepsilon$
$C\delta$	$D\varepsilon$	$E\alpha$	$A\beta$	$B\gamma$
$E\beta$	$A\gamma$	$B\delta$	$C\varepsilon$	$D\alpha$
$B\varepsilon$	$C\alpha$	$D\beta$	$E\gamma$	$A\delta$
$D\gamma$	$E\delta$	$A\varepsilon$	$B\alpha$	$C\beta$

(III.103)

В полученном квадрате каждая буква одного квадрата связана один и только один раз с каждой буквой другого квадрата. Такие два латинских квадрата называются ортогональными. Полученный квадрат второго порядка называют также греко-латинским квадратом. Задача о нахождении ортогональных латинских квадратов в комбинаторной математике еще полностью не решена. Доказано существование ортогональных латинских квадратов для $n=3$, 4, 5, 7, 8 и 9. Известно, что их нет для $n=6$. Для $n=6$ поэтому можно построить обычный латинский квадрат и нельзя построить квадрат второго порядка. Латинский квадрат для $n=10$ не исследован. Если имеется $k=n-1$ попарно ортогональных

латинских квадратов, то они образуют так называемую *полную систему ортогональных латинских квадратов*. Показано, что существуют полные системы латинских квадратов для $n=p$ (p — простое число) и $n=p^a$ (степени простого числа). Полную систему ортогональных латинских квадратов для $n=p$ (p — простое число) можно построить, используя поля Галуа. Построим, например, поле Галуа вычетов по модулю 5. Два целых числа a и b конгруэнтны по модулю 5; если $a-b=\lambda 5$, где λ — какое-либо целое число, это можно записать в виде

$$a \equiv b \pmod 5. \qquad \text{(III.104)}$$

Конгруэнция (III.104) определяет поле. В этом поле содержится пять различных элементов 0, 1, 2, 3, 4. Составим таблицу сложения и таблицу умножения в этом поле:

Сложение					Умноженне			
0	1	2	3	4	1	2	3	4
1	2	3	4	0	2	4	1	3
2	3	4	0	1	3	1	4	2
3	4	0	1	2	4	3	2	1
4	0	1	2	3				

(III.105)

Рассмотрим латинский квадрат, образованный таблицей сложения. Если в этом квадрате заменить p-ю строку, начинающуюся с элемента p ($p=0$, 1, 2, 3, 4), строкой, полученной прибавлением (по модулю 5) к элементам первой строки первого квадрата числа $p\times 2$, получим второй квадрат:

$k=2$

$2\times 0=0$	0	0	1	2	3	4
$2\times 1=2$	2	2	3	4	0	1
$2\times 2=4$	4	4	0	1	2	3
$2\times 3=1$	1	1	2	3	4	0
$2\times 4=3$	3	3	4	0	1	2

(III.106)

Для получения p-й строки третьего и четвертого латинских квадратов прибавляют (по модулю 5) к элементам первой строки первого квадрата соответственно числа $p\times 3$ и $p\times 4$:

$k=3$

$3\times 0=0$	0	0 1 2 3 4
$3\times 1=3$	3	3 4 0 1 2
$3\times 2=1$	1	1 2 3 4 0
$3\times 3=4$	4	4 0 1 2 3
$3\times 4=2$	2	2 3 4 0 1

$k=4$

$4\times 0=0$	0	0 1 2 3 4
$4\times 1=4$	4	4 0 1 2 3
$4\times 2=3$	3	3 4 0 1 2
$4\times 3=2$	2	2 3 4 0 1
$4\times 4=1$	1	1 2 3 4 0

(III.107)

Таким образом, получили полную систему ортогональных латинских квадратов.

Таблица 16. **Греко-латинские квадраты**

3×3

A	B		
	b_1	b_2	b_3
a_1	c_1 d_1	c_2 d_2	c_3 d_3
a_2	c_2 d_3	c_3 d_1	c_1 d_2
a_3	c_3 d_2	c_1 d_3	c_2 d_1

4×4

A	B			
	b_1	b_2	b_3	b_4
a_1	c_1 d_1	c_2 d_2	c_3 d_3	c_4 d_4
a_2	c_2 d_3	c_1 d_4	c_4 d_1	c_3 d_2
a_3	c_3 d_4	c_4 d_3	c_1 d_2	c_2 d_1
a_4	c_4 d_2	c_3 d_1	c_2 d_4	c_1 d_3

5×5

A	B				
	b_1	b_2	b_3	b_4	b_5
a_1	c_1 d_1	c_2 d_2	c_3 d_3	c_4 d_4	c_5 d_5
a_2	c_3 d_4	c_4 d_5	c_5 d_1	c_1 d_2	c_2 d_3
a_3	c_5 d_2	c_1 d_3	c_2 d_4	c_3 d_5	c_4 d_1
a_4	c_2 d_5	c_3 d_1	c_4 d_2	c_5 d_3	c_1 d_4
a_5	c_4 d_3	c_5 d_4	c_1 d_5	c_2 d_1	c_3 d_2

Планирование эксперимента по схеме греко-латинского квадрата применяется для четырех факторов. Число уровней для всех факторов должно быть одинаково. В табл. 16 приведены греко-латинские квадраты размерности 3×3, 4×4 и 5×5.

Греко-латинский квадрат является частью четырехфакторного плана — по схеме греко-латинского квадрата вводятся в план эксперимента факторы C и D. Например, в последнем плане (табл. 16) уровни фактора C соответствуют латинским, а уровни фактора D — греческим буквам греко-латинского квадрата (III.103): $A - c_1$, $B - c_2$, $C - c_3$, $D - c_4$, $E - c_5$ и $\alpha - d_1$, $\beta - d_2$, $\gamma - d_3$, $\delta - d_4$, $\varepsilon - d_5$. Однако принято греко-латинским квадратом называть весь четырехфакторный план (табл. 16). Матрица планирования, соответствующая греко-латинскому квадрату 3×3, приведена в табл. 17.

Таблица 17. **План эксперимента $n = 3$, $N = 9$**

Номер опыта	A	B	C	D	y	Номер опыта	A	B	C	D	y
1	a_1	b_1	c_1	d_1	y_1	6	a_2	b_3	c_1	d_2	y_6
2	a_1	b_2	c_2	d_2	y_2	7	a_3	b_1	c_3	d_2	y_7
3	a_1	b_3	c_3	d_3	y_3	8	a_3	b_2	c_1	d_3	y_8
4	a_2	b_1	c_2	d_3	y_4	9	a_3	b_3	c_2	d_1	y_9
5	a_2	b_2	c_3	d_1	y_5						

Таблица 18. **Гипер-греко-латинский квадрат четвертого порядка**

A	B				
	0	1	2	3	4
0	$C = 0$ $D = 0$ $E = 0$ $F = 0$	$C = 1$ $D = 1$ $E = 1$ $F = 1$	$C = 2$ $D = 2$ $E = 2$ $F = 2$	$C = 3$ $D = 3$ $E = 3$ $F = 3$	$C = 4$ $D = 4$ $E = 4$ $F = 4$
1	$C = 1$ $D = 2$ $E = 3$ $F = 4$	$C = 2$ $D = 3$ $E = 4$ $F = 0$	$C = 3$ $D = 4$ $E = 0$ $F = 1$	$C = 4$ $D = 0$ $E = 1$ $F = 2$	$C = 0$ $D = 1$ $E = 2$ $F = 3$
2	$C = 2$ $D = 4$ $E = 1$ $F = 3$	$C = 3$ $D = 0$ $E = 2$ $F = 4$	$C = 4$ $D = 1$ $E = 3$ $F = 0$	$C = 0$ $D = 2$ $E = 4$ $F = 1$	$C = 1$ $D = 3$ $E = 0$ $F = 2$
3	$C = 3$ $D = 1$ $E = 4$ $F = 2$	$C = 4$ $D = 2$ $E = 0$ $F = 3$	$C = 0$ $D = 3$ $E = 1$ $F = 4$	$C = 1$ $D = 4$ $E = 2$ $F = 1$	$C = 2$ $D = 0$ $E = 3$ $F = 2$
4	$C = 4$ $D = 3$ $E = 2$ $F = 1$	$C = 0$ $D = 4$ $E = 3$ $F = 2$	$C = 1$ $D = 0$ $E = 4$ $F = 3$	$C = 2$ $D = 1$ $E = 0$ $F = 4$	$C = 3$ $D = 2$ $E = 1$ $F = 0$

В греко-латинском квадрате имеется n^2 различных комбинаций уровней факторов вместо n^4 комбинаций полного четырехфакторного эксперимента. Поэтому греко-латинский квадрат представляет собой $1/n^2$ реплику от полного факторного эксперимента (ПФЭ). Так, приведенный в табл. 16 греко-латинский квадрат 3×3 представляет собой 1/9 реплику от ПФЭ 3^4 ($N=81$), греко-латинский квадрат $4\times4-1/16$ реплику от ПФЭ 4^4 ($N=256$), $5\times5-1/25$ реплику от ПФЭ 5^4 ($N=625$).

Дисперсионный анализ греко-латинского квадрата проводится так же, как и анализ обычного латинского квадрата, с учетом четвертого фактора D (греческая буква). Сумма квадратов для греческой буквы имеет число степеней свободы $n-1$. Число степеней свободы остаточной суммы, определяемой, как и ранее, в виде разности между общей суммой квадратов и суммами квадратов всех факторов, равна $(n-1)(n-3)$. Если наложить друг на друга три ортогональных латинских квадрата, получим латинский квадрат третьего порядка, n ортогональных квадратов — латинский квадрат n-го порядка. Полученные квадраты называют также гипер-греко-латинскими квадратами.

При n уровнях в план можно ввести $n+1$ фактор. Число степеней свободы остаточной суммы при этом будет равно нулю. Такие планы называются насыщенными. Построим насыщенный план для $n=5$. Наложим для этого друг на друга четыре полученных ортогональных латинских квадрата 5×5 [см. (III.105)—(III.108)], составляющих полный ряд ортогональных латинских квадратов 5×5 (табл. 18). Исходный латинский квадрат (III.105) соответствует уровням фактора C, второй квадрат (III.106) — уровням фактора D и т. д. Уровни факторов обозначены цифрами. Соответствующий план эксперимента для шести факторов приведен в табл. 19.

Полученный план является насыщенным, так как число степеней свободы остаточной суммы, определяемое по формуле $f=(n-1)(n-k+1)$, где k — число изучаемых факторов, равно нулю.

План представляет собой 1/625 реплику от ПФЭ 5^6. Такие планы обычно применяют на первых стадиях исследования процесса, когда при-

Таблица 19. **План эксперимента $n=5$, $N=25$**

Номер опыта	A	B	C	D	E	F	Номер опыта	A	B	C	D	E	F
1	0	0	0	0	0	0	14	2	3	0	2	4	1
2	0	1	1	1	1	1	15	2	4	1	3	0	2
3	0	2	2	2	2	2	16	3	0	3	1	4	2
4	0	3	3	3	3	3	17	3	1	4	2	0	3
5	0	4	4	4	4	4	18	3	2	0	3	1	4
6	1	0	1	2	3	4	19	3	3	1	4	2	0
7	1	1	2	3	4	0	20	3	4	2	0	3	1
8	1	2	3	4	0	1	21	4	0	4	3	2	1
9	1	3	4	0	1	2	22	4	1	0	4	3	2
10	1	4	0	1	2	3	23	4	2	1	0	4	3
11	2	0	2	4	1	3	24	4	3	2	1	0	4
12	2	1	3	0	2	4	25	4	4	3	2	1	0
13	2	2	4	1	3	0							

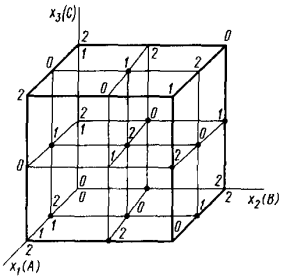


Рис. 22. Латинский куб первого порядка

ходится проводить сложный перебор качественных факторов с тем, чтобы выделить перспективные комбинации для дальнейшего исследования и отсеять неприемлемые. Использование греко-латинских и гипергреко-латинских квадратов в качестве планов эксперимента одновременно дает экономию в числе наблюдений и приводит к упрощению вычислений.

Основным допущением, лежащим в основе применения греко-латинского квадрата и квадратов высших порядков, является предположение об отсутствии взаимодействий между факторами. Проверить адекватность принятой линейной модели, как и при применении латинских квадратов, можно только при наличии параллельных опытов.

5. Латинские кубы. Полному факторному эксперименту для трех факторов $n^3 (n > 2)$ соответствует кубическое расположение из n элементов, включающее n^3 позиций. Трем ребрам куба соответствуют факторы A, B и C с уровнями 0, 1, 2, ..., $n-1$ (рис. 22). Если ввести в план четвертый фактор D и уровни этого фактора (0, 1, 2, ..., $n-1$) разместить в соответствующих опытам точках кубического расположения, то получится латинский куб размера n первого порядка.

Латинским кубом размера n первого порядка называют кубическую таблицу из n элементов, расположенных в n^3 позициях, в которую каждый элемент входит n^2 раз и встречается в каждой из $3n$ плоскостей, параллельных координатным плоскостям x_1ox_2, x_1ox_3, x_2ox_3, одинаковое для всех элементов и равное n число раз. Действительно, уровни дополнительного фактора D (элементы латинского куба) встречаются в плане одинаковое и равное n^2 число раз и встречаются в каждой из $3n$ координатных плоскостей (т. е. с уровнями трех факторов A, B, C) одинаковое и равное n число раз (табл. 20).

Таблица 20. **3×3×3 латинский куб первого порядка**

$C = 0$

A	B		
	0	1	2
0	0	1	2
1	2	0	1
2	1	2	0

$C = 1$

A	B		
	0	1	2
0	2	0	1
1	1	2	0
2	0	1	2

$C = 2$

A	B		
	0	1	2
0	1	2	0
1	0	1	2
2	2	0	1

Соответствующая матрица планирования для латинского куба с размерами $n=3$, $r=1$ приведена в табл. 21.

Планирование эксперимента по латинскому кубу первого порядка позволяет включить в рассмотрение четыре фактора (A, B, C и D). Отличие от греко-латинского квадрата, который тоже дает возможность изу-

Таблица 21. **Плаи эксперимента $n=3$, $N=27$**

Номер опыта	A	B	C	D	y	Номер опыта	A	B	C	D	y
1	0	0	0	0	y_1	15	1	2	1	0	y_{15}
2	0	1	0	1	y_2	16	2	0	1	0	y_{16}
3	0	2	0	2	y_3	17	2	1	1	1	y_{17}
4	1	0	0	0	y_4	18	2	2	1	2	y_{18}
5	1	1	0	1	y_5	19	0	0	2	1	y_{19}
6	1	2	0	1	y_6	20	0	1	2	2	y_{20}
7	2	0	0	2	y_7	21	0	2	2	0	y_{21}
8	2	1	0	2	y_8	22	1	0	2	0	y_{22}
9	2	2	0	0	y_9	23	1	1	2	1	y_{23}
10	0	0	1	2	y_{10}	24	1	2	2	2	y_{24}
11	0	1	1	0	y_{11}	25	2	0	2	2	y_{25}
12	0	2	1	1	y_{12}	26	2	1	2	0	y_{26}
13	1	0	1	1	y_{13}	27	2	2	2	1	y_{27}
14	1	1	1	2	y_{14}						

чать влияние четырех факторов, состоит в том, что в латинском кубе три фактора (A, B и C) считаются главными и один фактор (D) составляет элиминирующую группировку, а в греко-латинском квадрате главными считаются два фактора A и B, а C и D составляют двойную элиминирующую группировку. Число опытов в кубе в n раз больше, чем в греко-латинском квадрате. Латинский куб без повторных опытов применяется в предположении линейной модели процесса:

$$y_{ijql} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_q + \delta_l + \varepsilon_{ijql}, \qquad \text{(III.108)}$$

где μ — общее среднее; α_i — эффект фактора A на i-м уровне, $i=0, 1, 2, \ldots, n-1$; β_j — эффект фактора B на j-м уровне, $j=0, 1, 2, \ldots, n-1$; γ_q — эффект фактора C на q-м уровне, $q=0, 1, 2, \ldots, n-1$; δ_l — эффект фактора D на l-м уровне; ε_{ijql} — случайная ошибка эксперимента.

Статистический анализ латинского куба первого порядка без повторных опытов удобно проводить по следующему алгоритму. Определяют: 1) итоги для всех факторов на каждом уровне:

$$A_i\ (i=0, 1, 2, \ldots, n-1), \quad B_j\ (j=0, 1, 2, \ldots, n-1),$$
$$C_q\ (q=0, 1, 2, \ldots, n-1), \quad D_l\ (l=0, 1, 2, \ldots, n-1).$$

Применительно, например, к плану, приведенному в табл. 21, имеем

$$A_0 = y_1 + y_2 + y_3 + y_{10} + y_{11} + y_{12} + y_{19} + y_{20} + y_{21},$$
$$A_1 = y_4 + y_5 + y_6 + y_{13} + y_{14} + y_{15} + y_{22} + y_{23} + y_{24},$$
$$A_2 = y_7 + y_8 + y_9 + y_{16} + y_{17} + y_{18} + y_{25} + y_{26} + y_{27},$$
$$B_0 = y_1 + y_4 + y_7 + y_{10} + y_{13} + y_{16} + y_{19} + y_{22} + y_{25},$$
$$B_1 = y_2 + y_5 + y_8 + y_{11} + y_{14} + y_{17} + y_{20} + y_{23} + y_{26},$$
$$B_2 = y_3 + y_6 + y_9 + y_{12} + y_{15} + y_{18} + y_{21} + y_{24} + y_{27},$$
$$C_0 = y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 + y_7 + y_8 + y_9,$$
$$C_1 = y_{10} + y_{11} + y_{12} + y_{13} + y_{14} + y_{15} + y_{16} + y_{17} + y_{18},$$

$$C_2 = y_{19} + y_{20} + y_{21} + y_{22} + y_{23} + y_{24} + y_{25} + y_{26} + y_{27},$$

$$D_0 = y_1 + y_5 + y_9 + y_{11} + y_{15} + y_{16} + y_{21} + y_{22} + y_{26},$$

$$D_1 = y_2 + y_6 + y_7 + y_{12} + y_{13} + y_{17} + y_{19} + y_{23} + y_{27},$$

$$D_2 = y_3 + y_4 + y_8 + y_{10} + y_{14} + y_{18} + y_{20} + y_{24} + y_{25};$$

2) сумму квадратов всех наблюдений

$$SS_1 = \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{q=0}^{n-1} (y_{ijql})^2; \qquad \text{(III.109)}$$

3) сумму квадратов итогов по фактору A, деленную на n^2,

$$SS_2 = \frac{1}{n^2} \sum_{i=0}^{n-1} A_i^2; \qquad \text{(III.110)}$$

4) сумму квадратов итогов по фактору B, деленную на n^2,

$$SS_3 = \frac{1}{n^2} \sum_{j=0}^{n-1} B_j^2; \qquad \text{(III.111)}$$

5) сумму квадратов итогов по фактору C, деленную на n^2,

$$SS_4 = \frac{1}{n^2} \sum_{q=0}^{n-1} C_q^2; \qquad \text{(III.112)}$$

6) сумму квадратов итогов по фактору D, деленную на n^2,

$$SS_5 = \frac{1}{n^2} \sum_{l=0}^{n-1} D_l^2; \qquad \text{(III.113)}$$

7) корректирующий член, равный квадрату общего итога, деленному на число всех наблюдений,

$$SS_6 = \frac{1}{n^3} \left(\sum_{i=0}^{n-1} A_i \right)^2 = \frac{1}{n^3} \left(\sum_{j=0}^{n-1} B_j \right)^2 = \frac{1}{n^3} \left(\sum_{q=0}^{n-1} C_q \right)^2 =$$

$$= \frac{1}{n^3} \left(\sum_{l=0}^{n-1} D_l \right)^2; \qquad \text{(III.114)}$$

8) общую сумму квадратов, равную разнице между суммой квадратов всех наблюдений и корректирующим членом,

$$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_6; \qquad \text{(III.115)}$$

9) сумму квадратов, обусловленную фактором A,

$$SS_A = SS_2 - SS_6; \qquad \text{(III.116)}$$

10) сумму квадратов, обусловленную фактором B,

$$SS_B = SS_3 - SS_6; \qquad \text{(III.117)}$$

11) сумму квадратов, обусловленную фактором C,

$$SS_C = SS_4 - SS_6; \qquad \text{(III.118)}$$

12) сумму квадратов, обусловленную фактором D,

$$SS_D = SS_5 - SS_6; \qquad \text{(III.119)}$$

13) остаточную сумму квадратов

$$SS_{\text{ост}} = SS_{\text{общ}} - (SS_A + SS_B + SS_C + SS_D). \qquad \text{(III.120)}$$

Результаты расчета представляют в виде таблицы дисперсионного анализа (табл. 22).

Таблица 22. **Дисперсионный анализ для латинского куба первого порядка (без повторных опытов)**

Источник дисперсии	Число степеней свободы	Сумма квадратов	Средний квадрат	Математическое ожидание среднего квадрата
Фактор A	$n-1$	SS_A	$\frac{SS_A}{n-1}$	$n\sigma_A^2 + \sigma_{\text{ош}}^2$
Фактор B	$n-1$	SS_B	$\frac{SS_B}{n-1}$	$n\sigma_B^2 + \sigma_{\text{ош}}^2$
Фактор C	$n-1$	SS_C	$\frac{SS_C}{n-1}$	$n\sigma_C^2 + \sigma_{\text{ош}}^2$
Фактор D	$n-1$	SS_D	$\frac{SS_D}{n-1}$	$n\sigma_D^2 + \sigma_{\text{ош}}^2$
Остаток	$n^3 - 4n + 3$	$SS_{\text{ост}}$	$\frac{SS_{\text{ост}}}{n^3 - 4n + 3}$	$\sigma_{\text{ош}}^2$
Итого	$n^3 - 1$	$SS_{\text{общ}}$		

Два латинских куба размера n первого порядка ортогональны, если при наложении их друг на друга каждый элемент одного куба встречается с каждым элементом другого куба n раз. Два таких ортогональных куба, наложенные друг на друга, представляют *греко-латинский куб размера n первого порядка.* Планирование по схеме греко-латинского куба первого порядка позволяет ввести в эксперимент пятый фактор. Если совместить три ортогональных латинских куба и более, то получится *гипер-греко-латинский куб.* Полная система ортогональных латинских кубов размера n первого порядка, составляющих полностью ортогональный гипер-греко-латинский куб, не может включать более $n^2 + n - 2$ кубов. Существование таких систем доказано для n, представляющего собой простое число или целую положительную степень простого числа.

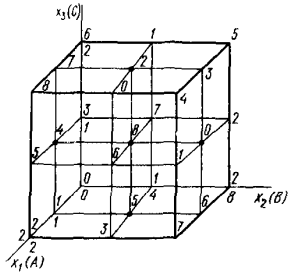


Рис. 23. Латинский куб второго порядка

В латинских кубах первого порядка все факторы устанавливаются на одинаковом количестве уровней, равном n — размеру куба, и все линейные эффекты определяются с одинаковой точностью, максимальной для данного числа опытов. В латинском кубе второго порядка один фактор устанавливается на n^2-уровнях, а все остальные факторы — на n-уровнях. На рис. 23 изображен латинский куб размера $n=3$ второго порядка. Факторы A, B, C имеют три уровня: 0, 1, 2, а фактор D — девять уровней: 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, расположенных по схеме латинского куба (табл. 23).

Планирование по схеме латинского куба может быть очень полезно на первых этапах исследования процесса при выборе оптимальной комбинации качественных факторов.

Таблица 23. **Латинский куб второго порядка ($n=3$, $r=2$)**

$C=0$

A \ B	0	1	2
0	0	4	8
1	1	5	6
2	2	3	7

$C=1$

A \ B	0	1	2
0	3	7	2
1	4	8	0
2	5	6	1

$C=2$

A \ B	0	1	2
0	6	1	5
1	7	2	3
2	8	0	4

Пример 4. Латинский куб второго порядка был использован при разработке композиций нового полимерного материала на основе полиэтилена высокого давления, обладающего повышенной жесткостью и способностью перерабатываться методом термоформования. Рассматривалась трехкомпонентная система: ПЭВД, наполнитель, эластифицирующая добавка. Изучались свойства композиций с тремя видами эластифицирующих систем, девятью типами наполнителей, в которых менялись на трех уровнях количество добавок и количество наполнителя. Тип добавки x_1: СКЭП (1); ИСТ-30 (2); ДСТ-30 (3); количество добавки x_2,%: 3 (1); 5 (2); 10 (3); количество наполнителя x_3,%: 5 (1); 10 (2); 15 (3); тип наполнителя x_4: тальк — Т(0); аэросил — А(1); слюда — С(2); Т : А = 1 : 1(3); Т : А = 1 : 0,5(4); Т : А = 0,5 : 1(5); А : С = 1 : 1(6); А : С = 1 : 0,5(7); А : С = 0,5 : 1(8).

Опыты проводились в лабораторных условиях. Пригодность разрабатываемого пластического материала к переработке и эксплуатации оценивалась по четырем показателям: y_1 — модуль упругости при изгибе, МПа; y_2 — разрушающее напряжение при разрыве, МПа; y_3 — относительное удлинение при разрыве, %; D — обобщенный безразмерный критерий качества (обобщенная функция желательности).

Решение. План эксперимента и результаты испытаний образцов приведены в табл. 24 (см. также табл. 23).

Для выделения факторов, существенно влияющих на показатели качества, был проведен дисперсионный анализ результатов в предположении линейной математической модели (III.108). Дисперсионный анализ проводился в следующем порядке. Для четырех показателей качества y_1, y_2, y_3 и D подсчитывались: 1) итоги для каждого фактора на всех уровнях (табл. 25):

$$X_{1i}\,(i=0,\ 1,\ 2),\ X_{2j}\,(j=0,\ 1,\ 2),\ X_{3q}\,(q=0,\ 1,\ 2),\ X_{4l}\,(l=0,\ 1,\ 2,\ \ldots,\ 8);$$

Таблица 24. **Латинский куб второго порядка**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	$y_1 \cdot 10^{-1}$, МПа	$y_2 \cdot 10^{-1}$, МПа	y_3, %	D
1	0	0	0	0	364	117	483	0,645
2	0	1	0	4	365	118	504	0,647
3	0	2	0	8	367	99	447	0,610
4	1	0	0	1	470	134	447	0,810
5	1	1	0	5	352	122	480	0,650
6	1	2	0	6	324	112	452	0,550
7	2	0	0	2	434	96	456	0,686
8	2	1	0	3	355	126	493	0,638
9	2	2	0	7	354	127	477	0,638
10	0	0	1	3	476	112	376	0,759
11	0	1	1	7	464	96	241	0,650
12	0	2	1	2	484	66	90	0,381
13	1	0	1	4	502	99	386	0,732
14	1	1	1	8	547	104	69	0,440
15	1	2	1	0	320	89	407	0,491
16	2	0	1	5	464	126	361	0,773
17	2	1	1	6	535	110	104	0,248
18	2	2	1	1	431	143	402	0,768
19	0	0	2	6	615	101	69	0,210
20	0	1	2	1	615	129	28	0,350
21	0	2	2	5	572	94	205	0,668
22	1	0	2	7	593	114	25	0,430
23	1	1	2	2	501	85	36	0,304
24	1	2	2	3	482	114	108	0,530
25	2	0	2	8	610	96	36	0,340
26	2	1	2	0	605	102	69	0,445
27	2	2	2	4	558	120	231	0,743

Таблица 25. **Итоги по разным уровням факторов**

Отклики	Добавки (x_1)			Количество добавки (x_2)			Количество наполнителя (x_3)		
	0	1	2	0	1	2	0	1	2
y_1	4322	4091	4346	4528	4339	3892	3385	4223	5151
y_2	932	973	1046	995	992	964	1050	945	955
y_3	2443	2410	2629	2639	2024	2819	4239	2436	807
D	4,937	4,920	5,279	5,382	4,320	4,986	3.627	5,238	5,877

Продолжение табл. 25

Отклики	Наполнители (x_4)								
	0	1	2	3	4	5	6	7	8
y_1	1289	1516	1419	1313	1425	1388	1474	1411	1524
y_2	308	406	247	352	337	342	323	337	299
y_3	959	877	582	977	1121	1046	625	743	552
D	1,581	1,929	1,371	1,926	1,725	1,911	1,008	1,719	1,389

2) сумма квадратов всех наблюдений

$$SS_1 = \sum_{i=0}^{2} \sum_{j=0}^{2} \sum_{q=0}^{2} y_{ijql}^2;$$

например, для модуля упругости при изгибе y_1

$$SS_1 = 364^2 + 365^2 + \cdots + 558^2 = 6\,275\,327;$$

3) сумма квадратов итогов по фактору x_1, деленная на n^2,

$$SS_2 = \frac{\sum_{i=0}^{2} X_{1i}^2}{n^2}.$$

Так, для показателя y_1 (табл. 25)

$$SS_2 = \frac{4322^2 + 4091^2 + 4346^2}{9} = 6\,033\,742.$$

Таким же образом определялись эти величины для остальных факторов:

$$4) \quad SS_3 = \frac{\sum_{j=0}^{2} X_{2j}^2}{n^2};$$

например, для y_1 (табл. 25)

$$SS_3 = \frac{4528^2 + 4339^2 + 3892^2}{9} = 6\,053\,041;$$

$$5) \quad SS_4 = \frac{\sum_{q=0}^{2} X_{3q}^2}{9};$$

например, для y_1 (табл. 25)

$$SS_4 = \frac{3385^2 + 4223^2 + 5151^2}{9} = 6\,202\,750;$$

$$6) \quad SS_5 = \frac{\sum_{l=0}^{8} X_{4l}^2}{3};$$

например, для y_1 (табл. 25)

$$SS_5 = \frac{1289^2 + 1516^2 + 1419^2 + \cdots + 1524^2}{3} = 6\,046\,886;$$

7) корректирующий член, равный квадрату общего итога, деленному на число опытов,

$$SS_6 = \frac{1}{n^3}\left(\sum_{i=0}^{3} X_{1i}\right)^2 = \frac{1}{n^3}\left(\sum_{j=0}^{2} X_{2j}\right)^2 = \frac{1}{n^3}\left(\sum_{q=0}^{3} X_{3q}\right)^2 = \frac{1}{n^3}\left(\sum_{l=0}^{8} X_{4l}\right)^2;$$

например, для y_1 (табл. 25)

$$SS_6 = \frac{(4322 + 4091 + 4346)^2}{27} = \frac{(4528 + 4339 + 3892)^2}{27} =$$

$$= \frac{(1289 + \cdots + 1524)^2}{27} = 6\,029\,336.$$

Далее определялись суммы квадратов для всех источников дисперсии

8) $SS_{x_1} = SS_2 - SS_6$;

например, для y_1

$$SS_{x_1} = 6\,033\,742 - 6\,029\,336 = 4406;$$

9) $SS_{x_2} = SS_3 - SS_6$;

например, для y_1

$$SS_{x_2} = 6\,053\,041 - 6\,029\,336 = 23\,705;$$

10) $SS_{x_3} = SS_4 - SS_6$;

например, для y_1

$$SS_{x_3} = 6\,202\,750 - 6\,029\,336 = 173\,414;$$

11) $SS_{x_4} = SS_5 - SS_6$;

например, для y_1

$$SS_{x_4} = 6\,046\,886 - 6\,029\,336 = 17\,547;$$

12) общая сумма квадратов равна разности между суммой квадратов всех наблюдений и корректирующим членом:

$$SS_{\text{общ}} = SS_1 - SS_6;$$

например, для y_1

$$SS_{\text{общ}} = 6\,275\,327 - 6\,029\,336 = 245\,991;$$

13) остаточная сумма квадратов служит для оценки ошибки эксперимента

$$SS_{\text{ост}} = SS_{\text{общ}} - (SS_{x_1} + SS_{x_2} + SS_{x_3} + SS_{x_4});$$

например, для y_1

$$SS_{\text{ост}} = 245\,991 - (4406 + 23\,705 + 17\,341 + 17\,547) = 26\,919.$$

Результаты дисперсионного анализа для всех четырех показателей качества представлены в таблице.

Свойство	Источник дисперсии	Число степеней свободы	Сумма квадратов	Средний квадрат	Проверка значимости
y_1	x_1	2	4 406	2 203	$F_1 = \frac{s^2_{x_1}}{s^2_{\text{ош}}} < 1$
	x_2	2	23 705	11 853	$F_2 = s^2_{x_2} / s^2_{\text{ош}} = 5{,}284$
	x_3	2	173 414	86 707	$F_3 = s^2_{x_3} / s^2_{\text{ош}} = 38{,}657$
	x_4	8	17 547	2 193	$F_4 = s^2_{x_4} / s^2_{\text{ош}} < 1$
	Ошибка	12	26 919	2 243	
	Общая сумма	26	245 991		
y_2	x_1	2	741	370	$F_1 = s^2_{x_1} / s^2_{\text{ош}} = 4{,}625$
	x_2	2	65	33	$F_2 = s^2_{x_2} / s^2_{\text{ош}} < 1$
	x_3	2	761	381	$F_3 = s^2_{x_3} / s^2_{\text{ош}} = 4{,}763$
	x_4	8	4 949	619	$F_4 = s^2_{x_4} / s^2_{\text{ош}} = 7{,}730$
	Ошибка	12	964	80	
	Общая сумма	26	7 480		

Продолжение

Свойство	Источник дисперсии	Число степеней свободы	Сумма квадратов	Средний квадрат	Проверка значимости
y_3	x_1	2	3 098	1 549	$F_1 = s^2_{x_1} / s^2_{ош} < 1$
	x_2	2	38 617	19 309	$F_2 = s^2_{x_2} / s^2_{ош} = 3{,}838$
	x_3	2	654 929	327 465	$F_3 = s^2_{x_3} / s^2_{ош} = 65{,}089$
	x_4	8	120 054	15 007	$F_4 = s^2_{x_4} / s^2_{ош} = 2{,}983$
	Ошибка	12	60 375	5 031	
	Общая сумма	26	877 073		
D	x_1	2	0	0	$F_1 < 1$
	x_2	2	0,058	0,029	$F_1 = 2{,}636$
	x_3	2	0,299	0,150	$F_3 = 13{,}636$
	x_4	8	0,307	0,154	$F_4 = 14{,}00$
	Ошибка	12	0,130	0,011	
	Общая сумма	26	0,794		

Для выбора оптимальной композиции эффекты факторов на разных уровнях были сопоставлены при помощи множественного рангового критерия Дункана (см. табл. 7 приложения). При этом поскольку тип добавки (x_1) значимо влияет только на y_2 (см. таблицу), была выбрана добавка, обеспечивающая максимальную прочность при изгибе. Ошибка среднего значения y_2 равна

$$s_{\bar{y}_2} = \sqrt{s^2_{ош}/9} = \sqrt{80/9} = 2{,}99.$$

Средние значения y_2 для уровней фактора x_1	$\bar{y}_2^{(0)} = 104$	$\bar{y}_2^{(1)} = 108$	$\bar{y}_2^{(2)} = 116$
Ранги, r		3,08	3,23
$r \times s_{\bar{y}_2}$		9,2	9,7

$$\bar{y}_2^{(2)} - \bar{y}_2^{(0)} = 12 > 9{,}7 \text{ — различие значимо}$$

$$\bar{y}_2^{(2)} - \bar{y}_2^{(1)} = 8 < 9{,}2 \text{ — различие незначимо}$$

$$\bar{y}_2^{(1)} - \bar{y}_2^{(0)} = 4 < 9{,}2 \text{ — различие незначимо}$$

Была выбрана добавка типа ДСТ-30. Этот тип добавки существенно отличается от добавки типа СКЭП и незначимо от ИСТ-30.

В связи с тем, что факторы x_3, x_2 и x_4 по-разному влияют на показатели качества (табл. 25), оптимальная композиция была выбрана на основании факторного анализа обобщенной функции желательности D. Была определена ошибка среднего значения D: для факторов x_2 и x_3

$$s_{\bar{D}} = \sqrt{0{,}011/9} = 0{,}035,$$

для фактора x_4

$$s_{\bar{D}} = \sqrt{0{,}011/3} = 0{,}061.$$

Уровни фактора x_2	1	2	0
Средние значения D	0,480	0,554	0,598
Ранги, r		3,08	3,23
$r \times s_{\bar{D}}$		0,107	0,113

$\overline{D}^{(0)} - \overline{D}^{(1)} = 0,118 > 0,113$ — различие значимо

$\overline{D}^{(0)} - \overline{D}^{(2)} = 0,044 < 0,107$ — различие незначимо

$\overline{D}^{(2)} - \overline{D}^{(1)} = 0,074 < 0,107$ — различие незначимо

Уровни фактора x_3	0	1	2
Средние значения D	0,403	0,582	0,653

$\overline{D}^{(2)} - \overline{D}^{(0)} = 0,250 > 0,113$ — различие значимо

$\overline{D}^{(2)} - \overline{D}^{(1)} = 0,071 < 0,107$ — различие незначимо

$\overline{D}^{(1)} - \overline{D}^{(0)} = 0,179 > 0,107$ — различие значимо

Уровни фактора x_4	6	2	8	0	7	4	3	1	5
Средние значения D	0,336	0,457	0,463	0,527	0,573	0,575	0,642	0,643	0,697
Ранги, r		3,08	3,23	3,33	3,36	3,40	3,42	3,44	3,44
$r \times s_{\overline{D}}$		0,187	0,197	0,201	0,205	0,208	0,209	0,210	0,220

$\overline{D}^{(5)} - \overline{D}^{(6)} = 0,331 > 0,210$ — различие значимое

$\overline{D}^{(5)} - \overline{D}^{(2)} = 0,240 > 0,210$ — различие значимое

$\overline{D}^{(5)} - \overline{D}^{(8)} = 0,234 > 0,209$ — различие значимое

$\overline{D}^{(5)} - \overline{D}^{(0)} = 0,170 < 0,208$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(5)} - \overline{D}^{(7)} = 0,124 < 0,205$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(5)} - \overline{D}^{(4)} = 0,122 < 0,201$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(5)} - \overline{D}^{(3)} = 0,055 < 0,197$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(5)} - \overline{D}^{(1)} = 0,054 < 0,187$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(1)} - \overline{D}^{(6)} = 0,307 > 0,210$ — различие значимое

$\overline{D}^{(1)} - \overline{D}^{(2)} = 0,186 < 0,209$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(1)} - \overline{D}^{(8)} = 0,180 < 0,208$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(1)} - \overline{D}^{(0)} = 0,116 < 0,205$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(1)} - \overline{D}^{(7)} = 0,070 < 0,201$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(1)} - \overline{D}^{(4)} = 0,068 < 0,197$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(1)} - \overline{D}^{(3)} = 0,001 < 0,187$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(3)} - \overline{D}^{(6)} = 0,306 > 0,209$ — различие значимое

$\overline{D}^{(3)} - \overline{D}^{(2)} = 0,185 < 0,208$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(3)} - \overline{D}^{(8)} = 0,179 < 0,205$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(3)} - \overline{D}^{(0)} = 0,115 < 0,201$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(3)} - \overline{D}^{(7)} = 0,069 < 0,197$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(3)} - \overline{D}^{(4)} = 0,067 < 0,187$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(4)} - \overline{D}^{(6)} = 0,239 > 0,208$ — различие значимое

$\overline{D}^{(4)} - \overline{D}^{(2)} = 0,118 < 0,205$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(4)} - \overline{D}^{(8)} = 0,112 < 0,201$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(4)} - \overline{D}^{(0)} = 0,048 < 0,197$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(4)} - \overline{D}^{(7)} = 0,002 < 0,187$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(7)} - \overline{D}^{(6)} = 0,237 > 0,205$ — различие значимое

$\overline{D}^{(7)} - \overline{D}^{(2)} = 0,116 < 0,201$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(7)} - \overline{D}^{(8)} = 0,110 < 0,197$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(7)} - \overline{D}^{(0)} = 0,046 < 0,187$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(0)} - \overline{D}^{(6)} = 0,191 < 0,201$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(0)} - \overline{D}^{(2)} = 0,070 < 0,197$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(0)} - \overline{D}^{(8)} = 0,064 < 0,187$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(8)} - \overline{D}^{(6)} = 0,127 < 0,197$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(8)} - \overline{D}^{(2)} = 0,006 < 0,187$ — различие незначимое

$\overline{D}^{(2)} - \overline{D}^{(6)} = 0,121 < 0,187$ — различие незначимое

На основании дисперсионного и факторного анализа были выбраны следующие композиции:

1) ПЭВД + 10% (Т : А = 1 : 1) + 10%ДСТ-30;
2) ПЭВД + 15% (Т : А = 1 : 1) + 10%ДСТ-30;
3) ПЭВД + 10% (Т : А = 1 : 0,5) + 10% ДСТ-30

Свойства оптимальных композиций приведены в таблице.

Номер композиции	$y_1 \cdot 10^{-1}$ МПа	$y_2 \cdot 10^{-1}$ МПа	y_3, %	Формуемость
1	545	135	450	Отличная
2	576	125	400	Хорошая
3	498	130	470	Отличная

Методы дисперсионного анализа и тесно связанного с ним планирования эксперимента в настоящее время довольно широко применяются для решения прикладных задач в химии и химической технологии.

Дисперсионный анализ использует свойство аддитивности дисперсии изучаемой случайной величины и дает возможность разложить ее на компоненты, обусловленные действием независимых факторов.

Основные положения дисперсионного анализа даются в данной главе без доказательств.

Приведены алгоритмы обработки наблюдений для однофакторного и двухфакторного анализов.

Рассмотрены методы планирования экспериментов по схеме латинского, греко-латинского, гипер-греко-латинского квадратов и латинских ку-

бов первого и второго порядков, дающие возможность существенно сократить перебор уровней, пожертвовав при этом наименее существенной при данной постановке задачи информацией.

Упражнения

1. Для каких задач эффективно применение дисперсионного анализа?

2. Какие модели используются в дисперсионном анализе? Каковы особенности интерпретации результатов при использовании различных моделей?

3. Что такое латинские квадраты и как они применяются в планировании экспериментов?

4. Сколько факторов и на скольких уровнях позволяют ввести в эксперимент латинские квадраты, гипер-греко-латинские квадраты, латинские кубы первого и второго порядков?

5. Оценить значимость различия в производительностях реакторов. Средняя производительных четырех параллельно работающих реакторов представлена в таблице:

Реактор	Средняя производительность, т/сут				
1	1600	1610	1650	1680	1700
2	1500	1640	1640	1700	1750
3	1460	1550	1600	1620	1640
4	1510	1520	1530	1570	1600

6. Оценить влияние температуры и значимость различия между марками стали на скорость коррозии. В таблице приведены значения скорости коррозии (мм/год) в полифосфорной кислоте при различной температуре для четырех марок стали.

Марка стали	Температура, °С			
	80	100	120	140
1	0,006	0,012	0,075	0,231
2	0,002	0,012	0,093	0,185
3	0,007	0,025	0,088	0,326
4	0,003	0,00	0,050	0,158

7. Латинский квадрат 3×3 (табл. 14) был использован для анализа процесса перекристаллизации биологически активного вещества. Факторы и их уровни приведены в таблице:

Факторы	Обозначение факторов	Уровни фактора	
		обозначение	значение
Температура, °С	A	a_1 a_2 a_3	3 10 20
Продолжительность, ч	B	b_1 b_2 b_3	7 17 24
Соотношение растворитель: вода	C	c_1 c_2 c_3	1:0,5 1:1 1:2

План эксперимента и результаты опытов — выход биологически активного вещества y приведены в таблице:

Номер опыта	A	B	C	y, %	Номер опыта	A	B	C	y, %
1	a_1	b_1	c_1	26,3	6	a_2	b_3	c_1	58,2
2	a_1	b_2	c_2	65,6	7	a_3	b_1	c_3	68,7
3	a_1	b_3	c_3	75,7	8	a_3	b_2	c_1	43,1
4	a_2	b_1	c_2	75,0	9	a_3	b_3	c_2	70,8
5	a_2	b_2	c_3	76,5					

1. Оценить значимость факторов методами факторного и дисперсионного анализов.
2. Провести анализ параметрической чувствительности процесса кристаллизации к изменению уровней факторов.
3. Определить оптимальную комбинацию уровней факторов, обеспечивающую наибольший выход биологически активного вещества.

ГЛАВА IV
МЕТОДЫ КОРРЕЛЯЦИОННОГО И РЕГРЕССИОННОГО АНАЛИЗОВ

1. Выборочный коэффициент корреляции. Методы корреляционного и регрессионного анализов широко применяются для выявления и описания зависимостей между случайными величинами по экспериментальным данным. Для экспериментального изучения зависимости между случайными величинами X и Y производят некоторое количество n независимых опытов. Результат i-го опыта дает пару значений (x_i, y_i), $i = 1, 2, ..., n$.

О наличии или отсутствии корреляции между двумя случайными величинами качественно можно судить по виду поля корреляции, нанеся точки (x_i, y_i) на координатную плоскость. Положительная корреляция между случайными величинами представлена на рис. 24, *а*. Еще более ярко выраженная корреляция, близкая к линейной функциональной, показана на рис. 24, *б*. На рис. 24, *в* приведен пример сравнительно слабой отрицательной корреляции, а на рис. 24, *г* — пример фактически некоррелированных случайных величин.

Для количественной оценки тесноты связи служит выборочный коэффициент корреляции.

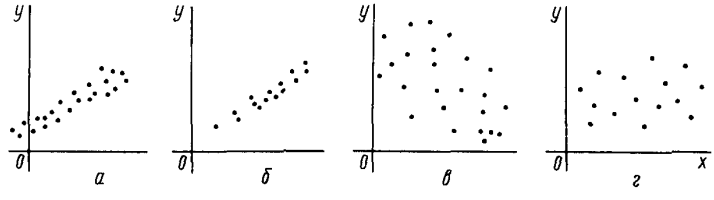


Рис. 24. Поле корреляции случайной величины

Как было показано (см. гл. II), состоятельными и несмещенными оценками для математических ожиданий m_x и m_y служат выборочные средние:

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

Состоятельными и несмещенными оценками дисперсий σ_x^2 и σ_y^2 служат выборочные дисперсии:

$$s_x^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 = \frac{1}{n-1}\left[\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2\right],$$

$$s_y^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2 = \frac{1}{n-1}\left[\sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)^2\right].$$

Наконец, состоятельной и несмещенной оценкой ковариации cov_{yx} служит выборочная ковариация:

$$\mathrm{cov}^*_{yx} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}).$$

По этим оценкам получают выборочный коэффициент корреляции:

$$r^*_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{(n-1)\, s_x\, s_y}. \qquad \text{(IV.1)}$$

Выборочный коэффициент корреляции r^* дает состоятельную, но смещенную оценку для коэффициента корреляции генеральной совокупности, эта оценка имеет смещение, равное $\frac{r(1-r^2)}{2n}$. Величина смещения убывает обратно пропорционально числу опытов n и при $n > 50$ составляет менее 1%.

Выборочный коэффициент корреляции r^*_{xy}, так же как и r_{xy} — коэффициент корреляции генеральной совокупности, по абсолютной величине не превосходит единицы:

$$-1 \leqslant r^*_{xy} \leqslant +1.$$

Выборочный коэффициент корреляции не изменяется при изменении начала отсчета и масштаба величин X и Y (см. свойства коэффициента корреляции генеральной совокупности, с. 25). Это свойство позволяет существенно упростить вычисления.

Коэффициент корреляции одинаково отмечает долю случайности и криволинейность связи между X и Y. Зависимость между X и Y может быть близкой к функциональной, но существенно нелинейной, а коэффициент корреляции будет значительно меньше единицы.

При достаточно большом объеме выборки n выборочный коэффициент корреляции r^* приближенно равен генеральному коэффициенту r. Однако оценить возникающую при этом погрешность затруднительно. Для этого нужно знать распределение r^* как случайной величины. Это распределение зависит от генерального коэффициента корреляции r, который неизвестен. Для проверки гипотезы об отсутствии корреляции необходимо проверять, значимо ли отличается r^* от нуля. Для проверки нулевой гипотезы $H^\circ: r=0$ можно использовать нормальное распределение со стандартом:

$$\sigma_{r^*} \approx (1-r^{*2})/\sqrt{n}\,. \qquad \text{(IV.2)}$$

Если в качестве доверительной вероятности взять $\beta=0{,}95$, коэффициент корреляции находится в следующих доверительных границах:

$$r^* - \frac{1{,}96\,(1-r^{*2})}{\sqrt{n}} < r < r^* + \frac{1{,}96\,(1-r^{*2})}{\sqrt{n}}\,. \qquad \text{(IV.3)}$$

С вероятностью 0,95 можно утверждать, что зависимость между случайными величинами существует, если 0 не содержится внутри доверительного интервала, т. е. если

$$|\,r^*\,| - \frac{1{,}96\,(1-r^{*2})}{\sqrt{n}} > 0. \qquad \text{(IV.4)}$$

При малом числе экспериментов и сравнительно высокой корреляции распределение коэффициента корреляции существенно отличается от нормального (рис. 25, *а*). Для построения доверительного интервала можно воспользоваться преобразованием Фишера:

$$r^* = \operatorname{th} z = \frac{e^{2z}-1}{e^{2z}+1}\,, \qquad \text{(IV.5)}$$

отсюда

$$z = \frac{1}{2}\ln\frac{1+r^*}{1-r^*}\,. \qquad \text{(IV.6)}$$

Распределение z является почти неизменным по форме при меняющихся r^* и n и с возрастанием n быстро приближается к нормальному (рис. 25, *б*) со средним, равным

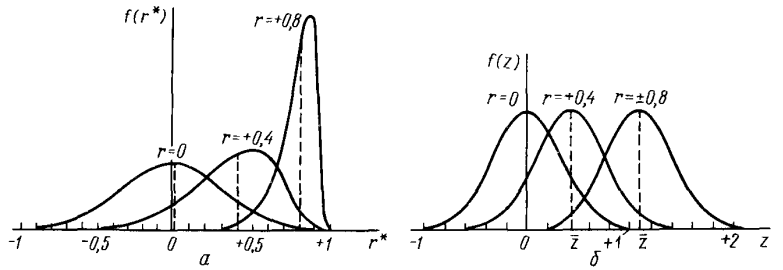


Рис. 25. Плотность распределения выборочного коэффициента корреляции

$$m_z = \frac{1}{2} \ln \frac{1+r}{1-r}, \tag{IV.7}$$

и со стандартом

$$\sigma_z \cong \frac{1}{\sqrt{n-3}}. \tag{IV.8}$$

Тогда с доверительной вероятностью β значение неизвестного m_z находится в пределах

$$z - \frac{u_\beta}{\sqrt{n-3}} < m_z < z + \frac{u_\beta}{\sqrt{n-3}}, \tag{IV.9}$$

где u_β — квантиль нормального распределения. При доверительной вероятности $\beta = 0{,}95$, $u_\beta = 1{,}96$, отсюда

$$z - \frac{1{,}96}{\sqrt{n-3}} < m_z < z + \frac{1{,}96}{\sqrt{n-3}}. \tag{IV.10}$$

После нахождения доверительных границ для m_z

$$z_1 = z - \frac{1{,}96}{\sqrt{n-3}} \tag{IV.11}$$

и

$$z_2 = z + \frac{1{,}96}{\sqrt{n-3}}$$

можно найти доверительные границы для генерального коэффициента корреляции, подставляя z_1 и z_2 в формулу (IV.5).

2. Коэффициенты частной корреляции. При исследовании зависимости величины y от двух факторов x_1 и x_2 наличие корреляции между y и x_2 и корреляции между x_1 и x_2 будет влиять на корреляцию между y и x_1. Для того чтобы устранить влияние x_2, необходимо измерить корреляцию между y и x_1, когда x_2 постоянно. Для этой цели в статистике применяют частные коэффициенты корреляции:

$$r^*_{yx_1 \cdot x_2} = \frac{r^*_{yx_1} - r^*_{yx_2} r^*_{x_2x_1}}{\left(1 - r^{*2}_{yx_2}\right)^{1/2} \left(1 - r^{*2}_{x_1x_2}\right)^{1/2}}, \tag{IV.12}$$

$$r^*_{yx_2 \cdot x_1} = \frac{r^*_{yx_2} - r^*_{yx_1} r^*_{x_2x_1}}{\left(1 - r^{*2}_{yx_1}\right)^{1/2} \left(1 - r^{*2}_{x_1x_2}\right)^{1/2}}. \tag{IV.13}$$

Частный коэффициент корреляции $r^*_{yx_1 \cdot x_2}$ оценивает степень влияния фактора x_1 на y при условии, что влияние x_2 на y исключено. В обозначении частного коэффициента корреляции этот исключенный фактор поставлен в индексе после точки. При изучении зависимости y от трех факторов x_1, x_2 и x_3 частный коэффициент корреляции между y и x_1 при условии, что x_2 и x_3 будут постоянными, можно вычислить по формуле

$$r^*_{yx_1 \cdot x_2x_3} = \frac{r^*_{y1.3} - r^*_{y2.3} r^*_{12.3}}{\left(1 - r^{*2}_{y2.3}\right)^{1/2} \left(1 - r^*_{12.3}\right)^{1/2}}. \tag{IV.14}$$

При переходе от парных коэффициентов корреляции к частным может существенно измениться не только величина коэффициента корреляции, но и знак. Проиллюстрируем это на примере.

Исследовалась скорость коррозии (K) образцов стали, содержащих серу (S), фосфор (P) и медь (Cu) в растворе лимонной кислоты.

На основании выборки из 39 опытов были получены значения коэффициентов парной корреляции:

$$r^*_{KS} = +0{,}205; \qquad r^*_{SP} = +0{,}810;$$

$$r^*_{KP} = +0{,}277; \qquad r^*_{SCu} = +0{,}663;$$

$$r^*_{K\,Cu} = -0{,}504; \qquad r^*_{P\,Cu} = +0{,}369.$$

По формуле (IV.12) найдем частные коэффициенты корреляции, исключив влияние одного из факторов:

$$r^*_{K\,S\cdot Cu} = +0{,}850; \qquad r^*_{K\,Cu\cdot S} = -0{,}887; \qquad r_{K\,Cu\cdot P} = -0{,}690.$$

$$r^*_{K\,S\cdot P} = -0{,}034; \qquad r^*_{S\,P\cdot Cu} = +0{,}813;$$

$$r^*_{K\,P\cdot Cu} = +0{,}585; \qquad r^*_{P\,Cu\cdot S} = -0{,}383;$$

$$r^*_{K\,P\cdot S} = +0{,}193; \qquad r^*_{S\,Cu\cdot P} = +0{,}668;$$

Сопоставление величин парных и частных коэффициентов корреляции показывает, что влияние, например, фосфора на скорость коррозии при постоянном содержании меди больше, чем при переменном, а влияние фосфора на скорость коррозии при постоянном содержании серы меньше, чем при переменном:

$$r^*_{KP\cdot S} < r^*_{KP} < r^*_{KP\cdot Cu}.$$

Частные коэффициенты корреляции, вычисленные по формуле (IV.14) в предположении, что устранено влияние двух факторов, приведены ниже:

$$r^*_{KS\cdot Cu\,P} = +0{,}792; \quad r^*_{KP\cdot S\,Cu} = -0{,}343; \quad r^*_{K\,Cu\cdot SP} = -0{,}897.$$

Коэффициент парной корреляции между скоростью коррозии и содержанием фосфора при меняющихся концентрациях меди и серы положительный ($r^*_{KP} = +0{,}277$); частный коэффициент корреляции $r^*_{KP\,.\,SCu} = -0{,}343$.

Таким образом, анализ корреляции дал возможность установить характер и степень влияния количества серы, фосфора и меди, содержащихся в стали, на скорость ее коррозии в растворе лимонной кислоты.

В общем случае для расчета коэффициентов частной корреляции можно воспользоваться выборочной корреляционной матрицей:

$$[r^*_{ij}] = \begin{pmatrix} r^*_{11} & r^*_{12} \cdots r^*_{1y} \\ r^*_{21} & r^*_{22} \cdots r^*_{2y} \\ \cdots & \cdots \\ r^*_{y1} & r^*_{y2} \cdots r^*_{yy} \end{pmatrix}.$$

Коэффициент частной корреляции между x_i и y определится по формуле

$$r^{*}_{iy\cdot 1,2,\ldots,i-1,i+1,\ldots,k} = \frac{\Delta_{iy}}{\sqrt{\Delta_{ii}\cdot\Delta_{yy}}}, \qquad \text{(IV.15)}$$

где $\Delta_{i,y}$ — минор, получаемый вычеркиванием i-й строки и столбца y; Δ_{ii} (Δ_{jj}) — минор, получаемый вычеркиванием i-й (j-й) строки и i-го (j-го) столбца. Например, для корреляционной матрицы

$$\begin{pmatrix} r^{*}_{11} & r^{*}_{12} & r^{*}_{13} & \cdots & r^{*}_{1y} \\ r^{*}_{21} & r^{*}_{22} & r^{*}_{23} & \cdots & r^{*}_{2y} \\ r^{*}_{31} & r^{*}_{32} & r^{*}_{33} & \cdots & r^{*}_{3y} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ r^{*}_{y1} & r^{*}_{y2} & r^{*}_{y3} & \cdots & r^{*}_{yy} \end{pmatrix} \qquad \text{(IV.16)}$$

коэффициент частной корреляции $r^{*}_{1y\cdot 23}$ между x_1 и y определится следующим образом:

$$r^{*}_{1y\cdot 23} = \frac{\begin{vmatrix} r^{*}_{21} & r^{*}_{22} & r^{*}_{23} \\ r^{*}_{31} & r^{*}_{32} & r^{*}_{33} \\ r^{*}_{y1} & r^{*}_{y2} & r^{*}_{y3} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} r^{*}_{22} & r^{*}_{23} & r^{*}_{2y} \\ r^{*}_{32} & r^{*}_{33} & r^{*}_{3y} \\ r^{*}_{y2} & r^{*}_{y3} & r^{*}_{yy} \end{vmatrix}^{1/2} \begin{vmatrix} r^{*}_{11} & r^{*}_{12} & r^{*}_{13} \\ r^{*}_{21} & r^{*}_{22} & r^{*}_{23} \\ r^{*}_{31} & r^{*}_{32} & r^{*}_{33} \end{vmatrix}^{1/2}}. \qquad \text{(IV.17)}$$

При интерпретации результатов корреляционного анализа нужно иметь в виду, что коэффициент корреляции — чисто статистический показатель. Он не содержит предположения, что изучаемые величины находятся в причинно-следственной связи. Поэтому любая трактовка корреляционной зависимости должна основываться на информации физико-химического характера.

3. Приближенная регрессия. Метод наименьших квадратов. Для характеристики формы связи при изучении корреляционной зависимости пользуются уравнением приближенной регрессии. Задача ставится таким образом: по данной выборке объема n найти уравнение приближенной регрессии и оценить допускаемую при этом ошибку. Эта задача решается методами *регрессионного* и *корреляционного анализа*. Уравнение приближенной регрессии существенно зависит от выбираемого метода приближения. В качестве такого метода обычно выбирают метод наименьших квадратов. Пусть задан некоторый класс функций $f(x)$, накладывающих на выборку одинаковое *число связей* l. Число связей l равно числу неопределенных коэффициентов, входящих в аналитическое выражение этой функции. Чаще всего используют многочлены различной степени. Наилучшее уравнение приближенной регрессии дает та функция из рассматриваемого класса, для которой сумма квадратов имеет наименьшее значение

$$\Phi = \sum_{i=1}^{n} [y_i - f(x_i)]^2 \qquad \text{(IV.18)}$$

При нормальном распределении случайных величин метод наименьших квадратов обосновывается в теории вероятностей как частный случай принципа максимума правдоподобия.

Предположим, что уравнение истинной регрессии выражается формулой $m_y = \varphi(x)$, а экспериментальные точки отклоняются от этой зависимости вследствие случайных ошибок измерения. Допустим, что ошибки измерения подчиняются нормальному закону распределения. Тогда результат i-го опыта есть случайная величина y_i, распределенная по нормальному закону с математическим ожиданием $m_{y_i} = \varphi(xi)$ и средним квадратичным отклонением σ_i, характеризующим ошибку воспроизводимости.

Полагая, что все эксперименты равноточны, имеем:

$$\sigma_1 = \sigma_2 = \ldots = \sigma_i = \ldots \sigma_n = \sigma.$$

Тогда нормальный закон, по которому распределена величина y_i, можно записать в виде

$$f_i(y_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}[y_i - \varphi(x_i)]^2\right\}.$$

В результате опыта — ряда измерений — произошло следующее событие: случайные величины Y_1, $Y_2,\ldots,Y_n$ приняли совокупность значений y_1, $y_2,\ldots,y_n$. В соответствии с принципом максимального правдоподобия (см. гл. II, с. 30) подберем так математические ожидания $\varphi(x_1)$, $\varphi(x_2),\ldots,\varphi(x_n)$, чтобы вероятность этого события P была максимальна.

Вероятность p_i того, что случайная величина Y_i попадет в интервал $y_1 - \varepsilon/2$, $y_1 + \varepsilon/2$ в первом приближении, равна:

$$p_i = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2\pi}\,\sigma} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}[y_i - \varphi(x_i)]^2\right\}.$$

Найдем вероятность того, что система независимых случайных величин Y_1, $Y_2,\ldots,Y_n$ примет совокупность значений из интервалов $y_i - \varepsilon/2$, $y_i + \varepsilon/2$, $i = 1,2,\ldots,n$:

$$P = \varepsilon^n \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}[y_i - \varphi(x_i)]^2\right\} =$$

$$= \varepsilon^n \sigma^{-n} (2\pi)^{-n/2} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}[y_i - \varphi(x_i)]^2\right\} =$$

$$= K \exp\left\{-\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}[y_i - \varphi(x_i)]^2\right\},$$

где K — коэффициент, не зависящий от $\varphi(x_i)$.

Очевидно, что при заданном σ^2 максимум вероятности P получит-

ся в случае, когда стоящая в показателе степени экспоненты сумма минимальна, т. е.

$$\sum_{i=1}^{n} [y_i - \varphi(x_i)]^2 = \min.$$

По методу наименьших квадратов можно обрабатывать любые экспериментальные данные, однако оптимальность этой процедуры доказывается только для нормального распределения. При этом можно говорить о достаточных статистиках, т. е. таких функциях от результатов наблюдений (оценках для параметров генеральной совокупности), при помощи которых извлекается вся информация об этих параметрах, содержащаяся в эксперименте.

Задача определения коэффициентов уравнения регрессии по методу наименьших квадратов сводится практически к определению минимума функции многих переменных. Если

$$\hat{y} = f(x, b_0, b_1, b_2, \ldots, b_k) \qquad \text{(IV.19)}$$

есть функция дифференцируемая и требуется выбрать b_0, b_1, b_2... так, чтобы

$$\Phi = \sum_{i=1}^{n} [y_i - f(x_i, b_0, b_1, b_2, \ldots, b_k)]^2 = \min, \qquad \text{(IV.20)}$$

необходимым условием минимума $\Phi(b_0, b_1, b_2, \ldots, b_k)$ является выполнение равенств

$$\frac{\partial \Phi}{\partial b_0} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial b_1} = 0, \quad \ldots, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial b_k} = 0 \qquad \text{(IV.21)}$$

или

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^{n} 2 \left[y_i - f(x_i, b_0, b_1, b_2, \ldots, b_k) \right] \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_0} = 0, \\
&\sum_{i=1}^{n} 2 \left[y_i - f(x_i, b_0, b_1, b_2, \ldots, b_k) \right] \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_1} = 0, \qquad \text{(IV.22)} \\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\
&\sum_{i=1}^{n} 2 \left[y_i - f(x_i, b_0, b_1, b_2, \ldots, b_k) \right] \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_k} = 0.
\end{aligned}$$

После преобразования

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^{n} y_i \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_0} - \sum_{i=1}^{n} f(x_i, b_0, b_1, b_2, \ldots, b_k) \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_0} = 0, \\
&\sum_{i=1}^{n} y_i \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_1} - \sum_{i=1}^{n} f(x_i, b_0, b_1, b_2, \ldots, b_k) \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_1} = 0, \qquad \text{(IV.23)} \\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots
\end{aligned}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_k} - \sum_{i=1}^{n} f(x_i, b_0, b_1, b_2, \ldots, b_k) \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_k} = 0.$$

Система уравнений (IV.23) содержит столько же уравнений, сколько неизвестных коэффициентов b_0, b_1, b_2,...,b_k входит в уравнение регрессии, и называется в математической статистике *системой нормальных уравнений.*

Функция $\Phi \geqslant 0$ при любых b_0, b_1, b_2,...,b_k, следовательно, у нее обязательно должен существовать хотя бы один минимум. Поэтому если система нормальных уравнений имеет единственное решение, то оно и является минимумом для функции Ф.

При изучении зависимости от одного переменного параметра полезно для определения вида уравнения регрессии построить *эмпирическую линию регрессии.* Для этого весь диапазон изменения x на поле корреляции (рис. 26) разбивается на k равных интервалов Δx. Все точки, попавшие в данный интервал Δx_j, относят к его середине x_j. Для этого подсчитывают частные средние $\bar{y}_j$ для каждого интервала

$$\bar{y}_j = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} y_{ji}}{n_j}, \qquad \text{(IV.24)}$$

где n_j — число точек в интервале Δx_j; при этом

$$\sum_{j=1}^{k} n_j = n; \qquad \text{(IV.25)}$$

n — объем выборки. Затем последовательно соединяют точки $(x_j, \bar{y}_j)$ отрезками прямой. Полученная ломаная называется эмпирической линией регрессии y по x. По виду эмпирической линии регрессии можно подобрать уравнение регрессии $\hat{y} = f(x)$.

4. Линейная регрессия от одного параметра. Требуется определить по методу наименьших квадратов коэффициенты линейного уравнения регрессии

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x \qquad \text{(IV.26)}$$

по выборке объема n. Система нормальных уравнений при этом имеет вид

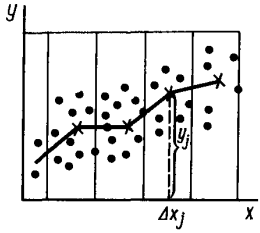


Рис. 26. Эмпирическая линия регрессии

$$\sum_{i=1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} (b_0 + b_1 x_i) = 0,$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i - \sum_{i=1}^{n} (b_0 + b_1 x_i) x_i = 0,$$

или

$$nb_0 + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} y_i,$$

$$b_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i. \qquad \text{(IV.27)}$$

Коэффициенты b_0 и b_1 легко найти при помощи определителей:

$$b_0 = \frac{\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i y_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{vmatrix}} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{n \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i \right)^2}; \qquad \text{(IV.28)}$$

$$b_1 = \frac{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{vmatrix}} = \frac{n \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i \right)^2} =$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}; \qquad \text{(IV.29)}$$

b_0 проще найти по известному b_1 из первого уравнения системы:

$$b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x}. \qquad \text{(IV.30)}$$

Уравнение (IV.30) показывает, что между коэффициентами b_0 и b_1 существует корреляционная зависимость. Для оценки силы линейной связи (IV.26) вычисляется выборочный коэффициент корреляции r^*:

$$r^* = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{(n-1) s_x s_y}, \qquad \text{(IV.31)}$$

где s_x, s_y – выборочные среднеквадратичные отклонения.

Из уравнений (IV.29) и (IV.31) имеем

$$r^* = \frac{b_1 s_x}{s_y} = b_1 \sqrt{\frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}{n\sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)^2}}. \qquad \text{(IV.32)}$$

Пример 1. Требуется определить зависимость растворимости хлорида бария в воде (y) в присутствии хлорида кальция (x) при 70°С. Объем выборки $n = 6$. Экспериментальные данные приведены ниже:

x_{CaCl_2}, %	0	5	8	10	15	20
y (растворимость $BaCl_2$, %) . . .	32	25	20	17	11	5

Р е ш е н и е. Определим коэффициенты уравнения линейной регрессии вида

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

Коэффициент b_1 определим по формуле (IV.29), b_0 — по формуле (IV.30). Для этого экспериментальные данные и результаты расчета представим в виде таблицы.

Номер опыта	x	y	x^2	xy	y^2	$x + y$	$(x + y)^2$
1	0	32	0	0	1024	32	1024
2	5	25	25	125	625	30	900
3	8	20	64	160	400	28	784
4	10	17	100	170	289	27	729
5	15	11	225	165	121	26	676
6	20	5	400	100	25	25	625
Σ	58	110	814	720	2484	168	4738

Проверку вычислений можно провести по формуле

$$\sum_{i=1}^{n} (x_i + y_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + 2\sum_{i=1}^{n} x_i y_i + \sum_{i=1}^{n} y_i^2. \qquad \text{(IV.33)}$$

В данном примере имеем $4738 = 814 + 2 \cdot 720 + 2484$, т.е. вычисления проведены правильно.

Используем полученные в таблице суммы для определения коэффициентов b_0 и b_1:

$$b_1 = \frac{6 \cdot 720 - 58 \cdot 110}{6 \cdot 814 - 58^2} = -1{,}355; \quad b_0 = \frac{110 + 1{,}355 \cdot 58}{6} = 31{,}43.$$

По формуле (IV.32) определим выборочный коэффициент корреляции:

$$r^* = -1{,}355 \sqrt{\frac{6 \cdot 814 - 3364}{6 \cdot 2484 - 12\,100}} = -1{,}355 \sqrt{\frac{1520}{2804}} = -0{,}99.$$

Коэффициент корреляции очень близок к единице, следовательно, зависимость между x и y является практически линейной в изученном диапазоне и имеет вид

$$\hat{y} = 31{,}43 - 1{,}355\,x.$$

После того как уравнение регрессии найдено, необходимо провести статистический анализ результатов. Этот анализ заключается в проверке значимости всех коэффициентов регрессии в сравнении с ошибкой воспроизводимости и адекватности уравнения. Такое исследование называется регрессионным анализом. Примем при проведении регрессионного анализа следующие допущения:

1. Входной параметр x измеряется с пренебрежимо малой ошибкой по сравнению с ошибкой в определении y. Большая ошибка y объясняется наличием в каждом процессе невыявленных переменных, не вошедших в уравнение регрессии.

2. Результаты наблюдений y_1, y_2,...,y_n над выходной величиной y представляют собой независимые, нормально распределенные случайные величины.

3. При проведении эксперимента с объемом выборки n при условии, что каждый опыт повторен m раз, $i=1,2,...,n$, выборочные дисперсии s_1^2, s_2^2,...,s_n^2 должны быть однородны.

Однородность дисперсий при одинаковом числе степеней свободы проверяют по критерию Кохрена, а при разном — по критерию Бартлета. Определенная по параллельным опытам дисперсия воспроизводимости $s^2_{\text{воспр}}$ необходима для оценки значимости коэффициентов уравнения регрессии и проверки адекватности уравнения эксперименту.

Оценка значимости коэффициентов производится по критерию Стьюдента

$$t_j = |b_j|/s_{b_j}\,, \tag{IV.34}$$

где b_j — j-й коэффициент уравнения регрессии; s_{b_j} — среднее квадратичное отклонение j-го коэффициента.

Если t_j больше табличного $t_p(f)$ для выбранного уровня значимости p и числа степеней свободы $f=f_{\text{воспр}}$, то коэффициент b_j значимо отличается от нуля; s_{b_j} определяется по закону накопления ошибок (II 36):

$$s_{b_j} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial b_j}{\partial y_i}\right)^2 s_i^2}\,. \tag{IV.35}$$

Если выборочные дисперсии s_1^2, s_2^2,...,s_n^2 однородны, получим

$$s_{b_0} = \sqrt{\frac{s^2_{\text{воспр}}\sum_{i=1}^{n} x_i^2}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}}\,, \tag{IV.36}$$

$$s_{b_1} = \sqrt{\frac{s^2_{\text{воспр}}\, n}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}}\,. \tag{IV.37}$$

Незначимые коэффициенты исключаются из уравнения регресии. Оставшиеся коэффициенты пересчитываются заново, поскольку коэффициенты закоррелированы друг с другом. Адекватность уравнения проверяется по критерию Фишера:

$$F = s^2_{\text{ад}} / s^2_{\text{воспр}} , \tag{IV.38}$$

где $s^2_{\text{ад}}$ — дисперсия адекватности; $s^2_{\text{воспр}}$ — дисперсия воспроизводимости;

$$s^2_{\text{ад}} = SS_{\text{ад}} / f_{\text{ад}}, \tag{IV.39}$$

$SS_{\text{ад}}$ — сумма квадратов адекватности;

$$SS_{\text{ад}} = SS_{\text{ост}} - SS_{\text{воспр}}, \tag{IV.40}$$

$f_{\text{ад}}$ — число степеней свободы дисперсии адекватности;

$$f_{\text{ад}} = f_{\text{ост}} - f_{\text{воспр}} = n - l, \tag{IV.41}$$

l — число коэффициентов в уравнении регрессии;

$SS_{\text{воспр}}$ — сумма квадратов, связанная с дисперсией воспроизводимости $s^2_{\text{воспр}}$,

$$SS_{\text{воспр}} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{u=1}^{m_i} (y_{iu} - \bar{y}_i)^2; \tag{IV.42}$$

$$\bar{y}_i = \frac{1}{m_i} \sum_{u=1}^{m_i} y_{iu}; \tag{IV.43}$$

$$s^2_{\text{воспр}} = SS_{\text{воспр}} / f_{\text{воспр}}, \tag{IV.44}$$

$f_{\text{воспр}}$ — число степеней свободы дисперсии воспроизводимости;

$$f_{\text{воспр}} = \sum_{i=1}^{n} (m_i - 1); \tag{IV.45}$$

$$s^2_{\text{воспр}} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \sum_{u=1}^{m_i} (y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n} (m_i - 1)} , \tag{IV.46}$$

$SS_{\text{ост}}$ — остаточная сумма квадратов;

$$SS_{\text{ост}} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{u=1}^{m_i} (y_{iu} - \hat{y}_i)^2; \tag{IV.47}$$

$$f_{\text{ост}} = \sum_{i=1}^{n} m_i - l, \tag{IV.48}$$

$f_{ост}$ — число степеней свободы остаточной дисперсии $s^2_{ост}$;

$$s^2_{ост} = \frac{SS_{ост}}{f_{ост}} = \frac{\sum_{i=1}^{n}\sum_{u=1}^{m_i}(y_{iu} - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n} m_i - l}. \qquad (IV.49)$$

Если

$$F = s^2_{ад} / s^2_{воспр} \qquad (IV.50)$$

окажется меньше табличного значения $F_{1-p}(f_1, f_2)$ для уровня значимости p и числа степеней свободы $f_1 = f_{ад}$ и $f_2 = f_{воспр}$, уравнение адекватно эксперименту.

Для одинакового числа опытов $m_1 = m_2 = ... = m_j = ... = m_n = m$ вычисления упрощаются:

$$s^2_{ад} = \frac{m\sum_{i=1}^{n}(\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2}{n - l}. \qquad (IV.51)$$

$$s^2_{воспр} = \frac{\sum_{i=1}^{n}\sum_{u=1}^{m}(y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{n(m-1)}. \qquad (IV.52)$$

Если опыты проведены без параллельных, а для получения дисперсии воспроизводимости проделана отдельная серия из m опытов, тогда

$$s^2_{ад} = s^2_{ост} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)}{n - l} \qquad (IV.53)$$

и

$$s^2_{воспр} = \frac{\sum_{u=1}^{m}\left(y^0_u - \bar{y}^0\right)^2}{m-1}, \qquad (IV.54)$$

$$\bar{y}^0 = \frac{\sum_{u=1}^{m} y^0_u}{m}. \qquad (IV.55)$$

При отсутствии параллельных опытов и дисперсии воспроизводимости можно оценить качество аппроксимации принятым уравнением, сравнив $s^2_{ост}$ и дисперсию относительно среднего s^2_y:

$$s^2_y = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}{n-1}, \qquad (IV.56)$$

по критерию Фишера

$$F = \frac{s_y^2(f_1)}{s_{ост}^2(f_2)} \quad . \tag{IV.57}$$

В этом случае критерий Фишера показывает, во сколько раз уменьшается рассеяние относительно полученного уравнения регрессии по сравнению с рассеянием относительно среднего. Чем больше значение F превышает табличное $F_{1-p}(f_1, f_2)$ для выбранного уровня значимости p и чисел степеней свободы $f_1 = n - 1$ и $f_2 = n - l$, тем эффективнее уравнение регрессии.

5. Параболическая регрессия. Если уравнение регрессии представляет собой полином некоторой степени, то при применении метода наименьших квадратов коэффициенты этого полинома находят решением системы линейных уравнений. Например, требуется определить по методу наименьших квадратов коэффициенты квадратичной функции — параболы второго порядка:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x + b_2 x^2. \tag{IV.58}$$

При этом

$$\frac{\partial f(x)}{\partial b_0} = 1; \quad \frac{\partial f(x)}{\partial b_1} = x; \quad \frac{\partial f(x)}{\partial b_2} = x^2$$

и система нормальных уравнений имеет вид:

$$\begin{aligned} b_0 n + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_i + b_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 &= \sum_{i=1}^{n} y_i, \\ b_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^3 &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i, \\ b_0 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^3 + b_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^4 &= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i. \end{aligned} \tag{IV.59}$$

Аналогичными по структуре уравнениями будут определяться коэффициенты параболы любого порядка.

Адекватности уравнения регрессии эксперименту добиваются повышением степени полинома. При этом в связи с наличием корреляции между коэффициентами все коэффициенты регрессии нужно вычислять заново. При переходе от k-й степени полинома к $(k+1)$-й в правой части уравнения регрессии добавляется одно слагаемое вида $b_{k+1} x^{k+1}$, но все $k+2$ коэффициента приходится рассчитывать заново. В качестве критерия при вычислениях рассматривается остаточная дисперсия:

$$s_{ост}^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2/(n-l).$$

Как только $s^2_{k+1\,\text{ост}}$ перестанет быть значимо меньше $s^2_{k\,\text{ост}}$, увеличение степени k нужно прекратить. Значимость различия между s^2_k и s^2_{k+1} проверяется по критерию Фишера:

$$F = s^2_k / s^2_{k+1} .$$

Если полученное F-отношение меньше табличного $F_{1-p}(f_1, f_2)$ для выбранного уровня значимости и чисел степеней свободы $f_1 = f_k$ и $f_2 = f_{k+1}$, увеличение степени k нужно прекратить.

6. Полиномы Чебышева. Уравнение регрессии, выраженное через полиномы Чебышева, имеет вид

$$\hat{y} = b_0 P_0(x) + b_1 P_1(x) + \ldots + b_k P_k(x), \qquad \text{(IV.60)}$$

где $P_0(x), P_1(x), \ldots, P_k(x)$ — ортогональные полиномы Чебышева на множестве точек $x_1, x_2, \ldots, x_n$. Это означает, что для всех $u \neq j$ выполняются соотношения

$$\sum_{i=1}^{n} P_u(x_i) P_j(x_i) = 0, \qquad \text{(IV.61)}$$

где $P_{k+1}(x)$ зависит только от объема выборки n. Зная многочлены Чебышева $P_{k+1}(x)$, при каждом увеличении степени уравнения регрессии необходимо вычислять только коэффициент b_{k+1}. Многочлены Чебышева определяются по формулам

$$P_0(x) = 1, \qquad \text{(IV.62)}$$

$$P_1(x) = x - \frac{n+1}{2} , \qquad \text{(IV.63)}$$

. . . . . .

$$P_{k+1}(x) = P_1(x) P_k(x) - \frac{k^2 (n^2 - k^2)}{4 (4k^2 - 1)} P_{k-1}(x). \qquad \text{(IV.64)}$$

Например,

$$P_2(x) = x^2 - (n+1)\, x + \frac{(n+1)(n+2)}{6} . \qquad \text{(IV.65)}$$

$$P_3(x) = x^3 - \frac{3(n+1)}{2} x^2 + \frac{6n^2 + 15n + 11}{10} x - \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{20} \qquad \text{(IV.66)}$$

$$P_4(x) = x^4 - 2(n+1) x^3 + \frac{9n^2 + 21n + 4}{7} x^2 - \frac{(n+1)(2n^2 + 7n + 10)}{7} x +$$

$$+ \frac{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}{80} . \qquad \text{(IV.67)}$$

Определяя коэффициенты $b_0, b_1, \ldots, b_k$ уравнения регрессии (IV.60) по методу наименьших квадратов, получим

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n} ,$$

$$b_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i P_1(x_i)}{\sum_{i=1}^{n} P_1^2(x_i)},$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots \qquad \text{(IV.68)}$$

$$b_k = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i P_k(x_i)}{\sum_{i=1}^{n} P_k^2(x_i)}.$$

Вычисленные по формулам (IV.68) коэффициенты b_j не зависят от того, каков будет порядок определяемого уравнения регрессии. При нахождении уравнения регрессии методом последовательных уточнений используются все ранее найденные b_j. Повышение порядка уравнения регрессии на 1 приводит к определению только одного коэффициента. При этом удобными получаются формулы для расчета остаточной дисперсии для уравнения регрессии k-го порядка:

$$s^2_{k\,\text{ост}} = \frac{SS_k}{n-k-1}, \qquad \text{(IV.69)}$$

где суммы квадратов отклонений SS определяются по рекуррентной формуле

$$SS_k = SS_{k-1} - b_k^2 \sum_{i=1}^{n} P_k^2(x_i). \qquad \text{(IV.70)}$$

Необходимо только заранее подсчитать SS_0:

$$SS_0 = \sum_{i=1}^{n} [y_i - b_0 P_0(x_i)]^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)^2}{n}. \qquad \text{(IV.71)}$$

При равноотстоящих значениях аргумента

$$x_2 = x_1 + h; \quad x_3 = x_1 + 2h; \quad \ldots; \quad x_n = x_1 + (n-1)h,$$

где h — шаг интерполяции, вычисления коэффициентов облегчаются. Сделаем замену переменных:

$$z = \frac{x - x_1}{h} + 1. \qquad \text{(IV.72)}$$

Тогда каждое значение x_i заменится своим номером, т. е. $z_i = i$. Определим коэффициенты уравнения регрессии вида

$$\hat{y} = a_0 P_0(z) + a_1 P_1(z) + \ldots + a_k P_k(z), \qquad \text{(IV.73)}$$

где

$$a_0 = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n}, \tag{IV.74}$$

$$a_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i P_1(i)}{\sum_{i=1}^{n} P_1^2(i)}, \tag{IV.75}$$

. . . . . .

$$a_k = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i P_k(i)}{\sum_{i=1}^{n} P_k^2(i)}. \tag{IV.76}$$

Суммы, стоящие в знаменателе, можно определить по сокращенной формуле:

$$\sum_{i=1}^{n} P_k^2(i) = \frac{(k!)^2 n (n^2-1)(n^2-4) \ldots (n^2-k^2)}{[(2k-1)!!]^2 2^{2k} (2k+1)}, \tag{IV.77}$$

где $(2k-1)!!$ — произведение всех нечетных чисел от 1 до $2k-1$ включительно. В частности,

$$\sum_{i=1}^{n} P_1^2(i) = \frac{n(n^2-1)}{12}, \tag{IV.78}$$

$$\sum_{i=1}^{n} P_2^2(i) = \frac{n(n^2-1)(n^2-4)}{180}, \tag{IV.79}$$

$$\sum_{i=1}^{n} P_3^2(i) = \frac{n(n^2-1)(n^2-4)(n^2-9)}{2800}, \tag{IV.80}$$

$$\sum_{i=1}^{n} P_4^2(i) = \frac{n(n^2-1)(n^2-4)(n^2-9)(n^2-16)}{44\,100}. \tag{IV.81}$$

Эти суммы используются и для вычисления сумм SS_k, нужных для определения остаточной дисперсии:

$$SS_k = SS_{k-1} - a_k^2 \sum_{i=1}^{n} P_k^2(i). \tag{IV.82}$$

После получения уравнения регрессий (IV.73) переменную z опять заменяют первоначальной переменной x.

Пример 2. Требуется определить зависимость степени диссоциации α иодида водорода от температуры t. Экспериментальные данные приведены ниже:

t, °C	280	300	320	340	360	380	400	420	440	460	480
α	0,178	0,182	0,186	0,191	0,196	0,202	0,207	0,213	0,220	0,228	0,236

Объем выборки $n = 11$. Температура фиксировалась через равные интервалы 20° ($h = 20$).

Р е ш е н и е. Применим метод ортогональных полиномов Чебышева для получения уравнения регрессии степени диссоциации от температуры. Сделаем замену переменных по формуле

$$z = \frac{t - 260}{20}.$$

Одновременно для удобства вычислений заменим α на y:

$$y = 1000\,(\alpha - 0{,}178).$$

Полученные значения z_i, y_i и полиномов Чебышева, посчитанных по формулам (IV.63), (IV.65) и (IV.66), в которые вместо x подставлены значения $i = 1,2,\ldots,11$, приведены в таблице.

$z_i = i$	y_i	$P_1(i)$	$y_i P_1(i)$	$P_2(i)$	$y_i P_2(i)$	$P_3(i)$	$y_i P_3(i)$
1	0	−5	0	15	0	−36	0
2	4	−4	−16	6	24	7,2	28,3
3	8	−3	−24	−1	−8	26,4	24,2
4	13	−2	−26	−6	−78	27,6	358,8
5	18	−1	−18	−9	−162	16,8	302,4
6	24	0	0	−10	−240	0	0
7	29	1	29	−9	−261	−16,8	−487,2
8	35	2	70	−6	−210	−27,6	−96,6
9	42	3	126	−1	−42	−26,4	−1108,8
10	50	4	200	6	300	−7,2	−360
11	58	5	290	15	870	36	2088
Σ	281		631		193		67,2

Определим коэффициенты уравнения вида

$$\hat{y} = a_0 P_0(z) + a_1 P_1(z);$$

$$P_0(z) = 1; \quad P_1(z) = z - 6.$$

По формуле (IV.74)

$$a_0 = 281/11 = 25{,}6;$$

$\sum_{i=1}^{n} P_1^2(i)$ по сокращенной формуле (IV.78) равна

$$\sum_{i=1}^{n} P_1^2(i) = \frac{11\,(121 - 1)}{12} = 110,$$

и коэффициент a_1 по (IV.75) равен

$$a_1 = 631/110 = 5{,}73.$$

Уравнение регрессии первого порядка имеет вид

$$\hat{y} = 25{,}6 + 5{,}73\,(z - 6).$$

Определим остаточную дисперсию $s^2_{1\,\text{ост}}$. Для этого по формулам (IV.71) и (IV.82) вычислим суммы:

$$SS_0 = \sum_{i=1}^{11} y_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^{11} y_i\right)^2}{11} = 10843 - \frac{78961}{11} = 3665,$$

$$SS_1 = SS_0 - a_1^2 \sum_{i=1}^{11} P_1^2(i) = 3665 - 5{,}73^2 \cdot 110 = 53,$$

откуда

$$s^2_{1\,\text{ост}} = \frac{SS_1}{n-2} = \frac{53}{9} = 5{,}9.$$

Определим теперь уравнение регрессии второго порядка:

$$\hat{y} = a_0 P_0(z) + a_1 P_1(z) + a_2 P_2(z).$$

По формуле (IV.65) $P_2(z)$ равно

$$P_2(z) = z^2 - 12z + 26.$$

По формуле (IV.79) находим

$$\sum_{i=1}^{11} P_2^2(i) = \frac{11\,(121-1)\,(121-9)}{180} = 858$$

и определяем

$$a_2 = 193/858 = 0{,}225.$$

В результате получим уравнение регрессии второго порядка:

$$\hat{y} = 25{,}6 + 5{,}73\,(z-6) + 0{,}225\,(z^2 - 12z + 26).$$

Определим остаточную дисперсию $s^2_{2\,\text{ост}}$:

$$s^2_{2\,\text{ост}} = \frac{SS_2}{n-3} = \frac{SS_1 - a_2^2 \sum_{i=1}^{n} P_2^2(i)}{n-3} = \frac{53 - 0{,}225^2 \cdot 858}{8} = \frac{9{,}6}{8} = 1{,}2.$$

Проверим значимость различия $s^2_{1\,\text{ост}}$ и $s^2_{2\,\text{ост}}$ по критерию Фишера:

$$F = s^2_{1\,\text{ост}} / s^2_{2\,\text{ост}} = 5{,}9/1{,}2 = 4{,}9,$$

$$F_{0{,}95}(9, 8) = 3{,}4,$$

$$F > F_{1-p}(f_1, f_2),$$

значит, уравнение второго порядка является существенным уточнением уравнения первого порядка. Определим уравнение регрессии третьего порядка:

$$\hat{y} = a_0 P_0(z) + a_1 P_1(z) + a_2 P_2(z) + a_3 P_3(z).$$

Подставляя $n = 11$ в формулу (IV.66), получим

$$P_3(z) = z^3 - 18z^2 + 90{,}2z - 191{,}1.$$

По формуле (IV.80) находим

$$\sum_{i=1}^{11} P_3^2(i) = \frac{11\,(121-1)\,(121-4)\,(121-9)}{2800} = 6177{,}7,$$

откуда

$$a_3 = 67{,}2/177{,}6 = 0{,}0109,$$

и уравнение регрессии третьего порядка имеет вид

$$\hat{y} = 25{,}6 + 5{,}73\,(z-6) + 0{,}225\,(z^2 - 12z + 26) + \\ + 0{,}0109\,(z^3 + 18z^2 + 90z - 191{,}1).$$

Проверим существенность перехода от уравнения регрессии второго порядка к уравнению третьего порядка. Для этого определим

$$s^2_{3\,\text{ост}} = \frac{SS_3}{n-4} = \frac{SS_2 - a_3^2 \sum_{i=1}^{n} P_3^2(i)}{n-4} = \frac{9{,}6 - 0{,}0109^2 \cdot 6177{,}6}{7} = \frac{8{,}9}{7} = 1{,}27,$$

$$s^2_{3\,\text{ост}} > s^2_{2\,\text{ост}}.$$

Следовательно, нужно остановиться на регрессии второго порядка. Делая обратную замену y и z на α и t, получим

$$1000\,(\alpha - 0{,}178) = 25{,}6 + 5{,}73\left(\frac{t-260}{20} - 6\right) + \\ + 0{,}225\left[\left(\frac{t-260}{20}\right)^2 - 12\,\frac{t-260}{20} + 26\right]$$

и окончательно

$$\alpha = 0{,}1731 - 0{,}000139t + 0{,}00000056t^2.$$

Полученное уравнение является окончательным в классе полиномов. Оценим тесноту найденной связи при помощи корреляционного отношения (IV.89):

$$\theta = \sqrt{1-\xi},$$

$$\xi = SS_2/SS_0 = 9{,}6/3665 = 0{,}00272,$$

$$\theta = \sqrt{1 - 0{,}00272} = 0{,}986.$$

Корреляционное отношение θ близко к 1, следовательно, найденная связь близка к строго функциональной.

7. Трансцендентная регрессия. При малых объемах выборки n увеличение порядка полинома может привести к росту остаточной дисперсии. Чтобы уменьшить число определяемых коэффициентов, используют *трансцендентную регрессию*. Вычисление коэффициентов трансцендентной регрессии может оказаться весьма трудоемким вследствие необходимости решать систему нелинейных уравнений. Вычисление упрощается, если провести замену переменных. Например, зависимости показательного типа и дробно-степенного

$$\hat{y} = b_0 b_1^x, \qquad \text{(IV.83)}$$

$$\hat{y} = b_0 x^{b_1} \qquad \text{(IV.84)}$$

линеаризуются логарифмированием:

$$\lg \hat{y} = \lg b_0 + x \lg b_1, \qquad \text{(IV.85)}$$

$$\lg \hat{y} = \lg b_0 + b_1 \lg x; \qquad \text{(IV.86)}$$

положив

$$\lg \hat{y} = \hat{z}, \quad \lg b_0 = a_0 \text{ и } \lg b_1 = a_1, \quad \lg x = t,$$

получим линейные уравнения относительно новых переменных:

$$\hat{z} = a_0 + a_1 x, \quad \hat{z} = a_0 + b_1 t.$$

Коэффициенты a_0, a_1, b_1 определяются по методу наименьших квадратов. По полученным a_0 и a_1 определяются коэффициенты b_0 и b_1. Однако следует иметь в виду, что полученные таким образом коэффициенты уравнений регрессии (IV.83) и (IV.84) являются смещенными оценками для соответствующих генеральных коэффициентов.

8. Оценка тесноты нелинейной связи. Если считать, что уравнение регрессии найдено с достаточной точностью, то остаточная дисперсия обусловлена только наличием дисперсии воспроизводимости, т. е.

$$s^2_{\text{ост}} \approx s^2_{\text{воспр}}. \qquad \text{(IV.87)}$$

Чем меньше доля $s^2_{\text{ост}} \approx s^2_{\text{воспр}}$ в общей дисперсии s^2_y, тем сильнее связь между Y и X, так как меньше доля случайности в этой связи. Поэтому силу связи можно характеризовать величиной

$$\xi = \frac{(n-l)\, s^2_{\text{ост}}}{(n-1)\, s^2_y}, \qquad \text{(IV.88)}$$

где

$$s^2_{\text{ост}} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-l},$$

$$s^2_y = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2}{n-1}$$

и

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n}.$$

Связь тем сильнее, чем меньше ξ. Величина

$$\sqrt{1-\xi} = \theta \qquad \text{(IV.89)}$$

называется *корреляционным отношением*. Чем больше θ, тем сильнее связь

$$0 < \theta < 1. \tag{IV.90}$$

Если $\theta = 1$, то существует функциональная зависимость между параметрами. Однако при $\theta = 0$ величины Y и X нельзя считать независимыми, так как связь между ними, не сказываясь на дисперсиях, может проявить себя в моментах более высокого порядка. И только при нормальном распределении равенство нулю корреляционного отношения однозначно свидетельствует об отсутствии связи между случайными величинами. Корреляционное отношение, как и коэффициент корреляции в линейной регрессии, характеризует тесноту связи между случайными величинами. Вообще анализ силы связи по θ называют *корреляционным анализом*.

При линейной регрессии корреляционное отношение равно коэффициенту корреляции:

$$\theta = \sqrt{1 - \frac{n-2}{n-1}\,\frac{s^2_{\text{ост}}}{s^2_y}} = |r^*|. \tag{IV.91}$$

9. Метод множественной корреляции. Если необходимо исследовать корреляционную связь между многими величинами, то пользуются уравнениями множественной регрессии:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_k x_k. \tag{IV.92}$$

Уравнение (IV.92) представляет собой поверхность регрессии при $k = 2$ и гиперповерхность при $k > 2$. Эту поверхность называют поверхностью отклика. При построении поверхности отклика на координатных осях факторного пространства откладываются численные значения параметров (факторов). Исходный статистический материал представлен в табл. 26.

Таблица 26. **Исходный статистический материал в натуральном масштабе**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	...	x_k	y
1	x_{11}	x_{21}	x_{31}		x_{k1}	y_1
2	x_{12}	x_{22}	x_{32}		x_{k2}	y_2
3	x_{13}	x_{23}	x_{33}		x_{k3}	y_3
.	.	.	.		.	.
.	.	.	.		.	.
.	.	.	.		.	.
n	x_{1n}	x_{2n}	x_{3n}		x_{kn}	y_n

Перейдем от натурального масштаба к новому, проведя нормировку всех значений случайных величин по формулам:

$$y^0_i = \frac{y_i - \bar{y}}{s_y}; \quad x^0_{ji} = \frac{x_{ji} - \bar{x}_j}{s_{x_j}}; \tag{IV.93}$$

$$i = 1, 2, \ldots, n; \quad j = 1, 2, \ldots, k,$$

где y_i^0, x_{ji}^0 – нормированные значения соответствующих факторов; $\overline{y}$, $\overline{x}_j$ – средние значения факторов; s_y, s_{x_j} – среднеквадратичные отклонения факторов:

$$s_y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y})^2}{n-1}}; \qquad s_{x_j} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{ji} - \overline{x_j})^2}{n-1}}.$$

В табл. 27 приведен исходный статистический материал в новом масштабе:

Таблица 27. **Исходный статистический материал в безразмерном масштабе**

Номер опыта	x_1^0	x_2^0	x_3^0	...	x_k^0	y^0
1	x_{11}^0	x_{21}^0	x_{31}^0		x_{k1}^0	y_1^0
2	x_{12}^0	x_{22}^0	x_{32}^0		x_{k2}^0	y_2^0
3	x_{13}^0	x_{23}^0	x_{33}^0		x_{k3}^0	y_3^0
.						
.						
.						
n	x_{1n}^0	x_{2n}^0	x_{3n}^0		x_{kn}^0	y_n^0

В новом масштабе имеем:

$$\overline{x_j^0} = 0, \quad \overline{y^0} = 0 \quad \text{и} \quad s_{x_j^0} = 1, \quad s_{y^0} = 1. \tag{IV.94}$$

Выборочный коэффициент корреляции при этом равен

$$r^*_{y^0 x_j^0} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n} y_i^0 x_{ji}^0, \tag{IV.95}$$

$$r^*_{x_l^0 x_m^0} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n} x_{l_i}^0 x_{m_i}^0, \quad l, m = 1, 2, \ldots, k, \; l > m.$$

Вычисленный по формуле (IV.95) выборочный коэффициент корреляции равен коэффициенту корреляции между переменными, выраженными в натуральном масштабе $r^*_{yx_j}$, $r^*_{x_l x_m}$. Уравнение регрессии между нормированными переменными не имеет свободного члена и принимает вид

$$\hat{y}^0 = a_1 x_1^0 + a_2 x_2^0 + \cdots + a_k x_k^0. \tag{IV.96}$$

Коэффициенты уравнения (IV.96) находятся из условия

$$S = \sum_{i=1}^{n}(y_i^0 - \hat{y}_i^0)^2 = \min.$$

Условия минимума функции S определяются так же, как для зависимости от одной переменной:

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = 0; \quad \frac{\partial S}{\partial a_2} = 0; \quad \cdots; \quad \frac{\partial S}{\partial a_k} = 0, \tag{IV.97}$$

и система нормальных уравнений имеет вид

$$\begin{aligned}
a_1 \sum_{i=1}^{n} \left(x_{1i}^0\right)^2 + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_{1i}^0 x_{2i}^0 + \cdots + a_k \sum_{i=1}^{n} x_{1i}^0 x_{ki}^0 &= \sum_{i=1}^{n} x_{1i}^0 y_i^0, \\
a_1 \sum_{i=1}^{n} x_{2i}^0 x_{1i}^0 + a_2 \sum_{i=1}^{n} \left(x_{2i}^0\right)^2 + \cdots + a_k \sum_{i=1}^{n} x_{2i}^0 x_{ki}^0 &= \sum_{i=1}^{n} x_{2i}^0 y_i^0, \\
\cdots\cdots\cdots

ниваемая коэффициентом множественной корреляции. Формула для коррекции

$$R' = \sqrt{1 - (1 - R^2)\frac{n-1}{n-l}}, \qquad \text{(IV.102)}$$

где R' — скорректированное значение коэффициента множественной корреляции; l — число коэффициентов уравнения регрессии. В уравнении (IV.92) $l = k + 1$.

От уравнения (IV.96) можно перейти к натуральному масштабу по формулам

$$b_j = a_j \frac{s_y}{s_{x_j}}, \quad j = 1, 2, \ldots, k; \quad j \neq 0, \qquad \text{(IV.103)}$$

$$b_0 = \bar{y} - \sum_{i=1}^{n} b_j \bar{x}_j.$$

При наличии параллельных опытов можно рассчитать дисперсию воспроизводимости и провести статистический анализ уравнения регрессии.

Пример 4. Необходимо получить зависимость степени извлечения серной кислоты (y) из травильных растворов от следующих факторов: x_1 — концентрации H_2SO_4 в исходном растворе; x_2 — концентрации сульфата железа $FeSO_4$; x_3 — объемного соотношения спирт — кислота. Исходным статистическим материалом служит выборка объемом в 105 измерений, полученная пассивным экспериментом.

Р е ш е н и е. Известно, что зависимость между степенью извлечения серной кислоты и выбранными факторами в исследуемой области носит линейный характер. В связи с этим определим эту зависимость в виде линейного уравнения регрессии

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

методом множественной корреляции. По формулам (IV.93) все результаты эксперимента переводим в стандартный масштаб. Затем по (IV.95) вычисляем выборочные коэффициенты корреляции:

$$r^*_{yx_1} = 0{,}212, \quad r^*_{yx_2} = 0{,}043, \quad r^*_{yx_3} = 0{,}903, \quad r^*_{x_1x_2} = -0{,}417,$$

$$r^*_{x_1x_3} = -0{,}128, \quad r^*_{x_2x_3} = 0{,}046.$$

Полученные значения коэффициентов корреляции подставляем в систему уравнений (IV.99). В результате получим

$$\begin{aligned} a_1 - 0{,}417a_2 - 0{,}128a_3 &= 0{,}212, \\ -0{,}417a_1 + a_2 + 0{,}046a_3 &= 0{,}043, \\ -0{,}128a_1 + 0{,}046a_2 + a_3 &= 0{,}903. \end{aligned}$$

Решив систему, получим $a_1 = 0{,}397$, $a_2 = 0{,}166$, $a_3 = 0{,}903$ и уравнение регрессии в стандартном масштабе:

$$\hat{y}^0 = 0{,}397x_1^0 + 0{,}166x_2^0 + 0{,}903x_3^0.$$

По формулам (IV.103) перейдем к натуральному масштабу:

$$\hat{y} = -26{,}5 + 1{,}987x_1 + 1{,}17x_2 + 14{,}14x_3.$$

Проверим адекватность полученного уравнения по критерию Фишера:

$$F = s^2_{\text{ост}} / s^2_{\text{воспр}}.$$

Дисперсию воспроизводимости определим по данным трех параллельных опытов

$$s^2_{\text{воспр}} = \frac{\sum_{u=1}^{3} (y_u^0 - \bar{y}^0)}{2} = 3{,}82,$$

где $\bar{y}^0$ — среднее по параллельным опытам.

Число степеней свободы $s^2_{\text{воспр}}$ равно 2. Остаточную дисперсию определим по формуле (IV.53):

$$s^2_{\text{ост}} = \frac{\sum_{i=1}^{105} (y_i - \hat{y}_i)^2}{105 - 4} = 36{,}03.$$

Число степеней свободы $s^2_{\text{ост}}$ равно 101; F-отношение равно 9,4. Табличное значение критерия Фишера для уровня значимости $p = 0{,}05$ и чисел степеней свободы $f_1 = 101$ и $f_2 = 2$ F_{1-p} $(f_1, f_2) = 19{,}5$. Следовательно, полученное уравнение регрессии адекватно эксперименту.

10. Регрессионный анализ в матричной форме. Регрессионный анализ в матричной форме удобен для решения задач на ЦВМ. Методом наименьших квадратов необходимо найти коэффициенты уравнения регрессии по данным табл. 26

$$y = b_0 x_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_k x_k,$$

где x_0 — фиктивная переменная, равная 1.

Представим исходный статистический материал в матричной форме. Будем называть матрицу

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} x_{01} & x_{11} \cdots x_{k1} \\ x_{02} & x_{12} \cdots x_{k2} \\ \vdots & \vdots \quad \vdots \\ x_{0n} & x_{1n} \cdots x_{kn} \end{bmatrix} \qquad \text{(IV.104)}$$

матрицей независимых переменных, а матрицу-столбец

$$\boldsymbol{Y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \qquad \text{(IV.105)}$$

вектором наблюдений.

Введем матрицу-столбец коэффициентов $\boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$ и матрицу, транспонированную к $\boldsymbol{X}$:

$$\boldsymbol{X}^T = \begin{bmatrix} x_{01} & x_{02} \cdots x_{0n} \\ x_{11} & x_{12} \cdots x_{1n} \\ \cdots & \cdots \cdots \\ x_{k1} & x_{k2} \cdots x_{kn} \end{bmatrix}. \qquad \text{(IV.106)}$$

Система нормальных уравнений для определения $b_0, b_1, \ldots, b_k$ имеет вид

$$\begin{aligned}
b_0 \sum_{i=1}^{n} x_{0i}^2 + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_{0i}x_{1i} + \cdots + b_k \sum_{i=1}^{n} x_{0i}x_{ki} &= \sum_{i=1}^{n} x_{0i}y_i, \\
b_0 \sum_{i=1}^{n} x_{1i}x_{0i} + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_{1i}^2 + \cdots + b_k \sum_{i=1}^{n} x_{1i}x_{ki} &= \sum_{i=1}^{n} x_{1i}y_i, \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
b_0 \sum_{i=1}^{n} x_{ki}x_{0i} + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_{ki}x_{1i} + \cdots + b_k \sum_{i=1}^{n} x_{ki}^2 &= \sum_{i=1}^{n} x_{ki}y_i.
\end{aligned} \tag{IV.107}$$

В матричной форме система нормальных уравнений запишется следующим образом:

$$\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{Y}. \tag{IV.108}$$

Действительно, перемножив матрицу $\boldsymbol{X}^T$ и $\boldsymbol{X}$, имеем

$$\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_{0i}^2 & \sum_{i=1}^{n} x_{0i}x_{1i} & \cdots & \sum_{i=1}^{n} x_{0i}x_{ki} \\ \sum_{i=1}^{n} x_{1i}x_{0i} & \sum_{i=1}^{n} x_{1i}^2 & \cdots & \sum_{i=1}^{n} x_{1i}x_{ki} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum_{i=1}^{n} x_{ki}x_{0i} & \sum_{i=1}^{n} x_{ki}x_{1i} & \cdots & \sum_{i=1}^{n} x_{ki}^2 \end{bmatrix}. \tag{IV.109}$$

$\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}$ — матрица моментов. Умножив матрицу $\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}$ на матрицу-столбец B, получим матрицу-столбец:

$$\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} b_0 \sum_{i=1}^{n} x_{0i}^2 + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_{0i}x_{1i} + \cdots + b_k \sum_{i=1}^{n} x_{0i}x_{ki} \\ b_0 \sum_{i=1}^{n} x_{1i}x_{0i} + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_{1i}^2 + \cdots + b_k \sum_{i=1}^{n} x_{1i}x_{ki} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ b_0 \sum_{i=1}^{n} x_{ki}x_{0i} + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_{ki}x_{1i} + \cdots + b_k \sum_{i=1}^{n} x_{ki}^2 \end{bmatrix}. \tag{IV.110}$$

Умножив матрицу X^T на вектор наблюдений Y, получим

$$\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_{0i}y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_{1i}y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{n} x_{ki}y_i \end{bmatrix}. \tag{IV.111}$$

Из уравнения (IV.108) матрица-столбец коэффициентов $\boldsymbol{B}$ определяется следующим образом:

$$\boldsymbol{B} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{Y}, \tag{IV.112}$$

где $(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}$ — матрица, обратная матрице $(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})$;

$$(\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} = \begin{bmatrix} c_{00} & c_{01} & \dots & c_{0k} \\ c_{10} & c_{11} & \dots & c_{1k} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ c_{k0} & c_{k1} & \dots & c_{kk} \end{bmatrix}. \tag{IV.113}$$

Элементы обратной матрицы определяются соотношением

$$c_{ju} = \frac{A_{uj}}{\det (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})}, \tag{IV.114}$$

где $\det (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})$ — определитель матрицы $\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}$, а A_{uj} — алгебраическое дополнение элемента $\sum_{i=1}^{n} x_{ui}x_{ji}$ в матрице $\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}$.

Для существования обратной матрицы $(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})$ должна быть невырожденной. В связи с этим при использовании рассматриваемого вычислительного метода необходимо, чтобы переменные x_1, x_2,...,x_k были линейно независимы. Тогда в матрице независимых переменных элементы одного столбца не будут линейной комбинацией соответствующих элементов других столбцов.

Для определения остаточной дисперсии определяют матрицу-столбец $\hat{Y}$:

$$\hat{\boldsymbol{Y}} = \begin{bmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_n \end{bmatrix} = \boldsymbol{XB}. \tag{IV.115}$$

Числитель остаточной дисперсии получается умножением матриц:

$$\left[\boldsymbol{Y} - \hat{\boldsymbol{Y}}\right]^T \left[\boldsymbol{Y} - \hat{\boldsymbol{Y}}\right] = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \hat{y}_i\right)^2. \tag{IV.116}$$

Обозначим через β вектор-столбец коэффициентов истинной регрессии, при этом математическое ожидание $\boldsymbol{B}$ равно $M(\boldsymbol{B}) = \beta$. Тогда

$$M\left[(\boldsymbol{B} - \beta)(\boldsymbol{B} - \beta^T)\right] = \begin{bmatrix} \sigma^2_{b_0} & \operatorname{cov}_{b_0 b_1} \dots \operatorname{cov}_{b_0 b_k} \\ \operatorname{cov}_{b_1 b_0} & \sigma^2_{b_1} \dots \operatorname{cov}_{b_1 b_k} \\ \cdot & \cdot \\ \operatorname{cov}_{b_k b_0} & \operatorname{cov}_{b_k b_1} \dots \sigma^2_{b_k} \end{bmatrix}, \tag{IV.117}$$

где $\sigma^2_{b_j}$ — генеральная дисперсия коэффициента b_j; $\operatorname{cov}_{b_j b_u}$ — ковариация, или корреляционный момент, между коэффициентами b_j и b_u.

Таким образом, диагональные члены матрицы представляют собой дисперсии коэффициентов, необходимые для проверки гипотезы

значимости, а недиагональные — ковариации соответствующих коэффициентов регрессии, определяющие статистическую зависимость между коэффициентами. Выразим матрицу $M[(\boldsymbol{B}-\boldsymbol{\beta})(\boldsymbol{B}-\boldsymbol{\beta})^T]$ через результаты наблюдений, имея в виду, что $\boldsymbol{B}=(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y}$. В результате получим

$$M[(\boldsymbol{B}-\boldsymbol{\beta})(\boldsymbol{B}-\boldsymbol{\beta})^T]=M\{(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y}^0[(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{Y}^0]^T\},$$

где $\boldsymbol{Y}^0$ — случайный нормальный вектор с независимыми компонентами, имеющими дисперсии σ_y^2:

$$\boldsymbol{Y}^0=\boldsymbol{Y}-M(\boldsymbol{Y})=\begin{bmatrix} y_1-m(y_1)\\ y_2-m(y_2)\\ \vdots\\ y_n-m(y_n)\end{bmatrix}$$

Матрица коэффициентов нормальных уравнений симметрична и, следовательно,

$$[(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}]^T=(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}.$$

Полагая $\sigma_{y_1}^2=\sigma_{y_2}^2=\ldots=\sigma_{y_n}^2=\sigma_y^2$ и учитывая статистическую независимость ошибок, получаем

$$M(\boldsymbol{Y}^0\boldsymbol{Y}^{0T})=\begin{bmatrix}\sigma_{y_1}^2 & & 0\\ & \sigma_{y_2}^2 & \\ & \ddots & \\ 0 & & \sigma_{y_n}^2\end{bmatrix}=\boldsymbol{E}\sigma_y^2. \qquad (IV.118)$$

Таким образом, имеем

$$M[(\boldsymbol{B}-\boldsymbol{\beta})(\boldsymbol{B}-\boldsymbol{\beta})^T]=(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\sigma_y^2. \qquad (IV.119)$$

Отсюда

$$\sigma_{b_j}^2=c_{jj}\sigma_y^2;\quad \mathrm{cov}_{b_jb_u}=c_{ju}\sigma_y^2. \qquad (IV.120)$$

Матрица $(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}$ называется матрицей ошибок или *ковариационной матрицей*. Так как ковариационная матрица недиагональна и, следовательно, все коэффициенты регрессии взаимно связаны, нельзя проверить значимость каждого коэффициента в отдельности. Поэтому отношения

$$t_j=\frac{|b_j|}{s_y\sqrt{c_{jj}}} \qquad (IV.121)$$

можно рассматривать только как средство ранжировки факторов. Используется процедура последовательного исключения незначимых факторов: фактор, для которого t_j оказывается наименьшим, исключается, и расчет повторяется. Исключение факторов производится до тех пор, пока уменьшается остаточная дисперсия. При этом улучшаются интерполяционные свойства уравнения регрессии, однако полученные коэффициенты оказываются смещенными оценками для соответствующих генеральных коэффициентов. При большом числе факторов для расчета множественной регрессии необходимо использовать ЦВМ.

При решении линейных алгебраических систем часто приходится сталкиваться с проблемой плохой обусловленности этих систем. Так, если для системы $XB = Y$ малым изменениям элементов матрицы X или вектора Y отвечают достаточно большие изменения решений (элементов вектора B), то система плохо обусловлена. В противном случае система обусловлена хорошо. Погрешности в определении экспериментальных величин x и y сказываются на определяемых величинах коэффициентов и при плохой обусловленности влекут за собой сильные вариации в значении коэффициентов и, следовательно, малую достоверность полученных результатов расчета.

Хорошая или плохая обусловленность тесно связана с величинами определителя матрицы (X^TX) и ее элементов. Введено большое число различных критериев, определяющих обусловленность.

Для плохо обусловленных систем возникает проблема выбора алгоритма решения. При проведении расчетов по рассмотренному алгоритму на каждом шаге будет возникать некоторая ошибка, например, за счет округления или заданной точности на ЦВМ, а также ощутимая потеря значащих цифр в результате вычитаний. В конечном итоге это может привести к достаточно сильному искажению решения. Для таких систем требуются так называемые устойчивые алгоритмы, позволяющие исключить появление нежелательных ошибок, связанных, в частности, с плохой обусловленностью. Наиболее общим и наиболее часто используемым подходом является метод регуляризации, разработанный А. Н. Тихоновым.

Проблем, связанных с плохой обусловленностью, не возникает при обработке планированного эксперимента (см. гл. V).

11. Метод группового учета аргументов (МГУА). Метод группового учета аргументов, предложенный А. Г. Ивахненко, существенно уменьшает вычислительные трудности, возникающие при применении метода наименьших квадратов в задачах большой размерности. МГУА дает возможность решение исходной многофакторной задачи свести к решению большого числа сравнительно простых задач аппроксимации экспериментальных данных функциями двух переменных — полиномами обычно невысокого порядка. Метод Ивахненко состоит в выборе иерархии частных моделей вместо одной общей модели. На каждой из стадий этого процесса производится отбор наилучших, в некотором смысле, полиномов, которые используются на следующей стадии в качестве фиктивных аргументов новых полиномов.

На рис. 27 приведена схема применения МГУА. Каждая частная модель имеет два входа и один выход. Параметры частных моделей (коэффициенты частных полиномов) подбираются так, чтобы как можно точнее аппроксимировать величину y. В качестве частных полиномов используют линейные уравнения для двух факторов:

$$v = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2, \qquad \text{(IV.122)}$$

уравнения с эффектом парного взаимодействия

$$v = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 \qquad \text{(IV.123)}$$

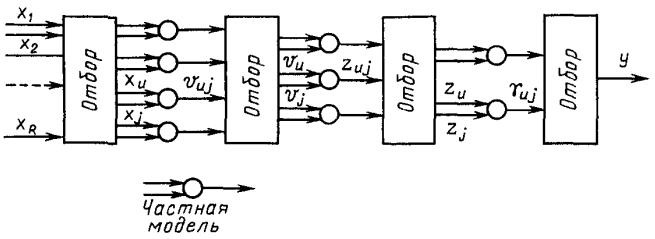


Рис. 27. Схема МГУА

или второго порядка

$$v = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2. \qquad \text{(IV.124)}$$

Последовательно образуя, согласно схеме на рис. 27, новые переменные, стараются в конце концов получить расчетные значения $\hat{y}$, являющиеся хорошей аппроксимацией экспериментальных данных. Пусть исходные экспериментальные данные представлены в табл. 26. Разобьем совокупность экспериментальных данных на три множества:

обучающее $M_0 = \{ x_i^э,\ y_i^э \},\quad i = 1,\ 2,\ \ldots,\ n_1;$

проверочное $M_п = \{ x_i^э,\ y_i^э \},\quad i = n_1 + 1,\ n_1 + 2,\ \ldots,\ n_2;$

контрольное $M_к = \{ x_i^э,\ y_i^э \},\quad i = n_2 + 1,\ n_2 + 2,\ \ldots,\ n.$

На первом этапе (рис. 27) построим C_k^2 частных полиномов для двух факторов x_u и x_j, например, вида (IV. 124):

$$v_{uj} = b_{0uj} + b_u x_u + b_j x_j + b_{uj} x_u x_j + b_{uu} x_u^2 + b_{jj} x_j^2;$$

$$u,\ j = 1,\ 2,\ \ldots,\ k;\quad u \neq j.$$

Коэффициенты частных полиномов определим методом наименьших квадратов по данным табл. 26, принадлежащим обучающему множеству M_0, при этом число точек в множестве n_1 должно быть больше числа коэффициентов в частном полиноме. При определении каждого частного полинома на первой стадии (рис. 27) минимизируется сумма квадратов отклонений вида

$$\Phi_1 = \sum_{i=1}^{n_1} \left[y_i - \hat{v}_{uj}(i) \right]^2. \qquad \text{(IV.125)}$$

Среди полученных полиномов необходимо выбрать лучшие. Используем для этой цели проверочное множество экспериментальных точек $M_п$. Вычислим v_{uj} для каждого полинома во всех точках множества $M_п$ и определим средние квадратичные ошибки аппроксимации экспериментальных данных проверочного множества $M_п$ каждым частным полиномом:

$$s_{uj} = \sqrt{\frac{1}{n_2 - n_1} \sum_{i=n_1+1}^{n_2} [y_i - v_{uj}(i)]^2}\,; \qquad \text{(IV.126)}$$

$$u,\ j = 1,\ 2,\ \ldots,\ k;\quad u \neq j.$$

Среди ошибок аппроксимации найдем наименьшую и обозначим ее s_{*1}. Выберем среди частных полиномов m_1 лучших (v_1, v_2,...,v_m), которым соответствуют меньшие ошибки аппроксимации s_{uj}. В методе группового учета аргументов процедура выбора числа лучших полиномов наименее формализована. Чрезмерное уменьшение числа отбираемых на следующую стадию полиномов может привести к потере значимых факторов, увеличение m — к резкому росту объема вычислений.

Вычислим значения $v_j(i)$, j=1,2,...,m_1 отобранных полиномов во всех точках обучающего множества M_0 и контрольного $M_к$. Полученные значения $v_j(i)$ на контрольном множестве $M_к$ используем для определения средних квадратических ошибок δ_j :

$$\delta_j = \sqrt{\frac{1}{n - n_2} \sum_{i=n_2}^{n} [y_i - v_j(i)]^2}\ . \qquad \text{(IV.127)}$$

Среди всех величин δ_j найдем наименьшую и обозначим ее δ_{*1}. Эта величина используется на следующих стадиях аппроксимации.

На второй стадии отобранные полиномы v_1, v_2,...,v_{m_1} служат аргументами новых частных полиномов:

$$z_{uj} = b_{0uj} + b_u v_u + b_j v_j + b_{uj} v_u v_j + b_{uu} v_u^2 + b_{jj} v_j^2\,; \qquad \text{(IV.128)}$$

$$u,\ j = 1,\ 2,\ \ldots,\ m_1;\quad u \neq j.$$

Число полиномов (IV.128) на второй стадии равно $C_{m_1}^2$.

Коэффициенты новых частных полиномов определяются методом наименьших квадратов на обучающем множестве M_0, значения $v_j(i)$ и $v_u(i)$, j, $u = 1, 2, \ldots, m_1$; $j \neq u$; $i = 1, 2, \ldots, n_1$ были вычислены на первой стадии. При определении коэффициентов полиномов (IV.128) минимизируется сумма квадратов отклонений вида

$$\Phi_2 = \sum_{i=1}^{n_1} \left[y_i - \hat{z}_{uj}(i) \right]^2. \qquad \text{(IV.129)}$$

Для выборки лучших полиномов воспользуемся проверочным множеством точек $M_п$. Вычислим z_{uj} для каждого нового частного полинома во всех точках множества $M_п$ и определим средние квадратичные ошибки аппроксимации экспериментальных данных проверочного множества $M_п$, подставив для этого в формулу (IV.129) z_{uj} вместо v_{uj}. Среди ошибок аппроксимации снова найдем наименьшую и обозначим ее s_{*2}. Выберем среди новых частных полиномов m_2 лучшие z_1, z_2, ..., z_{m_2}, которым соответствуют меньшие ошибки аппроксимации эксперимен-

тальных точек на множестве $M_п$. Число отобранных полиномов m_2 меньше отобранных на первой стадии отбора $m_2 < C^2_{m_1}$. Каждый такой полином представляет собой зависимость уже от четырех факторов, поэтому вероятность аппроксимации им с требуемой точностью экспериментальных данных табл. 26 выше, чем полиномами, полученными на первой стадии. В связи с этим необходимо выяснить целесообразность перехода к третьей стадии аппроксимации. Процедура последовательной аппроксимации оканчивается, когда средняя квадратичная ошибка аппроксимации экспериментальных данных контрольного множества $M_к$ лучшим полиномом δ_* статистически незначимо отличается от ошибки воспроизводимости. Для проверки точности аппроксимации вычислим средние квадратичные ошибки δ_j на множестве $M_к$:

$$\delta_j = \sqrt{\frac{1}{n - n_2} \sum_{i=n_2}^{n} [y_i - z_j(i)]^2}, \quad j = 1, 2, \ldots, m_2. \quad \text{(IV.130)}$$

Найдем наименьшую среди всех δ_j и обозначим δ_{*2}.

Если окажется, что δ_{*2} статистически незначимо отличается от ошибки воспроизводимости, то процедура аппроксимации закончена. Если же δ_{*2} существенно больше ошибки воспроизводимости, необходима третья стадия аппроксимации, на которой уже в качестве фиктивных аргументов будут использоваться полиномы $z_1, z_2, \ldots, z_{m_2}$.

При отсутствии информации об ошибке воспроизводимости для окончания процесса аппроксимации можно применять величину

$$\varepsilon = |\delta_{*1} - \delta_{*2}| / \delta_{*2}. \quad \text{(IV.131)}$$

Если ε относительно невелико, например менее 0,1—0,15, то дальнейшая аппроксимация малоэффективна.

Следует отметить, что во многих случаях величина δ_* возрастает с ростом числа стадий аппроксимации. Это явление называют неустойчивостью МГУА. Неустойчивость МГУА проявляется и в изменении величины s^*, которая с ростом числа стадий вначале убывает, а затем начинает быстро возрастать. Величина s^* менее чувствительна к росту числа стадий, чем δ_*, так как точки, принадлежащие проверочному множеству $M_п$, участвуют в формировании аппроксимирующего полинома. Рекомендуется заканчивать процедуру последовательной аппроксимации на стадии, соответствующей минимальному значению s^*.

Многие вопросы применения и обоснования метода группового учета аргументов еще нуждаются в детальной разработке. Важным достоинством этого метода является возможность на каждой стадии аппроксимации иметь дело с информационной матрицей порядка, не превышающего 6×6, что в общем случае способствует улучшению ее обусловленности.

12. Метод главных компонент. Метод главных компонент был предложен Пирсоном (1901) и позднее детально разработан Хотеллингом (1933). Метод дает возможность от непосредственно измеряемых факторов $x_i (i = 1, \ldots, k)$ перейти к их некоррелированным линейным комбинациям:

$$v_j = \sum_{i=1}^{k} u_{ji} x_i, \quad i, j = 1, 2, \ldots, k, \tag{IV.132}$$

дисперсии которых убывают, т. е.

$$s^2_{v_1} \geqslant s^2_{v_2} \geqslant \cdots \geqslant s^2_{v_k}.$$

Коэффициентами линейных комбинаций, нагрузками i-й переменной в j-й компоненте u_{ji} являются элементы собственных векторов матрицы ковариаций, а дисперсии компонент равны собственным числам этой матрицы.

Пусть $\boldsymbol{X}$ — матрица центрированных наблюдений с нулевым вектором средних:

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{21} \cdots x_{k1} \\ x_{12} & x_{22} \cdots x_{k2} \\ \vdots & \vdots \quad \vdots \\ x_{1n} & x_{2n} \cdots x_{kn} \end{pmatrix}$$

Тогда матрица

$$\boldsymbol{L} = \frac{\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X}}{n-1} = (n-1)^{-1} \begin{pmatrix} \sum\limits_{i=1}^{N} x_{1i}^2 & \sum\limits_{i=1}^{N} x_{1i}x_{2i} \cdots \sum\limits_{i=1}^{N} x_{1i}x_{ki} \\ \sum\limits_{i=1}^{N} x_{2i}x_{1i} & \sum\limits_{i=1}^{N} x_{2i}^2 \cdots \sum\limits_{i=1}^{N} x_{2i}x_{ki} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \sum\limits_{i=1}^{N} x_{ki}x_{1i} & \sum\limits_{i=1}^{N} x_{ki}x_{2i} \cdots \sum\limits_{i=1}^{N} x_{ki}^2 \end{pmatrix} \tag{IV.133}$$

дисперсионно-ковариационная матрица наблюдений: ее диагональные элементы представляют собой дисперсии, недиагональные элементы — ковариации.

Если от центрированных переменных перейти к нормированным (см. IV.93), получим корреляционную матрицу:

$$R = \begin{pmatrix} 1 & r^*_{x_1x_2} \cdots r^*_{x_1x_k} \\ r^*_{x_2x_1} & 1 \quad \cdots r^*_{x_2x_k} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ r^*_{x_kx_1} & r^*_{x_kx_2} \cdots 1 \end{pmatrix}. \tag{IV.134}$$

Для любой симметрической матрицы $\boldsymbol{L}$ (или $\boldsymbol{R}$) существует ортогональная матрица $\boldsymbol{U}$, такая, что

$$\boldsymbol{U}^T \boldsymbol{L}\boldsymbol{U} = \lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \cdots 0 \\ 0 & \lambda_2 \cdots 0 \\ \cdots\cdots\cdots \\ 0 & 0 \cdots \lambda_k \end{pmatrix}, \tag{IV.135}$$

где λ_r $(r = 1, 2, \ldots, k)$ — собственные значения матрицы $\boldsymbol{L}$, а $\boldsymbol{U}$ является такой ортогональной матрицей, в которой r-й столбец является r-м собственным вектором, соответствующим r-му собственному числу. Соб-

ственные числа матрицы L определяются как корни характеристического многочлена

$$(L - \lambda E) = 0, \tag{IV.136}$$

где E — единичная матрица;

$$| L - \lambda E | = (-1)^k \lambda^k + (-1)^{k-1} p_1 \lambda^{k-1} + \cdots + p_k. \tag{IV.137}$$

Первый, второй и последний члены характеристического полинома матрицы L определяются просто: $p_1 = \mathrm{tr}(L)$ — след матрицы L (сумма ее диагональных элементов); $P_k = |L|$. Значительно трудней определить остальные члены характеристического полинома. Предложены следующие формулы для коэффициентов характеристического полинома:

$$\begin{array}{lll}
L_1 = L & p_1 = \mathrm{tr}\,(L_1) & B_1 = L_1 - p_1 E \\
L_2 = LB_1 & p_2 = \dfrac{1}{2}\,\mathrm{tr}\,(L_2) & B_2 = L_2 - p_2 E \\
\cdots\cdots & \cdots\cdots\cdots & \cdots\cdots\cdots \\
L_{k-1} = LB_{k-2} & p_{k-1} = \dfrac{1}{k-1}\,\mathrm{tr}\,(L_{k-1}) & B_{k-1} = L_{k-1} - p_{k-1} E \\
L_k = LB_{k-1} & p_k = \dfrac{1}{k}\,\mathrm{tr}\,(L_k) & B_k = L_k - p_k E
\end{array} \tag{IV.138}$$

где E — единичная матрица.

Геометрически нахождение главных компонент сводится к переходу к новой ортогональной системе координат. Первую координатную ось определяют так, чтобы соответствующая ей линейная комбинация извлекала возможно большую дисперсию, далее находят ортогональную ей ось, которая делает то же самое с оставшейся дисперсией, и т. д. От новых координат v_j можно вернуться к старым x_i:

$$x_i = \sum_{j=1}^{k} u_{ji} v_j, \quad i, j = 1, 2, \ldots, k, \tag{IV.139}$$

где v_j — j-я главная компонента; u_{ji} — масса j-й компоненты в i-й переменной.

Доля дисперсии, выраженная в %, объясняемая r-й компонентой, определяется следующим образом:

$$\gamma = \frac{\lambda_r}{\sum_{i=1}^{k} \lambda_i}\ 100\ \%. \tag{IV.140}$$

В ряде задач интересные выводы можно получить по небольшому числу компонент. В этих случаях метод главных компонент дает возможность уменьшить размерность задачи за счет того, что линейные комбинации, имеющие маленькие дисперсии, отбрасываются, а рассматриваются лишь линейные комбинации с большими дисперсиями.

Например, процесс характеризуется не одной выходной величиной, а целым набором коррелированных показателей. Желательно знать, какие

комбинации показателей объясняют большую долю дисперсии. Это определит, что следует изучать дальше. Главные компоненты можно рассматривать как новое множество измерений, полученных в результате линейной комбинации исходных измерений. Используя метод главных компонент, можно попытаться свести большое количество сильно коррелированных характеристик процесса к одной-двум обобщенным характеристикам или компонентам, что облегчит оценку качества процесса в каждой точке наблюдения. Все это будет иметь смысл только в том случае, если полученным линейным комбинациям удастся дать разумное физическое истолкование.

Метод главных компонент применяют и как способ ортогонализации матрицы независимых переменных. Если $\boldsymbol{V}$ — матрица значений главных компонент, полученная ортогональным преобразованием:

$$\boldsymbol{V} = \boldsymbol{XU}, \tag{IV.141}$$

то новые переменные v_j независимы и их ковариационная матрица диагональна:

$$\boldsymbol{V}^T \boldsymbol{V} = \boldsymbol{U}^T \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{XU} = (n-1)\, \boldsymbol{U}^T \boldsymbol{LU}. \tag{IV.142}$$

С учетом (IV.135) имеем

$$\boldsymbol{V}^T \boldsymbol{V} = (n-1)\, \lambda. \tag{IV.143}$$

Если $\boldsymbol{Y}$ — вектор значений выходной величины и все предпосылки регрессионного анализа выполняются, можно получить оценки коэффициентов линейного уравнения регрессии

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{VB}, \tag{IV.144}$$

где $\boldsymbol{B}$ — вектор коэффициентов.

В соответствии с (IV.143) получим

$$\boldsymbol{B} = (n-1)^{-1} \boldsymbol{L}^{-1} \boldsymbol{VY}, \tag{IV.145}$$

или для каждого коэффициента

$$b_j = (n-1)^{-1} \lambda_j^{-1} \sum_{i=1}^{n} u_{ji} y_i \tag{IV.146}$$

оценка значимости коэффициентов регрессии по главным компонентам проводится по t-критерию Стьюдента вполне корректно, так как все ковариации между коэффициентами равны нулю:

$$t_j = \frac{|\, b_j \,|}{s_{b_j}} = \frac{|\, b_j \,|}{\sqrt{(n-1)\, \lambda_j}\; s_{\text{воспр}}}. \tag{IV.147}$$

Можно показать, что коэффициенты регрессии по независимым переменным x и по главным компонентам связываются следующим образом:

$$b_j = \sum_{i=1}^{k} u_{ji} a_i l_i^{-1}, \tag{IV.148}$$

где a_i — коэффициент регрессии по переменной x_i, $i = 1, 2, \ldots, k$; b_j — коэффициент регрессии по компоненте v_j; u_{ji} — координаты j-го собственного вектора; l_i — масштабный множитель.

Главные компоненты не инвариантны к изменению масштаба тех шкал, по которым отсчитываются переменные. Обычно работают с

нормированными переменными, в качестве масштабного множителя берут величину, обратную среднему квадратичному отклонению $l_i = s_{x_i}^{-1}$, т. е. все вычисления проводятся для матрицы корреляции.

Метод главных компонент был успешно применен для построения математической модели промышленного процесса флотации калийных руд в условиях комбината Белоруськалий. В ходе пассивного эксперимента на комбинате фиксировались значения 20 входных и двух выходных параметров процесса. Были построены уравнения регрессии по главным компонентам для показателей процесса y_1 и y_2, проведена оценка значимости коэффициентов по формуле (IV.147). По уравнениям регрессии и по нагрузкам компонент оценена степень влияния переменных на показатели процесса y_1 и y_2, сделаны выводы о взаимосвязях процесса и даны рекомендации по его улучшению.

Глава посвящена методам корреляционного и регрессионного анализов, широко применяемым при обработке результатов наблюдений.

Математическая модель процесса представляется полиномом, коэффициенты которого определяются методом наименьших квадратов.

Метод наименьших квадратов обосновывается как частный случай метода максимального правдоподобия при нормальном распределении наблюдаемой случайной величины.

Полиномиальная модель очень удобна, так как позволяет улучшать аппроксимацию, повышая порядок полинома, приводит к линейной системе нормальных уравнений при определении коэффициентов уравнения регрессии методом наименьших квадратов.

Рассмотрены различные алгоритмы регрессионного анализа для обработки пассивного эксперимента.

Корреляция между коэффициентами уравнения регрессии, полученного обработкой пассивного эксперимента, затрудняет статистический анализ и интерпретацию результатов. Методы активного эксперимента, изложенные в следующей главе, дают возможность преодолеть эти недостатки классического регрессионного анализа.

Упражнения

1. В таблице приведены характеристики гомогенных анионитовых мембран, полученные при различных условиях нитрования сополимера: x_1 — температура, °С; x_2 — продолжительность, ч; x_3 — степень нитрования, %; y_1 — удельное объемное электрическое сопротивление, Ом · см; y_2 — предел прочности при растяжении, МПа.

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	$y_1 \cdot 10$	$y_2 \cdot 10$	Номер опыта	x_1	x_2	x_3	$y_1 \cdot 10$	$y_2 \cdot 10$
1	60	2	30	920	190	9	70	8	85	85	59
2	60	4	55	290	105	10	70	10	85	89	53
3	60	6	74	190	74	11	80	2	55	505	80
4	60	8	75	100	68	12	80	4	80	195	68
5	60	10	75	100	68	13	80	6	92	82	54
6	70	2	40	740	107	14	80	8	92	82	50
7	70	4	68	207	72	15	80	10	92	88	50
8	70	6	83	98	59						

Определить коэффициенты парной и частной корреляции между параметрами процесса.

2. Определить зависимость содержания Fe, % (y), в кристаллах медного купороса $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ от содержания $FeSO_4$, г/л (x), в маточном растворе. Каждый опыт повторяется два раза.

x	y		x	y	
50	0,65	0,84	85	1,33	1,47
60	0,96	0,84	100	1,75	1,86
70	0,93	1,2	105	2,32	2,48

а) Оценить однородность дисперсий; б) определить дисперсию воспроизводимости; в) выбрать вид функциональной зависимости $y=f(x)$; г) определить уравнение регрессии; д) провести регрессионный и корреляционный анализ результатов.

3. Определить зависимость гидравлического сопротивления слоя насадки Δp ($h = 4$ м, насадка кольца Рашига 15×15×0,5 мм) от фиктивной скорости потока $v_{ср}$, используя ортогональные полиномы Чебышева:

$v_{ср}$, см/с	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\Delta p \cdot 10$, МПа	0,01	0,025	0,04	0,055	0,07	0,09	0,113	0,13	0,16	0,019

4. При получении фосфора возгонкой из фосфатов кальция исследовалась зависимость степени восстановления фосфата (y) от температуры (x) для фосфорита Каратау. Опыты повторялись 2–3 раза.

x, °C	y, %			x, °C	y, %		
1100	8,5	11,6		1175	37,5	40,0	42,3
1125	19,0	28,2	21,8	1200	50,5	50,0	
1150	29,5	30,6		1225	57,2	60,3	62,7

а) Проверить однородность выборочных дисперсий; б) посчитать коэффициент корреляции между температурой и степенью восстановления; в) определить коэффициенты уравнения регрессии; г) оценить значимость коэффициентов и адекватность уравнения регрессии эксперименту.

5) Исследовалась зависимость степени окисления (y) хромита Cr_2O_3 в хромат CrO_3 от продолжительности прокаливания (x) шихты при 830°С. Каждый опыт повторялся два раза.

x, ч	y, %		x, ч	y, %	
0,3	8,2	12,3	3,0	49,3	51,4
1,2	28,0	32,0	4,0	52,0	58,0
2,0	43,1	47,2	5,0	56,5	57,4
			6,0	58,7	61,6

Считая зависимость степени окисления от времени нелинейной (полином второго порядка), методами линейной алгебры определить уравнение регрессии и провести регрессионный и корреляционный анализ результатов.

часть 2

Методы планирования эксперимента

ГЛАВА V
МЕТОДЫ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Большое количество экспериментальных задач в химии и химической технологии формулируется как задачи экстремальные: определение оптимальных условий процесса, оптимального состава композиции и т. д. Благодаря оптимальному расположению точек в факторном пространстве и линейному преобразованию координат, удается преодолеть недостатки классического регрессионного анализа, в частности корреляцию между коэффициентами уравнения регрессии. Выбор плана эксперимента определяется постановкой задачи исследования и особенностями объекта. Процесс исследования обычно разбивается на отдельные этапы. Информация, полученная после каждого этапа, определяет дальнейшую стратегию эксперимента. Таким образом возникает возможность оптимального управления экспериментом. Планирование эксперимента позволяет варьировать одновременно все факторы и получать количественные оценки основных эффектов и эффектов взаимодействия. Интересующие исследователя эффекты определяются с меньшей ошибкой, чем при традиционных методах исследования. В конечном счете применение методов планирования значительно повышает эффективность эксперимента.

1. Полный факторный эксперимент. При планировании по схеме полного факторного эксперимента (ПФЭ) реализуются все возможные комбинации факторов на всех выбранных для исследования уровнях. Необходимое количество опытов N при ПФЭ определяется по формуле

$$N = n^k,$$

где n — количество уровней; k — число факторов.

Если эксперименты проводятся только на двух уровнях, при двух значениях факторов и при этом в процессе эксперимента осуществляются все возможные комбинации из k факторов, то постановка опытов по такому плану называется полным факторным экспериментом типа 2^k. Уровни факторов представляют собой границы исследуемой области по данному технологическому параметру. Например, изучается влияние на выход продукта (y, %) трех факторов: температуры (z_1) в диапазоне 100—200°С, давления (z_2) $2-6\cdot10^5$ Па и времени пребывания (z_3) 10—

20 мин. Верхний уровень по температуре z_1^{max} равен 200°С, нижний z_1^{min} равен 100°С. Тогда для z_1 имеем

$$\overset{0}{z_1} = \frac{z_1^{max} + z_1^{min}}{2} = 150°; \quad \Delta z_1 = \frac{z_1^{max} - z_1^{min}}{2} = 50°.$$

Вообще для любого фактора z_j

$$\overset{0}{z_j} = \frac{z_j^{max} + z_j^{min}}{2}, \quad j = 1, 2, \ldots, k; \tag{V.1}$$

$$\Delta z_j = \frac{z_j^{max} - z_j^{min}}{2}. \tag{V.2}$$

Точка с координатами $(z_1^0, \ldots, z_k^0)$ называется центром плана, иногда ее называют основным уровнем; Δz_j — интервал варьирования по оси z_j. От переменных $z_1, \ldots, z_k$ перейдем к новым — $x_1, \ldots, x_k$ путем следующего линейного преобразования:

$$x_j = \frac{z_j - z_j^0}{\Delta z_j}; \quad j = 1, 2, \ldots, k. \tag{V.3}$$

Для переменных $x_1, \ldots, x_k$ верхний уровень равен $+1$, нижний уровень -1, координаты центра плана равны нулю и совпадают с началом координат. В рассматриваемом примере $k = 3$. Число возможных комбинаций N из трех факторов на двух уровнях равно $N = 2^k = 2^3 = 8$. План проведения экспериментов (матрица планирования) записывается в виде табл. 28.

Представленный в табл. 28 план в безразмерном масштабе геометрически может быть интерпретирован в виде восьми вершин куба (рис. 28). Введем в ПФЭ 2^3 столбец так называемой фиктивной переменной $x_0 = 1$ (табл. 29).

Приведенная в табл. 29 матрица планирования обладает следующими свойствами:

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^{N} x_{ui} x_{ji} = 0; \; u \neq j; \; u, j = 0, 1, \ldots, k; \\
&\sum_{i=1}^{N} x_{ji} = 0; \; j = 1, 2, \ldots, k; \; j \neq 0; \\
&\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 = N; \; j = 0, 1, \ldots, k,
\end{aligned} \tag{V.4}$$

где k — число независимых факторов; N — число опытов в матрице планирования.

Первое свойство (V.4) — равенство нулю скалярных произведений всех вектор-столбцов — называется *свойством ортогональности* матрицы планирования. Это свойство резко уменьшает трудности, связанные с расчетом коэффициентов уравнения регрессии, так как матрица коэффициентов нормальных уравнений $(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})$ становится диагональной и ее

Таблица 28. **Полный факторный эксперимент 2^3**

Номер опыта	Факторы в натуральном масштабе			Факторы в безразмерном масштабе			
	z_1	z_2	z_3	x_1	x_2	x_3	y
1	100	20	10	−1	−1	−1	2
2	200	20	10	+1	−1	−1	6
3	100	60	10	−1	+1	−1	4
4	200	60	10	+1	+1	−1	8
5	100	20	30	−1	−1	+1	10
6	200	20	30	+1	−1	+1	18
7	100	60	30	−1	+1	+1	8
8	200	60	30	+1	+1	+1	12

Таблица 29. **Матрица планирования с фиктивной переменной**

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	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
5	+1	−1	−1	+1	y_5
6	+1	+1	−1	+1	y_6
7	+1	−1	+1	+1	y_7
8	+1	+1	+1	+1	y_8

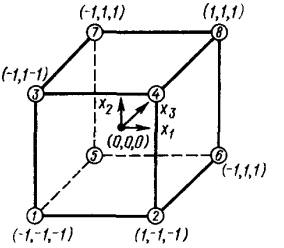


Рис. 28. Полный факторный эксперимент 2^3

диагональные элементы равны числу опытов в матрице планирования N.

Коэффициенты уравнения регрессии по методу наименьших квадратов определяются следующим образом:

$$B = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = (X^T X)^{-1} X^T Y.$$

Матрица моментов $(X^T X)$, соответствующая табл. 29, имеет вид

$$(X^T X) = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{8} x_{0i}^2 & \sum_{i=1}^{8} x_{0i} x_{1i} & \sum_{i=1}^{8} x_{0i} x_{2i} & \sum_{i=1}^{8} x_{0i} x_{3i} \\ \sum_{i=1}^{8} x_{1i} x_{0i} & \sum_{i=1}^{8} x_{1i}^2 & \sum_{i=1}^{8} x_{1i} x_{2i} & \sum_{i=1}^{8} x_{1i} x_{3i} \\ \sum_{i=1}^{8} x_{2i} x_{0i} & \sum_{i=1}^{8} x_{2i} x_{1i} & \sum_{i=1}^{8} x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^{8} x_{2i} x_{3i} \\ \sum_{i=1}^{8} x_{3i} x_{0i} & \sum_{i=1}^{8} x_{3i} x_{1i} & \sum_{i=1}^{8} x_{3i} x_{2i} & \sum_{i=1}^{8} x_{3i}^2 \end{bmatrix}$$

Учитывая свойства (V.4), получим

$$\left(X^T X\right) = \begin{pmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 8 \end{pmatrix} \tag{V.5}$$

Матрица, обратная матрице моментов $\left(X^T X\right)^{-1}$, получается равной

$$\left(X^T X\right)^{-1} = \begin{pmatrix} 1/8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/8 \end{pmatrix} \tag{V.6}$$

и

$$\left(X^T Y\right) = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{N} x_{0i}\, y_i \\ \sum_{i=1}^{N} x_{1i}\, y_i \\ \sum_{i=1}^{N} x_{2i}\, y_i \\ \sum_{i=1}^{N} x_{3i}\, y_i \end{bmatrix} \tag{V.7}$$

Таким образом,

$$B = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/8 \end{pmatrix} \times \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{8} x_{0i}\, y_i \\ \sum_{i=1}^{8} x_{1i}\, y_i \\ \sum_{i=1}^{8} x_{2i}\, y_i \\ \sum_{i=1}^{8} x_{3i}\, y_i \end{bmatrix} . \tag{V.8}$$

Следовательно, любой коэффициент уравнения регрессии b_j определяется скалярным произведением столбца y на соответствующий столбец x_j, деленным на число опытов в матрице планирования N:

$$b_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_{ji}\, y_i . \tag{V.9}$$

Пользуясь планом, представленным в табл. 28, сначала вычислим коэффициенты линейного уравнения регрессии

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3. \qquad (V.10)$$

Например, для определения коэффициента b_1 при x_1 необходимо получить сумму произведений:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ -1 \\ +1 \\ -1 \\ +1 \\ -1 \\ +1 \\ -1 \\ +1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} y \\ 2 \\ 6 \\ 4 \\ 8 \\ 10 \\ 18 \\ 8 \\ 12 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ +6 \\ -4 \\ +8 \\ -10 \\ +18 \\ -8 \\ +12 \end{bmatrix}$$

$$\sum_{i=1}^{8} x_{1i} y_i = 20$$

$$b_1 = \frac{\sum_{i=1}^{8} x_{1i} y_i}{8} = \frac{20}{8} = +2{,}5.$$

Аналогично получим $b_0 = 8{,}5$; $b_2 = -0{,}5$; $b_3 = +3{,}5$. Если в рассмотрение ввести более полное уравнение регрессии с коэффициентами взаимодействия

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{123} x_1 x_2 x_3, \qquad (V.11)$$

то для определения коэффициентов b_{12}, b_{13}, b_{23} (эффектов парного взаимодействия) и b_{123} (эффекта тройного взаимодействия) необходимо расширить матрицу (табл. 29) следующим образом (табл. 30).

Таблица 30. **Расширенная матрица планирования полного факторного эксперимента 2^3**

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y
1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	2
2	+1	+1	−1	−1	−1	−1	+1	+1	6
3	+1	−1	+1	−1	−1	+1	−1	+1	4
4	+1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	8
5	+1	−1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	10
6	+1	+1	−1	+1	−1	+1	−1	−1	18
7	+1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	−1	8
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	12

Эффекты взаимодействия определяются аналогично линейным эффектам. Так, для определения коэффициента b_{12} необходимо:

$$\begin{matrix} x_1x_2 \\ \begin{bmatrix} +1 \\ -1 \\ -1 \\ +1 \\ +1 \\ -1 \\ -1 \\ +1 \end{bmatrix} \end{matrix} \times \begin{matrix} y \\ \begin{bmatrix} 2 \\ 6 \\ 4 \\ 8 \\ 10 \\ 18 \\ 8 \\ 12 \end{bmatrix} \end{matrix} = \begin{bmatrix} +2 \\ -6 \\ -4 \\ +8 \\ +10 \\ -18 \\ -8 \\ +12 \end{bmatrix}$$

$$\sum_{i=1}^{8} (x_1x_2)_i\, y_i = -4$$

$$b_{12} = \frac{\sum_{i=1}^{N} (x_1x_2)_i\, y_i}{N} = -\frac{4}{8} = -0{,}5.$$

Остальные коэффициенты определяются подобным образом:

$$b_{13} = +0{,}5, \quad b_{23} = -1{,}5, \quad b_{123} = 0{,}11.$$

Если поставить дополнительно параллельные опыты, можно определить $s^2_{\text{воспр}}$, проверить значимость коэффициентов регрессии и при наличии степеней свободы — адекватность уравнения.

В связи с тем, что ковариационная матрица $(X^TX)^{-1}$ для спланированного эксперимента — матрица диагональная

$$\left(X^TX\right)^{-1} = \begin{bmatrix} 1/N & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1/N & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1/N \end{bmatrix} \qquad (V.12)$$

коэффициенты уравнения регрессии некоррелированы между собой. Значимость коэффициентов уравнения регрессии можно проверять для каждого коэффициента в отдельности по критерию Стьюдента. Исключение из уравнения регрессии (V.11) незначимого коэффициента не скажется на остальных коэффициентах. При этом выборочные коэффициенты b_j оказываются так называемыми *несмешанными оценками* для соответствующих теоретических коэффициентов β_j:

$$b_j \to \beta_j, \qquad (V.13)$$

т. е. значения коэффициентов уравнения регрессии характеризуют вклад соответствующего фактора в величину y. Диагональные элементы ковариационной матрицы равны между собой, поэтому все коэффициенты уравнений (V.10) и (V.11) определяются с одинаковой точностью:

$$s_{b_j} = s_{\text{воспр}}/\sqrt{N}. \qquad (V.14)$$

Например, в центре плана поставлено дополнительно три параллельных опыта и получены следующие значения y:

$$y_1^0 = 8; \quad y_2^0 = 9; \quad y_3^0 = 8{,}8;$$

$$\bar{y}^0 = \frac{\sum_{u=1}^{3} y_u^0}{3} = 8{,}6;$$

$$s^2_{\text{воспр}} = \frac{\sum_{u=1}^{3} \left(y_u^0 - \bar{y}^0 \right)^2}{2} = 0{,}28; \quad s_{\text{воспр}} = 0{,}55;$$

$$s_{b_j} = 0{,}55 / \sqrt{8} = 0{,}2.$$

Оценим значимость коэффициентов по критерию Стьюдента:

$$t_0 = \frac{|b_0|}{s_{b_0}} = \frac{8{,}5}{0{,}2} = 42{,}5;$$

$$t_1 = \frac{|b_1|}{s_{b_1}} = \frac{2{,}6}{0{,}2} = 12{,}5;$$

$$t_2 = \frac{|b_2|}{s_{b_2}} = 2{,}5;$$

$$t_3 = \frac{|b_3|}{s_{b_3}} = 17{,}5;$$

$$t_{12} = \frac{|b_{12}|}{s_{b_{12}}} = 2{,}5;$$

$$t_{13} = \frac{|b_{13}|}{s_{b_{13}}} = 2{,}5;$$

$$t_{23} = \frac{|b_{23}|}{s_{b_{23}}} = 7{,}5;$$

$$t_{123} = \frac{|b_{123}|}{s_{b_{123}}} = 1{,}25.$$

Табличное значение критерия Стьюдента для уровня значимости $p = 0{,}05$ и числа степеней свободы $f = 2$ $t_p(f) = 4{,}3$ Таким образом, коэффициенты b_2, b_{12}, b_{13} и b_{123} незначимы и их следует исключить из уравнения. После исключения незначимых коэффициентов уравнение регрессии имеет вид

$$\hat{y} = 8{,}5 + 2{,}5x_1 + 3{,}5x_3 - 1{,}5x_2x_3.$$

Проверим адекватность полученного уравнения по критерию Фишера:

$$F = s^2_{\text{ост}} / s^2_{\text{воспр}};$$

$$s^2_{\text{ост}} = \frac{\sum_{i=1}^{8} \left(y_i - \hat{y}_i \right)^2}{N - l} = \frac{8}{4} = 2;$$

$$s^2_{\text{воспр}} = 0{,}28;$$

l — число значимых коэффициентов в уравнении регрессии, равное 4. Тогда $F = 2/0{,}28 = 7{,}1$ Табулированное значение критерия Фишера для $p = 0{,}05$, $f_1 = 4$, $f_2 = 2$, $F_{1-p}(f_1, f_2) = 19{,}3$, $F < F_{1-p}(f_1, f_2)$.

Следовательно, полученное уравнение адекватно описывает эксперимент.

2. Дробные реплики. Если при получении уравнения можно ограничиться линейным приближением, то число опытов резко сокращается при использовании дробных реплик (см. гл. III, 4) от полного факторного эксперимента или дробного факторного эксперимента (ДФЭ). Чтобы дробная реплика представляла собой ортогональный план, в качестве реплики следует брать полный факторный эксперимент для меньшего числа факторов. Число опытов при этом должно быть больше (или равно) числа неизвестных коэффициентов в уравнении регрессии. Допустим, что нужно получить линейное приближение некоторого небольшого участка поверхности отклика при трех независимых факторах:

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

Для решения этой задачи можно ограничиться четырьмя опытами, если в планировании для ПФЭ 2^2 (табл. 31) использовать столбец $x_1 x_2$ в качестве плана для x_3 (табл. 32).

Таблица 31. **Полный факториый эксперимеит 2^2**

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2
1	+1	+1	+1	+1
2	+1	−1	−1	+1
3	+1	−1	+1	−1
4	+1	+1	−1	−1

Таблица 32. **Полуреплика от ПФЭ 2^3**

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3
1	+1	+1	+1	+1
2	+1	−1	−1	+1
3	+1	−1	+1	−1
4	+1	+1	−1	−1

Такой сокращенный план — половина ПФЭ 2^3 — называется полурепликой от ПФЭ 2^3. Пользуясь таким планированием, можно оценить свободный член и три коэффициента уравнения регрессии при линейных членах.

На практике обычно не удается априори постулировать равенство нулю эффектов взаимодействия, однако часто имеются основания полагать, что некоторые из них малы по сравнению с линейными эффектами. Если коэффициенты регрессии при парных произведениях не равны нулю, то полученные коэффициенты будут *смешанными оценками* для генеральных коэффициентов:

$$b_1 \to \beta_1 + \beta_{23}, \quad b_2 \to \beta_2 + \beta_{13}, \quad b_3 \to \beta_3 + \beta_{12}, \qquad \text{(V.15)}$$

где β — математические ожидания для соответствующих коэффициентов.

Эти генеральные коэффициенты не могут быть раздельно оценены по плану, включающему всего четыре опыта (табл. 32), так как при

этом столбцы для линейных членов и парных произведений одинаковы. Если, например, в дополнение к столбцам, приведенным в табл. 32, вычислить еще столбец для произведения x_1x_3, то окажется, что элементы этого столбца в точности равны элементам столбца x_2. Таким образом, сокращение числа опытов приводит к получению смешанных оценок для коэффициентов. Чтобы определить, какие генеральные коэффициенты смешаны, удобно пользоваться таким приемом: поставив x_3 на место x_1x_2 (табл. 32), получаем соотношение

$$x_3 = x_1 x_2, \qquad (V.16)$$

называемое *генерирующим соотношением*. Умножим обе части генерирующего соотношения на x_3:

$$x_3^2 = x_1x_2x_3,$$

при этом слева получим единичный столбец:

$$I = x_1x_2x_3. \qquad (V.17)$$

Произведение (V.17) называется *определяющим контрастом*, при помощи его удобно определить, в каких столбцах одинаковые элементы. Умножив по очереди определяющий контраст на x_1, x_2, x_3, получим

$$x_1 = x_1^2 x_2x_3 = x_2x_3; \quad x_2 = x_1x_3; \quad x_3 = x_1x_2. \qquad (V.18)$$

Полученным соотношениям (V.18) соответствует система смешанных оценок (V.15).

При использовании ДФЭ необходимо иметь четкое представление о так называемой *разрешающей способности дробной реплики*, т. е. определить заранее, какие коэффициенты являются несмешанными оценками для соответствующих генеральных коэффициентов. Тогда в зависимости от поставленной задачи подбирается дробная реплика, при помощи которой можно извлечь максимальную информацию из эксперимента. Например, в задаче с четырьмя факторами $k=4$ в качестве генерирующего соотношения можно взять

$$x_4 = x_1x_2x_3 \qquad (V.19)$$

и любое из парных произведений факторов, например

$$x_4 = x_1x_2. \qquad (V.20)$$

Матрица планирования с генерирующим соотношением (V.19) приведена в табл. 33.

Таблица 33. **Полуреплика от ПФЭ 2^4 с генерирующим соотношением (V.19)**

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4
1	+1	+1	+1	+1	+1	5	+1	+1	+1	−1	−1
2	+1	−1	−1	+1	+1	6	+1	−1	−1	−1	−1
3	+1	−1	+1	+1	−1	7	+1	−1	+1	−1	+1
4	+1	+1	−1	+1	−1	8	+1	+1	−1	−1	+1

Воспользовавшись определяющим контрастом $I=x_1x_2x_3x_4$, получим такую систему совместных оценок для коэффициентов уравнения регрессии:

$$
\begin{aligned}
x_1 &= x_2 x_3 x_4, \quad b_1 \to \beta_1 + \beta_{234},\\
x_2 &= x_1 x_3 x_4, \quad b_2 \to \beta_2 + \beta_{134},\\
x_3 &= x_1 x_2 x_4, \quad b_3 \to \beta_3 + \beta_{124},\\
x_4 &= x_1 x_2 x_3, \quad b_4 \to \beta_4 + \beta_{123},\\
x_1 x_2 &= x_3 x_4, \quad b_{12} \to \beta_{12} + \beta_{34},\\
x_1 x_3 &= x_2 x_4, \quad b_{13} \to \beta_{13} + \beta_{24},\\
x_1 x_4 &= x_2 x_3, \quad b_{14} \to \beta_{14} + \beta_{23}.
\end{aligned}
\qquad (V.21)
$$

В реальных задачах тройные взаимодействия бывают равными нулю значительно чаще, чем двойные. Если наибольший интерес представляют оценки для линейных эффектов, следует брать генерирующее соотношение $x_4 = x_1 x_2 x_3$.

При регенерирующем сотношении (V.20) матрица планирования имеет вид (табл. 34).

Таблица 34. **Полуреплика от ПФЭ 2^4 с генерирующим соотношением (V.20)**

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4
1	+1	+1	+1	+1	+1	5	+1	+1	+1	−1	+1
2	+1	−1	−1	+1	+1	6	+1	−1	−1	−1	+1
3	+1	−1	+1	+1	−1	7	+1	−1	+1	−1	−1
4	+1	+1	−1	+1	−1	8	+1	+1	−1	−1	−1

Определяющий контраст выражается соотношением $I = x_1 x_2 x_4$. Получается следующая система оценок:

$$
\begin{aligned}
x_1 &= x_2 x_4, \quad b_1 \to \beta_1 + \beta_{24},\\
x_2 &= x_1 x_4, \quad b_2 \to \beta_2 + \beta_{14},\\
x_3 &= x_1 x_2 x_3 x_4, \quad b_3 \to \beta_3 + \beta_{1234},\\
x_4 &= x_1 x_2, \quad b_4 \to \beta_4 + \beta_{12},\\
x_1 x_3 &= x_2 x_3 x_4, \quad b_{13} \to \beta_{13} + \beta_{234},\\
x_2 x_3 &= x_1 x_3 x_4, \quad b_{23} \to \beta_{23} + \beta_{134},\\
x_3 x_4 &= x_1 x_2 x_3, \quad b_{34} \to \beta_{34} + \beta_{123}.
\end{aligned}
\qquad (V.22)
$$

Следовательно, дробную реплику с генерирующим соотношением $x_4 = x_1 x_2$ имеет смысл использовать, если наибольший интерес представляют коэффициенты β_{12}, β_{23} и β_{34}.

В полуреплике от ПФЭ 2^5 с генерирующим соотношением $x_5 = x_1 x_2 x_3 x_4$ все линейные эффекты и эффекты парного взаимодействия смешаны только с эффектами тройного и более высокого порядков:

$$
\begin{aligned}
x_0 &= x_1 x_2 x_3 x_4 x_5, \quad b_0 \to \beta_0 + \beta_{12345},\\
x_1 &= x_2 x_3 x_4 x_5, \quad b_1 \to \beta_1 + \beta_{2345},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
x_2 &= x_1 x_3 x_4 x_5, & b_2 &\to \beta_2 + \beta_{1345},\\
x_3 &= x_1 x_2 x_4 x_5, & b_3 &\to \beta_3 + \beta_{1245},\\
x_4 &= x_1 x_2 x_3 x_5, & b_4 &\to \beta_4 + \beta_{1235},\\
x_5 &= x_1 x_2 x_3 x_4, & b_5 &\to \beta_5 + \beta_{1234},\\
x_1 x_2 &= x_3 x_4 x_5, & b_{12} &\to \beta_{12} + \beta_{345},\\
x_1 x_3 &= x_2 x_4 x_5, & b_{13} &\to \beta_{13} + \beta_{245},\\
x_1 x_4 &= x_2 x_3 x_5, & b_{14} &\to \beta_{14} + \beta_{235},\\
x_1 x_5 &= x_2 x_3 x_4, & b_{15} &\to \beta_{15} + \beta_{234},\\
x_2 x_3 &= x_1 x_4 x_5, & b_{23} &\to \beta_{23} + \beta_{145},\\
x_2 x_4 &= x_1 x_3 x_5, & b_{24} &\to \beta_{24} + \beta_{135},\\
x_2 x_5 &= x_1 x_3 x_4, & b_{25} &\to \beta_{25} + \beta_{134},\\
x_3 x_4 &= x_1 x_2 x_5, & b_{34} &\to \beta_{34} + \beta_{125},\\
x_3 x_5 &= x_1 x_2 x_4, & b_{35} &\to \beta_{35} + \beta_{124},\\
x_4 x_5 &= x_1 x_2 x_3, & b_{45} &\to \beta_{45} + \beta_{123}.
\end{aligned}
\qquad (V.23)
$$

Пренебрегая эффектами взаимодействия выше второго порядка, практически можно считать, что при $k \geqslant 5$ полуреплики от ПФЭ обеспечивают несмешанные оценки для линейных эффектов и эффектов парного взаимодействия. Используют в экспериментальной практике также и ¼ реплики, 1/8 реплики и т. д. Дробную реплику, в которой p линейных эффектов приравнены к эффектам взаимодействия, обозначают 2^{k-p}. Для четвертьреплики, например, в планировании для $k=5$ типа 2^{5-2} могут быть заданы генерирующие соотношения:

$$x_4 = x_1 x_2 x_3, \quad x_5 = x_1 x_2.$$

Определяющими контрастами для этой реплики будут соотношения

$$I = x_1 x_2 x_3 x_4, \quad I = x_1 x_2 x_5. \qquad (V.24)$$

Перемножив определяющие контрасты между собой, получим так называемый *обобщающий определяющий контраст,* который с учетом соотношений (V. 24) полностью характеризует разрешающую способность реплик высокой степени дробности:

$$I = x_1 x_2 x_3 x_4 \overset{4}{\cancel{=}} x_1 x_2 x_5 = x_3 x_4 x_5. \qquad (V.25)$$

При этом получается следующая система совместных оценок:

$$
\begin{aligned}
x_0 &= x_1 x_2 x_3 x_4 = x_1 x_2 x_5 = x_3 x_4 x_5, & b_0 &\to \beta_0 + \beta_{1234} + \beta_{125} + \beta_{345},\\
x_1 &= x_2 x_3 x_4 = x_2 x_5 = x_1 x_3 x_4 x_5, & b_1 &\to \beta_1 + \beta_{234} + \beta_{25} + \beta_{1345},\\
x_2 &= x_1 x_3 x_4 = x_1 x_5 = x_2 x_3 x_4 x_5, & b_2 &\to \beta_2 + \beta_{134} + \beta_{15} + \beta_{2345},\\
x_3 &= x_1 x_2 x_4 = x_1 x_2 x_3 x_5 = x_4 x_5, & b_3 &\to \beta_3 + \beta_{124} + \beta_{1235} + \beta_{45},\\
x_4 &= x_1 x_2 x_3 = x_1 x_2 x_4 x_5 = x_3 x_5, & b_4 &\to \beta_4 + \beta_{123} + \beta_{1345} + \beta_{35},\\
x_5 &= x_1 x_2 x_3 x_4 x_5 = x_1 x_2 = x_3 x_4, & b_5 &\to \beta_5 + \beta_{12345} + \beta_{12} + \beta_{34},
\end{aligned}
$$

$$x_1 x_3 = x_2 x_4 = x_2 x_3 x_5 = x_1 x_4 x_5, \quad b_{13} \to \beta_{13} + \beta_{24} + \beta_{235} + \beta_{145},$$
$$x_1 x_4 = x_2 x_3 = x_2 x_4 x_5 = x_1 x_3 x_5, \quad b_{14} \to \beta_{14} + \beta_{23} + \beta_{245} + \beta_{135}. \qquad (V.26)$$

Соответствующий план эксперимента приведен в табл. 35

Таблица 35. **Четвертьреплика от ПФЭ 2^5 с генерирующими соотношениями (V.24)**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
1	+1	+1	+1	+1	+1	5	+1	+1	−1	−1	+1
2	−1	−1	+1	+1	+1	6	−1	−1	−1	−1	+1
3	−1	+1	+1	−1	−1	7	−1	+1	−1	+1	−1
4	+1	−1	+1	−1	−1	8	+1	−1	−1	+1	−1

Разрешающая способность этой четвертьреплики невелика — все линейные эффекты смешаны с эффектами парного взаимодействия. ДФЭ можно дополнить до полного факторного эксперимента, реализовав недостающие дробные реплики. В рассматриваемом примере для остальных трех четвертьреплик генерирующие соотношения будут:

$$x_4 = x_1 x_2 x_3, \quad x_5 = -x_1 x_2,$$
$$x_4 = -x_1 x_2 x_3, \quad x_5 = x_1 x_2, \qquad (V.27)$$
$$x_4 = -x_1 x_2 x_3, \quad x_5 = -x_1 x_2.$$

При этом обобщающие определяющие контрасты имеют вид

$$I = x_1 x_2 x_3 x_4 = -x_1 x_2 x_5 = -x_3 x_4 x_5,$$
$$I = -x_1 x_2 x_3 x_4 = x_1 x_2 x_5 = -x_3 x_4 x_5, \qquad (V.28)$$
$$I = -x_1 x_2 x_3 x_4 = -x_1 x_2 x_5 = x_3 x_4 x_5.$$

В результате реализации этих дополняющих четвертьреплик получаются несмешанные оценки для всех теоретических коэффициентов.

Число опытов в дробной реплике должно удовлетворять неравенству

$$k + 1 \leqslant N < 2^k$$

(где k — число факторов) для получения несмешанных оценок линейных эффектов. Если число опытов N равно $k+1$ — числу определяемых коэффициентов в линейном уравнении регрессии, дробная реплика представляет собой *насыщенный линейный ортогональный план*. В табл. 36 приведен насыщенный ортогональный план для $k=7$, представляющий собой 1/16 ПФЭ 2^7.

В табл. 36 факторы x_4, x_5, x_6 и x_7 приравнены произведениям факторов:

$$x_4 = x_1 x_2, \quad x_5 = x_1 x_3, \quad x_6 = x_2 x_3, \quad x_7 = x_1 x_2 x_3.$$

В связи с этим все линейные эффекты смешаны с эффектами взаимодействия.

Поскольку число опытов в насыщенных планах равно числу определяемых коэффициентов, число степеней свободы остаточной

Таблица 36. **Линейный насыщенный план для $k=7$**

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	5	+1	−1	−1	+1	+1	−1	−1	+1
2	+1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	6	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
3	+1	−1	+1	−1	−1	+1	−1	+1	7	+1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	−1
4	+1	+1	−1	−1	−1	−1	+1	+1	8	+1	+1	−1	+1	−1	+1	−1	−1

дисперсии равно нулю. Для проверки адекватности линейного уравнения, полученного по насыщенному плану, необходим дополнительный эксперимент.

Таким образом, оптимальные двухуровневые планы 2^k и 2^{k-p} имеют следующие преимущества: планы ортогональны, и поэтому все вычисления просты, все коэффициенты определяются независимо друг от друга; каждый коэффициент определяется по результатам всех N опытов. Эти планы обладают также свойством *D-оптимальности:* для данного числа опытов N они имеют минимальный определитель ковариационной матрицы $(X^TX)^{-1}$. Вследствие этого все коэффициенты регрессии определяются с одинаковой и минимальной дисперсией. Необходимо также отметить, что линейные планы 2^k и 2^{k-p} обладают свойством *ротатабельности.* Вследствие отсутствия корреляции между коэффициентами по закону сложения дисперсий для линейного уравнения при k факторах имеем:

$$s_g^2 = s_{b_0}^2 + x_1^2 s_{b_1}^2 + \ldots + x_k^2 s_{b_k}^2 . \qquad \text{(V.29)}$$

Так как $s_{b_j}^2 = s_{\text{воспр}}^2/N$, получим

$$s_{\hat{y}}^2 = \frac{s_{\text{воспр}}^2}{N}\left(1 + x_1^2 + \ldots + x_k^2\right) = \frac{s_{\text{воспр}}^2}{N}(1+\rho^2), \qquad \text{(V.30)}$$

$$\rho^2 = \sum_{j=1}^{k} x_j^2 ,$$

где ρ^2 — квадрат радиуса сферы в k-мерном пространстве. Величину, обратную s_y^2, можно принять за меру информации, содержащейся в уравнении регрессии. Согласно (V.30) количество информации убывает пропорционально квадрату радиуса сферы ρ^2 и одинаково для всех эквидистантных точек (рис. 29). Планирование, обладающее таким свойством, называют *ротатабельным планированием.*

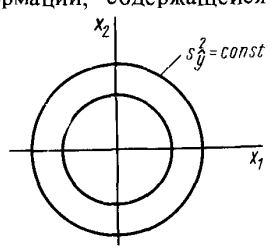


Рис. 29. Свойство ротатабельности линейного плана 2^2

Приведем в общем виде схему дисперсионного и регрессионного анализов планированного эксперимента, когда каждый опыт в матрице планирования повторялся m раз (табл. 37).

Таблица 37. **Матрица планирования и результаты измерений**

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_k	y	$\bar{y}$	s^2
1	+1	+1	−1	...+1	$y_{11}, y_{12}, \ldots, y_{1m}$	$\bar{y}_1$	s_1^2
2	+1	−1	−1	...+1	$y_{21}, y_{22}, \ldots, y_{2m}$	$\bar{y}_2$	s_2^2
3	+1	+1	+1	...+1	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.
N	+1	−1	+1	...−1	$y_{N1}, y_{N2}, \ldots, y_{Nm}$	$\bar{y}_N$	s_N^2

В каждой строчке матрицы планирования определяется среднее значение измеряемой величины по m параллельным опытам:

$$\bar{y}_i = \frac{\sum_{u=1}^{m} y_{iu}}{m}, \quad i = 1,2, \ldots, N. \tag{V.31}$$

и дисперсия

$$s_i^2 = \frac{\sum_{u=1}^{m} (y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{m-1}; \quad i = 1,2, \ldots, N. \tag{V.32}$$

Проверяется однородность выборочных дисперсий по критерию Кохрена. Для этого составляется отношение максимальной дисперсии к сумме всех дисперсий:

$$G = \frac{s_{\max}^2}{\sum_{i=1}^{N} s_i^2}.$$

Полученное отношение сравнивается с табличным: $G_{1-p}(f_1 f_2)$, где $p = 0{,}05$; $f_1 = m - 1$; $f_2 = N$. Если $G < G_{1-p}(f_1 f_2)$, дисперсии однородны.

Тогда в качестве оценки для дисперсии воспроизводимости можно взять среднюю дисперсию

$$s_{\text{воспр}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{N} s_i^2}{N} \tag{V.33}$$

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

Коэффициенты уравнения регрессии определяются по формуле

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_{ji}\, \bar{y}_i}{N}. \tag{V.34}$$

Учитывая, что дисперсия $\bar{y}$ полученного по выборке объема m в m раз меньше дисперсии единичного измерения

$$s_{\bar{y}}^2 = s_{\text{воспр}}^2 / m, \tag{V.35}$$

в рассматриваемом примере (табл. 37) дисперсия коэффициентов $s_{b_j}^2$ определяется следующим образом:

$$s_{b_j}^2 = s_{\text{воспр}}^2 / Nm. \tag{V.36}$$

Значимость коэффициентов проверяется по критерию Стьюдента. В условиях нулевой гипотезы $H^0: \beta_j = 0$, отношение абсолютной величины коэффициента уравнения регрессии к его ошибке имеет распределение Стьюдента. Для всех коэффициентов уравнения регрессии составляется t-отношение

$$t_j = \frac{|b_j|}{s_{b_j}}, \tag{V.37}$$

которое сравнивается с табличным $t_{1-p}(f)$ для уровня значимости $p = 0{,}05$ и числа степеней свободы $f = N(m-1)$. Если $t_j < t_{1-p}(f)$, то принимается гипотеза равенства нулю генерального коэффициента регрессии $\beta_j = 0$, а соответствующий выборочный коэффициент b_j как незначимый отсеивается из уравнения регресии. При этом ввиду ортогональности матрицы планирования остальные коэффициенты не приходится пересчитывать.

Адекватность уравнения регрессии эксперименту проверяется так же, как и при обработке пассивного эксперимента, по критерию Фишера. В матрице планирования (табл. 37) каждый опыт повторялся m раз. Для проверки адекватности составляется дисперсионное отношение

$$F = s_{\text{ад}}^2 / s_{\text{воспр}}^2,$$

где $s_{\text{ад}}^2$ — дисперсия адекватности, определяемая формулой

$$s_{\text{ад}}^2 = \frac{m \sum_{i=1}^{N} \left(\bar{y}_i - \hat{y}_i\right)^2}{N - l}; \tag{V.38}$$

l — число значимых коэффициентов в уравнении регрессии.

Если полученное дисперсионное отношение оказывается меньше табличного:

$$F < F_{1-p}(f_1, f_2), \tag{V.39}$$

где p — уровень значимости; f_1 — число степеней свободы дисперсии адекватности,

$$f_1 = N - l, \tag{V.40}$$

f_2 — число степеней свободы дисперсии воспроизводимости, $f_2 = N(m-1)$, уравнение адекватно эксперименту. Если

$$F \geqslant F_{1-p}(f_1, f_2), \tag{V.41}$$

то для адекватного описания эксперимента необходимо увеличить порядок аппроксимирующего полинома.

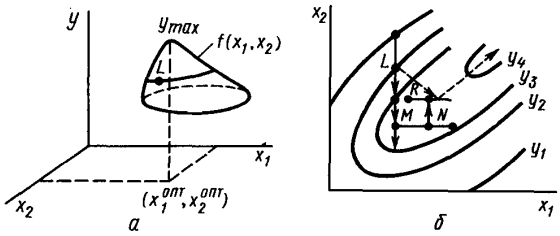


Рис. 30. Движение по поверхности отклика *(а)* к экстремуму в однофакторном эксперименте и в методе крутого восхождения *(б)*

3. Оптимизация методом крутого восхождения по поверхности отклика. Задача оптимизации ставится таким образом: необходимо определить экспериментально координаты экстремальной точки $(x_1^{опт}, x_2^{опт}, ..., x_k^{опт})$ функции $y = f(x_1, x_2, ..., x_k)$. Построим контурные сечения y=const поверхности отклика для $k=2$ (рис. 30, *а*). При традиционном эксперименте обычно фиксируют один из факторов, например x_1, и двигаются из точки L в направлении оси x_2. Координаты точки L известны из предварительных опытов. Движение по x_2 продолжается до тех пор, пока не прекращается прирост y (рис. 30, *б*). В точке M с лучшим выходом фиксируется фактор x_2 и начинается движение в направлении оси x_1. В точке N снова фиксируется x_1 и начинается опять движение по переменной x_2 и т. д. Очевидно, что путь к экстремуму по ломаной $LMNR$ не самый короткий. Известно, что движение по кратчайшему, наиболее крутому пути — это движение по градиенту перпендикулярно линиям y= const (на рис. 30, *б* показано пунктиром). Если описание поверхности отклика в общем случае $y = f(x_1, x_2, ..., x_k)$, градиент функции

$$\text{grad } f = \frac{\partial f}{\partial x_1}\vec{i} + \frac{\partial f}{\partial x_2}\vec{j} + \ldots + \frac{\partial f}{\partial x_k}\vec{k}, \qquad \text{(V.42)}$$

где $\vec{i}, \vec{j}, ..., \vec{k}$ — орты координатных осей.

Предполагается, что функция f непрерывна, дифференцируема, однозначна и не имеет особых точек. Бокс и Уилсон предложили шаговый метод движения по поверхности отклика. В окрестности точки L ставится эксперимент для локального описания поверхности отклика линейным уравнением регрессии:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \ldots + b_k x_k. \qquad \text{(V.43)}$$

Далее двигаются по поверхности отклика в направлении градиента линейного приближения:

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x_1} = b_1; \quad \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_2} = b_2; \quad \ldots; \quad \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_k} = b_k. \qquad \text{(V.44)}$$

При постановке опытов величина шага должна быть пропорциональна произведению коэффициента b_j на интервал варьирования $b_j \Delta z_j$. Если одного линейного приближения недостаточно, то ставит-

ся новая серия опытов с центром в точке, которая соответствует наибольшему значению y, и находится новое направление для движения по поверхности отклика. Такой шаговый процесс продолжается до достижения области, близкой к экстремуму, или *«почти стационарной области»*.

Направление градиента зависит от выбранного интервала варьирования независимых факторов. При изменении в n раз интервала варьирования для некоторого j-го фактора меняется в n^2 раз величина шага для этого фактора, так как в n раз изменяется коэффициент регрессии b_j и также в n раз — интервал варьирования. Инвариантными к изменению интервала остаются только знаки составляющих градиента. Удачный выбор интервала варьирования во многом связан с наличием априорной информации о параметрической чувствительности процесса. Интервал варьирования должен быть достаточно велик, чтобы диапазон изменения выходной величины был в несколько раз (не менее 3—4 раз) больше ошибки воспроизводимости. В то же время для большинства процессов линейное приближение поверхности отклика адекватно эксперименту только при небольших интервалах варьирования. Если на интервалы варьирования не наложено никаких ограничений, их стремятся выбрать таким образом, чтобы получить уравнение регрессии, симметричное относительно коэффициентов при линейных членах. Обработка результатов эксперимента, связанного с крутым восхождением, должна сопровождаться тщательным статистическим анализом полученных результатов.

Пример 1. Определялся оптимальный состав фотохромного стекла в системе $Li_2O - Al_2O_3 - SiO_2$. В качестве параметров оптимизации (y) рассматривалась оптическая плотность в облученном состоянии. Надо было определить состав стекла и условия его варки, обеспечивающие максимальную оптическую плотность.

В качестве независимых факторов были выбраны: z_1 — исходная концентрация хлора, г-атом/100 г стекла; z_2 — исходная концентрация брома, г-атом/100 г стекла; z_3 — соотношение Ag : Cl; z_4 — температура варки, °С; z_5 — время выдержки, ч; z_6 — содержание Al_2O_3, мол. доли; z_7 — соотношение Li_2O / SiO_2.

Условия эксперимента приведены в таблице.

	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5	z_6	z_7
Основной уровень z_j^0	0,0425	0,0187	0,0675	1325	1,75	0,1395	0,4165
Интервал варьирования Δz_j	0,0205	0,0093	0,0325	25	0,25	0,0125	0,0835
+1	0,063	0,028	0,1	1350	2	0,157	0,5
−1	0,022	0,0094	0,035	1300	1,5	0,124	0,333

Р е ш е н и е. Для определения коэффициентов линейного уравнения регрессии

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + b_5x_5 + b_6x_6 + b_7x_7$$

использована 1/16 от ПФЭ 2^7 с генерирующими соотношениями

$$x_4 = x_1x_2x_3, \quad x_5 = x_1x_2, \quad x_6 = x_1x_3, \quad x_7 = x_2x_3.$$

Каждый опыт в матрице планирования (табл. 38) повторен два раза.

Средние значения оптической плотности y получены по двум измерениям. Проверим однородность дисперсий s_i^2, $i = 1, 2, \ldots, 8$, по критерию Кохрена. Сумма дисперсий

$$\sum_{i=1}^{8} s_i^2 = 27{,}80 \cdot 10^{-4}.$$

Критерий Кохрена

$$G = \frac{s_{\max}^2}{\sum_{i=1}^{N} s_i^2} = \frac{10{,}1 \cdot 10^{-4}}{27{,}80 \cdot 10^{-4}} = 0{,}363.$$

Табличное значение критерия Кохрена для уровня значимости $p = 0{,}05$ и чисел степеней свободы $f_1 = 1$, $f_2 = 8$ $G_{0{,}95}(1{,}8) = 0{,}6798$. $G < G_{0{,}95}(1{,}8)$, и, следовательно, дисперсии однородны. Дисперсия воспроизводимости определяется в связи с этим как среднее арифметическое:

$$s_{\text{воспр}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{N} s_i^2}{N} = \frac{27{,}80 \cdot 10^{-4}}{8} = 3{,}475 \cdot 10^{-4}.$$

Число степеней свободы дисперсии воспроизводимости равно

$$f_{\text{воспр}} = N(m - 1) = 8(2 - 1) = 8.$$

Коэффициенты уравнения регрессии определяем по формуле (V.34):

$$b_0 = 0{,}2128, \quad b_1 = 0{,}0724, \quad b_2 = -0{,}00575, \quad b_3 = 0{,}1363,$$

$$b_4 = -0{,}00088, \quad b_5 = -0{,}0129, \quad b_6 = -0{,}041, \quad b_7 = 0{,}00625.$$

Оценим значимость коэффициентов по критерию Стьюдента. Для этого по формуле (V.36) определим ошибку коэффициентов

$$s_{b_j} = \sqrt{\frac{3{,}475 \cdot 10^{-4}}{2 \cdot 8}} = 0{,}468 \cdot 10^{-2}$$

и составим t-отношение для всех коэффициентов уравнения регрессии

$$t_0 = \frac{0{,}2128}{0{,}468 \cdot 10^{-2}} = 45{,}5; \quad t_1 = \frac{0{,}0724}{0{,}468 \cdot 10^{-2}} = 15{,}45;$$

$$t_2 = \frac{0{,}00575}{0{,}468 \cdot 10^{-2}} = 1{,}23; \quad t_3 = \frac{0{,}1363}{0{,}468 \cdot 10^{-2}} = 29{,}1;$$

$$t_4 = \frac{0{,}00088}{0{,}468 \cdot 10^{-2}} = 0{,}188; \quad t_5 = \frac{0{,}0129}{0{,}468 \cdot 10^{-2}} = 2{,}77;$$

$$t_6 = \frac{0{,}0041}{0{,}468 \cdot 10^{-2}} = 0{,}875; \quad t_7 = \frac{0{,}00625}{0{,}468 \cdot 10^{-2}} = 1{,}35.$$

Табличное значение критерия Стьюдента $t_{0{,}05}(8) = 2{,}31$. Коэффициенты b_2, b_4, b_6, b_7 незначимы, так как составленные для них t-отношения меньше табличного. После исключения незначимых коэффициентов уравнение регрессии примет вид

$$\hat{y} = 0{,}2128 + 0{,}0724x_1 + 0{,}1363x_3 - 0{,}0129x_5.$$

Проверим адекватность этого уравнения эксперименту по критерию Фишера. Дисперсия адекватности определяется по (V.38):

$$s_{\text{ад}}^2 = \frac{2 \sum_{i=1}^{8} (\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2}{8 - 4} = \frac{2 \cdot 6{,}77 \cdot 10^{-4}}{4} = 3{,}385 \cdot 10^{-4}.$$

Таблица 38

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	y_1	y_2	$\bar{y}$	$s^2 \cdot 10^4$	$\hat{y}$	$(\bar{y}-\hat{y})^2 \times 10^4$
1	+	−	+	−	+	−	+	−	0	0	0	0	0,017	2,9
2	+	+	+	−	−	+	−	−	0,108	0,15	0,129	8,82	0,136	0,49
3	+	−	−	−	−	+	+	+	0	0	0	0	−0,0089	0,77
4	+	+	−	−	+	−	−	+	0,194	0,16	0,177	5,78	0,1618	2,3
5	+	−	+	+	−	−	−	+	0,298	0,292	0,295	0,18	0,2896	0,29
6	+	+	+	+	+	+	+	+	0,400	0,408	0,404	0,32	0,4086	0,21
7	+	−	−	+	+	+	−	−	0,255	0,278	0,266	2,6	0,2638	0,073
8	+	+	−	+	−	−	+	−	0,453	0,408	0,431	10,1	0,4344	0,1156

Тогда F-отношение равно

$$F = \frac{s^2_{\text{ад}}}{s^2_{\text{воспр}}} = \frac{3{,}385 \cdot 10^{-4}}{3{,}35 \cdot 10^{-4}} = 1{,}01.$$

Табличное значение критерия Фишера для $p = 0{,}05$, $f_1 = 4$ и $f_2 = 8$ $F_{0,95}$ (4,8) = 3.8. $F < F_{0,95}$ (4,8), и уравнение регрессии адекватно эксперименту. Используем полученное уравнение для крутого восхождения по поверхности отклика для увеличения оптической плотности стекла. При крутом восхождении незначимые параметры были зафиксированы на нулевом уровне, время выдержки на нижнем уровне 1,5 ч. Таким образом, изменялись только исходная концентрация хлора (Z_1) и соотношение Ag : Cl (z_3). Первые три опыта при крутом восхождении (9, 10, 11) были «мысленные» (таблица).

	z_1	z_3	y	Номер опыта	z_1	z_3	y
z_j^0	0,0425	0,0675					
Δz_j	0,0205	0,099					
b_j	0,0724	0,1363		9	0,0462	0,0787	—
$b_j \Delta z_j$	0,00148	0,00443		10	0,0498	0,0897	—
Шаг	0,0036	0,0111		11	0,0536	0,1008	—
				12	0,0573	0,1119	0,552
				13	0,0610	0,1230	0,500
				14	0,0647	0,1341	0,476
				15	0,0683	0,1452	0,436
				16	0,0719	0,1563	0,426

В качестве шагов взяты величины, в 2,5 раза большие произведений $b_j \Delta z_j$. Лучший результат получен в 12-м опыте. Дальнейшее увеличение концентрации хлора и отношения Ag : Cl ухудшает фотохромные свойства стекла. В связи с этим были реализованы пропущенные опыты 10 и 11. Получены следующие значения оптической плотности стекла:

$$y^{10} = 0{,}496, \quad y^{11} = 0{,}561.$$

Таким образом, в качестве оптимального рекомендуется состав стекла, полученный в 11-м опыте.

4. Описание области, близкой к экстремуму. Композиционные планы Бокса — Уилсона. Область, близкую к экстремуму, называют также почти стационарной областью. Это область с существенной нелинейностью функции отклика, для адекватного описания которой необходимо использовать нелинейные полиномы. В настоящее время наиболее широко для описания области, близкой к экстремуму,

применяют полиномы второго порядка. Это связано с тем, что, во-первых, имеются хорошо разработанные планы второго порядка, во-вторых, с тем, что поверхности второго порядка легко поддаются систематизации и исследованию на экстремум. И наконец, увеличение порядка аппроксимирующего полинома приводит к значительному увеличению числа опытов.

Обычно эксперимент, реализованный для определения оптимальных условий процесса, можно адекватно описать полиномом второго порядка. При этом число опытов N в плане должно быть не меньше числа определяемых коэффициентов в уравнении регрессии второго порядка для k факторов:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \ldots + b_k x_k + b_{12} x_1 x_2 + \ldots + b_{k-1,\,k} x_{k-1} x_k + b_{11} x_1^2 + \ldots + b_{kk} x_k^2 . \qquad \text{(V.45)}$$

Коэффициенты уравнения регрессии (V.45) служат оценками для соответствующих коэффициентов уравнения теоретической регрессии:

$$m_y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_k x_k + \beta_{12} x_1 x_2 + \ldots + \beta_{k-1,\,k} x_{k-1} x_k + \beta_{11} x_1^2 + \ldots + \beta_{kk} x_k^2 . \qquad \text{(V.46)}$$

Число коэффициентов l в полиноме второго порядка (V.45) можно определить по формуле

$$l = k + 1 + k + C_k^2 = 2k + 1 + \frac{k!}{2!\,(k-2)!} = \frac{(k+1)(k+2)}{2} , \qquad \text{(V.47)}$$

где C_k^2 — количество сочетаний из k факторов по два, равное числу эффектов парного взаимодействия в уравнении (V.45).

Если почти стационарную область адекватно можно описать теоретическим уравнением регрессии второго порядка (V.46), тогда становятся значимыми определенные по эксперименту эффекты взаимодействия факторов и квадратичные эффекты. Это позволяет установить факт нахождения в почти стационарной области. Близость почти стационарной области можно установить, если поставить дополнительно к факторному плану 2^k или 2^{k-p} опыты в центре плана ($x_1 = 0$; $x_2 = 0$;...; $x_k = 0$) и вычислить среднее $\bar{y}^0$. Среднее $\bar{y}^0$ является оценкой для свободного члена уравнения теоретической регрессии

$$\bar{y}^0 \to \beta_0 , \qquad \text{(V.48)}$$

в то время как коэффициент b_0, подсчитываемый в факторном эксперименте по формуле

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_{0i}\, y_i}{N} ,$$

является совместной оценкой для свободного члена и суммы квадратичных:

$$b_0 \to \beta_0 + \sum_{j=1}^{k} \beta_{jj} . \qquad \text{(V.49)}$$

Поэтому разность

$$b_0 - \bar{y}_0 \to \sum_{j=1}^{k} \beta_{jj} \qquad (V.50)$$

может до некоторой степени служить мерой кривизны поверхности.

Для описания поверхности отклика полиномами второго порядка независимые факторы в планах должны принимать не менее трех разных значений. Трехуровневый план, в котором реализованы все возможные комбинации из k факторов на трех уровнях, представляет собой полный факторный эксперимент 3^k. В табл. 39 приведена матрица планирования полного факторного эксперимента 3^2.

Таблица 39. **ПФЭ 3^2**

Номер опыта	x_1	x_2	y	Номер опыта	x_1	x_2	y
1	0	0	y_1	6	−1	+1	y_6
2	+1	0	y_2	7	0	−1	y_7
3	−1	0	y_3	8	+1	−1	y_8
4	0	+1	y_4	9	−1	−1	y_9
5	+1	+1	y_5				

Полный факторный эксперимент 3^k требует слишком большого числа опытов, намного превышающего число определяемых коэффициентов l уже для $k > 2$.

Число опытов в ПФЭ 3^k и число коэффициентов l в уравнении регрессии второго порядка приведены ниже:

k	2	3	4	5	6
3^k	9	27	81	243	729
l	6	10	15	21	28

Сократить число опытов можно, если воспользоваться так называемыми *композиционными* или *последовательными* планами, предложенными Боксом и Уилсоном. Ядро таких планов составляет ПФЭ 2^k при $k < 5$ или полуреплика от него при $k \geqslant 5$. Возможность использования в качестве ядра плана полуреплики при $k \geqslant 5$ обусловлена тем, что уже полуреплика обеспечивает получение несмешанных оценок для линейных эффектов и эффектов парного взаимодействия (см. гл. V, 2).

Если линейное уравнение регрессии оказалось неадекватным, необходимо: 1) добавить $2k$ звездных точек, расположенных на координатных осях факторного пространства. Координаты звездных точек:

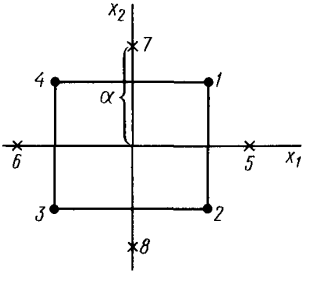


Рис. 31. Композиционный план второго порядка для $k = 2$

$$(\pm\alpha, 0, \ldots, 0), \quad (0, \pm\alpha, 0, \ldots, 0) \ldots (0, 0, \ldots, 0, \pm\alpha),$$

где α — расстояние от центра плана до звездной точки — *звездное плечо*; 2) увеличить число экспериментов в центре плана n_0.

Рассмотрим построение композиционных планов на примере $k=2$ (рис. 31). Точки *1, 2, 3, 4* образуют ПФЭ 2^2, точки *5, 6, 7, 8* — звездные точки с координатами $(\pm\alpha, 0)$ и $(0, \pm\alpha)$, координаты n_0 опытов в центре плана нулевые — (0, 0) (табл. 40).

Таблица 40. **Композиционный план второго порядка для двух факторов**

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x_1^2	x_2^2	Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x_1^2	x_2^2
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	8	+1	0	$-\alpha$	0	0	α^2
2	+1	+1	−1	−1	+1	+1	9	+1	0	0	0	0	0
3	+1	−1	−1	+1	+1	+1	10	+1	0	0	0	0	0
4	+1	−1	+1	−1	+1	+1	.	.	.	.	.	.	.
5	+1	$+\alpha$	0	0	α^2	0	.	.	.	.	.	.	.
6	+1	$-\alpha$	0	0	α^2	0	N	+1	0	0	0	0	0
7	+1	0	$+\alpha$	0	0	α^2							

Информационная матрица (матрица моментов) композиционного плана второго порядка имеет для $k=2$ вид

$$(X^TX) = \begin{array}{c} \\ b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_{12} \\ b_{11} \\ b_{22} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} b_0 & b_1 & b_2 & b_{12} & b_{11} & b_{22} \end{array} \\ \begin{bmatrix} \sum\limits_{i=1}^{N} x_{0i}^2 & 0 & 0 & 0 & \sum\limits_{i=1}^{N} x_{0i}x_{1i}^2 & \sum\limits_{i=1}^{N} x_{0i}x_{2i}^2 \\ 0 & \sum\limits_{i=1}^{N} x_{1i}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sum\limits_{i=1}^{N} x_{2i}^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sum\limits_{i=1}^{N} x_{1i}^2x_{2i}^2 & 0 & 0 \\ \sum\limits_{i=1}^{N} x_{1i}^2x_{0i} & 0 & 0 & 0 & \sum\limits_{i=1}^{N} x_{1i}^4 & \sum\limits_{i=1}^{N} x_{1i}^2x_{2i}^2 \\ \sum\limits_{i=1}^{N} x_{2i}^2x_{0i} & 0 & 0 & 0 & \sum\limits_{i=1}^{N} x_{2i}^2x_{1i}^2 & \sum\limits_{i=1}^{N} x_{2i}^4 \end{bmatrix} \end{array} \tag{V.51}$$

где

$$\sum_{i=1}^{N} x_{0i}^2 = N,$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_{1i}^2 = \sum_{i=1}^{N} x_{2i}^2 = 2^2 + 2\alpha^2,$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_{0i}x_{1i}^2 = \sum_{i=1}^{N} x_{0i}x_{2i}^2 = 2^2 + 2\alpha^2,$$

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

$$\sum_{i=1}^{N} x_{1i}^4 = \sum_{i=1}^{N} x_{2i}^4 = 2^2 + 2\alpha^4.$$

Общее число опытов в матрице композиционного плана второго порядка при k факторах (табл. 41) составляет

$$N = 2^k + 2k + n_0 \text{ при } k < 5, \quad N = 2^{k-1} + 2k + n_0 \text{ при } k \geqslant 5. \quad \text{(V.52)}$$

Таблица 41. **Композиционный план второго порядка для k факторов**

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	...	x_k
1	+1	+1	−1	+1	...	−1
2	+1	−1	−1	−1	...	+1
3	+1	+1	−1	+1	...	−1
4	+1	−1	+1	−1	...	+1
5	+1	+1	−1	+1	...	−1
.	.	.	.	.	...	.
.	.	.	.	.	...	.
.	.	.	.	.	...	.
$n_я$	+1	−1	−1	−1	...	−1
$n_я + 1$	+1	+α	0	0	...	0
$n_я + 2$	+1	−α	0	0	...	0
.	.	.	.	.	...	.
.	.	.	.	.	...	.
.	.	.	.	.	...	.
$n_я + 2k$	+1	0	0	0	...	−α
.	.	.	.	.	...	.
.	.	.	.	.	...	.
.	.	.	.	.	...	.
N	+1	0	0	0	...	0

Соответствующая плану (табл. 41) информационная матрица $X^T X$ имеет вид (V.53)

Таблица 42. **Значения α^2 для различного числа факторов и количества опытов в центре плана**

n_0	k				n_0	k			
	2	3	4	5*		2	3	4	5*
1	1,00	1,476	2,00	2,39	6	1,742	2,325	2,950	3,31
2	1,160	1,650	2,164	2,58	7	1,873	2,481	3,140	3,49
3	1,317	1,831	2,390	2,77	8	2,00	2,633	3,310	3,66
4	1,475	2,00	2,580	2,95	9	2,113	2,782	3,490	3,83
5	1,606	2,164	2,770	2,14	10	2,243	2,928	3,66	4,00

* Полуреплика, $x_5 = x_1 x_2 x_3 x_4$

$$
\begin{array}{c|c|c|c|c}
 & b_0 & b_1, \dots, b_k & b_{12}, b_{13}, \dots, b_{k-1,k} & b_{11}, b_{22}, \dots, b_{kk} \\
\hline
b_0 & \sum x_{0i}^2 & 0 & & \sum x_{0i}x_{1i}^2 \;\; \sum x_{0i}x_{2i}^2 \cdots \sum x_{0i}x_{ki}^2 \\
b_1 & & \sum x_{1i}^2 \;\; \ddots & 0 & \\
\vdots & & & & \\
b_k & 0 & \sum x_{ki}^2 & & 0 \\
\hline
b_{12} & & & \sum x_{1i}^2 x_{2i}^2 \;\; 0 & \\
b_{13} & 0 & & \sum x_{1i}^2 x_{3i}^2 \;\; \ddots & 0 \\
\vdots & & & & \\
b_{k-1,k} & & & 0 \;\; \sum x_{k-1}^2 x_{ki}^2 & \\
\hline
b_{11} & \sum x_{1i}^2 x_{0i} & & & \sum x_{1i}^4 \;\; \sum x_{1i}^2 x_{2i}^2 \cdots \sum x_{1i}^2 x_{ki}^2 \\
b_{22} & \sum x_{2i}^2 x_{0i} & & 0 & \sum x_{2i}^2 x_{1i}^2 \;\; \sum x_{2i}^4 \cdots \sum x_{2i}^2 x_{ki}^2 \\
\vdots & \vdots & 0 & & \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
b_{kk} & \sum x_{ki}^2 x_{0i} & & & \sum x_{ki}^2 x_{1i}^2 \;\; \sum x_{ki}^2 x_{2i}^2 \cdots \sum x_{ki}^4
\end{array}
\qquad (V.53)
$$

где

$$\sum_{i=1}^{N} x_{0i}^2 = N,$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_{1i}^2 = \sum_{i=1}^{N} x_{2i}^2 = \cdots = \sum_{i=1}^{N} x_{ki}^2 \ll \begin{matrix} 2^k + 2\alpha^2 \text{ для } k < 5, \text{ ядро } 2^k \\ 2^{k-1} + 2\alpha^2 \text{ для } k \geqslant 5, \text{ ядро } 2^{k-1}; \end{matrix}$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_{0i}x_{1i}^2 = \sum_{i=1}^{N} x_{0i}x_{2i}^2 = \cdots = \sum_{i=1}^{N} x_{0i}x_{ki}^2 \ll \begin{matrix} 2^k + 2\alpha^2 \text{ для } k < 5 \\ 2^{k-1} + 2\alpha^2 \text{ для } k \geqslant 5; \end{matrix}$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_{1i}^2 x_{2i}^2 = \sum_{i=1}^{N} x_{1i}^2 x_{3i}^2 = \cdots = \sum_{i=1}^{N} x_{(k-1)\,i}^2 x_{ki}^2 \ll \begin{matrix} 2^k \text{ для } k < 5 \\ 2^{k-1} \text{ для } k \geqslant 5; \end{matrix}$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_{1i}^4 = \sum_{i=1}^{N} x_{2i}^4 = \cdots = \sum_{i=1}^{N} x_{ki}^4 \ll \begin{matrix} 2^k + 2\alpha^4 \text{ для } k < 5 \\ 2^{k-1} + 2\alpha^4 \text{ для } k \geqslant 5. \end{matrix}$$

Таким образом, композиционные планы второго порядка неортогональны:

$$\sum_{i=1}^{N} x_{0i}x_{ji}^2 \neq 0, \quad j = 1, 2, \ldots, k;$$

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

Выбор величины звездного плеча α и числа опытов в центре плана n_0 связан с критерием оптимальности плана.

5. Ортогональные планы второго порядка. Композиционные планы легко приводятся к ортогональным выбором соответствующего звездного плеча α. Для этого было проведено обращение матрицы (V.53) в общем виде. При этом достаточно было обратить ту ее часть, которая связана со столбцами x_0 и x_j^2 (табл. 41), т. е. с коэффициентами b_0 и b_{jj}, и определить α из условия равенства нулю недиагонального элемента обратной матрицы:

$$\begin{aligned} \alpha^4 + 2^k\alpha^2 - 2^{k-1}(k + 0{,}5n_0) = 0, \quad \text{ядро } 2^k; \\ \alpha^4 + 2^{k-1}\alpha^2 - 2^{k-2}(k + 0{,}5n_0) = 0, \quad \text{ядро } 2^{k-1}. \end{aligned} \qquad \text{(V.54)}$$

Значения α^2, определенные по (V.54), приведены в табл. 42 (см. стр. 181).

Выбрав α из табл. 42 и проведя следующее линейное преобразование квадратичных столбцов x_j^2

$$x_j' = x_j^2 - \overline{x_j^2} = x_j^2 - \frac{\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2}{N}, \qquad \text{(V.55)}$$

получим ортогональную матрицу. Так, ортогональный план второго порядка для $k = 2$ и $n_0 = 1$ имеет вид (табл. 43):

Таблица 43. **Ортогональный план второго порядка для $k = 2$**

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x_1'	x_2'	Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x_1'	x_2'
1	+1	+1	+1	+1	+1/3	+1/3	6	+1	−1	0	0	+1/3	−2/3
2	+1	+1	−1	−1	+1/3	+1/3	7	+1	0	+1	0	−2/3	+1/3
3	+1	−1	−1	+1	+1/3	+1/3	8	+1	0	−1	0	−2/3	+1/3
4	+1	−1	+1	−1	+1/3	+1/3	9	+1	0	0	0	−2/3	−2/3
5	+1	+1	0	0	+1/3	−2/3							

Благодаря ортогональности матрицы планирования все коэффициенты регрессии определяются независимо друг от друга по формуле

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_{ji} y_i}{\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2} \qquad \text{(V.56)}$$

и дисперсии коэффициентов равны

$$s_{b_j}^2 = \frac{s_{\text{воспр}}^2}{\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2}. \qquad \text{(V.57)}$$

В результате расчетов по матрице с преобразованными столбцами для квадратичных эффектов получим уравнение вида

$$\hat{y} = b_0' + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_k x_k + b_{12} x_1 x_2 + \cdots +$$

$$+ b_{(k-1)\,k}\, x_{k-1}\, x_k + b_{11}\left(x_1^2 - \overline{x_1^2}\right) + \cdots + b_{kk}\left(x_k^2 - \overline{x_k^2}\right). \qquad \text{(V.58)}$$

Чтобы перейти к обычной записи, определяют b_0 по формуле

$$b_0 = b_0' - b_{11}\overline{x_1^2} - \cdots - b_{kk}\overline{x_k^2} \qquad \text{(V.59)}$$

и оценивают с дисперсией, равной

$$s_{b_0}^2 = s_{b_0'}^2 + \left(\overline{x_1^2}\right)^2 s_{b_{11}}^2 + \cdots + \left(\overline{x_k^2}\right)^2 s_{b_{kk}}^2. \qquad \text{(V.60)}$$

Зная дисперсию воспроизводимости, проверяют значимость коэффициентов и адекватность уравнения

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_k x_k + b_{12} x_1 x_2 + \cdots +$$

$$+ b_{k-1,\,k}\, x_{k-1} x_k + b_{11} x_1^2 + \cdots + b_{kk} x_k^2.$$

Адекватность уравнения проверяют по критерию Фишера, составляя отношение дисперсий:

$$F = s_{\text{ад}}^2 / s_{\text{воспр}}^2.$$

Уравнение адекватно, если составленное таким образом F-отношение меньше табличного для выбранного уровня значимости p (обычно равного 0,05) и чисел степеней свободы дисперсии адекватности и дисперсии воспроизводимости:

$$F < F_{1-p}(f_1,\ f_2),$$

где $f_1 = N - l$ — число степеней свободы дисперсии адекватности; f_2 — число степеней свободы дисперсии воспроизводимости; N — число опытов в матрице планирования; l — число коэффициентов в уравнении регрессии второго порядка.

Значимость коэффициентов проверяется по критерию Стьюдента:

$$t_j = b_j / s_{b_j}.$$

Коэффициент значим, если $t_j > t_p$ (f_2), где f_2 — число степеней свободы дисперсии воспроизводимости.

Коэффициенты уравнения регрессии, получаемые при помощи ортогональных планов второго порядка, определяются с разной точностью. Согласно (V.57) имеем:

$$s_{b_0} = s_{\text{воспр}} / \sqrt{N},$$

$$s_{b_j} = s_{\text{воспр}} / \sqrt{2^k + 2\alpha^2},\ j = 1,\ 2,\ \ldots,\ k \text{ при } k < 5, \text{ ядро } 2^k,$$

$$s_{b_j} = s_{\text{воспр}} \Big/ \sqrt{2^{k-1} + 2\alpha^2} \text{ при } k \geqslant 5, \text{ ядро } 2^{k-1},$$

$$s_{b_{uj}} = s_{\text{воспр}} \Big/ \sqrt{2^k} \text{ при } k < 5, \text{ ядро } 2^k,$$

$$u,\ j = 1,\ 2,\ \ldots,\ k,$$

$$u \neq j,$$

$$s_{b_{uj}} = s_{\text{воспр}} \Big/ \sqrt{2^{k-1}} \text{ при } k \geqslant 5, \text{ ядро } 2^{k-1}, \qquad \text{(V.61)}$$

$$s_{b_{jj}} = \frac{s_{\text{воспр}}}{\sqrt{2^k\left(1 - \overline{x_j^2}\right)^2 + 2\left(\alpha^2 - \overline{x_j^2}\right)^2 + (n_0 + 2k - 2)\left(\overline{x_j^2}\right)^2}} \text{ при } k < 5, \text{ ядро } 2^k,$$

$$j = 1,\ 2,\ \ldots,\ k,$$

$$s_{b_{jj}} = \frac{s_{\text{воспр}}}{\sqrt{2^{k-1}\left(1 - \overline{x_j^2}\right)^2 + 2\left(\alpha^2 - \overline{x_j^2}\right)^2 + (n_0 + 2k - 2)\left(\overline{x_j^2}\right)^2}} \text{ при } k \geqslant 5, \text{ ядро } 2^{k-1}.$$

Ортогональные планы второго порядка не обладают свойством ротатабельности.

Пример 2. Исследовался процесс разложения полигалита азотной кислотой:

$$K_2SO_4 \cdot MgSO_4 \cdot 2CaSO_4 \cdot 2H_2O + 4HNO_3 \rightarrow$$

$$\rightarrow 2KNO_3 + Mg(NO_3)_2 + 2H_2SO_4 + 2CaSO_4$$

Ставилась задача выяснения принципиальной возможности максимально полного перевода полезных компонентов полигалита калия и магния в азотнокислотную вытяжку и анализ параметрической чувствительности процесса.

Р е ш е н и е. В качестве факторов, от которых зависит процесс разложения полигалита азотной кислотой, были выбраны следующие: z_1 — температура процесса, °С; z_2 — продолжительность взаимодействия реагентов, мин; z_3 — норма азотной кислоты, мас.% от стехиометрии на разложение калийно-магниевой части полигалита; z_4 — концентрация азотной кислоты, мас.%.

В связи с тем, что целью данного исследования был анализ параметрической чувствительности процесса, в качестве плана эксперимента был выбран ортогональный план второго порядка, обеспечивающий равенство нулю всех ковариаций между коэффициентами в уравнении регрессии. Координаты центра плана, интервалы варьирования и уровни исследования приведены в таблице.

	z_1	z_2	z_3	z_4
z_j^0	30	15	150	12,5
Δz_j	6,21	3,1	31	4,65
+1	36,21	18,1	181	17,15
−1	23,79	11,9	119	7,85
+1,61	40,00	20,00	200	20,0
−1,61	20,00	10,00	100	5,0

В экспериментах были использованы полигалитовые отходы от производства сульфата калия из полиминеральной руды Калужского комбината.

Состав полигалитовых отходов, %:

K_2O 13,8; Mg 7,3; CaO 15,6; SO_3 46,5; нерастворимый осадок (н.о.) 6,2;

минералогический состав, %:

K_2SO_4 25,59; $MgSO_4$ 21,8; $CaSO_4$ 34,9; $H_2O_{гидр}$ 4,0; н.о. 6,2; $H_2O_{гигр}$ 1,92.

Химический состав и грансостав полигалитовых отходов Калужского комбината идентичен полигалиту Жилянского месторождения. Средний размер частиц полигалита 0,25 мм.

План и результаты эксперимента:

y_1 — степень извлечения в жидкую фазу K_2O, мас.%; y_2 — степень извлечения MgO, мас.% приведены в табл. 44. Параметры плана: $k = 4$; $n_0 = 4$; $\alpha = 1{,}61$; $N = 28$.

Дисперсии воспроизводимости посчитаны по четырем опытам в центре плана: $s^2_{y_1} = 6{,}48$; $s^2_{y_2} = 5{,}38$.

Таблица 44. **План и результаты эксперимента**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	y_1	y_2
1	+1	+1	+1	+1	93,94	90,40
2	−1	−1	+1	+1	65,50	67,75
3	−1	+1	+1	+1	77,74	74,52
4	+1	−1	+1	+1	94,08	87,00
5	+1	+1	−1	+1	79,69	76,30
6	−1	−1	−1	+1	67,77	65,96
7	−1	+1	−1	+1	69,95	67,05
8	+1	−1	−1	+1	81,31	78,08
9	+1	+1	+1	−1	96,95	87,50
10	−1	−1	+1	−1	76,47	73,90
11	−1	+1	+1	−1	76,68	63,66
12	+1	−1	+1	−1	88,72	83,90
13	+1	+1	−1	−1	90,00	81,51
14	−1	−1	−1	−1	62,06	58,56
15	−1	+1	−1	−1	71,33	66,78
16	+1	−1	−1	−1	88,00	78,77
17	0	0	0	0	90,31	80,96
18	0	0	0	0	89,16	79,73
19	0	0	0	0	88,27	82,26
20	0	0	0	0	94,65	85,14
21	+1,61	0	0	0	98,36	86,62
22	−1,61	0	0	0	63,00	61,64
23	0	+1,61	0	0	89,20	86,93
24	0	−1,61	0	0	75,25	75,41
25	0	0	+1,61	0	91,30	90,00
26	0	0	−1,61	0	71,38	73,29
27	0	0	0	+1,61	79,60	75,48
28	0	0	0	−1,61	79,49	76,03

По результатам экспериментов (табл. 44) рассчитаны коэффициенты регрессии и их ошибки. Согласно формулам (V.56) и (V.57) для y_1 получены значения:

$b_0 = 81,77$ $b_1 = 9,54$; $b_2 = 1,94$; $b_3 = 4,34$;
$b_4 = -0,946$; $b_{12} = -0,96$; $b_{13} = 0,588$;
$b_{14} = -0,568$; $b_{23} = 0,543$; $b_{24} = -0,44$;
$b_{34} = -0,32$; $b_{11} = -3,13$; $b_{22} = -2,54$;
$b_{33} = -2,88$; $b_{44} = -3,57$;
$s_{b_j} = 0,55$; $s_{b_{uj}} = 0,64$; $s_{b_{jj}} = 0,69$.

Для y_2: $b_0 = 87,09$; $b_1 = 8,57$; $b_2 = 1,89$; $b_3 = 4,11$;
$b_4 = 0,44$; $b_{12} = -1,07$; $b_{13} = 0,64$; $b_{14} = 0,02$;
$b_{23} = -0,34$; $b_{24} = -0,013$; $b_{34} = 0,11$;
$b_{11} = -4,18$; $b_{22} = -1,72$; $b_{33} = -1,56$; $b_{44} = -3,67$
$s_{b_j} = 0,504$; $s_{b_{uj}} = 0,58$; $s_{b_{jj}} = 0,634$.

Значимость коэффициентов уравнений регрессии оценена по t-критерию Стьюдента в соответствии с формулой (IV.34):

для y_1: $t_1 = 17,35$; $t_2 = 3,53$; $t_3 = 7,9$;
$t_4 = 1,72$; $t_{12} = 1,5$; $t_{13} = 0,92$; $t_{14} = 0,89$;
$t_{23} = 0,85$; $t_{24} = 0,64$; $t_{34} = 0,5$;
$t_{11} = 4,54$; $t_{22} = 3,68$; $t_{33} = 4,17$; $t_{44} = 5,17$;

для y_2: $t_1 = 17,0$; $t_2 = 3,75$; $t_3 = 8,15$; $t_4 = 0,87$;
$t_{12} = 1,84$; $t_{13} = 1,1$; $t_{14} = 0,034$;
$t_{23} = 0,58$; $t_{24} = 0,02$; $t_{34} = 0,19$;
$t_{11} = 6,59$; $t_{22} = 2,71$; $t_{33} = 2,46$; $t_{44} = 5,79$.

Табличное значение критерия Стьюдента для уровня значимости $p = 0,05$ и числа степеней свободы $f = n_0 - 1 = 3$ $t_{0,05}(3) = 3,18$.

После отсева незначимых коэффициентов, для которых t-отношение меньше табличного, уравнения регрессии имеют вид

$$\hat{y}_1 = 90,98 + 9,54x_1 + 1,94x_2 + 4,34x_3 - 3,13x_1^2 - 2,54x_2^2 - 2,88x_3^2 - 3,57x_4^2,$$

$$\hat{y}_2 = 93,07 + 8,57x_1 + 1,89x_2 + 4,11x_3 - 4,18x_1^2 - 3,67x_4^2.$$

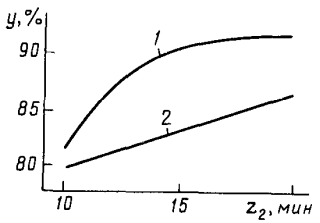


Рис. 32. Влияние температуры на степень извлечения K_2O (*1*) и MgO (*2*) в раствор

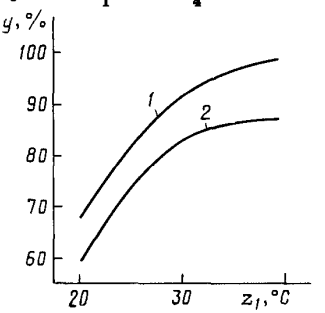


Рис. 33. Влияние продолжительности взаимодействия на степень извлечения K_2O (*1*) и MgO (*2*) в раствор

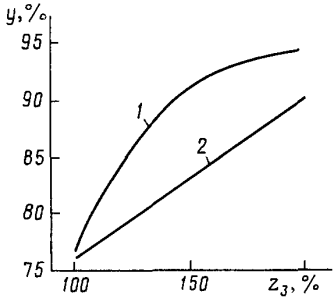


Рис. 34. Влияние нормы азотной кислоты на степень извлечения K_2O (*1*) и MgO (*2*) в раствор

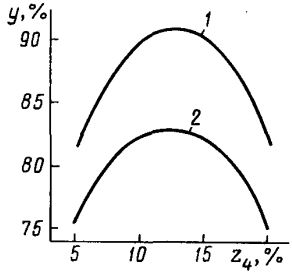


Рис. 35. Влияние концентрации азотной кислоты на степень извлечения K_2O (*1*) и MgO (*2*) в раствор

Полученные уравнения адекватны эксперименту: $F_{y_1} = 2{,}52$; $F_{y_2} = 1{,}95$. Табличное значение критерия Фишера $F_{\text{табл}} = 8{,}65$ для уровня значимости $p = 0{,}05$, $f_1 = 20$, $f_2 = 3$ и $f_1 = 22$, $f_2 = 3$.

Анализ параметрической чувствительности процесса по уравнениям регрессии показан на рис. 32–35. Расчеты сделаны для центра плана. Степень извлечения K_2O и MgO в раствор возрастает с увеличением температуры, продолжительности и нормы азотной кислоты (рис. 32–34). Зависимость степени извлечения MgO и K_2O в раствор от концентрации азотной кислоты носит экстремальный характер (рис. 35). Значение экстремума (максимума) для степени извлечения K_2O равно в данных условиях (в центре плана) 91,0%, а MgO – 93,0% при концентрации азотной кислоты 12,5%. Из приведенных данных следует, что при всех изученных условиях MgO быстрее извлекается из полигалита в раствор, чем K_2O. Поэтому при установлении оптимальных условий процесса разложения полигалита азотной кислотой в качестве основного показателя была выбрана степень извлечения K_2O. В результате решения задачи оптимизации методом нелинейного программирования получено, что в изученном диапазоне изменения факторов наибольшая степень извлечения K_2O в раствор (94,5%) достигается в следующих условиях: концентрация HNO_3 12,5%, норма HNO_3 – 200% от стехиометрии, продолжительность взаимодействия – 20 мин. В этих условиях MgO практически полностью переходит в раствор.

6. Ротатабельные планы второго порядка Бокса – Хантера. Ортогональные планы второго порядка не обладают свойством ротатабельности. Количество информации, определяемое как величина, обратная $s_{\hat{y}}^2$, оказывается различным для эквидистантных точек. На рис. 36 показаны контуры равной информации для $k = 2$ и плана, приведенного в табл. 43. Поверхности равной информации для большего числа факторов имеют очень сложный характер. Бокс и Хантер предложили считать оптимальными ротатабельные планы второго порядка. Ротатабельным будет такое планирование, у которого ковариационная матрица $(X^TX)^{-1}$ инвариантна к ортогональному вращению координат. Условие ротатабельности для планов второго порядка выполняется, если моменты

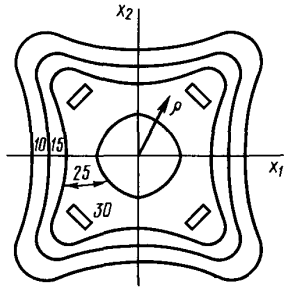


Рис. 36. Линии равной информации для ортогонального плана второго порядка при $k = 2$

информационной матрицы удовлетворяют соотношениям

$$\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 = N\lambda_2, \quad j = 1, 2, \ldots, k, \tag{V.62}$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^4 = 3 \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 x_{ui}^2 = 3N\lambda_4, \quad u, j = 1, 2, \ldots, k, \quad u \neq j, \tag{V.63}$$

где λ_2 и λ_4 — произвольные константы.

Остальные моменты информационной матрицы равны нулю (см. с. 190).

В зависимости от значений λ_2 и λ_4 меняются информационные профили. На рис. 37 приведены информационные профили для $k=2$, $\lambda_2=1$ при различных значениях λ_4. Аналогичные профили получаются и для других значений k. Значение λ_4 выбирают так, чтобы информация оставалась постоянной в интервале $0 \leqslant \rho \leqslant 1$. Такое планирование называется *униформ-ротатабельным планированием*.

В определитель матрицы (V.64) в качестве множителя входит величина $[(2+k)\ \lambda_4/\ \lambda_2^2] - k$. Для существования матрицы $(X^T X)^{-1}$ необходимо, чтобы выполнялось условие $[(2+k)\ \lambda_4/\ \lambda_2^2] - k \neq 0$, т. е.

$$\lambda_4/\lambda_2^2 > k/(k+2). \tag{V.65}$$

Рассмотрим, в каких случаях условие (V.65) не выполняется. Найдем связь констант λ_2 и λ_4 с числом факторов k. Умножив на k соотношение (V.62), получим

$$k \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 = \sum_{j=1}^{k} \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{k} x_{ji}^2 = \sum_{i=1}^{N} \rho_i^2 = k\lambda_2 N. \tag{V.66}$$

Отсюда

$$\lambda_2 = \frac{\sum_{i=1}^{N} \rho_i^2}{kN}, \tag{V.67}$$

где ρ_i — радиус i-й точки в k-мерном пространстве.

Используя соотношение (V.63), также получим

$$k \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^4 = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{k} x_{ji}^4. \tag{V.68}$$

Выразим сумму $\sum_{j=1}^{k} x_{ji}^4$ через радиус точки и число факторов k. Имея в виду, что для любой i-й точки

$$\left(\sum_{j=1}^{k} x_j^2\right)^2 = \rho^4 = (x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_k^2)^2 =$$

$$= \sum_{j=1}^{k} x_j^4 + 2C_k^2 x_u^2 x_j^2 =$$

$$= \sum_{j=1}^{k} x_j^4 + 2\,\frac{k!}{2!\,(k-2)!}\, x_u^2 x_j^2 =$$

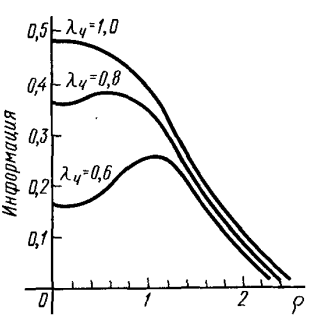


Рис. 37. Информационные профили для ротатабельного плана при $k=2$

$$
N^{-1}(X^T X) = \begin{array}{c} \\ b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_k \\ \\ b_{12} \\ b_{13} \\ \vdots \\ b_{k-1,\,k} \\ \\ b_{11} \\ b_{22} \\ \vdots \\ b_{kk} \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{cccccccccc} b_0 & b_1, \ldots, & b_k & b_{12} & b_{13}, \ldots, & b_{k-1,\,k} & b_{11} & b_{22}, \ldots, & b_{kk} & \end{array} \\
\left[\begin{array}{ccc:ccc:ccc}
1 & & 0 & & 0 & & \lambda_2 & \lambda_2 \ldots & \lambda_2 \\
 & \lambda_2 & & & & & & 0 & \\
 & \ddots & & & & & & & \\
0 & & \lambda_2 & & & & & & \\
\hdashline
 & & & \lambda_4 & & 0 & & & \\
 & 0 & & & \lambda_4 & & & 0 & \\
 & & & 0 & & \lambda_4 & & & \\
\hdashline
\lambda_2 & & & & & & 3\lambda_4\lambda_4 & \ldots & \lambda_4 \\
\lambda_2 & 0 & & & 0 & & \lambda_4\ 3\lambda_4 & \ldots & \lambda_4 \\
\vdots & & & & & & \vdots\ \vdots\ \vdots & \vdots & \vdots\ \vdots \\
\lambda_2 & & & & & & \lambda_4\lambda_4 & \ldots & 3\lambda_4
\end{array}\right] C
\end{array}
\tag{V.64}
$$

$$= \sum_{j=1}^{k} x_j^4 + k(k-1) x_u^2 x_j^2. \qquad \text{(V.69)}$$

получим

$$\sum_{j=1}^{k} x_j^4 = \rho^4 - k(k-1) x_u^2 x_j^2. \qquad \text{(V.70)}$$

Подставляя (V.70) в (V.68), получим

$$k \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^4 = \sum_{i=1}^{N} \rho_i^4 - k(k-1) \sum_{i=1}^{N} x_{ui}^2 x_{ji}^2. \qquad \text{(V.71)}$$

С учетом соотношения (V.63) имеем

$$3k \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^4 = 3 \sum_{i=1}^{N} \rho_i^4 - k(k-1) \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^4. \qquad \text{(V.72)}$$

Отсюда

$$\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^4 = \frac{3 \sum_{i=1}^{N} \rho_i^4}{k(k+2)} = 3N\lambda_4 \qquad \text{(V.73)}$$

и

$$\lambda_4 = \frac{\sum_{i=1}^{N} \rho_i^4}{Nk(k+2)}. \qquad \text{(V.74)}$$

Тогда

$$\frac{\lambda_4}{\lambda_2^2} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \rho_i^4}{\left(\sum_{i=1}^{N} \rho_i\right)^2} \frac{kN}{k+2}. \qquad \text{(V.75)}$$

Если все N точек ротатабельного плана расположены на одной сфере, т. е.

$$\rho_1^2 = \rho_2^2 = \cdots = \rho_N^2 \text{ и } \rho_1^4 = \rho_2^4 = \cdots = \rho_N^4,$$

из (V.75) имеем

$$\lambda_4 / \lambda_2^2 = k/(k+2)$$

и определитель матрицы $(X^T X)$ равен нулю. Поэтому необходимо, чтобы точки плана были расположены на нескольких сферах. Для некоторого числа факторов радиус сферы, на которой лежат точки ядра плана, совпадает с радиусом α сферы, на которой лежат звездные точки. Чтобы информационная матрица была невырожденной, в ротатабельный план вводят точки, лежащие на сфере с нулевым радиусом, — n_0 точек в центре плана. Пусть N точек плана расположены на s сферах по n_u точек на каждой сфере, тогда

$$\sum_{i=1}^{N} \rho_i^4 = \sum_{u=1}^{s} n_u \rho_u^4, \quad \sum_{i=1}^{N} \rho_i^2 = \sum_{u=1}^{s} n_u \rho_u^2. \qquad \text{(V.76)}$$

При $\lambda_2 = 1$ имеем

$$\lambda_4 = \frac{\sum_{u=1}^{s} n_u \rho_u^4}{\left(\sum_{u=1}^{s} n_u \rho_u^2\right)^2} \cdot \frac{kN}{k+2}. \qquad \text{(V.77)}$$

Если точки ядра плана $n_я$ и звездные точки n_α расположены на одной сфере $\rho_я = \rho_\alpha$ и в центре плана имеется n_0 точек, тогда

$$N = n_\alpha + n_я + n_0 = n + n_0$$

и из (V.77) имеем

$$\lambda_4 = \frac{kN}{k+2} \cdot \frac{n\rho_\alpha^4}{n^2\rho_\alpha^4} = \frac{k(n+n_0)}{(k+2)n} > \frac{k}{k+2}. \qquad \text{(V.78)}$$

Таким образом, наличие n_0 точек в центре плана обеспечивает выполнение условия (V.65). Величина звездного плеча в ротатабельных планах может быть определена из соотношения (V.63):

при $k < 5$

$$2^k + 2\alpha^4 = 3 \cdot 2^k; \quad \alpha = 2^{k/4}, \qquad \text{(V.79)}$$

при $k \geqslant 5$

$$2^{k-1} + 2\alpha^4 = 3 \cdot 2^{k-1}; \quad \alpha = 2^{\frac{k-1}{4}}. \qquad \text{(V.80)}$$

В табл. 45 приведены значения α, n_0 и радиуса сферы, на которой расположены точки ядра плана $\rho_я$ для различного числа факторов в ротатабельных униформ-планах.

Таблица 45. **Величины звездных плеч и количества точек в центре плана в ротатабельных униформ-планах**

Параметры плана	k								
	2	3	4	5	5	6	6	7	7
Ядро плана	2^2	2^3	2^4	2^5	2^{5-1}	2^6	2^{6-1}	2^7	2^{7-1}
$\rho_я$	1,41	1,73	2,00	2,24	2,27	2,45	2,45	2,64	2,64
α	1.41	1,68	2,00	2,38	2,00	2,83	2,38	3,36	2,83
n_0	5	6	7	10	6	15	9	21	14

Матрица ротатабельного плана второго порядка неортогональна, так как

$$\sum_{i=1}^{N} x_{0i} x_{ji}^2 \neq 0, \quad j = 1, 2, \ldots, k,$$

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

Коэффициенты b_{jj} коррелированы между собой и со свободным членом b_0. Поэтому для определения коэффициентов уравнения регрессии необходимо решать систему нормальных уравнений, обращая мат-

рицу $(X^T X)$

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

Специфический характер матрицы $(X^T X)$ для ротатабельных планов позволяет провести процедуру обращения этой матрицы в общем виде и получить формулы для расчетов коэффициентов уравнения регрессии и их дисперсий:

$$b_0 = \frac{A}{N}\left[2\lambda_4^2 (k+2) \sum_{i=1}^{N} y_i - 2\lambda_4 C \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 y_i\right];$$

$$b_j = \frac{C}{N} \sum_{i=1}^{N} x_{ji} y_i; \quad j = 1, 2, \ldots, k;$$

$$b_{uj} = \frac{C^2}{N\lambda_4} \sum_{i=1}^{N} x_{ui} x_{ji} y_i; \quad u \neq j; \quad u, j = 1, 2, \ldots, k;$$

(V.81)

$$b_{jj} = \frac{A}{N}\left\{[C^2 (k+2)\lambda_4 - k] \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 y_i + C^2 (1-\lambda_4) \sum_{j=1}^{k} \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 y_i - \right.$$

$$\left. - 2\lambda_4 C \sum_{i=1}^{N} y_i\right\};$$

$$s_{b_0}^2 = \frac{2A\lambda_4^2 (k+2)}{N} s_{\text{воспр}}^2;$$

$$s_{b_j}^2 = \frac{C}{N} s_{\text{воспр}}^2;$$

$$s_{b_{uj}}^2 = \frac{C^2}{\lambda_4 N} s_{\text{воспр}}^2;$$

$$s_{b_{jj}}^2 = \frac{A[(k+1)\lambda_4 - (k-1)]C^2}{N} s_{\text{воспр}}^2,$$

где k — число факторов,

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

$$A = \frac{1}{2\lambda_4[(k+2)\lambda_4 - k]}.$$

Константа λ_4 определяется по формуле (V.77). Выражения (V.81) можно упростить, объединив константы:

$$b_0 = a_1 \sum_{i=1}^{N} y_i - a_2 \sum_{j=1}^{k} \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 y_i;$$

$$b_j = a_3 \sum_{i=1}^{N} x_{ji} y_i; \quad j = 1, 2, \ldots, k; \qquad \text{(V.82)}$$

$$b_{uj} = a_4 \sum_{i=1}^{N} x_{ui} x_{ji} y_i; \quad u \neq j; \quad j, u = 1, 2, \ldots, k;$$

$$b_{jj} = a_5 \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 y_i + a_6 \sum_{j=1}^{k} \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 y_i - a_7 \sum_{i=1}^{N} y_i;$$

$$s_{b_0}^2 = a_1 s_y^2; \quad s_{b_j}^2 = a_3 s_y^2; \quad s_{b_{uj}}^2 = a_4 s_y^2; \quad s_{b_{jj}} = (a_5 + a_6) s_y^2. \qquad \text{(V.83)}$$

Значения констант, входящих в выражения (V.82), приведены в табл. 46.

Таблица 46. **Вычисление коэффициентов регрессии при ротатабельном планировании для $k \leqslant 7$**

Число независимых переменных k	Число опытов N	n_0	α	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7
2	13	5	1,412	0,2	0,1	0,125	0,25	0,1251	0,0187	0,1
3	20	6	1,682	0,1663	0,0568	0,0732	0,125	0,0625	0,0069	0,0568
4	31	7	2,00	0,1428	0,0357	0,0417	0,0625	0,0312	0,0037	0,0357
5*	32	6	2,00	0,1591	0,0341	0,0417	0,0625	0,0312	0,0028	0,0341
5	52	10	2,378	0,0988	0,0191	0,0231	0,0312	0,0156	0,0015	0,0191
6*	53	9	2,378	0,1108	0,0187	0,0231	0,0312	0,0156	0,0012	0,0187
6	91	15	2,828	0,0725	0,0098	0,0125	0,0156	0,0078	0,0005	0,0098
7*	92	14	2,828	0,0703	0,0098	0,0125	0,0156	0,0078	0,0005	0,0098
7	163	21	2,333	0,0398	0,0052	0,0066	0,0078	0,0039	0,0002	0,0052

* Полуреплика.

При использовании ротатабельных планов второго порядка отпадает необходимость в постановке дополнительных параллельных опытов для оценки дисперсии воспроизводимости. Дисперсию воспроизводимости определяют по опытам в центре плана:

$$s_{\text{воспр}}^2 = \frac{\sum_{u=1}^{n_0} (y_u^0 - \overline{y^0})^2}{n_0 - 1}; \qquad \overline{y^0} = \frac{\sum_{u=1}^{n_0} y_u^0}{n_0}. \qquad \text{(V.84)}$$

Число степеней свободы дисперсии воспроизводимости равно

$$f_{\text{воспр}} = (n_0 - 1).$$

Остаточную дисперсию определяют по формуле

$$s_{\text{ост}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{N} (y_i - \hat{y}_i)^2}{N - l}.$$

Число степеней свободы остаточной дисперсии $f_{\text{ост}} = N - l$.

Адекватность уравнения регрессии проверяют по критерию Фишера:

$$F = s_{\text{ад}}^2 / s_{\text{воспр}}^2, \qquad \text{(V.85)}$$

где $s^2_{од}$ — дисперсия адекватности, которая определяется из соотношения

$$s^2_{ад} f_{ад} = s^2_{ост} f_{ост} - s^2_{воспр} f_{воспр};$$

$$s^2_{ад} = \frac{s^2_{ост} f_{ост} - s^2_{воспр} f_{воспр}}{f_{ад}}, \qquad (V.86)$$

$f_{од}$ — число степеней свободы дисперсии адекватности;

$$f_{ад} = f_{ост} - f_{воспр}.$$

Уравнение адекватно, если $F < F_{1-p}$ (f_1, f_2), где f_1 — число степеней свободы дисперсии адекватности; f_2 — число степеней свободы дисперсии воспроизводимости.

Значимость коэффициентов проверяют по критерию Стьюдента. Если незначимым оказался один из квадратичных эффектов, после его исключения коэффициенты уравнения регрессии необходимо пересчитать.

Пример 3. Требуется установить влияние примесей, содержащихся в экстракционной фосфорной кислоте, на степень разложения (y, %) флотационного концентрата фосфорита Каратау. В качестве факторов, от которых зависит степень разложения, были выбраны следующие: z_1 - температура процесса, °С; z_2 — концентрация MgO в фосфорной кислоте, мас.%; z_3 — концентрация SO_3 в фосфорной кислоте, мас.%; z_4 — концентрация Al_2O_3 в фосфорной кислоте, мас.%; z_5 — концентрация F в фосфорной кислоте, мас.%.

Основной уровень, интервалы варьирования и границы области исследования приведены в таблице.

	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5
z^0_j	50	2,1	2,0	1,33	0,75
Δz_j	20	0,9	1,0	0,37	0,25
+2	90	3,9	4,0	2,07	1,25
−2	10	0,3	0,0	0,59	0,25

Область изменения независимых факторов соответствует диапазону изменения концентраций примесей в промышленной экстракционной кислоте.

Р е ш е н и е. Для определения уравнения регрессии используем ротатабельный план второго порядка (табл. 47).

Т а б л и ц а 47. **Ротатабельный план второго порядка для $k = 5$**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	y_1, %	Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	y_1, %
1	+1	+1	+1	+1	+1	34,7	17	−2	0	0	0	0	25,0
2	−1	+1	+1	+1	−1	41,4	18	+2	0	0	0	0	33,3
3	+1	−1	+1	+1	−1	39,0	19	0	−2	0	0	0	42,0
4	−1	−1	+1	+1	+1	39,2	20	0	+2	0	0	0	49,2
5	+1	+1	−1	+1	−1	29,5	21	0	0	−2	0	0	17,5
6	−1	+1	−1	+1	+1	26,6	22	0	0	+2	0	0	41,0
7	+1	−1	−1	+1	+1	30,0	23	0	0	0	−2	0	35,6
8	−1	−1	−1	+1	−1	34,5	24	0	0	0	+2	0	27,2
9	+1	+1	+1	−1	−1	32,2	25	0	0	0	0	−2	39,0
10	−1	+1	+1	−1	+1	41,4	26	0	0	0	0	+2	30,0
11	+1	−1	+1	−1	+1	33,7	27	0	0	0	0	0	35,4
12	1	−1	+1	−1	−1	40,9	28	0	0	0	0	0	36,4
13	+1	+1	−1	−1	+1	23,9	29	0	0	0	0	0	33,2
14	−1	+1	−1	−1	−1	33,3	30	0	0	0	0	0	32,4
15	+1	−1	−1	−1	−1	27,7	31	0	0	0	0	0	37,7
16	−1	−1	−1	−1	+1	35,9	32	0	0	0	0	0	36,9

Число опытов в матрице планирования для $k=5$ равно 32. Ядро плана представляет собой полуреплику 2^{5-1} с генерирующим соотношением $x_5 = x_1x_2x_3x_4$. Величину звездного плеча $\alpha=2$ определяем по табл. 45. Переход от натуральных переменных z к безразмерным x проведен по формуле (V.3). По эксперименту в центре плана определяем дисперсию воспроизводимости $s^2_{\text{воспр}} = 4{,}47$ с числом степеней свободы $f_{\text{воспр}} = n_0 - 1 = 5$.

По данным табл. 47 рассчитываем коэффициенты уравнения регрессии второго порядка и их ошибки:

$$b_0 = 35{,}41; \quad b_1 = 1{,}07794; \quad b_2 = -0{,}146; \quad b_3 = 4{,}5098;$$

$$b_4 = -0{,}542; \quad b_5 = -1{,}3; \quad b_{11} = -1{,}5; \quad b_{22} = 2{,}66;$$

$$b_{33} = -1{,}47; \quad b_{44} = -0{,}93; \quad b_{55} = -0{,}15; \quad b_{12} = 0{,}147;$$

$$b_{13} = 0{,}256; \quad b_{14} = 1{,}61; \quad b_{15} = 0{,}0534; \quad b_{23} = 0{,}736;$$

$$b_{24} = -0{,}198; \quad b_{25} = 0{,}403; \quad b_{34} = 0{,}401; \quad b_{35} = 0{,}256;$$

$$b_{45} = 0{,}93; \quad s_{bj} = 0{,}43; \quad s_{b_{uj}} = 0{,}53; \quad s_{bjj} = 0{,}394.$$

Значимость коэффициентов проверяем по критерию Стьюдента:

$$t_1 = 1{,}07/0{,}43 = 2{,}48; \quad t_{12} = 0{,}147/0{,}53 = 0{,}278;$$

$$t_2 = 0{,}146/0{,}43 = 0{,}34; \quad t_{13} = 0{,}256/0{,}53 = 0{,}483;$$

$$t_3 = 4{,}51/0{,}43 = 10{,}4; \quad t_{14} = 1{,}61/0{,}53 = 3{,}04;$$

$$t_4 = 0{,}542/0{,}43 = 1{,}26; \quad t_{15} = 0{,}0534/0{,}53 = 0{,}1;$$

$$t_5 = 1{,}3/0{,}43 = 3{,}02; \quad t_{23} = 0{,}736/0{,}53 = 0{,}1375;$$

$$t_{11} = 1{,}5/0{,}394 = 3{,}82; \quad t_{24} = 0{,}198/0{,}53 = 0{,}374;$$

$$t_{22} = 2{,}66/0{,}394 = 6{,}75;$$

$$t_{33} = 1{,}47/0{,}394 = 3{,}73; \quad t_{25} = 0{,}403/0{,}53 = 0{,}762;$$

$$t_{44} = 0{,}93/0{,}394 = 2{,}36; \quad t_{34} = 0{,}401/0{,}53 = 0{,}758;$$

$$t_{55} = 0{,}15/0{,}394 = 0{,}38; \quad t_{45} = 0{,}93/0{,}53 = 1{,}75.$$

Табличное значение критерия Стьюдента для уровня значимости $p=0{,}05$ и числа степеней свободы $f=5$ – $t_{0{,}95}(5) = 3{,}18$. После отсева незначимых коэффициентов, для которых t-отношение меньше табличного, и пересчета получаем уравнение регрессии вида

$$\hat{y} = 36{,}2 + 4{,}51x_3 - 1{,}3x_5 + 1{,}01x_1x_4 - 1{,}45x_1^2 + 2{,}82\,x_2^2 - 1{,}53\,x_3^2 .$$

Проверка адекватности по критерию Фишера показала, что оно адекватно эксперименту:

$$s^2_{\text{воспр}} = 4{,}47; \quad s^2_{\text{вд}} = 15{,}35; \quad F = 3{,}43; \quad F_{0{,}95}(20,5) = 4{,}5.$$

Полученное уравнение позволяет определить степень разложения флотоконцентрата фосфорита Каратау при различных температурах в зависимости от содержания примесей в кислоте.

7. Критерии оптимальности планов. При определении критериев оптимальности планов для Бокса и его школы характерным является эмпирико-интуитивный подход. Сначала ими было предложено считать оптимальными ортогональные планы, позднее – ротатабельные. План ортогонален, если ему соответствует диагональная информационная матрица. Полученные по ортогональным планам оценки параметров независимы. План ротатабелен, если соответствующая ему ковариационная матрица инвариантна к ортогональному вращению координат. Выполнение этого условия делает любое направление от центра эксперимента равнозначным в смысле точности оценки поверхности отклика.

Свойства ортогональности и ротатабельности планов чрезвычайно удобны в практическом отношении, что способствует широкому применению этих планов в экспери-

менте. Линейные ортогональные планы 2^k и 2^{k-p} обладают также свойством ротатабельности. Композиционные ротатабельные планы, предложенные Боксом и Хантером, не ортогональны. Если же в качестве критерия оптимальности выбирать ортогональность, то неизбежны некоторые потери в точности оценок параметров и регрессионной функции.

Одновременно с развитием идей Бокса развивалось второе, чисто теоретическое направление в планировании эксперимента. Наибольший вклад в его развитие внес американский математик Кифер. Концепция *D*-оптимальности, развиваемая Кифером, является естественным продолжением теории эффективных оценок Фишера. В теории Фишера эффективность оценок задается только оптимальным способом обработки результатов эксперимента. При обработке экспериментов методом наименьших квадратов для линейного уравнения регрессии находят совместно эффективные оценки этих коэффициентов. При этом эллипсоид рассеяния оценок имеет наименьший объем. Объем эллипсоида рассеяния связан с определителем информационной матрицы следующим образом:

$$V_k = \frac{(k+2)^{k/2}\,\pi^{k/2}}{\Gamma\left(\frac{k}{2}+1\right)\sqrt{|X^T X|}}\,, \qquad \text{(V.87)}$$

где $\Gamma\left(\frac{k}{2}+1\right)$ — гамма-функция.

В концепции Кифера эффективность обусловливается еще и оптимальным расположением точек в факторном пространстве. План эксперимента, при котором объем эллипсоида рассеяния минимизируется на множестве планов в заданной области, называется *D*-оптимальным. Согласно (V.87) *D*-оптимальному плану должен соответствовать максимальный определитель информационной матрицы.

Кифером предложен ряд критериев оптимальности планов. Все эти критерии, как и критерий *D*-оптимальности, фактически сводятся к некоторым требованиям, предъявляемым к виду ковариационной, а следовательно, и информационной матрицы. Так, план называется *A-оптимальным*, если его ковариационная матрица имеет наименьший след (сумму диагональных элементов). *A*-Оптимальный план позволяет минимизировать среднюю дисперсию оценок параметров. План называется *E-оптимальным*, если максимальное характеристическое значение соответствующей ему ковариационной матрицы оценок параметров минимально. Это значит, что *E*-оптимальный план минимизирует максимальную ось эллипсоида рассеяния оценок параметров. План называется *G-оптимальным*, если он обеспечивает наименьшую по всем планам максимальную дисперсию предсказанных значений y в области планирования и, следовательно, обеспечивает отсутствие в области планирования точек, в которых точность оценки поверхности отклика слишком низкая.

Боксом и Дрейпером предлагается еще один критерий оптимальности планов, позволяющий минимизировать систематическое и общее смещение, возникающее при аппроксимации поверхности отклика полиномом более низкого порядка, чем это требуется для адекватного описания.

В настоящее время наиболее развита теория построения *D*-оптимальных и *G*-оптимальных планов. В общем виде задача построения *D*-оптимальных планов не решена. Наиболее разработанными можно считать методы получения *D*-оптимальных планов для оценки одного параметра. В работах Кифера, Вольфовица, Хоула и Коно введено понятие непрерывного плана и построены непрерывные *D*-оптимальные планы для полиноминальной регрессии первого и второго порядков при ограничениях на гиперкубе и k-мерном шаре; для тригонометрической регрессии с различными весовыми функциями на отрезке. Границы эксперимента чаще всего задаются гиперкубом. *D*-Оптимальные планы первого порядка при ограничениях на кубе можно задать в виде ПФЭ 2^k. *D*-Оптимальными планами являются также некоторые дробные реплики полного факторного эксперимента, и планы Плакетта — Бермана для числа факторов k, удовлетворяющих условию $k+1$, кратны четырем. Эти планы в то же время ортогональны и ротатабельны.

D-Оптимальные непрерывные планы второго порядка на кубах размерности 2—5 для полиномов второго порядка, предложенные Кифером и Вольфовицем, как правило, содержат очень большое число наблюдений; так, например, при $k=5$ в таком точном плане должно быть более 1500 измерений. В связи с этим при помощи ЦВМ были найдены несимметричные планы второго порядка с достаточно малым числом экспериментальных точек, которые близки к *D*-оптимальным по таким характеристикам, как определитель информационной матрицы, средняя и максимальная дисперсия пред-

сказанного значения параметра оптимизации. Была проведена также сравнительная оценка с позиции D-оптимальности характеристик некоторых композиционных планов второго порядка при ограничениях на кубе для $k = 4, 5, 6$. Выбор того или иного плана исследования определяется постановкой задачи и возможностями эксперимента.

8. Исследование поверхности отклика. Решение задачи оптимизации. Уравнение регрессии второго порядка, адекватно описывающее почти стационарную область, исследуют для определения координат оптимума. Кроме того, представляет интерес изучение свойств поверхности отклика в окрестности оптимума. При этом полезно перейти от полинома второго порядка, полученного по результатам опыта, к стандартному, каноническому уравнению:

$$\hat{y} - y_s = \lambda_{11} X_1^2 + \lambda_{22} X_2^2 + \ldots + \lambda_{kk} X_k^2, \qquad (V.88)$$

где y_s — значение выхода в центре поверхности; $X_1, X_2, \ldots, X_k$ — канонические переменные, являющиеся линейными функциями факторов $x_1, x_2, \ldots, x_k$; $\lambda_{11}, \lambda_{22}, \ldots, \lambda_{kk}$ — коэффициенты канонической формы.

Первый этап канонического преобразования — перенос начала координат в особую точку поверхности отклика — центр поверхности. Координаты центра S определяются решением системы уравнений

$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = 0, \quad \frac{\partial y}{\partial x_2} = 0, \quad \ldots, \quad \frac{\partial y}{\partial x_k} = 0. \qquad (V.89)$$

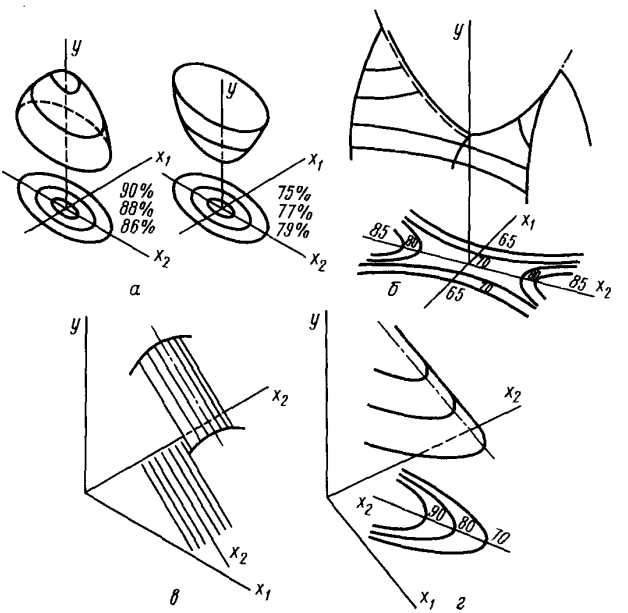


Рис. 38. Канонические поверхности и их сечения для $k = 2$

При аппроксимации поверхности отклика полиномом второго порядка приходится решать систему k линейных уравнений. Если определитель этой системы равен нулю, то поверхность не имеет центра. В этом случае можно или перенести начало координат в точку с наилучшим значением выхода, или совсем не переносить центр. При этом для нецентральной поверхности оптимум будет лежать на границе области определения факторов. Если поверхность имеет центр, то в него переносят начало координат. При этом в уравнении поверхности исчезают члены, содержащие линейные эффекты, и изменяется свободный член. Коэффициенты при вторых степенях и взаимодействиях инвариантны относительно переноса. Второй этап — поворот координатных осей в новом центре таким образом, чтобы исчезли члены с эффектами взаимодействия; свободный член инвариантен относительно поворота. В результате получим уравнение вида (V.88). Поверхности второго порядка классифицируются по их каноническим формам (рис. 38).

1. Все коэффициенты канонической формы имеют одинаковые знаки. Поверхность — эллиптический параболоид (рис. 38,*а*). В центре поверхности максимум при $\lambda_{ii}<0$ и минимум — при $\lambda_{ii}>0$.

2. Коэффициенты имеют разные знаки. Поверхность — гиперболический параболоид, «седло» (рис. 38, *б*). В центре поверхности — «минимакс».

3. Один или несколько (но не все) коэффициентов близки к нулю. При этом центр лежит далеко за областью экспериментирования. Поверхность такого типа называется «возрастающим возвышением» («гребнем»).

4. Возможен еще вырожденный случай параллельных плоскостей, который не представляет практического интереса (рис. 38, *в*).

При $\lambda_{22}=0$ (рис. 38, *г*), перенеся начало координат в точку S (обычно вблизи центра плана), получаем уравнение параболы:

$$\hat{y} - y_s = \lambda_{11} X_1^2 + \lambda_{22} X_2. \qquad (V.90)$$

Перейдем от уравнения регрессии второго порядка для $k=2$, полученного по экспериментальным данным

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 , \qquad (V.91)$$

к каноническому уравнению (V.88). Определим координаты точки S — центра поверхности. Для этого необходимо решить систему уравнений:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial y}{\partial x_1} = 0, \quad 2b_{11} x_1 + b_{12} x_2 + b_1 = 0; \\ &\frac{\partial y}{\partial x_2} = 0, \quad b_{12} x_1 + 2b_{22} x_2 + b_2 = 0. \end{aligned} \qquad (V.92)$$

Решение системы (V.92) дает координаты центра x_{1s} и x_{2s}. Подставив их в уравнение регрессии (V.91), получим значение выходной величины в точке $S - y_s$. Перенесем начало координат в точку S (y_s, x_{1s}, x_{2s}). Старые координаты x_1, x_2, y связаны с новыми x_1', x_2', y' соотношениями:

$$x_1 = x_{1s} + x_1' ,$$

$$x_2 = x_{2s} + x_2' \,, \qquad (V.93)$$
$$y = y_s + y' .$$

В новой системе координат уравнение (V.91) примет вид

$$\hat{y} - y_s = b_{11}\left(x_1'\right)^2 + b_{22}\left(x_2'\right)^2 + b_{12}\, x_1'\, x_2' \,.$$

На втором этапе преобразования при помощи поворота осей координат освободимся от эффекта взаимодействия. Для этого необходимо повернуть оси координат на такой угол α, чтобы

$$\operatorname{ctg} 2\alpha = (b_{11} - b_{22})/b_{12}. \qquad (V.94)$$

Тогда получим в новой системе координат X_1, X_2, y уравнение регрессии в каноническом виде:

$$\hat{y} - y_s = \lambda_{11} X_1^2 + \lambda_{22} X_2^2 \,. \qquad (V.95)$$

Старые координаты x_1, x_2 связаны с новыми соотношениями

$$\begin{aligned} x_1 &= (X_1 + x_{1s})\cos\alpha - (X_2 + x_{2s})\sin\alpha, \\ x_2 &= (X_1 + x_{1s})\sin\alpha + (X_2 + x_{2s})\cos\alpha. \end{aligned} \qquad (V.96)$$

Для определения коэффициентов канонического уравнения λ_{11} и λ_{22} воспользуемся следующими двумя инвариантами уравнения (функциями коэффициентов, которые не изменяют своего значения при любом преобразовании координат):

$$I_1 = b_{11} + b_{22} = \text{const}, \qquad (V.97)$$
$$I_2 = \begin{vmatrix} b_{11} & {}^1/_2 b_{12} \\ {}^1/_2 b_{12} & b_{22} \end{vmatrix} = \text{const}.$$

Из (V.95) имеем

$$\begin{aligned} b_{11} + b_{22} &= \lambda_{11} + \lambda_{22}, \\ b_{11}\, b_{22} - {}^1/_4 b_{12}^2 &= \lambda_{11}\lambda_{22} - {}^1/_4 \lambda_{12}^2 \,. \end{aligned} \qquad (V.98)$$

Так как в данном преобразовании $\lambda_{12} = 0$, получим соотношения для определения λ_{11} и λ_{22}:

$$\begin{aligned} b_{11} + b_{22} &= \lambda_{11} + \lambda_{22}, \\ b_{11}\, b_{22} - {}^1/_4\, b_{12}^2 &= \lambda_{11}\lambda_{22}. \end{aligned} \qquad (V.99)$$

Используя теорему Виета, λ_{11} и λ_{22} можно определить как корни квадратного уравнения:

$$\lambda^2 - (b_{11} + b_{22})\lambda + (b_{11} b_{22} - {}^1/_4 b_{12}^2) = 0. \qquad (V.100)$$

В многомерных задачах каноническое преобразование осуществляется методами линейной алгебры. Составим из коэффициентов уравнения регрессии второго порядка, полученного по эксперименту,

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + \ldots + b_k x_k + b_{12} x_1 x_2 + \ldots + b_{k-1,\,k}\, x_{k-1}\, x_k + \\ + b_{11} x_1^2 + \ldots + b_{kk}\, x_k^2$$

квадратную матрицу

$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & {}^1/_2\, b_{12} & \ldots & {}^1/_2\, b_{1k} \\ {}^1/_2\, b_{21} & b_{22} & \ldots & {}^1/_2\, b_{2k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ {}^1/_2\, b_{k1} & {}^1/_2\, b_{k2} & \ldots & b_{kk} \end{bmatrix} \qquad (V.101)$$

в которой $b_{ji} = b_{ij}$.

Для определения коэффициентов $\lambda_{11}, \ldots, \lambda_{kk}$ уравнения регрессии в каноническом виде (V.88) необходимо найти корни характеристического полинова $P_k(\lambda)$ матрицы B:

$$P_k(\lambda) = |B - \lambda E|, \qquad (V.102)$$

где E — единичная матрица, или

$$P_k(\lambda) = \begin{bmatrix} b_{11} - \lambda & {}^1/_2\, b_{12} & \ldots & {}^1/_2\, b_{1k} \\ {}^1/_2\, b_{21} & b_{22} - \lambda & \ldots & {}^1/_2\, b_{2k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ {}^1/_2\, b_{k1} & {}^1/_2\, b_{k2} & \ldots & b_{kk} - \lambda \end{bmatrix} \qquad (V.103)$$

Ортогональное линейное преобразование для X координат задается системой уравнений:

$$\begin{aligned} X_1 &= m_{11}(x_1 - x_{1s}) + m_{12}(x_2 - x_{2s}) + \ldots + m_{1k}(x_k - x_{ks}), \\ X_2 &= m_{21}(x_1 - x_{1s}) + m_{22}(x_2 - x_{2s}) + \ldots + m_{2k}(x_k - x_{ks}), \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ X_k &= m_{k1}(x_1 - x_{1s}) + m_{k2}(x_2 - x_{2s}) + \ldots + m_{kk}(x_k - x_{ks}). \end{aligned} \qquad (V.104)$$

Коэффициенты m_{ik} являются решениями k систем однородных уравнений. Для λ_i система будет иметь вид

$$\begin{aligned} (b_{11} - \lambda_i)\, m_{i1} + {}^1/_2\, b_{12}\, m_{i2} + \ldots + {}^1/_2\, b_{1k}\, m_{ik} &= 0, \\ \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad & \vdots \\ {}^1/_2\, b_{k1}\, m_{i1} + {}^1/_2\, b_{k2}\, m_{i2} + \ldots + (b_{kk} - \lambda_i)\, m_{ik} &= 0. \end{aligned} \qquad (V.105)$$

Так как решения уравнений лишь пропорциональны тем величинам m_{ij}, которые необходимы для ортогонализации линейного преобразования (V.104), их пересчитывают, принимая во внимание условие ортогональности:

$$m_{i1}^2 + m_{i2}^2 + \ldots + m_{ik}^2 = 1, \quad i = 1, 2, \ldots, k. \qquad (V.106)$$

Вычислив коэффициенты уравнения регрессии в каноническом виде, тем самым определяют тип поверхности отклика. Тип поверхности отклика определяет стратегию поиска экстремума. Если поверхность отклика представляет собой эллиптический параболоид и $\lambda_{11} < 0$, $\lambda_{22} < 0$,

в центре поверхности — максимум. Параметр оптимизации при $\lambda_{11}>0$ и $\lambda_{22}>0$ максимальное значение имеет на границе области исследования.

Если поверхность отклика — гиперболический параболоид

$$\hat{y} - y_s = \lambda_{11} X_1^2 - \lambda_{22} X_2^2 \qquad \text{(V.107)}$$

и определяются условия, обеспечивающие максимальное значение параметра оптимизации, задаются значениями $\hat{y}>y_s$ при $X_2=0$ и осуществляют движение вдоль канонической оси X_1, имеющей положительный канонический коэффициент. При этом проверяют выполнение ограничения $x_j=\pm\ \alpha$, подставляя значения

$$X_1 = \pm \sqrt{\frac{\hat{y} - y_s}{\lambda_{11}}}; \quad X_2 = 0 \qquad \text{(V.108)}$$

в формулы (V.96).

В многомерных задачах поиск оптимальных условий процесса ведут на ЦВМ, используя обычно один из методов нелинейного программирования.

Пример 4. Получено уравнение регрессии степени разложения флотационного концентрата фосфорита Каратау от температуры и содержащихся в фосфорной кислоте примесей:

$$\hat{y} = 35{,}4 + 4{,}51\, x_3 - 1{,}3\, x_5 - 1{,}5\, x_1^2 + 2{,}66\, x_2^2 - 1{,}47\, x_3^2 + 1{,}61\, x_1 x_4.$$

Требуется определить условия, соответствующие максимальной степени разложения ($y_{\max}$), при ограничениях, накладываемых сферой с радиусом, равным звездному плечу (табл. 47).

Р е ш е н и е. Для определения условий максимальной степени разложения переменные, характер влияния которых ясен из уравнения регрессии, принимаем равными: $x_2=+2$; $x_5=-2$. Влияние концентрации SO_3 в фосфорной кислоте представлено в уравнении положительным линейным и отрицательным квадратичным членами. Оптимальное значение x_3, равное 1,533, определяем из условия экстремального значения y по x_3. При этих значениях факторов x_2, x_3 и x_5 уравненне регрессни примет вид

$$\hat{y} = 52{,}12 - 1{,}5\, x_1^2 + 1{,}61\, x_1 x_4.$$

Приведем это уравнение к каноническому виду. Координаты центра поверхности S равны:

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x_1} = -1{,}5 \cdot 2 x_1 + 1{,}61\, x_4 = 0,$$

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x_4} = 1{;}61\, x_1 = 0,$$

$$x_{1S} = 0; \quad x_{4S} = 0; \quad y_S = 52{,}12.$$

Таким образом, центр поверхности совпадает с центром плана. Характеристический полином

$$P_k(\lambda) = \begin{vmatrix} -1{,}5 - \lambda & 0{,}805 \\ 0{,}805 & 0 - \lambda \end{vmatrix}$$

или

$$P_k(\lambda) = \lambda^2 + 1{,}5\lambda - 0{,}64 = 0.$$

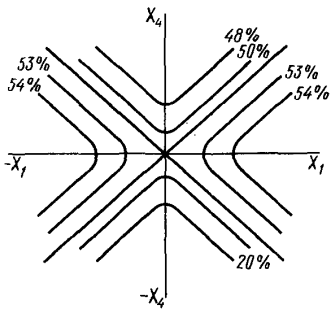


Рис. 39. Гиперболы равного выхода

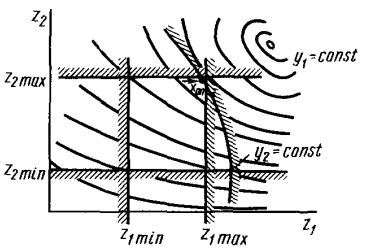


Рис. 40. Поиск экстремума при наличии ограничений

Корни полинома $\lambda_1 = +0{,}35$, $\lambda_2 = -1{,}85$. Уравнение в канонической форме

$$\hat{y} - 52{,}12 = 0{,}35\, X_1^2 - 1{,}85\, X_4^2 .$$

Поверхность отклика — гиперболический параболоид. В сечениях поверхности отклика плоскостями y = const — гиперболы (рис. 39). В центре поверхности — минимакс. Линейное преобразование задается системой:

$$X_1 = 0{,}920\, x_1 + 0{,}39\, x_4,$$

$$X_4 = -0{,}39\, x_1 + 0{,}92\, x_4 .$$

Для определения максимальной степени разложения выходим из минимакса по оси X_1 (коэффициент канонической формы положительный), приравняв X_4 нулю:

$$X_1 = \pm \sqrt{\frac{\hat{y} - 52{,}12}{0{,}35}}; \quad X_4 = 0.$$

Увеличивая $\hat{y}$, проверяем при этом выполнение условий $x_1 = x_4 \leqslant 2$. Максимальная величина степени разложения получилась равной 53,5% ($x_1 = \pm 1{,}82$; $x_4 = \pm 0{,}795$).

При увеличении $\bar{y}$ до 54% значение $x_1 > 2$. В полученных оптимальных условиях ($x_1 = +1{,}82$; $x_2 = +2$; $x_3 = +1{,}533$; $x_4 = +0{,}795$; $x_5 = -2$) и ($x_1 = -1{,}82$; $x_2 = +2$; $x_3 = +1{,}533$; $x_4 = -0{,}795$; $x_5 = -2$) были поставлены контрольные опыты. Степень разложения получилась соответственно равной 55,8 и 53,7%. Таким образом, расхождения с расчетными лежат в пределах ошибки эксперимента ($s_y = \sqrt{4{,}466} = 2{,}1$).

Если процесс описывается несколькими уравнениями регрессии, приходится решать компромиссную задачу — определять экстремальное значение одной функции отклика при ограничениях, накладываемых другими функциями отклика и границами области исследования (рис. 40). Пусть требуется найти экстремум функции $y = f(x_1, \ldots, x_k)$, которая зависит от k переменных $x_j (j = 1, \ldots, k)$, связанных в свою очередь соотношениями

$$\varphi_u(x_1, \ldots, x_k) = 0, \; u = 1, \ldots, m, \; m < k. \qquad \text{(V.109)}$$

Экстремум, который достигается функцией $f(x_1, \ldots, x_k)$ с учетом выполнения соотношений (V.109), обычно называется условным или относительным. Аналитически эта задача поиска условного экстремума решается с применением множителей Лагранжа. Формально задачу

отыскания условного экстремума функции f можно свести к определению безусловного экстремума функции Лагранжа:

$$\Phi(x,\ \lambda) = f(x) + \sum_{u=1}^{m} \lambda_u \varphi_u(x), \qquad (V.110)$$

рассматриваемой как функция $k+m$ переменных, где λ_u — неопределенные множители Лагранжа. Примером применения неопределенных множителей Лагранжа может служить решение такой компромиссной задачи. В широком диапазоне изменения параметров исследовали процесс конверсии нитрата кальция и фосфорной кислоты в твердый монокальцийфосфат и азотную кислоту в присутствии *н*-бутилового спирта. Был реализован ротатабельный план второго порядка и получены уравнения регрессии вида:

$$\hat{y}_1 = 60{,}9 + 14{,}5\,x_1 + 3{,}83\,x_3 - 4{,}09\,x_4 + 2{,}14\,x_1x_3 + 2{,}71\,x_1x_4 +$$
$$+ 2{,}21\,x_1x_5 + 1{,}28\,x_2x_3 - 2{,}48\,x_3x_4 + 0{,}68\,x_2^2 + 0{,}68\,x_4^2 + 0{,}8x_5^2\ , \qquad (V.111)$$

$$\hat{y}_2 = 1{,}682 - 0{,}85\,x_1 + 0{,}2722\,x_3 + 0{,}062\,x_4 - 0{,}041\,x_1x_4 - 0{,}034\,x_1x_5 +$$
$$+ 0{,}032\,x_3x_4 - 0{,}0235x_3^2 - 0{,}015x_4^2\ , \qquad (V.112)$$

где $\hat{y}_1$ — степень конверсии; $\hat{y}_2$ — отношение питательных веществ в удобрении в пересчете на P_2O_5 и N (азот); x_1 — концентрация исходной фосфорной кислоты; x_2 — продоложительность контакта; x_3 — норма фосфорной кислоты в растворе; x_4 — объемное отношение кислота: спирт; x_5 — температура конверсии.

С учетом ограничений на независимые переменные, накладываемых первой стадией процесса — кислотного разложения фосфатов: $x_1 = -0{,}5$; $x_5 = 0$, и необходимостью работать с высокой производительностью $x_2 = 0$ имеем:

$$\hat{y}_1 = 53{,}65 + 2{,}76\,x_3 + 5{,}45\,x_4 - 2{,}48\,x_3\,x_4 + 0{,}68\,x_4^2\ , \qquad (V.113)$$

$$\hat{y}_2 = 2{,}112 + 0{,}2722\,x_3 + 0{,}083\,x_4 + 0{,}032\,x_3\,x_4 - 0{,}0235x_3^2 - 0{,}015\,x_4^2. \qquad (V.114)$$

На соотношения питательных веществ в удобрении по агробиологическим соображениям накладываются ограничения. Необходимо было получить удобрения с одним из следующих соотношений питательных веществ:

$$P_2O_5 : N = 1 : 1;\quad P_2O_5 : N = 1{,}5 : 1;\quad P_2O_5 : N = 2 : 1.$$

Причем предпочтительнее всего получить уравновешенное удобрение с соотношением 1 : 1. С применением неопределенных множителей Лагранжа решалась задача определения значений $x_3^{опт}$ и $x_4^{опт}$, обеспечивающих максимальную степень конверсии с ограничением по соотношению питательных веществ в удобрении. Функция Лагранжа имеет вид

$$\Phi = \hat{y}_1 + \lambda\,(\hat{y}_2 - 2{,}112 - 0{,}2722\,x_3 - 0{,}083x_4 - 0{,}032\,x_3x_4 +$$
$$+ 0{,}0235\,x_3^2 + 0{,}015x_4^2). \qquad (V.115)$$

Система уравнений для определения оптимальных режимов:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_3} = 2{,}76 - 2{,}48\, x_4 + \lambda\,(-0{,}2722 - 0{,}032\, x_4 + 2 \cdot 0{,}0235\, x_3) = 0,$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_4} = -5{,}45 - 2{,}48\, x_3 + 2 \cdot 0{,}68\, x_4 + \lambda\,(-0{,}083 - 0{,}032\, x_3 + 2 \cdot 0{,}015\, x_4) = 0, \qquad \text{(V.116)}$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} = \hat{y}_2 - 2{,}112 - 0{,}2722\, x_3 - 0{,}083\, x_4 - 0{,}032\, x_3\, x_4 + 0{,}0235\, x_3^2 + 0{,}015 x_4^2 = 0.$$

Система (V.116) решалась на ЦВМ при ограничениях на x_3 и x_4, накладываемых областью исследования: $x_3 = \pm\,\alpha = \pm\,2$ и $x_4 = \pm\,\alpha = \pm\,2$; 1) $\hat{y}_2 = 1:1$; 2) $\hat{y}_2 = 1{,}5:1$; 3) $\hat{y}_2 = 2:1$. Оказалось, что внутри исследованной области можно получить только удобрения с соотношением питательных веществ 1,5 : 1 и 2 : 1. В результате расчета имеем: $\hat{y}_1^{\max} = 72{,}63\%$ и $\hat{y}_2 = 2{,}03$ при $x_3^{\text{опт}} = 0{,}7$ и $x_4^{\text{опт}} = -2{,}0$; $\hat{y}_1^{\max} = 54{,}05\%$ и $\hat{y}_2 = 1{,}46$ при $x_3^{\text{опт}} = -1{,}7$ и $x_4^{\text{опт}} = -2{,}0$.

При определении оптимальных условий процесса иногда возможна некоторая экстраполяция за границы области исследования. Во всех случаях требуется экспериментальная проверка найденных расчетом оптимальных условий процесса.

9. Функция желательности. Задачу оптимизации процессов, характеризующихся несколькими откликами, обычно сводят к задаче оптимизации по одному критерию с ограничениями в виде равенств или неравенств. В зависимости от вида поверхности отклика и характера ограничений для оптимизации предлагаегся использовать методы неопределенных множителей Лагранжа, линейного и нелинейного программирования, ридж-анализ и др. К недостаткам этих способов решения задачи оптимизации следует отнести вычислительные трудности. В частности, при описании поверхности отклика полиномами второго порядка решение задачи на условный экстремум с применением неопределенных множителей Лагранжа приводит к необходимости решать систему нелинейных уравнений. Поэтому одним из наиболее удачных способов решения задачи оптимизации процессов с большим количеством откликов является использование предложенной Харрингтоном в качестве обобщенного критерия оптимизации так называемой *обобщенной функции желательности D*. Для построения обобщенной функции желательности D предлагается преобразовать измеренные значения откликов в безразмерную шкалу желательности d. Построение шкалы желательности, которая устанавливает соотношение между значением отклика y и соответствующим ему значением d (*частной функцией желательности*), является в своей основе субъективным, отражающим отношение исследователя (потребителя) к отдельным откликам.

Для построения шкалы желательности удобно использовать метод количественных оценок с интервалом значений желательности от нуля до единицы, хотя возможны и другие варианты шкалы. Значение $d = 0$

(или $D=0$) соответствует абсолютно неприемлемому значению данного отклика; а $d=1$ ($D=1$) — самому лучшему значению отклика, причем дальнейшее улучшение его или невозможно, или не представляет интереса. Промежуточные значения желательности и соответствующие им числовые отметки приведены в табл. 48.

Таблица 48 **Базовые отметки шкалы желательности**

Количественная отметка на шкале желательности	Желательность значения отклика
0,80 ÷ 1,00	Очень хорошо
0,63 ÷ 0,80	Хорошо
0,37 ÷ 0,63	Удовлетворительно
0,20 ÷ 0,37	Плохо
0,00 ÷ 0,20	Очень плохо

Такой выбор числовых отметок объясняется удобством вычислений, поскольку

$$d = 0{,}63 \approx 1 - \frac{1}{e}, \text{ а } \quad d = 0{,}37 \approx \frac{1}{e} \ . \qquad \text{(V.117)}$$

Построенная в соответствии с табл. 48 шкала d представляет собой безразмерную шкалу, при помощи которой любой отклик может быть преобразован так, чтобы его можно было интерпретировать в терминах полезности или желательности для любого специфического применения.

Простейшим типом преобразования служит такое, в котором существует верхний и (или) нижний пределы спецификации, причем эти пределы являются единственным и не допускающим изменений критерием качества. Вне этих пределов значение $d=0{,}0$, между ними значение $d=1$. Частная функция желательности при одностороннем ограничении (рис. 41, *а*) имеет вид

$$d = \begin{cases} 0, & y < y_{min} \\ 1, & y \geqslant y_{min} \end{cases} \qquad \text{(V.118)}$$

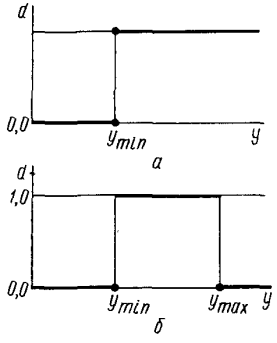


Рис. 41. Простейший вид частной функции желательности

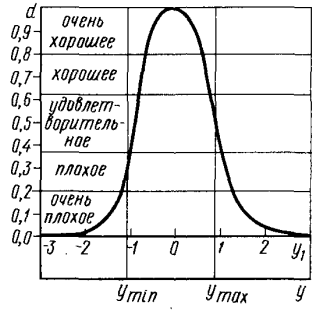


Рис. 42. Функция желательности для двустороннего ограничения

Аналогичным образом получается частная функция желательности, если спецификация задает ограничение сверху. Если для данного свойства существует двустороннее ограничение (рис. 41, *б*), то

$$d = \begin{cases} 0, & y < y_{\min} \text{ и } y > y_{\max} \\ 1, & y_{\min} \leqslant y \leqslant y_{\max} \end{cases} \qquad \text{(V.119)}$$

Всегда желательно, чтобы значение отклика находилось не только между пределами спецификации, но и на определенном расстоянии от них, чтобы противостоять присущим производственному процессу случайным колебаниям. Кроме того, довольно трудно бывает провести точную пограничную линию между приемлемой и неприемлемой продукцией. Поэтому в общем случае преобразование y в d осуществляется по более сложным законам. Для двустороннего ограничения вида

$$y_{\min} \leqslant y \leqslant y_{\max}$$

преобразование измеренного отклика y в шкалу d (рис. 42) производится при помощи выражения

$$d = \exp\left[-(|y'|)^n\right], \qquad \text{(V.120)}$$

где n — положительное число ($0 < n < \infty$), не обязательно целое;

$$y' = \frac{2y - (y_{\max} + y_{\min})}{y_{\max} - y_{\min}}; \qquad \text{(V.121)}$$

показатель степени n можно вычислить, если задать некоторому значению y значение d (предпочтительно в интервале $0{,}6 < d < 0{,}9$) по формуле

$$n = \frac{\ln \ln 1/d}{\ln |y'|}. \qquad \text{(V.122)}$$

Задавая при помощи контрольной точки крутизну кривой желательности, можно учесть особую важность отдельных свойств; для них n будет иметь бо́льшее значение, и малому изменению свойства вблизи ограничивающих пределов будет соответствовать резкое изменение желательности. Показатель степени n определяет наклон кривой, и когда n становится большим, кривая приближается к своей предельной форме (см. рис. 41, *б*): $d = 0$ вне пределов спецификации и $d = 1{,}0$ между этими пределами. Если нет спецификации, целесообразно дать статистическую оценку n по ряду значений y и соответствующих d.

Для односторонних ограничений вида $y \leqslant y_{\max}$ или $y \geqslant y_{\min}$ более удобной формой преобразования y в d служит другая экспоненциальная зависимость (рис. 43):

$$d = \exp\left[-\exp\left(-y'\right)\right]. \qquad \text{(V.123)}$$

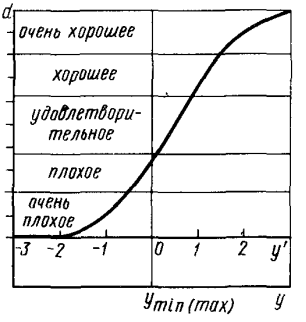


Рис. 43. Функция желательности для свойства, ограниченного с одной стороны

В выражении (V.123)

$$y' = b_0 + b_1 y. \qquad (V.124)$$

Коэффициенты b_0 и b_1 можно определить, если задать для двух значений свойства y соответствующие значения желательности d предпочтительно в интервале $0{,}2 < d < 0{,}8$.

Нелинейное преобразование y в y' применяется, если данное свойство имеет особую важность; нарушение ограничивающих условий недопустимо, и малому изменению свойства вблизи ограничивающего предела соответствует резкое изменение желательности. Односторонняя спецификация наиболее часто встречается на практике.

Имея несколько откликов, преобразованных в шкалу d, можно при помощи арифметических операций скомбинировать из этих различных d некий обобщенный показатель желательности D. При этом, если какой-либо один отклик является абсолютно неудовлетворительным, обобщенная функция желательности D должна быть равна 0 независимо от уровня остальных откликов. Математическим выражением, отвечающим этим требованиям, служит среднее геометрическое частных функций желательности, т. е.

$$D = \sqrt[k]{d_1 d_2 \ldots d_k}. \qquad (V.125)$$

Очевидно, что если какое-либо одно $d_i = 0$, то соответствующее $D = 0$. Более того, на D сильно влияют именно наименьшие значения d_i. В то же время $D = 1$ только тогда, когда все частные желательности $d_i = 1 (i = 1,2,\ldots,k)$. Важно еще то, что (V.125) позволяет применить к частным желательностям и обобщенному показателю единый способ задания базовых отметок шкалы желательности, представленный в табл. 48, так как если $d_1 = d_2 = \ldots = d_k = 0{,}37$, то и $D = 0{,}37$ и т. д. С обобщенной функцией желательности D можно проделывать все вычислительные операции, как и с любым откликом системы, можно использовать D в роли критерия оптимизации при исследовании и оптимизации процесса (см. пример 6). Следует иметь в виду, что множество возможных значений D ограничено: $D \leqslant 1$. Очень эффективным оказалось применение обобщенной функции желательности при разработке рецептур и технологии получения новых полимерных материалов.

Пример 5. Латинский куб второго порядка был применен при разработке композиции нового полимерного материала на основе полиэтилена высокого давления (см. с. 112). В качестве откликов были использованы: y_1 — модуль упругости при изгибе, мПа; y_2 — разрушающее напряжение при разрыве, мПа; y_3 — относительное удлинение при разрыве, %; D — обобщенная функция желательности. Покажем последовательность расчетов при определении D.

Р е ш е н и е. Для сравнительной оценки качества различных композиций обобщенную функцию желательности определяли по формуле

$$D = \sqrt[3]{d_1 d_2 d_3}, \qquad (V.126)$$

где d_1, d_2 и d_3 — частные функции желательности.

Для построения частных функций желательности необходимо сначала установить преобразование измеренных свойств y в безразмерную равномерную шкалу y'. Ограничения при этом носят характер $y \geqslant y_{\min}$. Разрабатываемый материал должен удовлетво-

рять заданным требованиям по трем показателям качества, которые предусматривают пригодность его к переработке и эксплуатации. Исходя из этих требований, были выбраны значения y_1, y_2 и y_3, соответствующие двум базовым отметкам на шкале желательности (см. табл. 48).

Преобразование отклика y в частную функцию желательности имеет вид (V.123). Коэффициенты b_0 и b_1 определялись по данным таблицы.

	y_1, мПа		y_2, мПа		y_3, %	
Значение свойств	430	320	110	60	200	100
Числовые отметки по шкале желательности d	0,63	0,2	0,63	0,2	0,63	0,2

Подставим значения d в уравнение (V.123):

$$0{,}63 = \exp[-\exp(-y')] \text{ и } 0{,}2 = \exp[-\exp(-y')], \qquad \text{(V.127)}$$

$$1/0{,}63 = 1{,}587 = \exp[\exp(-y')] \quad \text{и} \quad 1/0{,}2 = 5 = \exp[\exp(-y')].$$

Дважды логарифмируя выражения (V.127), получим

$$-y' = \ln(\ln 1{,}587) \text{ и } -y' = \ln(\ln 5),$$

или

$$-y' = -0{,}755 \quad \text{и} \quad -y' = 0{,}326. \qquad \text{(V.128)}$$

Тогда

$$b_0 + 430\,b_1 = 0{,}755,$$

$$b_0 + 320\,b_1 = -0{,}326. \qquad \text{(V.129)}$$

Решение системы (V.129) дает $b_1 = 0{,}0098$, $b_0 = -3{,}445$.

Таким образом, частная функция желательности имеет вид

$$d_1 = \exp[-\exp(-3{,}445 + 0{,}0098\,y_1)]. \qquad \text{(V.130)}$$

Аналогично получены частные функции желательности d_2 и d_3:

$$d_2 = \exp[-\exp(-1{,}45 + 0{,}02\,y_2)],$$

$$d_3 = \exp[-\exp(-1{,}25 + 0{,}01\,y_3)], \qquad \text{(V.131)}$$

Для всех композиций (таблица) частные функции желательности можно определять по формулам (V.130), (V.131) или по рис. 44.

Номер композиции	d_1	d_2	d_3	D	Номер композиции	d_1	d_2	d_3	D
1	0,410	0,67	0,97	0,645	15	0,260	0,49	0,95	0,491
2	0,420	0,67	0,98	0,647	16	0,720	0,71	0,91	0,773
3	0,423	0,55	0,96	0,610	17	0,850	0,62	0,29	0,535
4	0,730	0,75	0,96	0,810	18	0,630	0,78	0,93	0,768
5	0,419	0,68	0,97	0,650	19	0,930	0,57	0,17	0,210
6	0,270	0,63	0,97	0,550	20	0,930	0,72	0,07	0,350
7	0,640	0,53	0,97	0,686	21	0,890	0,52	0,64	0,668
8	0,370	0,71	0,98	0,638	22	0,917	0,64	0,06	0,430
9	0,371	0,71	0,97	0,638	23	0,790	0,45	0,08	0,304
10	0,740	0,63	0,92	0,759	24	0,760	0,64	0,30	0,530
11	0,720	0,53	0,73	0,650	25	0,930	0,53	0,08	0,340
12	0,760	0,31	0,24	0,381	26	0,920	0,57	0,17	0,445
13	0,780	0,55	0,93	0,732	27	0,870	0,68	0,71	0,749
14	0,860	0,58	0,17	0,440					

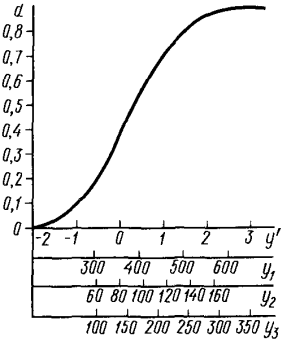


Рис. 44. Функция желательности

Обобщенная функция желательности (таблица) определена по формуле (V.126) и имеет вид

$$D = \exp\left\{-\frac{1}{3}\left[\exp(-3{,}445 + 0{,}0098\,y_1) + \exp(-1{,}45 + 0{,}02\,y_2) + \exp(-1{,}25 + 0{,}01\,y_3)\right]\right\}. \quad (V.132)$$

Наибольшее значение обобщенной функции желательности получено в четвертом опыте ($D = 0{,}810$). Хорошие композиции получены также в опытах 10, 13, 16, 18 и 27. Оптимальный состав композиции по обобщенной функции желательности выбран после проведения факторного и дисперсионного анализа.

Пример 6. Обобщенная функция желательности была использована в задаче моделирования и оптимизации процесса кристаллизации полугидрата сульфата кальция в условиях получения экстракционной фосфорной кислоты.

Полугидратный процесс позволяет получить без дополнительной упарки кислоту концентрацией 40—50% P_2O_5 и значительно увеличить производительность действующих цехов, работающих в дигидратном режиме без введения дополнительных производственных мощностей. Разложение апатитового концентрата идет по реакции

$$Ca_{10}F_2(PO_4)_6 + 10H_2SO_4 + 2{,}5H_2O \rightarrow 6H_3PO_4 + 10CaSO_4 \cdot 0{,}5H_2O + 2HF$$

Лимитирующей стадией производства фосфорной кислоты полугидратным способом является процесс кристаллизации полугидрата сульфата кальция. Необходимо получить крупные, хорошо фильтрующиеся, стабильные в течение длительного времени кристаллы полугидрата. Проведение процесса кристаллизации в неоптимальных условиях ведет к снижению производительности фильтра и к увеличению потерь P_2O_5. Оптимальные условия процесса кристаллизации различны для разных видов фосфатного сырья.

Р е ш е н и е. В лабораторных условиях исследовалось влияние на процесс кристаллизации полугидрата сульфата кальция температуры и состава раствора (концентрации фосфорной кислоты и содержания в ней примесей Fe_2O_3, Al_2O_3, SiF_6^{2-}, SO_4^{2-}). В качестве физической модели, имитирующей кристаллизацию полугидрата сульфата кальция в процессе получения экстракционной фосфорной кислоты непрерывным способом, выбран процесс дегидратации реактивного гипса в растворах фосфорной кислоты различной концентрации, содержащих примеси серной и кремнефтористоводородной кислот, а также фосфаты алюминия и железа. В процессе фазового превращения дигидрат вначале растворялся, а затем в осадок с различной скоростью выделялись кристаллы полугидрата, которые при своем формировании захватывали фосфат-ионы. Размер кристаллов и фильтруемость пульпы также связаны с условиями кристаллизации. Гипс растворяется с достаточно большой скоростью, и лимитирующей стадией в процессе является стадия образования и роста кристаллов полугидрата сульфата кальция.

Показателями процесса служили следующие параметры: y_1 — скорость кристаллизации, характеризующаяся степенью перехода $CaSO_4 \cdot 2H_2O$ в $CaSO_4 \cdot 0{,}5H_2O$, %; y_2 — время фильтрования, с; y_3 — захват фосфат-ионов, % P_2O_5; y_4 — размер кристаллов полугидрата, мкм. Факторы и диапазоны их изменения приведены в таблице:

	SO_4^{2-}, % z_1	SiF_6^{2-}, % z_2	Al_2O_3, % z_3	P_2O_5, % z_4	T, °C z_5	Fe_2O_3, % z_6
Центр плана z_j^0	2,50	0,75	1,35	46,5	95	1
Интервал варьирования Δz_j	1,32	0,38	0,34	3,96	5	0,52
$x_j = +1$	3,82	1,15	1,70	51,46	100	1,53
$x_j = -1$	1,18	0,35	1,00	43,54	90	0,48
$x_j = +1{,}895$	5,00	1,50	2,00	55,0	105	2
$x_j = -1{,}895$	0	0	0,70	40,00	85	0

В качестве плана эксперимента выбран ортогональный план второго порядка. Параметры плана: $k = 6$; $n_0 = 4$; $N = 2^{6-1} + 2 \cdot 6 + 4 = 48$. Величина звездного плеча α определена по уравнению (V.54): $\alpha^4 + 2^{5-1}\alpha^2 - 2^{6-2}(6 + 0{,}5 \cdot 4) = 0$. Отсюда $\alpha^2 = 3{,}6$; $\alpha = 1{,}895$.

Безразмерные переменные x_j связаны с размерными z_j линейным преобразованием (V.3).

Опыты проводили в термостатированном лабораторном реакторе ($V = 250$ мл) с обратным холодильником и лопастной мешалкой. К раствору фосфорной кислоты с определенным содержанием примесей (H_2SiF_6, H_2SO_4, Al_2O_3, Fe_2O_3), нагретому до температуры опыта, при перемешивании добавляли $CaSO_4 \cdot 2H_2O$.

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
2	−1	−1	+1	+1	+1	+1
3	−1	+1	+1	+1	+1	−1
4	+1	−1	+1	+1	+1	−1
5	+1	+1	−1	+1	+1	−1
6	−1	−1	−1	+1	+1	−1
7	−1	+1	−1	+1	+1	+1
8	+1	−1	−1	+1	+1	+1
9	+1	+1	+1	−1	+1	−1
10	−1	−1	+1	−1	+1	−1
11	−1	+1	+1	−1	+1	+1
12	+1	−1	+1	−1	+1	+1
13	+1	+1	−1	−1	+1	+1
14	−1	−1	−1	−1	+1	+1
15	−1	+1	−1	−1	+1	−1
16	+1	−1	−1	−1	+1	−1
17	+1	+1	+1	+1	−1	−1
18	−1	−1	+1	+1	−1	−1
19	−1	+1	+1	+1	−1	+1
20	+1	−1	+1	+1	−1	+1
21	+1	+1	−1	+1	−1	+1
22	−1	−1	−1	+1	−1	+1
23	−1	+1	−1	+1	−1	−1
24	+1	−1	−1	+1	−1	−1
25	+1	+1	+1	−1	−1	+1
26	−1	−1	+1	−1	−1	+1
27	−1	+1	+1	−1	−1	−1
28	+1	−1	+1	−1	−1	−1
29	+1	+1	−1	−1	−1	−1
30	−1	−1	−1	−1	−1	−1
31	−1	+1	−1	−1	−1	+1
32	+1	−1	−1	−1	−1	+1
33	+1,895	0	0	0	0	0
34	−1,895	0	0	0	0	0
35	0	+1,895	0	0	0	0
36	0	−1,895	0	0	0	0
37	0	0	+1,895	0	0	0
38	0	0	−1,895	0	0	0
39	0	0	0	+1,895	0	0
40	0	0	0	−1,895	0	0
41	0	0	0	0	+1,895	0
42	0	0	0	0	−1,895	0
43	0	0	0	0	0	+1,895
44	0	0	0	0	0	−1,895
45	0	0	0	0	0	0
46	0	0	0	0	0	0
47	0	0	0	0	0	0
48	0	0	0	0	0	0

Результаты эксперимента приведены в таблице.

Результаты эксперимента

Номер опыта	y_1	y_2	y_3	y_4	Номер опыта	y_1	y_2	y_3	y_4
1	99,1	200	4,08	8,0	25	85,9	61	1,64	12,7
2	95,8	137	2,45	11,4	26	85,0	30	2,30	13,5
3	90,1	120	1,69	10,0	27	51,0	45	1,20	16,2
4	93,0	103	0,90	11,5	28	89,0	31	1,79	16,4
5	98,6	65	1,39	11,1	29	86,9	16	0,25	14,0
6	89,2	44	1,97	13,8	30	86,6	25	1,68	15,2
7	84,3	115	2,83	6,1	31	25,3	27	0,40	14,1
8	96,6	120	2,06	12,8	32	90,4	30	1,00	14,1
9	86,1	56	3,04	11,2	33	96,7	41	2,80	14,6
10	85,2	31	0,68	14,2	34	59,4	40	3,30	16,3
11	57,3	65	0,04	9,8	35	80,5	59	2,0	13,6
12	95,1	43	0,31	9,1	36	99,3	27	2,07	13,0
13	89,7	28	2,50	12,4	37	94,0	86	2,50	15,4
14	88,7	21	2,10	14,2	38	88,9	14	1,20	18,6
15	73,6	31	0,40	6,2	39	95,9	190	3,10	13,5
16	93,2	24	1,03	14,6	40	72,0	17	1,80	22,4
17	92,7	176	3,88	12,1	41	99,3	30	1,60	14,2
18	88,3	109	5,75	9,3	42	88,6	60	2,12	14,2
19	80,1	245	4,72	9,5	43	86,3	80	1,65	15,5
20	94,5	200	4,10	12,4	44	87,0	22	0,60	16,4
21	89,9	157	2,58	8,9	45	93,0	41	2,35	16,8
22	80,3	150	5,00	12,1	46	96,3	60	1,72	13,2
23	84,5	67	1,80	13,3	47	96,8	61	2,30	15,3
24	95,4	64	1,10	13,2	48	86,5	41	1,69	15,0

На основании обработки экспериментальных данных, отсева незначимых коэффициентов по критерию Стьюдента получены следующие уравнения регрессии:

$$\hat{y}_1 = 89,4 + 9,3\,x_1 - 6,5\,x_2 + 7,0\,x_4 + 4,5\,x_5 - 5,1\,x_1^2 + 5,6\,x_1 x_2 - \\ - 5,4\,x_1 x_4 + 5,9\,x_2 x_4 + 3,9\,x_3 x_6;$$

$$\hat{y}_2 = 56,5 + 9,5\,x_2 + 20,5\,x_3 + 46,8\,x_4 - 7,4\,x_5 + 18,9\,x_6 + 8,0\,x_2 x_3 + \\ + 10,9\,x_3 x_4 - 9,3\,x_4 x_5 + 16,6\,x_4 x_6 + 20,2\,x_4^2;$$

$$\hat{y}_3 = 1,78 + 0,32\,x_3 + 0,82\,x_4 - 0,30\,x_5 + 0,30\,x_6 + 0,50\,x_1 x_2 + 0,16\,x_1 x_3 - \\ - 0,28\,x_1 x_4 + 0,30\,x_1 x_5 + 0,18\,x_2 x_3 + 0,32\,x_2 x_5 + 0,23\,x_3 x_4 - 0,39\,x_3 x_5 - \\ - 0,25\,x_3 x_6 - 0,36\,x_4 x_5 + 0,29\,x_4 x_6 + 0,33\,x_1^2 + 0,22\,x_4^2 - 0,22\,x_6^2;$$

$$\hat{y}_4 = 16,5 - 0,8\,x_2 - 0,8\,x_5 - 1,3\,x_4 - 0,6\,x_6 - 0,7\,x_2 x_5 - \\ - 0,8\,x_1^2 - 1,4\,x_2^2 - 1,1\,x_5^2 - 0,7\,x_6^2.$$

Проверка по критерию Фишера показала, что полученные уравнения адекватно описывают эксперимент. Уравнения для $y_1 - y_4$ позволяют рассчитать значения выбранных показателей процесса при любом сочетании изученных факторов в исследованном диапазоне.

Результаты таких расчетов приведены на рис. 45—51. На рис. 45 показана зависимость скорости кристаллизации полугидрата (y_1) от концентрации иона SO_4^{2-} в различных условиях ведения процесса. Зависимость y_1 от концентрации SO_4^{2-} имеет экстремальный

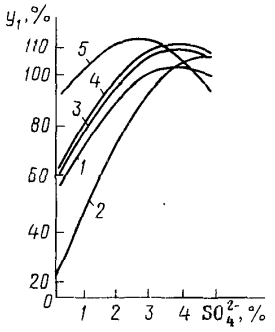


Рис. 45. Зависимость скорости кристаллизации полугидрата сульфата кальция от концентрации SO_4^{2-} в растворе при различных условиях:

1 — значения всех переменных соответствуют центру плана: P_2O_5 — 47,5%; SiF_6^{2-} — 0,75%; Al_2O_3 — 1,35%; Fe_2O_3 — 1%, температура 95°; *2* — 1,5% SiF^{2-}; *3* — 105°C; *4* — нет Fe_2O_3 и 0,7% Al_2O_3; *5* — 55% P_2O_5; значения остальных переменных для кривых *2, 3, 4, 5* соответствуют центру плана

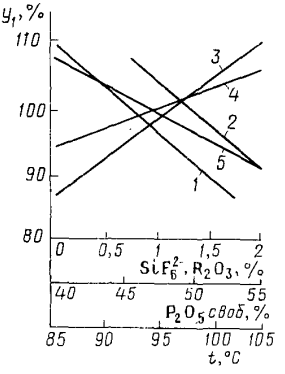


Рис. 46. Индивидуальное влияние факторов на скорость кристаллизации полугидрата:

1 — SiF_6^{2-}; *2* — Al_2O_3 (0% Fe_2O_3); *3* — P_2O_5; *4* — температура; *5* — Fe_2O_3 (0,7% Al_2O_3). Значения остальных параметров соответствуют центру плана

характер. При этом положение и величина экстремума (максимума) зависит от прочих условий проведения процесса кристаллизации полугидрата (температуры, концентрации P_2O_5, содержания примесей SiF_6^{2-}, Al_2O_3 и Fe_2O_3). Отсутствие в уравнении эффектов взаимодействия между содержанием SO_4^{2-} и температурой, а также содержанием SO_4^{2-} и попутных оксидов приводит к тому, что увеличение температуры и содержания R_2O_3 изменяет только абсолютную величину максимума. Наличие эффекта взаимодействия между концентрацией P_2O_5 и SO_4^{2-} обусловливает не только изменение величины экстремума, но и сдвиг максимума в область более низких значений SO_4^{2-} (кривая 5).

На рис. 46 приведены кривые, характеризующие индивидуальное влияние факторов ($z_2 - z_6$) на скорость кристаллизации полугидрата при значениях остальных независимых переменных, соответствующих центру плана. Из рисунка следует, что с увеличением концентрации фосфорной кислоты скорость процесса кристаллизации полугидрата увеличивается, а с увеличением концентрации кремнефтористоводородной кислоты — уменьшается. При увеличении концентрации одного из полуторных оксидов в отсутствие другого в растворе скорость кристаллизации полугидрата уменьшается. Однако из уравнения для y_1 следует, что при одновременном присутствии в растворе обоих оксидов отрицательное влияние каждого из них уменьшается и при определенной концентрации одного из них сходит на нет. Повышение температуры приводит к увеличению скорости процесса.

На рис. 47 представлены графики зависимости продолжительности фильтрации образовавшейся пульпы (y_2, с) от условий процесса кристаллизации. Из рис. 47 следует, что наибольшее отрицательное влияние на процесс фильтрации оказывает повышение концентрации фосфорной кислоты (кривая 5), так как при этом увеличивается не только вязкость раствора, но уменьшается и размер кристаллов полугидрата, кристаллизующихся из этого раствора. Возрастание содержания Al_2O_3, Fe_2O_3 и SiF_6^{2-} повышает вяз-

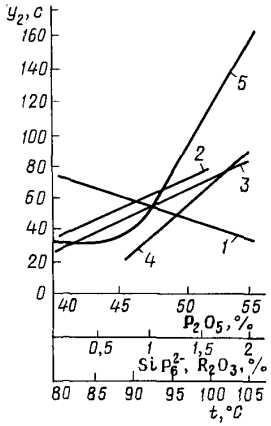


Рис. 47. Влияние температуры и состава раствора на продолжительность фильтрации пульпы:
1 — температура; *2* — SiF_6^{2-}; *3* — Fe_2O_3; *4* — Al_2O_3; *5* — P_2O_5 своб. Значения остальных параметров соответствуют центру плана

кость раствора, что увеличивает продолжительность фильтрации (кривые *4, 3, 2*). Напротив, повышение температуры (кривая *1*) уменьшает вязкость и, соответственно, сокращает время фильтрации.

На рис. 48 изображены графики взаимодействия между концентрациями Al_2O_3 и SiF_6^{2-} в растворе: при концентрациях Al_2O_3 до 1% с увеличением содержания иона SiF_6^{2-} скорость фильтрации возрастает; при концентрациях Al_2O_3 1—2% с увеличением содержания SiF_6^{2-} скорость фильтрации снижается. Таким образом, положительное влияние совместного присутствия в растворе ионов Al^{3+} и SiF_6^{2-} в условиях производства фосфорной кислоты полугидратным способом ограничено небольшим интервалом концентраций.

На рис. 49 представлены графики зависимости захвата фосфат-ионов осадком полугидрата (y_3, %) от состава раствора и температуры. Зависимость содержания P_2O_5 в полугидрате от ионов SO_4^{2-} в присутствии примесей R_2O_3 и SiF_6^{2-} имеет экстремальный характер. Положение и величина экстремума (минимума) определяется температурой и концентрацией примесей (рис. 49). На рис. 50 показано индивидуальное влияние примесей SO_4^{2-} (кривая *1*), SIF_6^{2-} (кривая *2*) и Al_2O_3 (кривая *3*) на величину захвата P_2O_5 полугидратом, кристаллизующимся из раствора фосфорной кислоты, содержащей 40% P_2O_5 и 0,7% Al_2O_3 при температуре 90°С. В отсутствие примесей Fe_2O_3, SiF_6^{2-} и малом содержании Al_2O_3 (0,7%) повышение концентрации SO_4^{2-} в растворе приводит к плавному снижению потерь P_2O_5 (кривая *1*). В указанных условиях увеличение содержания SiF_6^{2-} в изученных пределах резко снижает потери P_2O_5 (кривая *2*), что, по всей вероятности, связано с образованием нерастворимого в концентрированных фосфорнокислотных растворах кремнефторида кальция и появлением в жидкой фазе соответствующего коли-

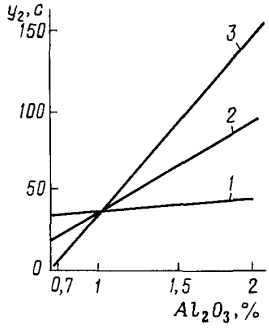


Рис. 48. Влияние содержания Al_2O_3 и SiF_6^{2-} на продолжительность фильтрации пульпы:
1 — 0% SiF_6^{2-}; *2* — 0,75% SiF_6^{2-}; *3* — 1,5% SiF_6^{2-}

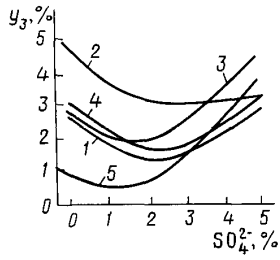


Рис. 49. Влияние температуры и состава раствора на величину захвата P_2O_5:
1 — центр плана; *2* — 55% P_2O_5; *3* — 2% Al_2O_3; *4* — 1,5% Al_2O_3; *5* — 105°С. Значения остальных факторов соответствуют центру плана

чества ионов SO_4^{2-}. Присутствие примесей в растворе влияет на диссоциацию фосфорной кислоты. В этом растворе фосфат-ионы, по-видимому, находятся в виде комплексных соединений с примесями. Степень диссоциации таких комплексных соединений зависит

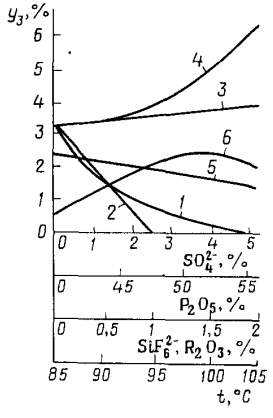


Рис. 50. Индивидуальное влияние факторов на величину захвата P_2O_5:

1 – SO_4^{2-}; *2* – SiF_6^{2-}; *3* – Al_2O_3; *4* – P_2O_5 своб; значения постоянных параметров соответствуют минимальным величинам (40% P_2O_5 своб; 0,7% Al_2O_3; нет SO_4^{2-}, SiF_6^{2-}, Al_2O_3) при 90°С; *5* – температура; *6* – Al_2O_3; значения остальных факторов при построении кривых *5*, *6* соответствуют центру плана

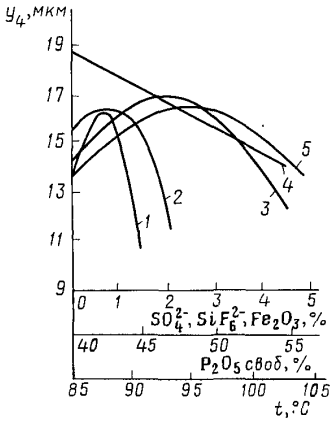


Рис. 51. Индивидуальное влияние факторов на размер кристаллов полугидрата:

1 – SiF_6^{2-}; *2* – Fe_2O_3; *3* – температура; *4* – P_2O_5 своб; *5* – SO_4^{2-}; значения остальных параметров соответствуют центру плана

не только от температуры, но и от соотношения компонентов в растворе. Такое предположение позволяет объяснить наличие в уравнении для y_3 эффектов взаимодействия между температурой и содержанием SO_4^{2-}, SiF_6^{2-}, Al_2O_3, P_2O_5 и между содержанием компонентов в растворе SO_4^{2-} – Al_2O_3; SO_4^{2-} – P_2O_5; SiF_6^{2-} – Al_2O_3; Al_2O_3 – P_2O_5; Al_2O_3 – Fe_2O_3; P_2O_5 – Fe_2O_3.

На рис. 51 представлены графики зависимости размера кристаллов от состава и температуры. В исследованном диапазоне изменения факторов образуются игольчатые кристаллы полугидрата, поэтому длина кристаллов характеризует их размер. Среднее значение длины кристаллов (y_6, мкм) определялось для каждого опыта усреднением длин 200–300 кристаллов. Из рис. 51 следует, что в растворе, состав которого соответствует центру плана, при повышении концентрации фосфорной кислоты размер кристаллов уменьшается (кривая *4*); по всей вероятности, это связано с увеличением скорости кристаллизации полугидрата (см. рис. 46, кривая *3*). Зависимость размера кристаллов от концентрации SO_4^{2-} носит экстремальный характер (кривая *5*). В интервале от 0 до ~0,6% SiF_6^{2-} повышение концентрации кремнефтористоводородной кислоты приводит к увеличению растворимости $CaSO_4 \cdot 0{,}5H_2O$, уменьшению скорости кристаллизации полугидрата (см. рис. 46, кривая *1*) и увеличению размера кристаллов. При дальнейшем повышении концентрации SiF_6^{2-} возможна кристаллизация мелких кристаллов кремнефторида кальция на поверхности кристаллов полугидрата и торможение их роста. Аналогичным образом повышение концентрации Fe_2O_3 в растворе приводит к уменьшению скорости кристаллизации полугидрата (см. рис. 46, кривая *5*), в результате этого размер кристаллов полугидрата несколько увеличивается (кривая *2*). При дальнейшем увеличении концентрации Fe_2O_3 часть его выпадает в осадок, что приводит к торможению процесса диффузии ионов Ca^{2+} и SO_4^{2-} к поверхности растущих кристаллов полугидрата. Зависимость размера кристаллов от температуры носит экстремальный характер: повышение температуры приводит к росту скорости диффузии, что облегчает рост кристаллов, однако увеличение скорости кристаллизации полугидрата (см. рис. 46, кривая *4*) влечет за собой осаждение мелких кристаллов (кривая *5*).

Полученные уравнения регрессии для $y_1 - y_4$ были использованы для решения задачи оптимизации процесса кристаллизации полугидрата сульфата кальция. Анализ параметрической чувствительности процесса показал (рис. 45–51), что характер влияния регулируемых факторов (концентрации SO_4^{2-}, P_2O_5 и температуры) существенно различен. Как уже отмечалось (с. 205), одним из наиболее удачных способов решения задачи оптимизации процессов с большим количеством откликов, лишенным вычислительных трудиостей, является использование предложенной Харрингтоном так называемой обобщенной функции желательности D в качестве обобщенного критерия оптимизации. Для построения обобщенной функции желательности D необходимо преобразовать измеренные значения откликов в безразмерную шкалу желательности d. Построение шкалы желательности устанавливает соотношение между значением отклика y и соответствующим ему значением d (частной функцией желательности).

В нашем случае имеют место односторонние ограничения на выходные параметры вида $y \leqslant y_{max}$ или $y \geqslant y_{min}$. Удобной формой преобразования y в d служит экспоненциальная зависимость (V.123): коэффициенты b_0 и b_1 можно определить, если задать для двух значений свойства y соответствующие значения желательности d предпочтительно в интервале $0{,}2 < d < 0{,}8$. Для определения b_0 и b_1 был использован следующий прием: худшему значению отклика, полученному по матрице планирования (см. табл. на с. 212), присваивается значение желательности, равное 0,2, а лучшему значению свойства, определенному по соответствующему уравнению регрессии методом нелинейного программирования в области исследования, присваивается значение желательности, равное 0,8. Согласно (V.123) имеем:

$$0{,}8 = \exp[-\exp(-y')], \text{ отсюда } y' = 1{,}51;$$

$$0{,}2 = \exp[-\exp(-y')], \text{ отсюда } y' = -0{,}46.$$

Согласно (V.124) система уравнений для определения b_0 и b_1 для скорости кристаллизации (y_1) имеет вид

$$1{,}51 = b_0 + 99{,}8\,b_1, \quad -0{,}46 = b_0 + 25{,}3\,b_1,$$

где 99,8 – лучшее значение отклика (%), полученное в результате решения задачи оптимизации для y_1; 25,3 – худшее значение (%), полученное в 31-м опыте. Отсюда $b_0 = -1{,}08$; $b_1 = 0{,}026$.

Аналогичным образом для времени фильтрования, y_2:

$$1{,}51 = b_0 + 5{,}3\,b_1, \quad -0{,}46 = b_0 + 245\,b_1,$$

где 5,3 – лучшее значение времени фильтрования (с); 245 – худшее значение времени фильтрования (с), полученное в 19-м опыте. Отсюда $b_0 = 1{,}553$; $b_1 = -0{,}008$.

Для y_3 – захвата фосфат-ионов:

$$1{,}51 = b_0 + 0{,}027\,b_1, \quad -0{,}46 = b_0 + 5{,}75\,b_1,$$

где 0,027 – лучшее значение для y_3 (%); 5,75 – худшее значение для y_3 (%). Отсюда $b_0 = 1{,}519$; $b_1 = -0{,}34$. Для размера кристаллов y_4, мкм:

$$1{,}51 = b_0 + 19{,}2\,b_1, \quad -0{,}46 = b_0 + 6{,}1\,b_1,$$

где 19,2 – лучшее значение y_4 (мкм); 6,1 – худшее значение y_4 (мкм), полученное в 7-м опыте. Отсюда $b_0 = -1{,}37$; $b_1 = 0{,}15$.

Частные функции имеют вид

$$d_1 = \exp[-\exp(-1{,}08 + 0{,}026\,y_1)],$$

$$d_2 = \exp[-\exp(1{,}553 - 0{,}008\,y_2)],$$

$$d_3 = \exp[-\exp(1{,}519 - 0{,}34\,y_3)],$$

$$d_4 = \exp[-\exp(1{,}37 + 0{,}15\,y_4)].$$

Значения частных функций желательности для всех точек плана, определенные по этим формулам, приведены в таблице.

Номер опыта	d_1	d_2	d_3	d_4	D	Номер опыта	d_1	d_2	d_3	d_4	D
1	0,800	0,330	0,410	0,300	0,43	25	0,730	0,705	0,690	0,540	0,66
2	0,780	0,440	0,600	0,490	0,57	26	0,721	0,765	0,615	0,590	0,67
3	0,745	0,475	0,690	0,420	0,57	27	0,450	0,740	0,740	0,700	0,65
4	0,760	0,510	0,730	0,490	0,61	28	0,750	0,760	0,665	0,710	0,72
5	0,790	0,690	0,710	0,470	0,65	29	0,731	0,790	0,780	0,610	0,72
6	0,750	0,740	0,660	0,602	0,68	30	0,730	0,775	0,690	0,670	0,72
7	0,720	0,580	0,560	0,205	0,46	31	0,200	0,770	0,775	0,610	0,52
8	0,780	0,475	0,650	0,541	0,60	32	0,750	0,765	0,730	0,610	0,71
9	0,730	0,715	0,535	0,473	0,60	33	0,780	0,750	0,575	0,640	0,68
10	0,721	0,760	0,765	0,620	0,71	34	0,450	0,749	0,490	0,710	0,59
11	0,510	0,690	0,795	0,410	0,58	35	0,690	0,710	0,655	0,600	0,66
12	0,780	0,745	0,775	0,360	0,64	36	0,800	0,700	0,680	0,560	0,69
13	0,750	0,770	0,610	0,532	0,66	37	0,770	0,600	0,610	0,671	0,66
14	0,740	0,780	0,650	0,620	0,70	38	0,750	0,710	0,740	0,781	0,74
15	0,650	0,760	0,775	0,200	0,53	39	0,780	0,350	0,520	0,590	0,54
16	0,760	0,775	0,730	0,640	0,73	40	0,640	0,790	0,695	0,870	0,74
17	0,759	0,375	0,430	0,530	0,50	41	0,800	0,765	0,695	0,610	0,71
18	0,740	0,495	0,200	0,300	0,41	42	0,740	0,710	0,640	0,610	0,67
19	0,690	0,200	0,330	0,380	0,37	43	0,730	0,621	0,690	0,680	0,68
20	0,771	0,330	0,410	0,530	0,49	44	0,740	0,780	0,765	0,710	0,75
21	0,750	0,410	0,590	0,350	0,50	45	0,770	0,750	0,620	0,730	0,72
22	0,690	0,425	0,285	0,511	0,46	46	0,780	0,710	0,680	0,550	0,67
23	0,720	0,685	0,670	0,550	0,65	47	0,781	0,705	0,620	0,670	0,69
24	0,780	0,690	0,750	0,549	0,69	48	0,730	0,750	0,690	0,660	0,71

Обобщенная функция желательности D определена по формуле

$$D = \sqrt[4]{d_1\, d_2\, d_3\, d_4}$$

и приведена в последнем столбце таблицы. По этим данным находим уравнение регрессии обобщенной функции желательности D от изученных факторов:

$$D = 0,62 + 0,022\, x_1 - 0,027\, x_2 - 0,024\, x_3 - 0,057\, x_4 - 0,032\, x_6 - 0,013\, x_1 x_3 -$$
$$- 0,014\, x_1 x_5 + 0,045\, x_1 x_6 - 0,015\, x_2 x_5 - 0,022\, x_3 x_4 + 0,012\, x_3 x_6 +$$
$$+ 0,023\, x_4 x_5 + 0,041\, x_4 x_6 - 0,029 x_1^2 - 0,016 x_2^2 - 0,027 x_4^2 - 0,012 x_5^2 .$$

Полученное уравнение регрессии для D было использовано для определения оптимальных условий процесса кристаллизации, соответствующих максимальному значению D. Для выяснения предельных возможностей процесса на первом этапе задача решалась во всем диапазоне изменения факторов. В результате получено $D_{max} = 0,86$ при

$$x_1 = -0,69, \quad z_1 = 1,59\%,$$
$$x_2 = -0,705, \quad z_2 = 0,48\%,$$
$$x_3 = -1,895, \quad z_3 = 0,7\%,$$
$$x_4 = -1,11, \quad z_4 = 43\%,$$
$$x_5 = -0,127, \quad z_5 = 95°C,$$
$$x_6 = -1,895, \quad z_6 = 0,0\%.$$

В оптимальных условиях обеспечиваются следующие значения показателей процесса: $y_1 = 92\%$, или 990 кг/(м³ · ч); $y_2 = 13$ с; $y_3 = 0,01\%$; $y_4 = 17$ мкм. При экспериментальной проверке в оптимальных условиях получены следующие результаты: $y_1 = 970$ кг/(м³ · ч);

$y_2 = 14$ с; y_3 — следы P_2O_5; $y_4 = 15{,}6$ мкм. Разница между расчетом и экспериментом укладывается в ошибку воспроизводимости.

Таким образом, в идеальных условиях процесс кристаллизации полугидрата можно осуществить без захвата фосфат-ионов при большой скорости кристаллизации с получением крупных кристаллов.

На втором этапе задача определения D_{max} была решена для апатитов различных месторождений, характеристика которых приведена в таблице.

Месторождение	В фосфате							В жидкой фазе после разложения			
	P_2O_5	CaO	Fe_2O_3	Al_2O_3	F	Неорганический остаток	CO_2	Fe_2O_3	Al_2O_3	SiF_6^{2-}	F
Кольское	39,4	52,1	0,25	0,70	2,9	—	—	0,20	0,74	1,50	1,2
Ошурковское	36,0	49,5	1,3	1,2	2,4	3,8	2,2	0,90	0,90	1,38	1,1
Белозиминское	36,4	48,0	2,0	1,0	2,8	4,5	0,8	2,00	0,70	1,50	1,2
Вьетнамское	34,9	44,8	1,9	1,2	2,7	4,3	0,31	0,95	1,42	1,50	1,2

Результаты решения задачи оптимизации для различных видов апатитового сырья представлены в таблице.

Оптимальные условия процесса кристаллизации

Месторождение	Оптимальные значения параметров						Значение D_{max}
	x_1	x_4	x_5	z_1, %	z_4, %	z_5, °C	
Кольское	−0,625	−1,895	1,01	1,678	40,0	100,05	0,706
Ошурковское	0,815	−0,119	−1,365	3,58	47,03	88,18	0,611
Белозиминское	1,895	1,895	−1,895	5,0	55,00	85,53	0,766
Вьетнамское	−0,200	−1,05	−0,373	2,975	43,34	93,27	0,553

Полученные в результате расчета оптимальные условия для апатита Кольского месторождения были проверены экспериментально. В результате расчета в оптимальных условиях $D_{max} = 0{,}706$, что соответствует $y_1 = 74{,}2\%$, или 800 кг/(м³ · ч); $y_2 = 15{,}6$ с; $y_3 = 0{,}04\%$; $y_4 = 13{,}5$ мкм. Разница между расчетными и экспериментальными показателями процесса укладывается в ошибку воспроизводимости.

Значение обобщенного показателя D_{max}, полученного в результате решения задачи оптимизации, может служить для предварительной оценки качества любого фосфатного сырья при получении из него экстракционной фосфорной кислоты полугидратным методом, если состав экстрагируемой из него кислоты по содержанию оксида фосфора (V) и примесей лежит в изученном нами интервале изменения этих факторов.

10. Сложные планы. Факторный эксперимент 2^{2k}, совмещенный с латинским квадратом. Для определения оптимальной комбинации качественных факторов применяют методы планирования эксперимента по схеме латинских, гипер-греко-латинских квадратов и кубов (см. гл. III). При совмещении факторного эксперимента l^2 с ортогональными латинскими квадратами $l \times l$ все факторы вводятся в планирование

на четырех уровнях и всего можно исследовать эффекты $(l+1)$ факторов.

Во многих задачах в планировании наряду с качественными факторами участвуют количественные, и их может быть достаточно много. Если всем факторам задавать одинаковое число уровней $l>2$, то или потребуется большое количество опытов, или необходимо будет ограничивать величиной $(l+1)$ число факторов, вводимых в план. Кроме того, для некоторых качественных факторов иногда невозможно задать более двух уровней. В таких задачах полезными оказываются сложные планы: факторный эксперимент 2^{2k}, совмещенный с латинским квадратом размера $2^k \times 2^k$. Они позволяют вводить в планирование несколько факторов на $l=2^k$ уровнях и достаточно большое число количественных и качественных факторов на двух уровнях. Такие планы можно построить только для факторного эксперимента 2^{2k} с количеством опытов, равным полному квадрату числа 2^k, $k=2, 3,...$

Таблица 49. **Совмещение факторного эксперимента 2^4 с латинским квадратом 4×4**

		$x_2(-1)$		$x_2(+1)$	
		$x_1(-1)$	$x_1(+1)$	$x_1(-1)$	$x_1(+1)$
$x_4(-1)$	$x_3(-1)$	A	B	C	D
	$x_3(+1)$	B	A	D	C
$x_4(+1)$	$x_3(-1)$	D	C	B	A
	$x_3(+1)$	C	D	A	B

Для совмещения факторного эксперимента 2^{2k} с латинским квадратом удобно факторный эксперимент 2^{2k} представить в виде таблицы с 2^{k+1} входами, на которую накладывается латинский квадрат размера $2^k \times 2^k$, например табл. 49.

Тогда фактор, вводимый в планирование по схеме латинского квадрата, ортогонален $2k$ факторам, задающим полный факторный эксперимент. Действительно, все $l=2^k$ уровней этого фактора встречаются в плане одинаково часто и каждый уровень его встречается с любым уровнем исходных $2k$ факторов одинаковое число раз.

Исходный план можно совместить с греко-латинским квадратом $2^k \times 2$ или даже с гипер-греко-латинским квадратом, полученным наложением друг на друга $(2k-1)$ ортогональных латинских квадратов, если существует полный ряд ортогональных латинских квадратов для данного $l=2^k$. При этом введенные (2^k-1) факторы ортогональны исходным $2k$ факторам, а также ортогональны всем взаимодействиям факторов, задающим столбцы квадрата. План будет насыщенным, если эти взаимодействия считать незначимыми и использовать их для введения в план дополнительных факторов на двух уровнях.

Представляют интерес самые различные варианты насыщенных ортогональных планов, полученных в результате совмещения факторного плана 2^{2k} с одним латинским квадратом, двумя ортогональными латинскими квадратами и т. д. до (2^k-1) ортогональных латинских квадратов. Каждый фактор, введенный в план на $l=2^k$ уровнях, имеет $(2k-1)$ степеней свободы и оказывается смешанным с 2^k-1 различными взаимодействиями $2k$ факторов полного факторного эксперимента. Если ввести в план m факторов $(m<2^k-1)$ на 2^k уровнях, то они окажутся смешанными с $m(2k-1)$ взаимодействиями исходных факторов Всего в полном факторном плане 2^{2k} имеется $(2^{2k}-2k-1)$ взаимодействий. Следовательно, свободными от смешивания с главными эффектами $(2k+m)$ факторов останутся $(2^{2k}-2k-1)-m(2^k-1)$ взаимодействий. Их можно использовать для введения в план дополнительных факторов на двух уровнях. Насыщенный план тогда включает $n=2^{2k}-m2^k+2m-1$ факторов, из которых m вводятся на $l=2^{2k}$ уровнях и $(n-m)$ на двух уровнях. Наибольший практический интерес представляют планы при $k=2$, т. е. $N=16$, $l=4$. Могут оказаться полезными планы при $k=3$, т. е. $N=64$, $l=8$. Планы, построенные при $k=4$, требуют слишком большого числа опытов ($N=256$).

При использовании сложных планов для количественных факторов, введенных в план на двух уровнях, можно подсчитать главные эффекты факторов, которые благодаря ортогональности плана совпадают с эффектами, вычисленными по методу наименьших квадратов, и затем провести крутое восхождение. При этом качественные факторы на этапе крутого восхождения устанавливаются на тех уровнях, которые дают лучшие эффекты.

Эффекты факторов, введенных в план на двух уровнях, вычисляются следующим образом. Пусть проделано $N=2^{2k}$ опытов по схеме сложного плана. В план введены n факторов, из них m установлено на $l=2^k$ уровнях, а $(n-m)$ – на двух уровнях. Получен ряд значений отклика: $y_1, y_2,...,y_N$. Тогда главный эффект фактора $x_i (i=1,2,..,n-m)$ получается как разность между суммой откликов во всех опытах, в которых x_i установлен на верхнем уровне x_i', и суммой откликов во всех опытах, в которых x_i установлен на нижнем уровне x_i^0, деленная на число опытов в плане:

$$m_i=\frac{1}{N}\left[\sum y\,(x_1,\ \ldots,\ x_i',\ \ldots,\ x_{n-m})-\sum y\,(x_1,\ \ldots,\ x_i^0,\ \ldots,\ x_{n-m})\right]. \quad \text{(V.133)}$$

Отношение m_i к $\sigma(m_i)=\sigma_{ош}/\sqrt{N}$, где $\sigma_{ош}$ – ошибка в измерении отклика, которое имеет t-распределение, можно использовать для оценки значимости вычисленных эффектов. При этом если план ненасыщенный, то для оценки величины $\sigma(m_i)$ можно использовать свободные от смешивания с основными факторами эффекты взаимодействия.

Эффекты факторов, введенных в план на $l=2^k$ уровнях, вычисляются отдельно для каждого уровня. Эффект фактора $x_j (j=n-m+1,...,n)$ на q-м уровне $(q=0,\ 1,\ 2,...,l-1)$ равен сумме откликов во всех опытах, в которых фактор x_j установлен на q-м уровне, деленной на число вхождений ($l=2^k$) в план фактора x_j на q-м уровне,

$$x_j(q) = \frac{\Sigma y\left(x_1, \ldots, x_j^l, \ldots, x_n\right)}{l}. \qquad (V.134)$$

Если есть основание предполагать однородность дисперсий $s^2_{ош}$ в измерении отклика по всем опытам, то для оценки значимости различия между эффектами указанных факторов на различных уровнях можно применить t-критерий. Недостатком этого критерия является то, что при оценке значимости различия между эффектами указанных факторов, например x_j, на двух уровнях l и $l+1$ используется не вся информация, а лишь часть ее. Множественный ранговый критерий Дункана позволяет определить значимость различия между эффектами уровней факторов, введенных в план на $l>2$ уровнях, с большей надежностью, поскольку при этом используется одновременно вся информация, полученная в эксперименте.

Значимость главных эффектов факторов, введенных в план, как на двух, так и на $l>2$ уровнях, можно проверить при помощи многофакторного дисперсионного анализа и факторного анализа. На основании результатов факторного анализа можно провести крутое восхождение.

Для линейной модели

$$y_{i\ldots\, jq\ldots f} = \mu + x_{1i} + \ldots + x_{(n-m)j} + x_{(n-m+1)\,q} + x_{nf} + \varepsilon_{i\ldots\, jq\ldots f}, \qquad (V.135)$$

где $y_{i\ldots\, jq\ldots f}$ — значение отклика в некотором опыте; μ — суммарный эффект во всех опытах; x_{1i} — эффект фактора x_1 на i-м уровне ($i=0,1$); $x_{(n-m)j}$ — эффект фактора x_{n-m} на j-м уровне ($j=0,\ 1$); $x_{(n-m+1)j}$ — эффект фактора x_{n-m+1} на q-м уровне ($q=0,\ 1,\ldots,2^k-1$); x_{nf} — эффект фактора x_n на f-м уровне ($f=0,\ 1,\ 2,\ldots,2^k-1$); $\varepsilon_{i\ldots jq\ldots f}$ — ошибка в измерении отклика.

Схема дисперсионного анализа приведена в табл. 50, в которой приняты следующие обозначения:

$$s_i^2 = \frac{\left(\Sigma y_{i\ldots\, jq\ldots\, f}\right)_i^2}{2^{2k-1}} \qquad (i = 0,1) \qquad (V.136)$$

— квадрат суммы результатов всех опытов, в которых фактор x_1 был установлен на i-м уровне, деленный на число вхождений (2^{2k-1}) в план фактора x_1 на i-м уровне;

$$s_q^2 = \frac{\left(\Sigma y_{i\ldots\, jq\ldots\, f}\right)_q^2}{2^k} \qquad (q = 0,1,2,\ \ldots,\ 2^k-1) \qquad (V.137)$$

— квадрат суммы результатов опытов, в которых фактор x_{n-m+1} был установлен на q-м уровне, деленный на число вхождений (2^k) в план фактора x_{n-m+1} на q-м уровне;

$$s_f^2 = \frac{\left(\Sigma y_{i\ldots\, jq\ldots\, f}\right)_f^2}{2^k} \qquad (f = 0,1,2,\ \ldots,\ 2^k-1) \qquad (V.138)$$

— квадрат суммы результатов опытов, в которых фактор x_n установлен на f-м уровне, деленный на число вхождений (2^k) в план данного

Таблица 50. **Дисперсионный анализ сложного плана**

Источник дисперсии	Число степеней свободы	Сумма квадратов	Средний квадрат	Математическое ожидание среднего квадрата
x_1	1	$SS_{x1} = \sum_{i=0}^{1} s_i^2 - SS_{\text{кор}}$	SS_{x_1}	$\sigma^2_{\text{ош}} + 2^{2k-1}\sigma^2_{x_1}$
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
x_{n-m}	1	$SS_{x_{n-m}} = \sum_{j=0}^{1} s_j^2 - SS_{\text{кор}}$	$SS_{x_{n-m}}$	$\sigma^2_{\text{ош}} + 2^{2k-1}\sigma^2_{x_{n-m}}$
x_{n-m+1}	$2^k - 1$	$SS_{x_{n-m+1}} = \sum_{q=0}^{2^k-1} s_q^2 - SS_{\text{кор}}$	$SS_{x_{n-m}}/(2^k - 1)$	$\sigma^2_{\text{ош}} + 2^k\sigma^2_{x_{n-m+1}}$
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
x_n	$2^k - 1$	$SS_{x_n} = \sum_{f=0}^{2^k} s_f^2 - SS_{\text{кор}}$	$SS_{x_n}/(2^k - 1)$	$\sigma^2_{\text{ош}} + 2^k\sigma^2_{x_n}$
Ошибка	$2^{2k} - m2^k + 2m - n - 1$	$SS_{\text{ош}} = SS_{\text{общ}} - SS_{x_1} - \ldots - SS_{x_n}$	$\dfrac{SS_{\text{ош}}}{2^{2k} - m2^k + 2m - n - 1}$	$\sigma^2_{\text{ош}}$
Общая сумма	$2^{2k} - 1$	$SS_{\text{общ}} = \sum\sum y^2_{i\ldots je\ldots f} - SS_{\text{кор}}$		

фактора на f-м уровне; $\Sigma\Sigma y^2_{i\ldots jq\ldots f}$ — сумма квадратов результатов всех $N=2^{2k}$ опытов;

$$SS_{\text{кор}} = \frac{(\Sigma\Sigma y_{i\ldots jq\ldots f})^2}{2^{2k}} \qquad \text{(V.139)}$$

— средний квадрат суммы результатов всех $N=2^{2k}$ опытов.

Пример 7. Исследовался одностадийный процесс получения водорастворимых полиэлектролитов путем радикальной полимеризации винилпиридиновых солей без их промежуточного выделения. Процесс зависит от большого числа количественных и качественных факторов. Необходимо определить оптимальные условия процесса.

Р е ш е н и е. Для оптимизации процесса синтеза водорастворимых полиэлектролитов на основе 2-метил-5-винилпиридина (2,5 МВП) был использован сложный план — дробная реплика 2^{6-2}, совмещенная с двумя латинскими квадратами (табл. 51).

Т а б л и ц а 51. **Матрица планирования**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	y
1	—	—	—	—	—	+	*A*	0	30,155
2	+	—	—	—	+	—	*B*	1	31,761
3	—	+	—	—	+	—	*C*	2	12,899
4	+	+	—	—	—	+	*D*	3	80,715
5	—	—	+	—	+	+	*B*	3	88,876
6	+	—	+	—	—	—	*A*	2	16,806
7	—	+	+	—	—	—	*D*	1	12,463
8	+	+	+	—	+	+	*C*	0	81,443
9	—	—	—	+	—	+	*C*	1	24,959
10	+	—	—	+	+	—	*D*	0	19,602
11	—	+	—	+	+	—	*A*	3	21,761
12	+	+	—	+	—	+	*B*	2	52,953
13	—	—	+	+	+	+	*D*	2	78,220
14	+	—	+	+	—	—	*C*	3	20,953
15	—	+	+	+	—	—	*B*	0	1,684
16	+	+	+	+	+	+	*A*	1	48,910

Рассматривалось влияние на выход полимера (y) восьми факторов, из которых два качественных — галогенакилы RX и растворители — менялись на четырех уровнях, а один качественный — инициатор — на двух. Значения выбранных уровней для всех исследуемых факторов приведены в табл. 52.

Вследствие ценных комбинаторных свойств, плана и рационального выбора факторов уже в процессе реализации матрицы планирования определены условия (опыты 4, 5, 8, 13), в которых выходы полимеров удовлетворяют технологическим требованиям.

Для определения интенсивности влияния различных параметров на выход полимера был проведен факторный и дисперсионный анализы полученных результатов. Ошибка воспроизводимости $s_{\text{воспр}} = 1{,}94$, используемая в факторном анализе, определена из предварительных опытов. Число степеней свободы $f_{\text{воспр}} = 6$.

В табл. 52 приведены эффекты факторов, введенных в планирование на двух уровнях, полученные по формуле (V.133). Значимость этих эффектов проверялась по критерию Стьюдента. Табличное значение критерия Стьюдента $t_{0,05}(6) = 2{,}45$. Эффект фактора x_2 (соотношение реагирующих компонентов) оказался незначимым. Таким образом, избыток галоидного алкила не влияет на выход полимера. Незначимый эффект в табл. 52 заменен нулем. Значимость главных эффектов факторов, введенных в план как на двух, так и на четырех уровнях, проверялась при помощи многофакторного дисперсионного анализа. Для оценки значимости эффектов в дисперсионном анализе было использовано отношение средних квадратов, обусловленных действием соответствующих факторов, к среднему квадрату, связанному с ошибкой опыта, имеющее распределение Фишера. При этом к сумме квадратов, связанной с ошибкой опыта, отнесена с соответствующим числом степеней свободы сумма квадратов, обусловленная

Таблица 52. **Результаты факторного анализа**

Факторы	Обозначения	Уровни факторов		Эффект
		+1	−1	
Температура, °С	x_1	70	60	+4,633
Соотношение МВП/RX, моль/моль	x_2	1/1,3	1/1,1	0
Концентрация инициатора, %	x_3	1,2	0,8	+4,159
Соотношение МВП и растворителя, мас. доли	x_4	1/2	1/1	−5,88
Продолжительность реакции, ч	x_5	12	6	+8,425
Вид инициатора	x_6	ДАК	ПБ	17,24
Вид растворителя	x_7	Бутанол Этанол Пропанол Изопропанол	*A* *B* *C* *D*	27,41 43,82 35,06 47,75
Вид галогеналкила	x_8	Бромистый этил Иодистый этил Иодистый пропил Иодистый метил	0 1 2 3	33,22 27,52 40,22 53,08

действием фактора x_2, эффект которого оказался незначимым. Результаты дисперсионного анализа представлены в табл. 53. Данные факторного и дисперсионного анализов хорошо согласуются.

В табл. 52 приведены эффекты факторов на двух и на четырех уровнях. Значимость различия между эффектами этих факторов на разных уровнях проверялась при помощи множественного рангового критерия Дункана с доверительной вероятностью $\beta = 0{,}95$. Нормированная ошибка среднего равна

$$s_{\bar{y}} = \frac{\sqrt{91{,}007}}{\sqrt{4}} = \frac{9{,}55}{2} = 4{,}775.$$

Эффекты факторов на разных уровнях расположены в порядке возрастания их величин. Для фактора x_7

$\bar{y}^{(A)} = 27{,}41$	$\bar{y}^{(C)} = 35{,}06$	$\bar{y}^{(B)} = 43{,}82$	$\bar{y}^{(D)} = 47{,}75$
r	3,93	4,01	4,02
$r \cdot s_{\bar{y}}$	18,83	19,15	19,25

$$\bar{y}^{(D)} - \bar{y}^{(A)} = 20{,}34 > 19{,}25 \text{ — различие значимое}$$

$$\bar{y}^{(D)} - \bar{y}^{(C)} = 12{,}69 < 19{,}15 \text{ — различие незначимое}$$

$$\bar{y}^{(D)} - \bar{y}^{(B)} = 3{,}93 < 18{,}8 \text{ — различие незначнмое}$$

$$\bar{y}^{(B)} - \bar{y}^{(A)} = 6{,}41 < 19{,}15 \text{ — различие незначимое}$$

$$\bar{y}^{(B)} - \bar{y}^{(C)} = 8{,}46 < 18{,}8 \text{ — различие незначимое}$$

$$\bar{y}^{(C)} - \bar{y}^{(A)} = 7{,}65 < 18{,}8 \text{ — различие незначимое}$$

Таблица 53. **Дисперсионный анализ**

Источник дисперсий	Число степеней свободы	Сумма квадратов	Средний квадрат	Проверка значимости
x_1	1	342,6461	342,6461	$\sigma^2_{x_1} \neq 0$
x_2	1	2,6518	2,6518	$\sigma^2_{x_2} = 0$
x_3	1	276,0360	276,0360	$\sigma^2_{x_3} \neq 0$
x_4	1	552,3729	552,3729	$\sigma^2_{x_4} \neq 0$
x_5	1	1136,1904	1136,1904	$\sigma^2_{x_5} \neq 0$
x_6	1	7238,9555	7238,9555	$\sigma^2_{x_6} \neq 0$
x_7	3	2980	933,991	$\sigma^2_{x_7} \neq 0$
x_8	3	4420	1454,35	$\sigma^2_{x_8} \neq 0$
Ошибка (1)	3	361,3800	120,4597	
Общая сумма	15	185378,610	12358,571	
Ошибка (2)	4	364,03	91,007	

Таким образом, реакция синтеза сильноосновных полиэлектролитов с разной эффективностью протекает в среде изопропанола и бутанола. Различие между остальными растворителями незначимое.

Для фактора x_8

$$\bar{y}^{(1)} = 27{,}52;\ \bar{y}^{(0)} = 33{,}22;\ \bar{y}^{(2)} = 40{,}22;\ \bar{y}^{(3)} = 53{,}08;$$

$$\bar{y}^{(3)} - \bar{y}^{(1)} = 25{,}44 > 19{,}25 \text{ — различие значимое}$$

$$\bar{y}^{(3)} - \bar{y}^{(0)} = 19{,}74 > 19{,}15 \text{ — различие значимое}$$

$$\bar{y}^{(3)} - \bar{y}^{(2)} = 12{,}74 < 18{,}8 \text{ — различие незначимое}$$

$$\bar{y}^{(2)} - \bar{y}^{(1)} = 12{,}7 < 19{,}15 \text{ — различие незначимое}$$

$$\bar{y}^{(2)} - \bar{y}^{(0)} = 7{,}0 < 18{,}8 \text{ — различие незначимое}$$

$$\bar{y}^{(0)} - \bar{y}^{(1)} = 5{,}7 < 18{,}8 \text{ — различие незначимое}$$

Выход полимера существенно уменьшается при замене наиболее активного галогеналкила — иодистого метила иодистым или бромистым этилом. Разница между остальными галогеналкилами незначима.

Из анализа результатов следует, что увеличение температуры и продолжительности опыта приводит к возрастанию выхода полимера, а увеличение количества растворителя снижает скорость реакции. Из инициаторов наиболее эффективным оказался динитрил азоизомасляной кислоты (ДАК). Использование в качестве инициатора перекиси бензоила (ПБ) уменьшает скорость реакции радикальной полимеризации. Лучшими растворителями являются этанол и изопропанол. Из галогеналкилов наиболее реакционноспособен иодистый метил, однако эффекты других галогеналкилов также имеют

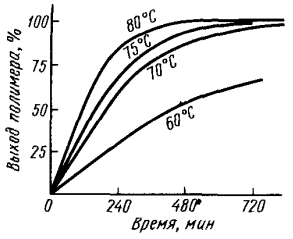


Рис. 52. Кинетические кривые реакции МВП — C_2H_5 в этаноле при различных температурах

высокие значения. Таким образом, оптимальные условия синтеза галоидсодержащих водорастворимых полиэлектролитов получились следующие: температура 70°С, МВП / RX = 1 : 1,1; МВП / растворитель = 1 : 1; продолжительность реакции 12 ч, концентрация инициатора (ДАК) = 1,2%, растворитель — изопропанол или этанол. В полученных оптимальных условиях были синтезироаны водорастворимые полиэлектролиты на основе 2-метил-5-винилпиридных и различных галогеналкилов. Выход полимера в оптимальных условиях приведен ниже.

Учитывая положительное влияние температуры (табл. 52), для сокращения длительности процесса синтеза исследовали влияние дальнейшего повышения температуры. Для этого были сняты кинетические кривые МВП — C_2H_5 в этаноле при температуре (°С): 60, 70, 75 и 80 (рис. 52). Дальнейшее увеличение температуры лимитируется температурой кипения растворителя и возможностью частичной деструкции образующегося полимера. Увеличение температуры до 80°С позволило сократить продолжительность реакции до 7—8 ч.

Полимер . .	МВП — CH_3	МВП — C_2H_5	МВП — C_3H_7	МВП — C_2H_5
Выход, % . .	99,0	97,0	86,0	98,0

Пример 8. На стадии разработки лабораторного регламента исследовалась стадия твердофазной экстракции процесса извлечения биологически активного препарата феллавина из листьев бархата амурского. Лекарственный препарат феллавин рекомендуется применять в медицинской практике в качестве противовирусного и антигепатоксического средства.

Р е ш е н и е. Для оптимизации процесса твердофазной экстракции феллавина из растительного сырья был использован сложный план — дробная реплика 2^{8-1}, совмещенная с одним латинским квадратом размером 4 × 4. В качестве параметра оптимизации (y) рассматривался выход феллавина в процентах от его содержания в сырье. Выбранные для исследования процесса экстракции факторы и диапазоны их изменения приведены в таблице:

Факторы	Обозначения	Уровни факторов	
		+1	-1
Время первой экстракции, ч	x_1	6	2
Время второй и третьей экстракций, ч	x_2	6	2
Соотношение сырье: растворитель	x_3	1 : 10	1 : 6
Количество экстракций	x_4	3	2
Температура экстракции	x_5	Кипение	50—60°С
Растворитель:	x_6		
метанол		*0*	
50%-ный этанол		1	
50%-ный изопропиловый спирт		2	
50%-ный метанол		3	

Размер частиц твердой фазы 1—2 мм. Процесс проводится в периодическом лабораторном экстракторе с мешалкой. Матрица планирования и результаты приведены в таблице (см. стр. 227).

Каждый опыт в матрице был повторен два раза. Статистический анализ результатов проводился методом факторного анализа. Эффекты факторов, введенных в план на двух уровнях, были рассчитаны по формуле (V.133):

$$b_1 = 8{,}659, \quad b_2 = 3{,}537, \quad b_3 = -0{,}384, \quad b_4 = 2{,}671, \quad b_5 = 7{,}015.$$

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	Выход продукта y, %	Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	Выход продукта y, %
1	−1	−1	−1	−1	−1	0	59,03	9	−1	−1	−1	+1	−1	2	60,08
2	+1	−1	−1	−1	+1	1	91,69	10	+1	−1	−1	+1	+1	3	87,9
3	−1	+1	−1	−1	+1	2	70,32	11	−1	+1	−1	+1	+1	0	96,29
4	+1	+1	−1	−1	−1	3	80,73	12	+1	+1	−1	+1	−1	1	87,5
5	−1	−1	+1	−1	+1	1	68,14	13	−1	−1	+1	+1	+1	3	77,58
6	+1	−1	+1	−1	−1	0	91,93	14	+1	−1	+1	+1	−1	2	65,32
7	−1	+1	+1	−1	−1	3	50,16	15	−1	+1	+1	+1	−1	1	79,59
8	+1	+1	+1	−1	+1	2	97,09	16	+1	+1	+1	+1	+1	0	97,58

Дисперсия воспроизводимости, определенная по параллельным опытам, $s^2_{\text{воспр}} = 19{,}637$; $f_{\text{воспр}} = 16$. Ошибка эффекта

$$s_{b_j} = \sqrt{\frac{19{,}637}{16}} = 1{,}108.$$

Значимость эффектов факторов, введенных в план на двух уровнях, проверялась по критерию Стьюдента для уровня значимости $p = 0{,}05$ и числа степеней свободы $f = 16$; $t_{0{,}05}(16) = 2{,}12$.

Значение t-критерия для каждого фактора:

$$t_1 = \frac{8{,}659}{1{,}108} = 7{,}815 > 2{,}12 \text{ — эффект значим}$$

$$t_2 = \frac{3{,}537}{1{,}108} = 3{,}192 > 2{,}12 \text{ — эффект значим}$$

$$t_3 = \frac{0{,}384}{1{,}108} = 0{,}346 < 2{,}12 \text{ — эффект незначим}$$

$$t_4 = \frac{2{,}671}{1{,}108} = 2{,}411 > 2{,}12 \text{ — эффект значим}$$

$$t_5 = \frac{7{,}015}{1{,}108} = 6{,}331 > 2{,}12 \text{ — эффект значим}$$

Эффект фактора x_3 оказался незначим, таким образом, избыток растворителя не влияет на выход феллавина. Увеличение времени экстракций, увеличение количества экстракций и повышение температуры, т.е. оставшиеся четыре фактора приводят к увеличению выхода феллавина.

Значимость различия между эффектами фактора x_6, веденном в плане на четырех уровнях, проверялась с помощью множественного рангового критерия Дункана. В таблице приведены значения среднего выхода для различных уровней фактора x_6:

Вид растворителя	Уровни фактора	Средний выход, %
Метанол	0	86,207
50%-ный этанол	1	81,73
50%-ный изопропиловый спирт	2	73,202
50%-ный метанол	3	74,092

Проранжируем средние значения выхода в порядке возрастания:

73,202	74,092	81,73	86,207
$\bar{y}^{(2)}$	$\bar{y}^{(3)}$	$\bar{y}^{(1)}$	$\bar{y}^{(0)}$

Ошибка воспроизводимости результатов $s_y = 4{,}432\%$. Ошибка среднего равна

$$s_{\bar{y}} = \sqrt{s_y^2 / n} = \sqrt{19{,}637/4} = 2{,}216\%.$$

Выпишем значимые ранги из таблицы Дункана для уровня значимости $p = 0{,}05$ и числа степеней свободы $n_D = f_{\text{воспр}} = 16$:

p	2	3	4
Ранги	3,01	3,15	3,23

Наименьшие значимые ранги (НЗР), умноженные на ошибку среднего $s_{\bar{y}}$, равны:

p	2	3	4
НЗР $\times s_{\bar{y}}$	6,67	7,003	7,202

Проверим значимость различия между средними:

$$\bar{y}^{(0)} - \bar{y}^{(2)} = 86{,}207 - 73{,}202 = 13{,}005 > 7{,}202 \text{ — различие значимое}$$

$$\bar{y}^{(0)} - \bar{y}^{(3)} = 76{,}207 - 74{,}092 = 12{,}115 > 7{,}003 \text{ — различие значимое}$$

$$\bar{y}^{(0)} - \bar{y}^{(1)} = 86{,}207 - 81{,}73 = 4{,}477 < 6{,}67 \text{ — различие незначимое}$$

$$\bar{y}^{(1)} - \bar{y}^{(2)} = 81{,}73 - 73{,}202 = 8{,}528 > 7{,}003 \text{ — различие значимое}$$

$$\bar{y}^{(1)} - \bar{y}^{(3)} = 81{,}73 - 74{,}092 = 7{,}638 > 6{,}67 \text{ — различие значимое}$$

$$\bar{y}^{(3)} - \bar{y}^{(2)} = 74{,}092 - 73{,}202 = 0{,}89 < 6{,}67 \text{ — различие незначимое}$$

Из анализа результатов следует, что лучшими растворителями являются метанол и 50%-ный этанол. Выбираем в качестве растворителя для процесса твердофазной экстракции 50%-ный этанол, который является наиболее эффективным, удешевляет процесс получения препарата и менее ядовит.

Таким образом, оптимальные условия процесса экстракции феллавина из листьев бархата амурского получились следующие: число экстракций — 3; время первой экстракции — 6 ч; время второй и третьей экстракции — 6 ч; соотношение сырье : растворитель — 1 : 6; растворитель — 50%-ный этанол; температура — 80°С (кипение).

11. Метод последовательного симплекс-планирования. В рассмотренных планах типа 2^k и 2^{k-p} экспериментальные точки располагались в вершинах многомерного куба. В качестве экспериментального плана можно также использовать регулярный симплекс. Симплексом в k-мерном пространстве называют выпуклый многогранник, имеющий ровно $k+1$ вершину, каждая из которых определяется пересечением k гиперплоскостей данного пространства. Примером симплекса в двумерном пространстве, т. е. на плоскости, служит треугольник. В трехмерном пространстве симплексом будет любая четырехгранная пирамида, имеющая четыре вершины, каждая из которых образована пересечением трех плоскостей — граней пирамиды.

Симплекс называется регулярным, если расстояния между всеми его вершинами равны. Так, регулярными симплексами являются правильный треугольник (двумерный симплекс), тетраэдр (трехмерный симплекс). При планировании экспериментов обычно используют регулярные симплексы. Однако регулярность симплекса, как и направление градиента в методе крутого восхождения, и свойство

ротатабельности планов не будут инвариантными к масштабу координат факторного пространства. При изменении масштаба регулярный симплекс может стать нерегулярным. С другой стороны, всегда можно подобрать соответствующее преобразование системы координат, делающее нерегулярный симплекс регулярным.

В экспериментальной практике симплексные планы наиболее широко используются для решения задач оптимизации на стадии движения к почти стационарной области. При этом, чтобы сделать симплекс регулярным, используется линейное преобразование

$$x_j = \frac{z_j - z_j^0}{\Delta z_j},$$

где z_j^0 – j-я координата центра плана; Δz_j – интервал варьирования по j-му фактору.

Для оптимизации используется следующее важное свойство симплекса: против любой из его вершин A_j расположена только одна грань, на которой можно построить новый симплекс, отличающийся от прежнего расположением новой вершины $\tilde{A}_j$, тогда как остальные вершины обоих симплексов совпадают. Последовательным отбрасыванием вершин осуществляется перемещение исходного симплекса в факторном пространстве.

Метод последовательного симплекс-планирования состоит в следующем: планируют исходную серию опытов так, чтобы точки, соответствующие условиям проведения этих опытов, образовывали регулярный симплекс в факторном пространстве. После проведения опытов выявляется вершина, отвечающая условиям, при которых получаются наихудшие результаты. Далее строится новый симплекс, для чего наихудшая точка исходного симплекса заменяется новой, расположенной симметрично относительно центра грани симплекса, находящейся против наихудшей точки. Новая точка вместе с оставшимися снова образует регулярный симплекс, центр тяжести которого смещен по сравнению с исходным в направлении: худшая точка – центр тяжести остальных точек. Это направление в общем случае не является наиболее крутым, однако оно обращено в сторону повышения качества процесса.

После реализации опыта в дополнительной точке опять производится сопоставление результатов, снова выявляется наихудшая точка, которая также заменяется ее зеркальным отражением, и т. д. Шаговое восхождение с последовательным отбрасыванием наихудших точек повторяется до области, близкой к экстремуму.

На рис. 53 показаны схемы достижения экстремума одной и той же поверхности отклика методами крутого восхождения и симплекс-планирования. Рассмотрим движение к экстремуму на примере задачи отыскания наибольшего значения целевой функции двух факторов. Для достижения экстремума методом крутого восхождения (рис. 53, *а*) в окрестности точки M с известным значением целевой функции был поставлен полный факторный эксперимент 2^2 (точки *1–4*), движение по градиенту осуществлялось в опытах 5–9 до тех пор, пока значение целевой функции не начало ухудшаться. С центром в лучшей точ-

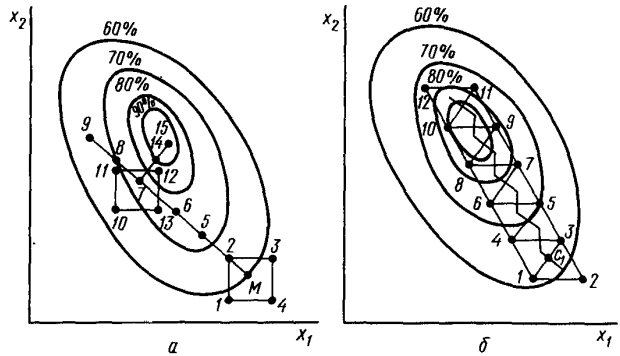


Рис. 53. Симплексный метод и крутое восхождение по поверхности отклика

ке *7* пришлось вновь реализовать план 2^2 (точки *10—13*). Новое движение по градиенту (точки *14, 15*) приводит к экстремальному значению целевой функции. При использовании симплекс-планирования (рис. 53, *б*) в исходном симплексе (точки *1—3*) худшей оказалась точка *2*. Точка *4* является зеркальным отражением худшей точки относительно c_1 — центра грани *1—3*. В новом симплексе 1, 3, 4 худшей оказалась точка *1*. В результате применения симплексного метода достигли области оптимума (симплекс 9, 10, 11). Таким образом, оба метода потребовали примерно одинакового числа опытов. Из рис. 53 видно, что вблизи оптимума при применении симплексного метода может возникнуть зацикливание. Достигнув области оптимума, симплекс начинает вращение вокруг вершины с максимальным значением отклика. Если симплекс располагается относительно поверхности отклика таким образом, что значение отклика в новой точке опять получается самым плохим, необходимо вернуться к предыдущему симплексу и попробовать следующее благоприятное направление. Наличие ошибок в определении отклика снижает скорость движения к экстремуму.

Исходный симплекс может быть по-разному ориентирован в факторном пространстве. Если центр симплекса совпадает с началом координат, одна из вершин лежит на координатной оси, а остальные располагаются симметрично относительно координатных осей, плоскостей и гиперплоскостей (в многомерном случае), то координаты вершин симплекса задаются матрицей X:

$$X = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_j & \dots & x_{k-1} & x_k \\ -x_1 & x_2 & \dots & x_j & \dots & x_{k-1} & x_k \\ 0 & -2x_2 & \dots & x_j & \dots & x_{k-1} & x_k \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -jx_j & \dots & x_{k-1} & x_k \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & -(k-1)x_{k-1} & x_k \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & -kx_k \end{bmatrix} \qquad \text{(V.140)}$$

При длине стороны симплекса, равной 1,

$$x_j = \sqrt{\frac{1}{2j(j+1)}}\,. \qquad \text{(V.141)}$$

Высота такого симплекса h_k (расстояние от вершины до противоположной грани) равна

$$h_k = \frac{k+1}{\sqrt{2k(k+1)}}\,, \qquad \text{(V.142)}$$

где k — размерность симплекса. Число опытов в симплексной матрице для k независимых факторов равно $N = k+1$.

Симплексные планы относятся к так называемым *насыщенным* планам, число опытов в которых равно числу коэффициентов в уравнении регрессии. В этой матрице соблюдаются условия

$$\sum_{i=1}^{N} x_{ji}\, x_{li} = 0, \quad j \neq l; \quad j,\ l = 1,2,\ \ldots,\ k \text{ и } \sum_{i=1}^{N} x_{ji} = 0, \qquad \text{(V.143)}$$

но не соблюдается условие $\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 = N$.

Только для столбца x_0, все элементы которого равны 1,

$$\sum_{i=1}^{N} x_{0i}^2 = N.$$

Для любого j-го столбца $\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2$ равна

$$\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 = j\,\frac{1}{2j(j+1)} + j^2\,\frac{1}{2j(j+1)} = 0{,}5. \qquad \text{(V.144)}$$

Поэтому для симплексного плана ковариационная матрица имеет вид

$$\left(X^T X\right)^{-1} = \begin{bmatrix} 1/N & & 0 \\ & 2 & \\ & & \ddots \\ 0 & & 2 \end{bmatrix} \qquad \text{(V.145)}$$

и коэффициенты регрессии определяются по формулам:

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^{N} y_i}{N}\,; \quad b_j = 2\sum_{i=1}^{N} x_{ji}\, y_i; \quad j = 1,2,\ \ldots,\ k. \qquad \text{(V.146)}$$

Симплексные планы — планы ротатабельные. Основным их недостатком является отсутствие D-оптимальности. Дисперсия коэффициентов в ортогональных планах определяется по формуле

$$s_{b_j}^2 = \frac{s_{\text{воспр}}^2}{\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2}. \qquad \text{(V.147)}$$

Для симплексного плана, согласно (V.147),

$$s_{b_j}^2 = 2s_{\text{воспр}}^2, \qquad \text{(V.148)}$$

в то время как для планов типа 2^k и 2^{k-p}

$$s_{b_j}^2 = \frac{s_{\text{воспр}}^2}{N}.$$

Таким образом, коэффициенты уравнения регрессии, полученного по симплексному плану, определяются с меньшей точностью. Построить насыщенные планы с элементами ± 1 удается только для числа факторов, равного $4a-1$, где a — целое положительное число. Например, для 3, 7, 11, 15 и т. д. факторов.

Для практического использования симплексной матрицы (V.140) заранее подсчитаны по формуле (V.141) числовые значения ее элементов:

$$X = \left\{\begin{array}{ccccc|c} 0{,}5 & 0{,}289 & 0{,}204 & 0{,}158 & 0{,}129 & 0{,}109\ldots \\ -0{,}5 & 0{,}289 & 0{,}204 & 0{,}158 & 0{,}129 & 0{,}109\ldots \\ 0 & -0{,}578 & 0{,}204 & 0{,}158 & 0{,}129 & 0{,}109\ldots \\ 0 & 0 & -0{,}612 & 0{,}158 & 0{,}129 & 0{,}109\ldots \\ 0 & 0 & 0 & -0{,}632 & 0{,}129 & 0{,}109\ldots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0{,}645 & 0{,}109\ldots \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0{,}655 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\ \vdots\ \vdots\ \vdots \end{array}\right\} \qquad \text{(V.149)}$$

План эксперимента в безразмерном масштабе для k факторов состоит из k столбцов и $k+1$ строки матрицы (V.149).

После реализации исходного симплекса анализируются результаты для выявления наихудшей точки. Затем проводится отражение наихудшей точки относительно центра противоположной грани симплекса, и таким образом находятся условия для проведения нового опыта взамен исключенного. Условия проведения опыта в отраженной точке могут быть найдены следующим образом:

$$x_j^{(k+2)} = 2x_j^{(c)} - x_j^{(l)}, \quad j = 1,2,\ldots, k, \qquad \text{(V.150)}$$

где $x_j^{(l)}$ — j-я координата наихудшей точки l; $x_j^{(k+2)}$ — j-я координата новой точки, получаемой в результате отражения; $x_j^{(c)}$ — j-я координата центра противоположной грани:

$$x_j^{(c)} = \frac{\sum_{i=1}^{k+1} x_j^{(i)}}{k}, \quad i \neq l. \qquad \text{(V.151)}$$

Исходный k-мерный симплекс можно достроить до $(k+1)$-мерного, вводя только одну новую точку. Такая необходимость возникает, если на первом этапе исследования рассматривалась зависимость изучаемого процесса только от k факторов, в то время как он зависит от $(k+1)$-го фактора. Величина $(k+1)$-го фактора по тем или иным причинам не изменялась в эксперименте. Тогда все точки k-мерного симплекса в действительности представляют собой точки $(k+1)$-мерного пространства, которые находятся в гиперплоскости $x_{k+1}=d$, где d — фиксированное значение $(k+1)$-го фактора в безразмерном виде. Из геометрических соотношений следует, что для построения симплекса размерностью $(k+1)$ из k-мерного симплекса необходимо найти центр тяжести точек k-мерного симплекса в $(k+1)$-мерном пространстве и провести через эту точку перпендикуляр к гиперплоскости, в которой лежат точки k-мерного симплекса. Если на этом перпендикуляре отложить отрезок длиной h_{k+1} (высота $k+1$-мерного симплекса), то полученная точка вместе с исходными образует $(k+1)$-мерный симплекс. Координаты новой точки

$$x_1^{(0)},\ x_2^{(0)},\ \ldots,\ x_j^{(0)},\ \ldots,\ x_k^{(0)},\ d+h_{k+1}, \qquad \text{(V.152)}$$

где x_j^s — j-я координата центра исходного симплекса.

При обычном факторном методе добавление еще одного параметра приводит к необходимости увеличить число опытов в два раза. Отметим еще следующие преимущества симплексного метода. При использовании симплекс-планирования параметр оптимизации y может измеряться приближенно: достаточно иметь возможность проранжировать эти величины. При этом можно одновременно учитывать несколько параметров оптимизации: выход продукта, стоимость, чистоту и т. д. Параметр оптимизации может не измеряться количественно. Метод не предъявляет жестких требований к аппроксимации поверхности отклика плоскостью. Симплекс-план может быть использован как алгоритм при оптимизации процесса с применением управляющей машины.

Пример 9. Сравнить эффективность симплексного метода оптимизации и метода крутого восхождения на основании результатов восьми опытов (см. табл. 38).

Решение. Использованный в примере 1 (см. с. 175) план — $^1/_{16}$ от ПФЭ 2^7 является D-оптимальным симплексом в семимерном пространстве. Этот план был использован в качестве исходного симплекса (опыты 1—8 в таблице).

Номер опыта	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5	z_6	z_7	y
1	0,022	0,028	0,035	1350	1,5	0,152	0,333	0
2	0,063	0,028	0,035	1300	2,0	0,127	0,333	0,129
3	0,022	0,0094	0,035	1300	2,0	0,152	0,5	0
4	0,063	0,0094	0,035	1350	1,5	0,127	0,5	0,177
5	0,022	0,028	0,10	1300	1,5	0,127	0,5	0,295
6	0,063	0,028	0,10	1350	2,0	0,152	0,5	0,404
7	0,022	0,0094	0,10	1350	2,0	0,127	0,333	0,2665
8	0,063	0,0094	0,10	1300	1,5	0,152	0,333	0,4305
9	0,069	0,031	0,109	1360	1,42	0,124	0,310	0,42

Продолжение

Номер опыта	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5	z_6	z_7	y
10	0,082	0,013	0,1304	1310	1,91	0,115	0,469	0,336
11	0,0316	0,0129	0,1278	1370	1,16	0,147	0,47	0,510
12	0,023	0,033	0,154	1330	1,09	0,153	0,437	0,489
13	0,079	0,035	0,1346	1312	1,02	0,149	0,520	0,2630

Анализ результатов (таблица) показывает, что наихудшие результаты получены в опытах 1 и 3. Заменим точку *3* ее зеркальным отражением — точкой *9*. Координаты новой точки вычислим по формулам (V.150) и (V.151). Определим координаты точки c — центра грани, образованной точками *1, 2, 4, 5, 6, 7, 8:*

$$z_1^{(c)} = \frac{0,022\cdot 3 + 0,063\cdot 4}{7} = 0,0454,$$

$$z_2^{(c)} = \frac{0,028\cdot 4 + 3\cdot 0,0094}{7} = 0,020,$$

$$z_3^{(c)} = \frac{3\cdot 0,035 + 4\cdot 0,1}{7} = 0,0721,$$

$$z_4^{(c)} = \frac{4\cdot 1350 + 3\cdot 1300}{7} = 1330,$$

$$z_5^{(c)} = \frac{4\cdot 1,5 + 3\cdot 2,0}{7} = 1,71,$$

$$z_6^{(c)} = \frac{3\cdot 0,152 + 4\cdot 0,127}{7} = 0,138,$$

$$z_7^{(c)} = \frac{4\cdot 0,333 + 0,5\cdot 3}{7} = 0,405.$$

Тогда координаты девятой точки выразятся следующим образом:

$$z_1^{(9)} = 2\cdot 0,0454 - 0,022 = 0,0688,$$

$$z_2^{(9)} = 2\cdot 0,02 - 0,0094 = 0,0306,$$

$$z_3^{(9)} = 2\cdot 0,0721 - 0,035 = 0,109,$$

$$z_4^{(9)} = 2\cdot 1330 - 1300 = 1360,$$

$$z_5^{(9)} = 2\cdot 1,71 - 2 = 1,42,$$

$$z_6^{(9)} = 2\cdot 0,138 - 0,152 = 0,124,$$

$$z_7^{(9)} = 2\cdot 0,405 - 0,5 = 0,310.$$

Аналогично при отражении первой точки были получены координаты десятой точки. В симплексе 2, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 худшая точка *2*. Ее отражение дает координаты точки *11*, отражение точки *4* — координаты точки *12*. В симплексе 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12 худшей является точка *7*. Ее отражение дает координаты точки *13*. Выход в точке *13* меньше, чем в точке *7*. Отражение точки *13* приведет снова в точку *7*.

Таким образом, симплекс зациклился. Определим выход в центре симплекса 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12. Координаты центра симплекса точки S:

$$z_1^{(S)} = \frac{2\cdot 0{,}022 + 2\cdot 0{,}063 + 0{,}069 + 0{,}082 + 0{,}0316 + 0{,}023}{8} = 0{,}047;$$

$$z_2^{(S)} = \frac{0{,}028\cdot 2 + 0{,}0094\cdot 2 + 0{,}031 + 0{,}013 + 0{,}0129 + 0{,}033}{8} = 0{,}0206;$$

$$z_3^{(S)} = \frac{0{,}10\cdot 4 + 0{,}109 + 0{,}1304 + 0{,}1278 + 0{,}154}{8} = 0{,}115;$$

$$z_4^{(S)} = \frac{1300\cdot 2 + 1350\cdot 2 + 1360 + 1310 + 1370 + 1330}{8} = 1334;$$

$$z_5^{(S)} = \frac{1{,}5\cdot 2 + 2\cdot 2{,}0 + 1{,}42 + 1{,}91 + 1{,}16 + 1{,}09}{8} = 1{,}57;$$

$$z_6^{(S)} = \frac{0{,}127\cdot 2 + 0{,}152\cdot 2 + 0{,}124 + 0{,}115 + 0{,}147 + 0{,}153}{8} = 0{,}137;$$

$$z_7^{(S)} = \frac{0{,}5\cdot 2 + 0{,}333\cdot 2 + 0{,}310 + 0{,}469 + 0{,}47 + 0{,}437}{8} = 0{,}420.$$

В точке S был реализован опыт. Полученное значение оптической плотности $y^{(S)} = 0{,}570$. Таким образом, наилучшее значение критерия оптимизации получено в центре симплекса за 14 опытов. Метод крутого восхождения потребовал для решения этой же задачи 15 опытов.

Пример 10. Изучалась реакция, протекающая по схеме $A + B + C \to D$ в водно-спиртовом растворе. На качество и количество продукта $D(y)$ влияли следующие факторы: z_1 — время реакции, ч; z_2 — содержание спирта в водно-спиртовом растворе, мол. доли; z_3 — концентрация вещества С, мол. доли; z_4 — концентрация вещества В, мол. доли; z_5 — молярное соотношение веществ В и А.

Основной уровень и интервалы варьирования факторов приведены ниже

Факторы	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5
z_j^0	2,0	0,65	0,10	0,25	1,20
Δz_j	0,20	0,15	0,025	0,05	0,20

Определить условия получения максимального количества продукта (y_{max}).

Р е ш е н и е. Воспользуемся симплексным методом планирования. Для $k = 5$ выделим из матрицы (см. V.149) подматрицу, содержащую пять столбцов и шесть строк. Используя формулу кодирования (V.3), получим:

$$x_1 = \frac{z_1 - 2{,}0}{0{,}20}, \quad x_2 = \frac{z_2 - 0{,}65}{0{,}15}, \quad x_3 = \frac{z_3 - 0{,}10}{0{,}025},$$

$$x_4 = \frac{z_4 - 0{,}25}{0{,}05}, \quad x_5 = \frac{z_5 - 1{,}20}{0{,}20}.$$

Тогда матрица исходного симплекса в натуральном масштабе имеет вид (таблица).

Номер опыта	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5	y
1	2,10	0,693	0,105	0,258	1,225	0,760
2	1,90	0,693	0,105	0,258	1,225	0,491
3	2,00	0,564	0,105	0,258	1,225	0,513
4	2,00	0,650	0,085	0,258	1,225	0,675
5	2,00	0,650	0,100	0,218	1,225	0,693
6	2,00	0,650	0,100	0,250	1,075	0,666

Как следует из таблицы, наихудшим является опыт 2. Заменим точку *2* ее зеркальным отражением — точкой *7*. Координаты новой точки найдем по формулам (V.150) и (V.151). Определим координаты точки c — центра грани, образованной точками *1, 3, 4, 5, 6*:

$$z_1^{(c)} = \frac{4 \cdot 2,00 + 2,1}{5} = 2,02;$$

$$z_2^{(c)} = \frac{3 \cdot 0,65 + 0,504 + 0,693}{5} = 0,641;$$

$$z_3^{(c)} = \frac{2 \cdot 0,105 + 0,085 + 2 \cdot 0,100}{5} = 0,099;$$

$$z_4^{(c)} = \frac{3 \cdot 0,258 + 0,218 + 0,250}{5} = 0,248;$$

$$z_5^{(c)} = \frac{4 \cdot 1,225 + 1,075}{5} = 1,195.$$

Тогда координаты точки *7* выразятся следующим образом:

$$z_1^{(7)} = 2 \cdot 2,02 - 1,90 = 2,14;$$

$$z_2^{(7)} = 2 \cdot 0,641 - 0,693 = 0,589;$$

$$z_3^{(7)} = 2 \cdot 0,099 - 0,105 = 0,093;$$

$$z_4^{(7)} = 2 \cdot 0,248 - 0,258 = 0,238;$$

$$z_5^{(7)} = 2 \cdot 1,195 - 1,225 = 1,165.$$

Новая точка 7 вместе с оставшимися образует симплекс 1, 3, 4, 5, 6, 7 (таблица).

Номер опыта	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5	y
1	2,10	0,693	0,105	0,258	1,225	0,760
3	2,00	0,569	0,105	0,258	1,225	0,513
4	2,00	0,650	0,085	0,258	1,225	0,675
5	2,00	0,650	0,100	0,218	1,225	0,693
6	2,00	0,650	0,100	0,250	1,075	0,666
7	2,14	0,589	0,093	0,238	1,165	0,810

После проведения опыта в точке *7*, наихудшей точкой комплекса 1, 3, 4, 5, 6, 7, оказалась точка *3*. Ее отражение относительно грани 1, 4, 5, 6, 7 дает условия следующего опыта и т. д. После проведения седьмого опыта добавляется еще один фактор z_6 — число оборотов мешалки. До сих пор z_6 поддерживался на постоянном уровне $z_6^0 = 800$ об/мин. Тогда координаты точки *8* в безразмерном виде будут:

$$x_1^{(s)}, \quad x_2^{(s)}, \quad \ldots, \quad x_{k+1}^{(s)} + h_{k+1}.$$

За единицу варьирования принимается $\Delta z_6 = 100$ об/мин, за основной уровень — $z_6^0 = 800$ об/мин. Тогда формула кодирования для z_6 примет вид

$$x_6 = \frac{z_6 - 800}{100}; \quad x_6^{(s)} = 0.$$

Высоту шестимерного симплекса получим по формуле (V.142) $h = 0{,}764$. Определим значения факторов для опыта 8. Значения первых пяти факторов представляют координаты центра тяжести пятимерного симплекса 1, 3, 4, 5, 6, 7:

$$z_1^{(s)} = z_1^{(8)} = \frac{2{,}10 + 4 \cdot 2{,}0 + 2{,}14}{6} = 2{,}04;$$

$$z_2^{(s)} = z_2^{(8)} = 0{,}633; \quad z_3^{(s)} = z_3^{(8)} = 0{,}098;$$

$$z_4^{(s)} = z_4^{(8)} = 0{,}247; \quad z_5^{(8)} = 1{,}19;$$

$$z_6^{(8)} = 800 + 100\, x_6^{(8)} = 800 + 100 \left(x_6^{(s)} + h_6 \right) = 877 \text{ об/мин}.$$

Опыт 8 вместе с точками *1–7* образует уже шестимерный симплекс 1, 3, 4, 5, 6, 7, 8 (таблица).

После реализации восьмого опыта необходимо провести анализ результатов и возобновить процесс отражения уже с учетом шести факторов.

Номер опыта	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5	z_6	y
1	2,10	0,693	0,105	0,258	1,225	800	0,760
3	2,00	0,564	0,105	0,258	1,225	800	0,513
4	2,00	0,650	0,085	0,258	1,225	800	0,675
5	2,00	0,650	0,100	0,218	1,225	800	0,693
6	2,00	0,650	0,100	0,250	1,075	800	0,666
7	2,14	0,589	0,093	0,238	1,165	800	0,810
8	2,04	0,633	0,098	0,147	1,190	877	

12. Ортогональные насыщенные планы Плакетта — Бермана. Ортогональные насыщенные двухуровневые D-оптимальные планы можно построить, используя дробные реплики от ПФЭ для числа факторов $k = 3$ ($n = 4$), $k = 7$ ($N = 8$), $k = 15$ ($N = 16$), $k = 31$ ($N = 32$) и т. д. Однако класс ортогональных насыщенных планов может быть значительно расширен. Плакетт и Берман разработали строгую математическую теорию построения и анализа ортогональных планов. В частности, было доказано, что в насыщенном плане вычисленные по методу наименьших квадратов оценки эффектов имеют максимальную для данного числа опытов N точность, одинаковую для всех эффектов, если матрица планирования имеет ортогональные столбцы. Чтобы матрица была ортогональной, необходимо и достаточно, чтобы: 1) каждый фактор встречался на каждом своем уровне одно и то же число раз; 2) каждые два фактора с любой комбинацией их уровней встречались одно и то же число раз; 3) число опытов делилось на квадрат числа уровней, т. е.

$$N = nl^2, \tag{V.153}$$

где n — целое число.

При такой формулировке условий ортогональности проблема построения ортогональной матрицы (плана эксперимента) превращается в чисто комбинаторную проблему.

Если $N = nl^2$, то число факторов, эффекты которых можно вычислить при данном N, равно

$$k = (nl^2 - 1)/(l - 1) \qquad \text{(V.154)}$$

или целой его части.

Если число уровней для всех факторов равно двум, то задача построения оптимального плана сводится к построению ортогональной матрицы, состоящей из $+1$ и -1, размера $N \times N$, где N — число, кратное четырем, т. е. $N = 4n$. Максимальное число факторов, которое можно ввести в планирование, при этом равно $k = N - 1$.

Для построения насыщенных планов для $k = 11$, 19, 23 и 35 воспользуемся строками из табл. 54.

Таблица 54. **Комбинации знаков, используемые при построении насыщенных планов для** $k = 11$, 19, 23 и 35

k	N	Комбинации знаков
11	12	+ + − + + + − − − + −
19	20	+ + − − + + + + − + − + − − − − + + −
23	24	+ + + + + − + − + + − − + + − − + − + − − − −
35	36	− + − + + + − − − + + + + + − + + + − − +
		− − − − + − + + − − + −

При построении плана для $k = 11$ (см. пример 11) в качестве элементов первого столбца берется строка из табл. 54. Второй столбец получим из первого, заменив в нем первый элемент на последний и сдвинув соответственно вниз все остальные элементы. Третий столбец получим, заменив в первом столбце первые два элемента на последние и сдвинув вниз остальные элементы и т. д. Элементами последней строки служат -1. Аналогичным образом строятся планы для $k = 19$, 23 и 35. Для $k = 27$ при построении матрицы планирования используются три блока A, B и C, приведенные в табл. 55. Эти блоки выписываются в порядке круговой перестановки:

A	B	C
C	A	B
B	C	A

и к ним опять добавляется строка, все элементы которой -1.

Таблица 55. **Блоки для построения насыщенного ортогонального плана для** $k = 27$

A	B	C
+ − + + + + − − −	− + − − − + − − +	+ + − + − + + − +
+ + − + + + − − −	− − + + − − + − −	− + + + + − + + −
− + + + + + − − −	+ − − − + − − + −	+ − + − + + − + +
+ − − + − + + + +	− − + − + − − − +	+ − + + + − + − +
− − − + + − + + +	+ − − − − − + − −	+ + − − + + + + −
− − − − + + + + +	− + − + − − − + −	− + + + − + − + +
− + + − − − + − +	− − + − − + − + −	+ − + + − + + + −
+ + + − − − + + −	+ − − + − − − − +	+ + − + + − − + +
+ + + − − − − + +	− + − − + − + − −	− + + − + + + − +

Плакетт и Берман показали, как могут быть построены насыщенные планы до $N=100$ при N, кратном 4 (за исключением $N=92$). Применение планов Плакетта — Бермана позволяет получать раздельные оценки линейных эффектов всех факторов с максимально возможной при данном числе опытов точностью, одинаковой для всех эффектов. Любой коэффициент линейного уравнения регрессии определяется по формуле

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_{ji}\, y_i}{N}, \quad j = 1, 2, \ldots, k.$$

Погрешность в определении b_j при этом равна

$$s_{b_j} = s_{\text{воспр}}/\sqrt{N},$$

где $s_{\text{воспр}}$ — ошибка измерения.

Поскольку матрица планирования ортогональна, такая оценка линейных эффектов совпадает с оценкой, полученной по методу наименьших квадратов. Кроме того, вследствие ортогональности матрицы полученные оценки линейных эффектов не смешаны между собой.

Отношение b_j к $s_{\text{воспр}}/\sqrt{N}$ имеет распределение Стьюдента для нульгипотезы, т. е. истинного значения $\beta_j = 0$. Это отношение можно использовать для проверки значимости эффектов. Для проверки значимости различия между эффектами можно использовать отношение

$$t = \frac{b_u - b_j}{s_{\text{воспр}}\sqrt{2}/\sqrt{N}}, \qquad \text{(V.155)}$$

также имеющее распределение Стьюдента.

Пример 11. Исследовалась возможность получения азотно-фосфорно-калийного удобрения путем частичной замены поташа аммиаком при нейтрализации азотнокислотной вытяжки. Процесс нейтрализации можно охарактеризовать суммарной реакцией:

$$6Ca(NO_3)_2 + 3H_3PO_4 + 6NH_3 + 3K_2CO_3 = 3CaHPO_4 + 6NH_4NO_3 + 6KNO_3 + 3CaCO_3$$

При исследовании последовательной нейтрализации вытяжки аммиаком и поташем особый интерес представляло выяснение степени ретроградации усвояемых форм оксида фосфора (V). Поэтому показателем процесса (y) служила степень усвояемости образующихся фосфорных соединений (процентное отношение количества водорастворимых и лимоннорастворимых форм фосфора к общему количеству фосфора в продуктах реакции). В качестве независимых факторов были выбраны следующие: z_1 — температура аммонизации (25 ÷ 70°С); z_2 — продолжительность аммонизации (15 ÷ 30 мин); z_3 — норма аммиака (100 ÷ 150% от стехиометрической нормы); z_4, z_5, z_6, z_7 — содержание примесей в исходной вытяжке, соответственно 0 ÷ 3,16% $Mg(NO_3)_2$; 0 ÷ 0,89% $Fe(NO_3)_2$; 0 ÷ 0,56% $Al(NO_3)_3$; 0 ÷ 0,88% H_2SiF_6; z_8 — температура при взаимодействии компонентов аммонизированной вытяжки с раствором карбоната калия (25 ÷ 70°С); z_9 — продолжительность взаимодействия с карбонатом калия (30 ÷ 60 мин); z_{10} — норма карбоната калия (100 — 120% от стехиометрической нормы).

Постоянными оставались содержание в вытяжке P_2O_5(6,9%) и CaO (11%).

Р е ш е н и е. В качестве плана эксперимента использовали первые 10 столбцов плана Плакетта — Бермана (табл. 56).

Таблица 56. **Матрица планирования и результаты экспериментов**

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}	y
1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	19,15
2	+1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	34,44
3	+1	−1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	85,08
4	+1	+1	−1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	+1	92,88
5	+1	+1	+1	−1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	90,91
6	+1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	51,76
7	+1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	−1	+1	−1	101,33
8	+1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	−1	+1	101,34
9	+1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	−1	98,62
10	+1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	87,85
11	+1	−1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	84,49
12	+1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	89,89
b_j	78,19	15,13	−3,43	−2,83	8,40	7,84	7,96	2,64	−13,23	−7,01	2,91	
t_j	312,76	61,44	13,72	11,32	33,60	31,36	31,86	10,58	52,92	28,04	11,64	

Средние значения степени усвояемости $\bar{y}$ определены по двум параллельным опытам. Дисперсия воспроизводимости равна $s^2_{\text{воспр}} = 1{,}48$. Число степеней свободы $f_{\text{воспр}} = 12$. Табличное значение критерия Стьюдента $t_{0.05}(12) = 2{,}18$. Таким образом, все коэффициенты уравнения регрессии оказались значимыми и уравнение имеет вид

$$\hat{y} = 78{,}19 - 15{,}36\,x_1 - 3{,}43\,x_2 - 2{,}83\,x_3 + 8{,}40\,x_4 + 7{,}84\,x_5 + \\ + 7{,}96\,x_6 + 2{,}64\,x_7 - 13{,}23\,x_8 - 7{,}01\,x_9 + 2{,}91\,x_{10}. \qquad \text{(V.156)}$$

Так как план эксперимента был ненасыщенный ($N = 12$, $k = 10$), имеется одна степень свободы для проверки адекватности уравнения эксперименту. Дисперсия адекватности равна

$$s^2_{\text{ад}} = \frac{2\sum_{i=1}^{12}\left(\bar{y}_i - \hat{y}_i\right)}{12 - 11} = 4{,}26.$$

Значение F-отношения $F = s^2_{\text{ад}}/s^2_{\text{воспр}} = 2{,}88$.

Табличное значение критерия Фишера $F_{0.95}(1,12) = 4{,}8$.

Таким образом, уравнение адекватно эксперименту. Полученное уравнение регрессии позволяет определить условия, обеспечивающие получение на основе азотнокислотной вытяжки из фосфатов удобрений, содержащих весь фосфор в усвояемой форме.

При отсутствии параллельных опытов для оценки $\sigma_{\text{воспр}}$ можно использовать эффекты так называемых *мнимых факторов*. Мнимые факторы вводятся, если план ненасыщенный, т. е. $k < N - 1$. При этом свободным столбцам матрицы планирования можно поставить в соответствие некоторые мнимые факторы и подсчитать их эффекты по общему правилу, как для действительных факторов. Эти эффекты отличаются от нуля за счет ошибки в измерении y и неучтенных эффектов взаимодействия. Если b_{k+1}, b_{k+2}, b_{N-1} — эффекты мнимых факторов, то величина

$$s^2_{b_j} = \left(b^2_{k+1} + b^2_{k+2} + \ldots + b^2_{N-1}\right)\frac{1}{N-k-1}$$

служит оценкой квадратичной ошибки в определении эффектов главных факторов, а

$$s^2_{\text{воспр}} = N\left(b^2_{k+1} + b^2_{k+2} + \ldots + b^2_{N-1}\right)\frac{1}{N-k-1}$$

является оценкой квадратичной ошибки в измерении отклика, если считать, что эффекты взаимодействия отсутствуют.

Планы Плакетта — Бермана являются в ряде случаев более экономными планами по сравнению с дробными репликами для данной размерности факторного пространства.

13. Отсеивающие эксперименты. Метод случайного баланса. Для уменьшения числа опытов часто без достаточных оснований стабилизируют значения некоторых факторов в процессе исследования. При решении задачи оптимизации это приводит к определению только локальных экстремумов процесса. Для многофакторных задач на первой стадии исследования проводят *отсеивающие эксперименты.* Поскольку интенсивность влияния фактора связана с диапазоном его изменения, многие факторы, подозреваемые как существенные на основании априорной информации, могут оказаться незначимыми. Поэтому отсеивающие эксперименты эффективны не только при исследовании новых процессов, но и как первая стадия изучения многофакторных процессов с достаточной априорной информацией, если число факторов слишком велико, чтобы сразу планировать эксперимент, направленный на поиск оптимальных условий процесса. Для отсеивания количественных и качественных факторов при числе уровней, равном двум, можно использовать дробные реплики от факторного эксперимента достаточно высокой степени дробности, а также насыщенные ортогональные планы Плакетта — Бермана. Эти планы позволяют получать раздельные оценки линейных эффектов всех факторов с максимально возможной при данном числе опытов точностью, одинаковой для всех эффектов. Последнее особенно ценно на этапе отсеивания, так как неизвестно, какие эффекты окажутся значимыми. К недостаткам указанных планов относится требование отсутствия значимых эффектов взаимодействия.

Для выделения существенных эффектов — линейных и парных взаимодействий — Саттерзвайтом предложен *метод случайного баланса.* В этом методе план эксперимента предлагается делать *сверхнасыщенным* — число опытов N в матрице планирования меньше числа рассматриваемых эффектов, т. е. в начале исследования число степеней свободы $f<0$. Метод случайного баланса не обосновывается теоретически, а носит в основном эвристический характер. Основная предпосылка эффективного применения метода случайного баланса: среди большого числа рассматриваемых эффектов лишь несколько действительно существенно влияют на процесс, а все остальные могут быть при-

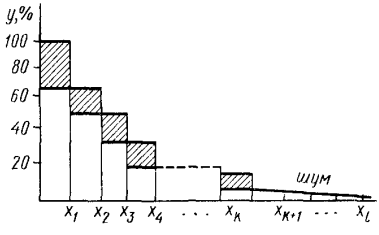


Рис. 54. Диаграмма ранжирования эффектов

знаны незначимыми и отнесены к шумовому полю. Если расположить эффекты в порядке убывания вносимого ими вклада в величины дисперсии выходного фактора, то получим *диаграмму ранжирования* (рис. 54). Эффекты, попавшие в правую часть диаграммы ранжирования, должны быть отнесены к шумовому полю. Отнесение части эффектов к шумовому полю позволяет расщепить исходную математическую модель:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \ldots + b_kx_k + b_{12}x_1x_2 + \\ + b_{13}x_1x_3 + \ldots + b_{k-1,\,k}\,x_{k-1}\,x_k + s_{\text{воспр}},$$

где $s_{\text{воспр}}$ — ошибка опыта.

Считая, что некоторые x_j обозначают парные взаимодействия, расщепленную модель можно записать в линейном виде:

$$y = b_0 + \sum_{j=1}^{l-m} b_jx_j + \sum_{j=1}^{m} c_j\,x_j' + u = b_0 + \sum_{j=1}^{l-m} b_j\,x_j + a,$$

где $l-m$ — число значимых эффектов; m — число эффектов, отнесенных к шумовому полю;

$$a = \sum_{j=1}^{m} c_j\,x_j' + u.$$

тогда

$$s_a^2 = \sum_{j=1}^{m} c_j^2\,s_{x_j'}^2 + s_{\text{воспр}}^2.$$

Оценка значимых коэффициентов будет производиться с большой ошибкой шумового поля s_a. В связи с этим метод случайного баланса обладает меньшей чувствительностью, чем ПФЭ или ДФЭ (под чувствительностью метода понимается способность выделять коэффициенты регрессии, значимо отличающиеся от нуля). Однако метод случайного баланса обладает большей разрешающей способностью: он позволяет выделить раздельно доминирующие эффекты среди очень большого числа эффектов.

Цель эксперимента методом случайного баланса состоит в том, чтобы распознать истинную диаграмму ранжирования и произвести расщепление модели. После этого план из сверхнасыщенного становится ненасыщенным по отношению к значимым эффектам, поэтому их можно оценить количественно обычным путем. Если же число действительно значимых эффектов велико, то экономии опытов за счет сверхнасыщенности не происходит. С увеличением числа значимых эффектов (особенно эффектов взаимодействия) эффективность метода случайного баланса падает. Чем круче будет убывать ранжировочная кривая, тем эффективнее будет отсеивание.

Чтобы совместные оценки эффектов были смешаны случайным образом, необходимо при построении матрицы планирования использовать какой-нибудь случайный механизм. Чаще всего факторы в методе слу-

чайного баланса варьируют на двух уровнях. Для построения матрицы планирования предлагается: 1) «чистый» случайный баланс, при котором выбор плана для каждого столбца не зависит от выбора для других столбцов; 2) случайное смешивание систематических дробных реплик факторного эксперимента. Чистый случайный баланс менее эффективен, его используют, если ближайшая степень двойки существенно увеличивает число пытов. Прежде чем использовать полученную таким образом матрицу планирования, необходимо убедиться в ее пригодности. Матрицу нельзя использовать, если в ней имеются полностью закоррелированные столбцы. Чем больше корреляция между столбцами, тем больше опасность выделения так называемых «ложных» эффектов. За меру оптимальности матриц планирования принимают следующие показатели: 1) число ортогональных столбцов; 2) минимум значения модуля коэффициента корреляции для всех возможных взаимодействий (линейных — парных, парных — парных); 3) условие $\sum_{i=1}^{N} x_i = 0$ для всех факторов.

По этим критериям на ЭВМ в результате случайного смешивания реплик 2^{5-1}, 2^{6-1} и случайного выбора столбцов были получены матрицы планирования, представленные в табл. 57 и в табл. 8, 9 приложения. Эти матрицы также можно использовать для меньшего числа факторов.

Рассмотрим в качестве примера задачу выделения значимых эффектов среди 14 линейных и 91 эффекта взаимодействия ($k = 14$). Матрица планирования и результаты эксперимента приведены в табл. 57. В матрице планирования коэффициент корреляции r^* для столбцов 1—4 равен нулю, для столбцов 1—10 $r^* \leqslant 0{,}517$, для столбцов 1—14 $r^* \leqslant 0{,}7$.

Для визуального выделения значимых факторов по результатам эксперимента строят *диаграмму рассеяния* (рис. 55). На первом этапе обработки экспериментов диаграмму рассеяния строят только для линейных эффектов. Эффект признается значимым, если он имеет большое

Таблица 57. **Матрица планирования в методе случайного баланса**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}	x_{11}	x_{12}	x_{13}	x_{14}	y	y^{I}	y^{II}	y^{III}	y^{IV}	y^{V}	y^{VI}
1	−	−	+	+	+	−	+	−	+	−	+	+	−	+	38,03	38,03	38,03	38,03	36,03	36,03	34,93
2	+	−	−	+	−	−	−	−	−	+	−	−	−	+	58,0	38,0	33,0	37,6	73,6	36,5	36,5
3	−	+	−	+	+	−	−	+	+	+	+	−	+	−	46,59	46,59	34,79	34,79	34,79	34,65	34,65
4	+	+	+	+	+	+	−	−	+	+	−	+	−	+	78,63	40,63	33,83	38,43	36,43	35,33	34,23
5	−	−	−	−	−	+	+	+	−	−	+	−	−	−	65,41	47,41	35,61	35,61	35,61	34,51	34,51
6	+	−	+	−	+	+	+	−	+	+	+	−	+	+	81,75	43,75	31,95	36,55	34,55	35,51	34,41
7	−	+	+	−	−	+	+	−	+	+	−	+	+	−	59,81	41,81	35,81	36,81	34,81	35,77	34,07
8	+	+	−	−	−	−	−	+	−	−	+	−	−	−	58,39	38,39	33,39	37,99	35,99	35,99	35,99
9	−	−	+	−	−	+	−	+	−	+	+	+	+	+	58,99	40,99	40,99	40,99	38,99	38,85	37,75
10	+	−	−	−	−	+	−	−	−	−	−	−	+	+	72,15	34,15	34,15	34,15	34,15	34,01	34,01
11	−	+	−	−	+	−	+	−	+	−	−	−	−	−	43,0	43,0	36,2	36,2	34, 2	33,1	33,1
12	+	+	+	−	+	−	−	−	−	−	−	−	+	−	70,37	50,37	38,57	38,57	36,57	36,43	35,33
13	−	−	−	+	+	+	−	+	−	+	+	+	+	−	54,0	36,0	29,2	33,8	31,8	32,76	32,76
14	+	−	+	+	−	−	+	+	+	−	+	+	−	−	59,85	39,85	33,05	37,65	35,65	34,55	33,45
15	−	+	+	+	−	−	+	+	+	+	−	+	+	+	29,51	29,51	29,51	34,11	34,11	35,07	33,97
16	+	+	−	+	+	+	+	+	−	−	−	+	−	+	74,43	36,43	31,43	36,03	36,03	34,93	34,93

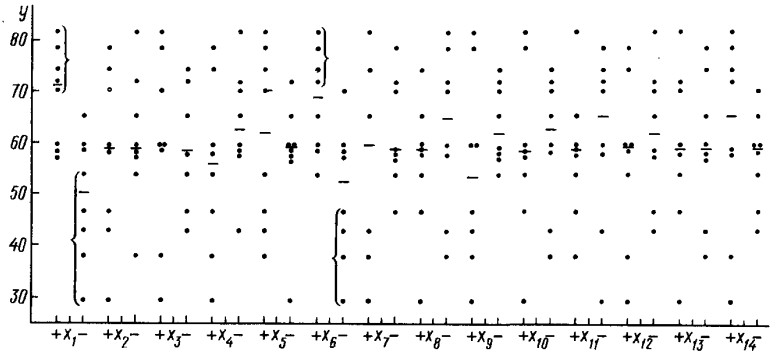


Рис. 55. Диаграмма рассеяния результатов наблюдений по уровням факторов

различие между медианами ΔMe. Однако этот критерий недостаточен, поскольку он не является однозначным. Эффект признается значимым, если он также имеет большое число выделившихся точек, расположенных выше (ниже) концов интервала изменения значений y для другого уровня фактора. При оценке значимости факторов по числу выделившихся точек можно использовать непараметрическую оценку вероятности p того, что из $2n = N$ точек в верхней и нижней части диаграммы рассеяния может выделиться случайно R точек:

$$p = \frac{C_{2n-R}^{n} + \sum_{l=1}^{R} C_{2n-1-R}^{n-1-l}}{C_{2n}^{n} - C_{2n-2}^{n-1}}. \qquad \text{(V.157)}$$

Для упрощения расчетов в качестве критерия значимости факторов можно использовать произведение разности между медианами на число выделившихся точек $g = |\Delta MeR|$. Использовав этот критерий, по диаграмме рассеяния (рис. 55) отобрали для количественной оценки факторы x_1, x_6, x_9. Количественная оценка при ручной обработке результатов проводится при помощи таблиц с несколькими входами. Чем больше входов у таблицы, тем точнее оценивается эффект. Однако сверхнасыщенный план часто не дает возможности заполнить все клетки таблицы. Такая ситуация возникла при построении таблицы с тремя входами для факторов x_1, x_6 и x_9 (табл. 58).

Поэтому пришлось ограничиться построением таблиц с двумя входами (табл. 59).

По данным табл. 59 определим коэффициенты уравнения регрессии b_1 и b_6:

$$b_1 = \left(\frac{\bar{y}_1 + \bar{y}_3}{2} - \frac{\bar{y}_2 - \bar{y}_4}{2} \right) : 2 = 9{,}86;$$

$$b_6 = \left(\frac{\bar{y}_1 + \bar{y}_2}{2} - \frac{\bar{y}_3 + \bar{y}_4}{2} \right) : 2 = 8{,}86.$$

Таблица 58. **Таблица с тремя входами для оценки линейных эффектов факторов x_1, x_6 и x_9**

	x_6^+		x_6^-	
	x_1^+	x_1^-	x_1^+	x_1^-
x_9^+	78.63 81,75	59,81	59,85	38,03 46,59 43,0 29,51
x_9^-	72,15 74,43	65,41 58,99 54,0	58,0 58,39 70,37	

Таблица 59. **Таблица с двумя входами для оценки линейных эффектов факторов x_1 и x_6**

	x_1^+	x_1^-		x_1^+	x_1^-
x_6^+	78,63 81,75 72,15 74,43	65,41 59,81 58,99 54,0	x_6^-	58,0 58,39 70,37 59,85	38,03 46,59 43,0 29,51
	$\bar{y}_1 = 76{,}74$	$\bar{y}_2 = 59.65$		$\bar{y}_3 = 61{,}65$	$\bar{y}_4 = 39{,}28$

Для проверки значимости j-го эффекта используют критерий Стьюдента:

$$t_{x_j} = \frac{b_j 2}{s_p}, \qquad \text{(V.158)}$$

где

$$s_p = s_w \sqrt{\sum_i 1/n_i}, \qquad \text{(V.159)}$$

n_i — число наблюдений в i-й клетке; s_w^2 — остаточная дисперсия, вычисленная на основании данных по рассеянию относительно средних арифметических в каждой клетке. Число степеней свободы $f_w = \Sigma n_i - a$, где a — число средних арифметических в таблице.

Для табл. 59 имеем

$$s_p = 5{,}6 \sqrt{4 \cdot \frac{1}{4}} = 5{,}6.$$

Табличное значение критерия Стьюдента $t_{0,05}(12) = 2{,}18$

$$t_1 = \frac{2 \cdot 9{,}86}{5{,}6} = 3{,}5 > 2{,}18; \quad t_6 = \frac{2 \cdot 8{,}86}{5{,}6} = 3{,}1 > 2{,}18.$$

Таким образом, оба коэффициента значимы.

Далее снимают эффекты значимых факторов для выявления более слабых эффектов. Для этого вычитают значения $2b_j$ из всех значений y, для которых фактор x_j находился на уровне $+1$. Так, при снятии эффекта фактора x_1 вычли значение $2 \cdot 9{,}86$ из y_2, y_4, y_6, y_8, y_{10}, y_{12}, y_{14}, y_{16}, а при снятии эффекта фактора x_6 вычли значение $2 \cdot 8{,}86$ из y_4, y_5, y_6, y_7, y_9, y_{10}, y_{13}, y_{16}. Полученные результаты значений y^1 приведены в табл. 57. Затем всю обработку опытных данных повторяют, начиная с построения диаграммы рассеяния для откорректированных значений y. Критерием для окончания отсева служит дисперсионное отношение

$$F = s^2_{ср} / s^2_{воспр},$$

где $s^2_{ср}$ — дисперсия результатов относительно среднего арифметического этих результатов.

В рассматриваемом примере пришлось повторять весь цикл семь раз, выделенные эффекты и их оценки приведены в табл. 60.

Таблица 60. **Сводная таблица результатов отсенвающего эксперимента**

Номер этапа	Выделенные эффекты	Оценка коэффициентов регрессии	Дисперсия $s^2_{ср}$	Номер этапа	Выделенные эффекты	Оценка коэффициентов регрессии	Дисперсия $s^2_{ср}$
I	x_1	9,86	214,6	V	x_{13}	−0,48	2,84
	x_6	8,86			x_2x_5	+0,55	
II	x_1x_3	3,14	27,36	VI	x_3	0,55	2,08
	x_6x_7	2,53					
III	x_6x_5	−2,31	10,45	VII	x_7	−0,25	1,73
					x_9	−0,4	
IV	x_6x_{10}	1,0	3,89				

Дисперсия воспроизводимости $s^2_{воспр} = 0{,}48$, $f_{воспр} = 5$. Вычисленное значение F-критерия

$$F = 1{,}73/0{,}48 = 3{,}62$$

меньше табличного $F_{0,95}(15,5) = 4{,}6$.

Следовательно, различие между дисперсиями $s^2_{ср}$ и $s^2_{воспр}$ незначимо.

Ручная обработка результатов в методе случайного баланса чрезвычайно трудоемка. Предложен алгоритм обработки результатов случайного баланса на ЦВМ, так называемая «ветвящаяся стратегия». Разработан алгоритм для выделения наибольших эффектов по диаграммам рассеяния. Этот этап не вносит ничего нового по сравнению с ручной обработкой. Для количественной оценки выделенных эффектов используют обычный регрессионный анализ. Можно одновременно оценивать до двадцати коэффициентов регрессии. На этом этапе вносится уже существенное улучшение. Если оценивать вместо трех сразу двадцать эффектов, то остаточная дисперсия резко уменьшается и тем самым увеличивается чувствительность метода. Выделение значимых эффектов производят в два этапа. Сначала отсеивают эффекты, отличающиеся от нуля менее чем на $3s$, в противном случае последующее отсеивание

методом ветвящейся стратегии превратилось бы в громоздкую задачу. Затем оставшиеся эффекты исключают при помощи ветвящейся стратегии; в качестве критерия используют величину остаточной дисперсии. Смысл ветвящейся стратегии состоит в том, что эффекты исключаются последовательно во всех возможных комбинациях по одному, по два и т. д. Этот процесс вторичного отсеивания продолжается до тех пор, пока не будет отобрана группа эффектов, обеспечивающая минимум остаточной дисперсии. Если учесть коррелированность коэффициентов регрессии (вследствие неортогональности матрицы планирования), то ясно, что ветвящаяся стратегия имеет несомненные преимущества перед раздельной оценкой коэффициентов регрессии при помощи t-критерия. При раздельной оценке часто выделяются ложные эффекты. Весь процесс отсеивания повторяется несколько раз до тех пор, пока остаточная дисперсия не снизится до необходимой величины.

14. Планирование эксперимента при определении констант уравнений формальной кинетики. В настоящее время интенсивно развивается новое направление по применению статистических методов для изучения механизма и определения кинетических констант сложных химических реакций. Рассмотрим наиболее простые приемы, основанные на использовании идей и методов планирования экстремальных экспериментов для определения констант уравнений формальной кинетики. Наибольшее распространение получил способ обработки кинетических данных, заключающийся в линеаризации кинетических зависимостей при помощи специальных преобразований. Например, скорость реакции

$$\sum_{i=1}^{m} a_i A_i \rightarrow \sum_{j=1}^{n} b_j B_j, \qquad (V.160)$$

где A_i и B_j — исходные вещества и продукты реакции соответственно; a_i и b_j — стехиометрические коэффициенты; можно описать формальным уравнением

$$W = K \prod_{i=1}^{m} [A_i]^{p_i}, \qquad (V.161)$$

где K — константа скорости реакции; p_i — порядок реакции по i-му веществу; $[A_i]$ — концентрация i-го вещества.

Если зависимость константы скорости от температуры подчиняется закону Аррениуса, то имеем

$$K = K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right), \qquad (V.162)$$

где K_0 — предэкспоненциальный множитель; E — энергия активации; R — газовая постоянная; T — абсолютная температура.

Логарифмирование уравнения (V.161) с учетом (V.162) дает

$$\ln W = \ln K_0 - \frac{E}{RT} + \sum_{i=1}^{m} p_i \ln [A_i]. \qquad (V.163)$$

Обозначив переменные следующим образом:

$$\begin{aligned} &\ln W = \hat{y}, && \ln K_0 = a_0, \\ &\ln 1/T = Z_1, && -E/R = a_1, \\ &\ln [A_1] = Z_2, && p_1 = a_2, \\ &\cdots\cdots && \cdots\cdots \\ &\ln [A_m] = Z_{m+1}, && p_m = a_{m+1}, \end{aligned} \qquad \text{(V.164)}$$

получим линейное уравнение

$$\hat{y} = a_0 + \sum_{i=1}^{m+1} a_i z_i. \qquad \text{(V.165)}$$

Для определения коэффициентов уравнения (V.165) методом планирования экспериентов можно использовать линейные ортогональные планы с числом опытов $N \geqslant m+2$.

Пример 12. Исследовалась кинетика процесса сополимеризации α, β, β-трифторстирола с метакриловой кислотой при небольших степенях превращения исходных мономеров в полимер. Уравнение формальной кинетики процесса рассматривалось в следующем виде:

$$W = K [C_1 + C_2]^{n_1} [И]^{n_2}, \qquad \text{(V.166)}$$

где $[C_1]$ и $[C_2]$ – концентрации исходных мономеров, моль/л; $[И]$ – концентрации инициатора (перекиси бензоила), моль/л; n_1 и n_2 – порядок реакции по суммарной концентрации мономеров и инициатору; E – энергия активации, кДж/моль; K – суммарная константа скорости реакции.

Уравнение (V.166) позволяет определить порядок реакции относительно суммарной концентрации мономеров и инициатора, энергию активации и константу скорости реакции. Константа скорости реакции K зависит от температуры по уравнению (V.162). В эксперименте суммарная концентрация исходных мономеров изменялась в диапазоне 8,08 ÷ ÷ 11,18 моль/л, концентрация инициатора – в диапазоне 0,0504 ÷ 0,1512 моль/л, температура реакции 60 ÷ 80°С.

Р е ш е н и е. Логарифмируя уравнения (V.166) с учетом (V.162), получим

$$\lg W = \lg K_0 + n_1 \lg [C_1 + C_2] + n_2 \lg [И] - \frac{E}{R} \lg e \frac{1}{T}, \qquad \text{(V.167)}$$

или в общем виде:

$$\hat{y} = a_0 + a_1 z_1 + a_2 z_2 - a_3 z_3, \qquad \text{(V.168)}$$

где $\hat{y} = \lg W$, $a_0 = \lg K_0$, $a_1 = n_1$, $a_2 = n_2$,

$$a_3 = +\frac{E}{R} \lg e, \quad z_1 = \lg [C_1 + C_2], \quad z_2 = \lg [И] \quad \text{и} \quad z_3 = 1/T.$$

В качестве плана эксперимента выбран ПФЭ 2^4. Безразмерные факторы x_j связаны с z_j линейным преобразованием (V.3). Координаты центра плана и интервалы варьирования приведены в таблице (см. с. 249).

В соответствии с планом эксперимента (табл. 61) были получены кинетические кривые зависимости степени превращения исходных мономеров в полимер от времени. Зависимость степени превращения q от времени аппроксимировалась линейным уравнением регрессии

$$q = d_0 + d_1 t,$$

	Логарифм суммариой концентрации исходных мономеров z_1	Логарифм коицентрации инициатора z_2	Температура z_3, K^{-1}
Интервалы варьирования Δz_j	0,0703	0,2380	0,00008
Координаты центра плана z_j^0	0,9777	−1,0591	0,00292

коэффициенты которого определялись методом наименьших квадратов. По этому уравнению определялась начальная скорость реакции W_0 как произведение коэффициента d_1 на исходную суммарную концентрацию мономеров. Ошибка воспроизводимости, полученная по параллельным опытам, равна $s_{\text{воспр}} = 5{,}43 \cdot 10^{-2}$, $f_{\text{воспр}} = 8$.

Таблица 61. **Матрица планирования процесса сополимеризации α, β, β-трифторстирола с метакриловой кислотой**

Номер опыта	Условия проведения эксперимента в натуральном масштабе			Скорость сополимеризации $W \cdot 10^3$, $\frac{\text{моль}}{\text{л} \cdot \text{с}}$	Значение факторов в безразмерной системе координат				Логарифм начальной скорости (среднее по двум опытам) $y = \lg W_0$
	суммарная концентрация исходных мономеров z_1, моль/л	концентрация инициатора перекиси бензоила z_2, моль/л	температура реакции z_3, °С		x_0	x_1	x_2	x_3	
1	11,18	0,0504	60	1,11	+	+	−	−	$\bar{3}$,0453
2	8,08	0,0504	60	0,76	+	−	−	−	$\bar{4}$,8808
3	11,18	0,0504	80	6,60	+	+	−	+	$\bar{3}$,8195
4	8,08	0,0504	80	4,46	+	−	−	+	$\bar{3}$,6776
5	11,18	0,1512	60	1,85	+	+	+	−	$\bar{3}$,2672
6	8,08	0,1512	60	1,29	+	−	+	−	$\bar{3}$,1106
7	11,18	0,1512	80	11,30	+	+	+	+	$\bar{2}$,0531
8	8,08	0,1512	80	8,17	+	−	+	+	$\bar{3}$,9122

Коэффициенты линейного уравнения регрессии

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 \qquad \text{(V.169)}$$

были определены по формуле (V.9). По результатам эксперимента (табл. 61) имеем

$$b_0 = -2{,}5292, \quad b_1 = 0{,}075, \quad b_2 = 0{,}115, \quad b_3 = 0{,}3948.$$

Ошибка коэффициентов b_j, определенная по формуле (V.14), составляет

$$s_{b_j} = \frac{s_{\text{воспр}}}{\sqrt{Nm}} = \frac{5{,}43 \cdot 10^{-2}}{\sqrt{2 \cdot 8}} = 1{,}35 \cdot 10^{-2}.$$

Проверка значимости коэффициентов по критерию Стьюдента показала, что все коэффициенты значимо отличаются от нуля, так как для всех коэффициентов t-отношение больше $t_{\text{табл}} = 2{,}31$. Уравнение (V.169) адекватно эксперименту:

$$s^2_{\text{ад}} = \frac{2 \sum_{i=1}^{8} \left(\lg W_i - \lg \hat{W}_i \right)^2}{8 - 4} = 9 \cdot 10^{-3}.$$

Дисперсионное отношение

$$F = \frac{s^2_{\text{ад}}}{s^2_{\text{воспр}}} = \frac{9 \cdot 10^{-3}}{2{,}96 \cdot 10^{-3}} = 3{,}1$$

меньше табличного $F_{0{,}95}(4,8) = 3{,}8$. В соответствии с (V.169) и (V.168)

$$n_1 = \frac{b_1}{\Delta z_1} = \frac{0{,}075}{0{,}0703} = 1{,}05 \approx 1,$$

$$n_2 = \frac{b_2}{\Delta z_2} = \frac{0{,}115}{0{,}238} = 0{,}49 \approx 0{,}5,$$

$$E = -\frac{b_3 R}{\Delta z_3 \lg e} = \frac{0{,}3948}{8 \cdot 10^{-5}} 1{,}987 \cdot 10^{-3} \cdot 2{,}3 \cdot 4{,}186 = 89{,}67 \text{ кДж/моль},$$

$$a_0 = \lg K_0,$$

$$a_0 = b_0 + b_1 \frac{z_1^0}{\Delta z_1} + b_2 \frac{z_2^0}{\Delta z_2} + b_3 \frac{z_3^0}{\Delta z_3} = 10{,}5123 \text{ и } K_0 = 0{,}3253 \cdot 10^{11}.$$

Уравнение формальной кинетики сополимеризации α, β, β-трифторстирола с метакриловой кислотой на начальной стадии реакции имеет вид

$$W = 0{,}3253 \cdot 10^{11} [C_1 + C_2] [H]^{0,5} e^{-\frac{89{,}67}{RT}}. \qquad \text{(V.170)}$$

Воспользовавшись свойствами ортогональности использованного плана эксперимента, определим среднеквадратичные ошибки полученных констант:

$$s_{n_1} = \frac{s_{b_1}}{\Delta z_1} = \frac{1{,}35 \cdot 10^{-2}}{0{,}0703} = 0{,}193,$$

$$s_{n_2} = \frac{s_{b_2}}{\Delta z_2} = \frac{1{,}35 \cdot 10^{-2}}{0{,}238} = 0{,}057, \qquad \text{(V.171)}$$

$$s_E = \frac{s_{b_3}}{\Delta z_3} \frac{R}{\lg e} = \frac{1{,}35 \cdot 10^{-2} \cdot 0{,}00198 \cdot 2{,}3 \cdot 4{,}186}{0{,}00008} = 0{,}323,$$

$$s_{\lg K_0} = \sqrt{s^2_{b_0} + \frac{(z_1^0)^2 s^2_{b_1}}{\Delta z_1^2} + \frac{(z_2^0)^2 s^2_{b_2}}{\Delta z_2^2} + \frac{(z_3^0)^2 s^2_{b_3}}{\Delta z_3^2}} =$$

$$= 1{,}35 \sqrt{1 + \frac{(0{,}977)^2}{(0{,}0703)^2} + \frac{(-1{,}0591)^2}{(0{,}238)^2} + \frac{(0{,}00292)^2}{(0{,}00008)^2}} = 0{,}53.$$

Из (V.171) следует, что ошибки констант зависят от интервалов варьирования факторов. За счет расширения интервалов варьирования можно уменьшить ошибки определения констант.

Рассмотренный метод линеаризации кинетических уравнений приводит к получению смещенных оценок для констант, так как константы определяются из условия минимума квадратичной формы:

$$\Phi_1 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \hat{y}_i\right)^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(\lg W_i - \lg \hat{W}_i\right)^2,$$

а не из

$$\Phi_2 = \sum_{i=1}^{n} \left(W_i - \hat{W}_i\right)^2.$$

Кроме того, зависимость (V.161) достаточно формальна. Опираясь на стадийный механизм реакций, было предложено определять константы скоростей каждой стадии из условия минимума квадратов отклонений

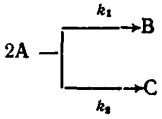
$$\Phi_3 = \sum_{j=1}^{m} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{s_{c_j}^2} \left(c_{ji} - \hat{c}_{ji}\right)^2, \qquad \text{(V.172)}$$

где n — число опытов; m — число компонентов; s_{c_j} — ошибка воспроизводимости определения концентрации j-го компонента.

Установлено, что при определении концентраций веществ без систематической ошибки оценки констант, минимизирующие квадратичную форму Φ_3, будут несмещенными. Вычисление концентраций $\hat{c}_{ij}$ производится или на основе интегральной формы кинетического уравнения, или численным интегрированием системы кинетических уравнений.

Минимум квадратичной формы Φ_3 определяют каким-либо методом нелинейного программирования. Сходимость решения зависит от начального приближения.

Для реакций, кинетика которых описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений с правыми частями в виде полиномов по концентрациям реагирующих веществ, предлагается для получения оценок констант пользоваться дифференциальными уравнениями, а не их интегральными формами. Например, для последовательно-параллельной реакции вида



$$B + A \xrightarrow{k_3} D \xrightarrow{k_4} E \qquad \text{(V.173)}$$

система кинетических уравнений имеет вид

$$W_1 = \frac{d[A]}{dt} = (k_1 + k_2)[A]^2 + k_3[A][B],$$

$$W_2 = \frac{d[B]}{dt} = k_1[A]^2 - k_3[A][B],$$

$$W_3 = \frac{d[C]}{dt} = k_2[A]^2, \qquad \text{(V.174)}$$

$$W_4 = \frac{d[D]}{dt} = k_3[A][B] - k_4[D],$$

$$W_5 = \frac{d[E]}{dt} = k_4[D].$$

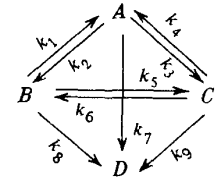
Из (V.174) следует, что уравнения кинетики для рассматриваемого класса реакций в общем виде соответствуют квадратичному полиному, обычно применяющемуся для описания почти стационарной области:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_j b_j x_j + \sum_{u<j} b_{uj} x_u x_j + \sum_j b_{jj} x_j^2, \qquad (V.175)$$

в котором независимыми факторами x являются концентрации реагирующих веществ, а откликом y — скорость образования того или иного компонента. Константы скоростей реакций первого порядка интерпретируются при таком подходе как линейные эффекты b_j, константы скоростей смешанного второго порядка — как эффекты взаимодействия b_{uj} и константы скоростей реакции второго порядка — как квадратичные эффекты — b_{jj}. Если схема реакций заранее неизвестна, но известны все те вещества, которые могут участвовать в реакции, то план эксперимента составляется так, чтобы по результатам опытов можно было найти независимые оценки всех коэффициентов полиномов второго порядка. Далее проводится проверка значимости коэффициентов и определяется схема реакции.

При протекании реакции концентрации действующих веществ непрерывно меняются, поэтому при планировании эксперимента в качестве факторов берут начальные концентрации реагентов, а в качестве отклика — начальные скорости реакции. Для определения последних обычно проводят графическое или численное дифференцирование начальных участков кинетических кривых или обрабатывают данные, полученные на проточно-циркуляционных установках.

Пример 13. Изучалась кинетика реакций каталитического окислительного дегидрирования бутенов в дивинил. На основании предварительных исследований был принят механизм реакций, в котором исключены обратные превращения дивинила в бутилены,



Здесь *A, B, C, D* соответственно бутен-1; *транс*-бутен-2; *цис*-бутен-2, дивинил.

При изучении кинетики реакций окислительного дегидрирования был установлен нулевой порядок по кислороду и первый порядок по бутиленам; специальными опытами было доказано отсутствие тормозящего влияния продуктов реакции. Кинетика реакций представлена системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{d[A]}{dt} = -(k_1 + k_3 + k_7)[A] + k_2[B] + k_4[C],$$
$$\frac{d[B]}{dt} = -(k_1 + k_5 + k_8)[B] + k_1[A] + k_6[C], \qquad (V.176)$$

$$\frac{d[C]}{dt} = -(k_4 + k_6 + k_9)[C] + k_3[A] + k_5[B],$$

$$\frac{d[D]}{dt} = k_7[A] + k_8[B] + k_9[C],$$

где $k_i (i = 1, 2, \ldots, 9)$ – константы скоростей псевдомономолекулярных реакций; [A], [B], [C], [D] – концентрации реагентов в газовой фазе.

Таким образом, необходимо определить по экспериментальным данным константы скоростей девяти реакций и показать, что система (V.176) адекватно описывает кинетику реакций.

Р е ш е н и е. Обозначим начальные концентрации веществ A, B, C через z_1, z_2, z_3 соответственно. Рассматривая скорости накопления веществ как отклики y_u, а начальные концентрации как независимые факторы, получим из (V.176)

$$y_u = b_{0_u} + b_{1_u} x_1 + b_{2_u} x_2 + b_{3_u} x_3, \quad u = 1,2,3,4. \qquad \text{(V.177)}$$

Переменные x_1, x_2, x_3 связаны с начальными концентрациями обычным линейным преобразованием

$$x_j = \left(z_j - z_j^0\right)/\Delta z_j.$$

Свободный член в уравнении (V.177) связан с линейными членами:

$$b_{0_u} = b_{1_u}\frac{z_1^0}{\Delta z_1} + b_{2_u}\frac{z_2^0}{\Delta z_2} + b_{3_u}\frac{z_3^0}{\Delta z_3}. \qquad \text{(V.178)}$$

Кинетику дегидрирования бутенов исследовали при различных температурах. Для каждой температуры составлялась своя матрица планирования. Рассмотрим кинетический эксперимент при $T = 669$ К. Область исследования приведена в таблице (z – концентрация бутенов, мол. доли):

	z_1	z_2	z_3
z_j^0	0,01500	0,01158	0,00993
Δz_j	0,00500	0,00386	0,00331

Для каждой функции отклика (V.176) нужно найти только три коэффициента. Поэтому при планировании достаточно взять ½ от ПФЭ 2^3. Здесь, однако, использован ПФЭ типа 2^3 (табл. 62), так как это позволяет точнее определить константы скоростей реакций и более подробно анализировать отклонения величин, предсказанных уравнениями, от опытных данных.

Для определения дисперсии воспроизводимости некоторые опыты дублировали.

Таблица 62. **Матрица планирования для исследования кинетики дегидрирования бутенов**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	y_1	y_2	y_3	y_4
1	−1	−1	−1	−0,288	0,046	0,003	0,272
2	−1	−1	+1	−0,263	0,077	−0,102	0,255
3	−1	+1	−1	−0,286	−0,124	0,041	0,257
4	+1	−1	−1	−0,737	0,068	0,033	0,370
5	+1	+1	+1	−0,678	−0,063	−0,060	0,426
6	+1	+1	−1	−0,725	−0,043	0,058	0,342
7	+1	−1	+1	−0,705	0,124	−0,130	0,356
8	−1	+1	+1	−0,276	−0,139	−0,180	0,262

Скорость накопления веществ y (мол. доли/с) определяли по формулам:

$$y_1 = \frac{[A]_\tau - [A]_0}{\tau}, \quad y_2 = \frac{[B]_\tau - [B]_0}{\tau},$$
$$y_3 = \frac{[C]_\tau - [C]_0}{\tau}, \quad y_4 = \frac{[D]_\tau - [D]_0}{\tau}. \qquad (V.179)$$

Здесь индекс «0» относится к начальным концентрациям бутенов, а индекс τ — к концентрациям, соответствующим времени τ. Таким образом, начальные участки кинетических кривых были аппроксимированы прямой линией. При этом вычисляемые оценки скоростей накопления реагентов будут смещенными, причем смещения зависят от скорости реакции. Чем более активно в химическом отношении реагирующее вещество, тем большее смещенне будут иметь соответствующие константы скорости. В таблице приведены значения констант и их ошибок, полученные по данным планированного эксперимента и методом нелинейных оценок (МНО).

	Константы скоростей, $с^{-1}$								
	k_1	k_2	k_3	k_4	k_5	k_6	k_7	k_8	k_9
По плану	7,128	0,74	6,62	5,60	3,47	2,57	10,80	1,08	2,90
По МНО	9,07	0,75	9,38	6.51	3,64	2,58	29,59	1,11	3,10
$s(k)$	1,8	2,6	1,8	3,5	2,6	3,5	1,8	2,6	3,5

Сравнение констант скоростей с их ошибками показывает, что ряд констант не выделяется на фоне шума. Для уменьшения ошибок констант необходимо увеличнть интервалы варьирования. Оценки полученных констант были уточнены методом нелинейных оценок (МНО). Согласно этому методу константы скоростей реакций должны быть подобраны таким образом, чтобы была минимальной сумма квадратов отклонений (V.172). Концентрации $\hat{c}_{ij}$ получены интегрированием системы (V.176) от $t = 0$ до $t = \tau$ при начальных условнях (см. таблицы на с. 253). Суммирование проводилось по всем опытам, причем слагаемые входили с равными массами, так как было доказано что ошибки воспроизводимости концентраций всех веществ однородны. В качестве начального приближения были использованы константы, определенные по плану. Затем по критерию Фишера была проверена адекватность математической модели (V.176) эксперименту:

$$s^2_{ост} = \frac{\Phi(k)_{min}}{8 \cdot 4 - 9},$$

где $\Phi(k)_{min}$ — остаточная сумма квадратов отклонений.

Отношение остаточной дисперсии к дисперсии воспроизводимости близко к единице, что указывает на адекватность системы (V.176).

15. Планирование эксперимента в производственных условиях. В производственных условиях на показатели процесса помимо основного комплекса факторов, исследованных в лабораторных условиях, влияет также множество факторов, контролировать которые трудно или невозможно. Это приводит к тому, что оптимальные условия, найденные в лабораториях, часто не воспроизводятся в промышленности, а также к дрейфу координат оптимума в ходе эксплуатации объекта. В связи с этим необходимо периодически проводить эксперимент непосредственно на промышленном объекте для уточнения координат оптимума.

Возможности экспериментирования на действующих промышленных установках, как правило, ограничены: в отличие от лабораторного

эксперимента в производстве экспериментирование поставлено в жесткие условия, факторы можно варьировать только таким образом (обычно в пределах, допускаемых регламентом), чтобы это не привело к получению бракованной продукции. В производственных условиях значительно больше, чем в лабораторных, ошибка опыта, выше уровень «шума». Однако в отличие от лабораторных условий, где стараются минимизировать число опытов, в промышленном эксперименте нет такой необходимости уменьшать число опытов. Поэтому для уменьшения ошибки можно дублировать опыты для выделения слабого полезного сигнала на фоне шума.

Задача планирования промышленных экспериментов — путем осторожных изменений процесса, не приводящих к браку, получить одновременно с продукцией и информацию о смещении оптимума процесса и затем на основании этой информации перейти к новым оптимальным условиям. Такая методика промышленного эксперимента получила название метода эволюционного планирования (ЭВОП) или адаптационной оптимизации. Метод был предложен Боксом и представляет собой использование методов экстремальных экспериментов в промышленных условиях.

Факторы варьируют на двух уровнях, реализуя полный факторный эксперимент или дробную реплику от него с включением опыта в центре плана. Такой эксперимент называют *циклом*. Поскольку интервалы варьирования факторов в промышленном эксперименте невелики, а ошибка опыта большая, после реализации одного цикла, как правило, значимых эффектов выделить не удается. Поэтому циклы повторяют несколько раз. При этом происходит накопление результатов наблюдений, что дает возможность уменьшить ошибку, так как ошибка среднего в $\sqrt{n}$ раз меньше ошибки единичного измерения. Повторяющиеся циклы образуют *фазу* эксперимента. После окончания каждой из фаз проводят обработку результатов экспериментов. В одной фазе делается столько циклов, сколько необходимо для того, чтобы на фоне помех обнаружить значимый эффект от воздействия одной или нескольких переменных на функцию отклика. Число циклов зависит от величины интервалов варьирования и характера поверхности отклика. Чем больше интервал варьирования, тем меньше число циклов в фазе. Однако, как уже говорилось, интервалы варьирования в промышленном эксперименте нельзя сильно увеличивать.

По окончании фазы выбираются новые базовые значения для варьируемых переменных, составляется и n раз реализуется новый план эксперимента. Обработка результатов эксперимента при эволюционном планировании, по сути дела, та же, что и при применении обычных факторных планов первого порядка (см. гл. V. 1, 2). Разница состоит в том, что расчет коэффициентов регрессии и проверка их значимости проводятся не после завершения всех опытов фазы, а после каждого цикла. Это связано с тем, что заранее неизвестно, сколько циклов будет содержать фаза, чтобы можно было выявить значимые эффекты. Для облегчения расчетов ошибку опытов считают после каждого цикла в данной фазе, начиная со второго, по параллельным наблюдениям методом размаха.

Пусть после проведения n циклов для N независимых опытов имеем:

Усредненные значения после $(n-1)$-го цикла	$\overline{y_1}$, $\overline{y_2}$, ..., $\overline{y_N}$
Измеренные значения для n-го цикла	$y_1, y_2, ..., y_N$
Разность $(\overline{y_i} - y_i)$	$\Delta y_1, \Delta y_2, ..., \Delta y_N$

Отсюда можно найти

$$s^2_{\Delta y} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \Delta y_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^{N} \Delta y_i\right)^2}{N}}{N-1} . \qquad (V.180)$$

В то же время

$$s^2_{\Delta y} = \frac{s_y^2}{n-1} + s_y^2 = \frac{n}{n-1} s_y^2 . \qquad (V.181)$$

Следовательно, после проведения n циклов дисперсию s_y^2, характеризующую ошибку опыта, можно найти по формуле

$$s_y^2 = \frac{n-1}{n} s^2_{\Delta y} . \qquad (V.182)$$

Для упрощения вычислений в ЭВОП-методе оценку $s^2_{\Delta y}$ получают не по (V.182), а используя размах величин Δy_i:

$$s_{\Delta y} = \delta \Delta y / d, \qquad (V.183)$$

где $\delta \Delta y = \left| \max_i \Delta y_i - \min_i \Delta y_i \right|$; d — константа

для преобразования значения диапазона изменения Δy в оценку среднего квадратичного отклонения этой величины.

Из (V.182) и (V.183) следует, что

$$s_y = \frac{1}{d} \sqrt{\frac{n-1}{n}}\, \delta \Delta y .$$

Значения $\frac{1}{d} \sqrt{\frac{n-1}{n}} = f_{n,N}$ представлены в табл. 63.

Таблица 63. **Значения** $f_{n,N}$

Номер цикла	Числов опытов N								Номер цикла	Число опытов N							
	2	3	4	5	6	7	8	9		2	3	4	5	6	7	8	9
2	0,63	0,42	0,32	0,30	0,28	0,26	0,24	0,23	11	0,84	0,56	0,46	0,41	0,38	0,35	0,32	0,31
3	0,72	0,48	0,40	0,35	0,32	0,30	0,27	0,26	12	0,85	0,57	0,47	0,41	0,38	0,35	0,32	0,31
4	0,77	0,51	0,42	0,37	0,34	0,32	0,29	0,28	13	0,85	0,57	0,47	0,41	0,38	0,36	0,32	0,31
5	0,79	0,53	0,43	0,38	0,35	0,33	0,30	0,29	14	0,85	0,57	0,47	0,41	0,38	0,36	0,32	0,31
6	0,81	0,54	0,44	0,39	0,36	0,34	0,31	0,30	15	0,86	0,57	0,47	0,42	0,38	0,36	0,33	0,32
7	0,82	0,55	0,45	0,40	0,37	0,34	0,31	0,30	16	0,86	0,57	0,47	0,42	0,38	0,36	0,33	0,32
8	0,83	0,55	0,45	0,40	0,37	0,35	0,31	0,30	17	0,86	0,57	0,47	0,42	0,38	0,36	0,33	0,32
9	0,84	0,56	0,46	0,40	0,37	0,35	0,32	0,31	18	0,86	0,57	0,47	0,42	0,38	0,36	0,33	0,32
10	0,84	0,56	0,46	0,41	0,37	0,35	0,32	0,31	19	0,86	0,58	0,47	0,42	0,38	0,36	0,33	0,32
									20	0,86	0,58	0,47	0,42	0,38	0,36	0,33	0,32

Ошибка опыта определяется по формуле

$$s_y = f_{n,N}\,\delta\Delta y. \qquad \text{(V.184)}$$

Регистрация и обработка результатов эволюционного планирования проводится с помощью специальных рабочих таблиц.

Рассмотрим порядок расчетов и заполнения рабочих таблиц на следующей задаче. В процессе получения аммиачной селитры при взаимодействии аммиака с азотной кислотой наблюдаются безвозвратные потери связанного азота (аммиака и селитры) с вторичным паром. Потери связанного азота зависят от режима в реакторе. В результате промышленного эксперимента требуется минимизировать потери связанного азота (y, г/л), варьируя кислотностью щелоков (x_1) и нагрузкой по аммиаку (x_2). Для факторов были установлены основной уровень, соответствующий обычному технологическому режиму, интервалы варьирования, верхние и нижние уровни (табл. 64).

Таблица 64. **Область исследования**

Факторы	Кислотность щелоков, г/л HNO_3	Нагрузка по NH_3, м³/ч
Основной уровень	0,7	1850
Интервал варьирования	0,4	80
$x_j = +1$	1,1	1930
$x_j = -1$	0,3	1770

План эксперимента представлен на рис. 56 и в табл. 65.

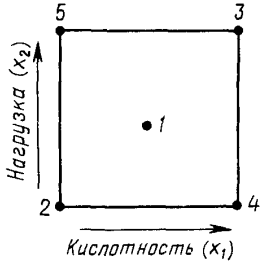


Рис. 56. Схема цикла для $k = 2$

Таблица 65. **Матрица планирования**

Номер опыта	x_1	x_2	x_1x_2	y, г/л
1	0	0	0	y_1
2	−1	−1	+1	y_2
3	+1	+1	+1	y_3
4	+1	−1	−1	y_4
5	−1	+1	−1	y_5

Рассмотрим рабочую таблицу для расчетов, заполненную после первого цикла (табл. 66). После первого цикла строки 1, 2 и 4 блока «Расчет средних» не заполнены. В этом блоке в 3-й строке записаны результаты опытов в точках плана $1 \div 5$, в строках 5 и 6 — средние значения отклика (потерь связанного азота) по всем опытам в каждой точке плана. Для первого цикла в строчки 5 и 6 записывают наблюдения. По результатам только первого цикла нельзя оценить ошибку опыта, сделать это можно, начиная только со второго цикла. Блок «Расчет

ошибки опыта» для первого цикла остается незаполненным. Однако для последующих экспериментов можно воспользоваться величиной ошибки опыта, оцененной в предыдущих фазах, а для первой фазы — априорной оценкой, приведенной в табл. 66 внизу справки.

Таблица 66. **ЭВОП, фаза 1, цикл $n=1$**

Расчет средних						Расчет ошибки опыта
	Номера точек эксперимента					1. Сумма ошибок предыдущих циклов $s=$
	1	2	3	4	5	2. Средняя ошибка предыдущих циклов $s_y=$
1. Сумма предыдущих циклов	—	—	—	—	—	3. Размах =
2. Среднее предыдущих циклов	—	—	—	—	—	4. Новое значение ошибки $s_y=$ размах $f_{N,n}=$
3. Новые наблюдения	5,0	6,5	5,5	5,5	5,6	5. Новая сумма ошибок $s=$
4. Разности (2) − (3)	—	—	—	—	—	6. Новая средняя ошибка $s_y=$
5. Новые суммы (1) + (3)	5,0	6,5	5,5	5,5	5,6	$=\frac{(5)}{n-1}=$
6. Новые средние $\bar{y}_i=\frac{(5)}{n}$	5,0	6,5	5,5	5,5	5,6	

Расчет эффектов	Расчет доверительных интервалов (ДИ)
1. Эффект кислотности $B_1=\frac{1}{2}(\bar{y}_3+\bar{y}_4-\bar{y}_2-\bar{y}_5)=-0{,}505$	1. ДИ для новых средних $\frac{2}{\sqrt{n}}s_y=\pm 1{,}0$
2. Эффект нагрузки $B_2=\frac{1}{2}(\bar{y}_3+\bar{y}_5-\bar{y}_2-\bar{y}_4)=-0{,}45$	2. ДИ для эффектов $\frac{2}{\sqrt{n}}s_y=\pm 1{,}0$
3. Эффект взаимодействия $B_{12}=\frac{1}{2}(\bar{y}_2+\bar{y}_3-\bar{y}_4-\bar{y}_5)=0{,}45$	3. ДИ для эффекта изменения среднего $\frac{1{,}79}{\sqrt{n}}s_y=\pm 0{,}89$
4. Эффект изменения среднего $\mu=\frac{1}{5}(\bar{y}_2+\bar{y}_3+\bar{y}_4+\bar{y}_5-4y_1)=0{,}62$	
Выводы: значимые эффекты не выявлены	Априорная ошибка опыта $s_y=0{,}5$ Решение: повторить опыт

В блоке «Расчет эффектов» считают эффекты факторов и их взаимодействий. Эффект некоторого фактора равен приращению значения параметра оптимизации (отклика) в результате перехода фактора с нижнего уровня на верхний. В случае двух факторов эффект x_1

$$B_1=\frac{\bar{y}_3+\bar{y}_4-\bar{y}_2-\bar{y}_5}{2}, \qquad \text{(V.185)}$$

эффект x_2

$$B_2=\frac{\bar{y}_3+\bar{y}_5-\bar{y}_2-\bar{y}_4}{2}, \qquad \text{(V.186)}$$

эффект взаимодействия

$$B_{12} = \frac{\bar{y}_2 + \bar{y}_3 - \bar{y}_4 - \bar{y}_5}{2}. \qquad \text{(V.187)}$$

Таким образом, эффекты факторов равны удвоенным коэффициентам уравнения регрессии при использовании линейных ортогональных планов типа 2^k или 2^{k-p} (см. формулу V.9). Результаты расчетов B_1, B_2 и B_{12} заносят в 1, 2 и 3-ю строки блока «Расчет эффектов». В 4-ю строку этого блока записывают значение эффекта изменения среднего параметра оптимизации (μ). Этот эффект подсчитывают как разность между общим средним по всем результатам эксперимента и значением y_1, полученным в центре плана (на основном уровне):

эффект изменения среднего

$$\mu = \frac{\bar{y}_2 + \bar{y}_3 + \bar{y}_4 + \bar{y}_5 + \bar{y}_1}{5} - \bar{y}_1 = \frac{\bar{y}_2 + \bar{y}_3 + \bar{y}_4 + \bar{y}_5 - 4\bar{y}_1}{5}. \qquad \text{(V.188)}$$

Эффект изменения среднего характеризует поверхность отклика в области экспериментирования. Если поверхность имеет экстремум, а опыты проводятся далеко от него, эффект изменения среднего будет значительным, причем если μ значительно меньше нуля, поверхность имеет максимум, если μ значительно больше нуля — минимум. При плоской форме экстремума или наличии седловой точки эффект изменения среднего в области экстремума будет близок к нулю.

В блоке «Расчет доверительных интервалов» рассчитывают доверительные интервалы (ДИ) для среднего, эффектов и эффектов изменения среднего. Для построения доверительных интервалов используют распределение Стьюдента.

Для эффектов факторов и эффектов взаимодействий

$$\text{ДИ} = \pm t \frac{2}{\sqrt{N-1}} \frac{s_y}{\sqrt{n}}; \qquad \text{(V.189)}$$

для эффекта изменения среднего

$$\text{ДИ}_\mu = \pm t \sqrt{\frac{N-1}{N}} \frac{s_y}{\sqrt{n}}. \qquad \text{(V.190)}$$

При $N = 2^2 + 1 = 5$ для доверительной вероятности $\beta = 0{,}95$ значение $t \approx 2$ и, следовательно, из (V.189) и (V.190) имеем

$$\text{ДИ} = \pm 2 \frac{s_y}{\sqrt{n}}, \qquad \text{(V.191)}$$

$$\text{ДИ}_\mu = \pm 1{,}78 \frac{s_y}{\sqrt{n}}. \qquad \text{(V.192)}$$

Эффекты считаются статистически значимыми, если они равны или больше по абсолютной величине доверительных интервалов. В рассматриваемом примере (см. табл. 66) при расчете доверительных интервалов использовалась априорная ошибка опыта $s_y = 0{,}5$. Сравнение величин эффектов с границами их доверительных интервалов свидетельствует

об отсутствии значимых эффектов и о необходимости перейти ко второму циклу данной фазы, т. е. еще раз повторить все опыты плана.

Рабочая табл. 67 заполнена после второго цикла. Во втором цикле мы начинаем получать информацию об ошибке опыта из данных этой же фазы. Последовательность заполнения рабочей таблицы для второго цикла следующая.

1. Данные из строк 4 и 6 блока «Расчет средних» таблицы первого цикла (см. табл. 66) переносят в строки 1 и 2 того же блока таблицы второго цикла (табл. 67).

Таблица 67. **ЭВОП, фаза 1, цикл $n=2$**

Расчет средних						Расчет ошибки опыта
	Номера точек эксперимента					
	1	2	3	4	5	
1. Сумма предыдущих циклов	5,0	6,5	5,5	5,5	5,5	1. Сумма ошибок предыдущих циклов $s =$
2. Среднее предыдущих циклов	5,0	6,5	5,5	5,5	5,5	2. Средняя ошибка предыдущих циклов $s_y =$
3. Новые наблюдения	7,0	5,5	4,0	5,0	6,5	3. Размах $= 3{,}5$
4. Разности (2) − (3)	−2,0	1,0	1,5	0,5	−1,0	4. Новое значение ошибки s_y = размах $f_{N,n} = 1{,}05$
5. Новые суммы (1) + (3)	12,0	12,0	9,5	10,5	12,0	5. Новая сумма ошибок $s = 1{,}05$
6. Новые средние $\bar{y}_i = \frac{(5)}{n}$	6,0	6,0	4,75	5,25	6,0	6. Новая средняя ошибка $s_y = \frac{s}{\sqrt{(n-1)}} = 1{,}05$

Расчет эффектов	Расчет доверительных интервалов (ДИ)
1. Эффект кислотности $B_1 = \frac{1}{2}(\bar{y}_3 + \bar{y}_4 - \bar{y}_2 - \bar{y}_5) = -1{,}0$	1. ДИ для новых средних $\frac{2}{\sqrt{n}} s_y = \frac{2 \cdot 1{,}05}{\sqrt{2}} = 1{,}48$
2. Эффект нагрузки $B_2 = \frac{1}{2}(\bar{y}_3 + \bar{y}_5 - \bar{y}_2 - \bar{y}_4) = -0{,}25$	2. ДИ для эффектов $\frac{2}{\sqrt{n}} s_y = \frac{2 \cdot 1{,}05}{\sqrt{2}} = 1{,}48$
3. Эффект взаимодействия $B_{12} = \frac{1}{2}(\bar{y}_2 + \bar{y}_3 - \bar{y}_4 - \bar{y}_5) = -0{,}25$	3. ДИ для эффекта изменения среднего $\frac{1{,}78}{\sqrt{n}} s_y = \frac{1{,}78}{\sqrt{2}} 1{,}05 = 1{,}32$
4. Эффект изменения среднего $\mu = \frac{1}{5}(\bar{y}_2 + \bar{y}_3 + \bar{y}_4 + \bar{y}_5 - 4y_1) = -0{,}4$	
Выводы: значимые эффекты не выявлены	Априорная ошибка $s_y = 0{,}5$
	Решение: повторить цикл

2. Результаты опытов, полученные во втором цикле, записывают в строку 3.

3. В строку 4 заносят со своими знаками разности строк 2 и 3, наибольшие и наименьшие разности подчеркивают. Это разности

между средними результатами предыдущего цикла и новыми результатами.

4. В строке 5 блока «Расчет средних» записывают новые суммы результатов наблюдений для каждой точки плана, т. е. суммы строк 1 и 3.

5. В строке 6 записывают новые средние для каждой точки плана как частные от деления новых сумм (строка 5) на число циклов к данному времени, т. е. в нашем случае частное от деления данных строки 5 на $n=2$.

6. По формулам (V.185)—(V.188) рассчитывают эффекты факторов, их взаимодействий и эффект изменения среднего. Полученные значения заносят в блок «Расчет эффектов».

7. В блоке «Расчет ошибки опыта» для второго цикла строки 1 и 2 не заполнены; в строку 3 записывают размах величин $\delta\Delta y$, определенный как разница между подчеркнутыми в строке 4 блока «Расчет средних» наибольшим и наименьшим значениями разностей Δy. В нашем случае размах равен $\delta\Delta y = 1{,}5 - (-2{,}0) = 3{,}5$.

8. В строку 4 записывают величину новой ошибки опыта, которую считают методом размаха по формуле (V.183). Величину f_{Nn} находим из табл. 63. В нашем случае $N=5$, $n=2$, $f_{5,2}=0{,}30$. Величина ошибки $s = 3{,}5 \cdot 0{,}30 = 1{,}5$. К концу второго цикла еще нет оценок ошибки опыта из предыдущего цикла, поэтому в строки 5 и 6 блока «Расчет ошибки опыта» переписывают величину новой ошибки (строка 4).

9. По формулам (V.189)—(V.192) определяют доверительные интервалы для нового среднего, эффектов и эффекта изменения среднего, которые записывают, соответственно, в строки 1, 2 и 3 блока «Расчет доверительных интервалов».

10. Сравнивают величину эффектов с соответствующими доверительными интервалами и делают вывод о статистической значимости эффектов, после чего принимают решение о следующем этапе.

В нашем случае все рассмотренные во втором цикле эффекты оказались статистически незначимыми, и было принято решение еще раз повторить все опыты плана, т. е. перейти к третьему циклу.

Начиная с третьего цикла, заполняются все строки рабочей таблицы (табл. 68). Все вычисления проводятся так же, как для предыдущих циклов, только в блоке «Расчет ошибки опыта» в строки 1 и 2 переписывают результаты из строк 5 и 6 того же блока предыдущего цикла. В строку 5 вносят результаты, полученные суммированием строк 2 и 4, строку 6 получают делением строки 5 на $n-1$. Оценка результатов третьего цикла свидетельствует о значимом отличии от нуля эффекта кислотности. В данной ситуации принимается одно из двух возможных решений.

1. Продолжить текущую фазу планирования для более четкого выделения значимых эффектов.

2. Начать новую фазу планирования. Начиная новую фазу, в качестве центра нового плана можно выбрать точку плана предшествующей фазы с наилучшим значением целевой функции.

В рассматриваемом примере (табл. 68) было принято решение начать новую фазу с центром плана в точке *3* (рис. 57).

В новой фазе планирования при необходимости можно изменить

Таблица 68. **ЭВОП, фаза 1, цикл $n=3$**

Расчет средних						Расчет ошибки опыта
	Номер точек эксперимента					
	1	2	3	4	5	
1. Сумма предыдущих циклов	12,0	12,0	9,5	10,5	12,0	1. Сумма ошибок предыдущих циклов $s=1{,}05$
2. Среднее предыдущих циклов	6,0	6,0	4,75	5,25	6,0	2. Средняя ошибка предыдущих циклов $s_y=1{,}05$
3. Новые наблюдения	5,5	6,5	4,2	4,0	6,0	3. Размах $=1{,}75$
4. Разности (2) − (3)	0,5	−0,5	0,55	1,25	0	4. Новые значения ошибки s_y = размах $f_{N,n}=0{,}6$
5. Новые суммы (1)+(3)	17,5	18,5	13,7	14,5	18,0	5. Новая сумма ошибок $s=1{,}65$
6. Новые средние $\bar{y}_i=\frac{(5)}{n}$	5,8	6,2	4,6	4,8	6,0	6. Новая средняя ошибка $s_y=\frac{(5)}{n-1}=0{,}81$

Расчет эффектов	Расчет доверительных интервалов (ДИ)
1. Эффект кислотности $B_1=\frac{1}{2}(\bar{y}_3+\bar{y}_4-\bar{y}_2-\bar{y}_5)=-1{,}4$	1. ДИ для новых средних $\frac{2}{\sqrt{2}}s_y=\frac{2\cdot 0{,}81}{\sqrt{3}}=0{,}90$
2. Эффект нагрузки $B_2=\frac{1}{2}(\bar{y}_3+\bar{y}_5-\bar{y}_2-\bar{y}_4)=-0{,}2$	2. ДИ для эффектов $\frac{2}{\sqrt{n}}s_y=0{,}94$
3. Эффект взаимодействия $B_{12}=\frac{1}{2}(\bar{y}_2+\bar{y}_3-\bar{y}_4-\bar{y}_5)=0{,}0$	3. ДИ для эффекта изменения среднего $\frac{1{,}78}{\sqrt{n}}s_y=0{,}81$
4. Эффект изменения среднего $\mu=\frac{1}{5}(\bar{y}_2+\bar{y}_3+\bar{y}_4+\bar{y}_5-4\bar{y}_1)=0{,}32$	
Выводы: эффект кислотности значим	Априорная ошибка опыта $s_y=0{,}5$
	Решение: начать новую фазу

интервалы варьирования факторов, можно изменить и сами факторы: некоторые из прежних оставить на выбранном оптимальном уровне и включить в программу эксперимента новые факторы; можно добавить факторы к уже имеющимся. Наиболее часто при эволюционном планировании варьируют два или три фактора. Расчеты для трех факторов во многом аналогичны двухфакторной задаче. Для каждого фактора выбирают по два уровня варьирования. Цикл представляет собой полный факторный эксперимент 2^3 (рис. 58). Однако в данном случае цикл делят на два блока, а в центре плана проводят два опыта (табл. 69).

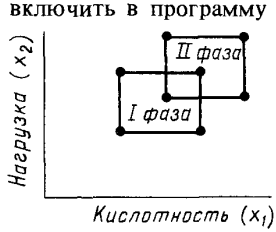


Рис. 57. Схема перехода ко второй фазе

Каждый блок является дробной репликой типа 2^{3-1} и опытом в центре плана. Блок I представляет собой полуреплику 2^{3-1} с определяющим контрастом $1=-x_1x_2x_3$. Это позволяет получить следующую систему оценок:

$$B_1^{\mathrm{I}} \to \beta_1 - \beta_{23},$$
$$B_2^{\mathrm{I}} \to \beta_2 - \beta_{13}, \qquad \text{(V.193)}$$
$$B_3^{\mathrm{I}} \to \beta_3 - \beta_{12}.$$

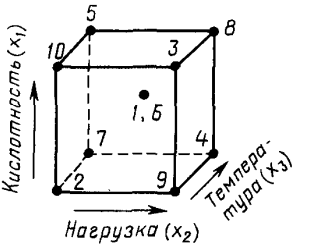


Рис. 58. Схема цикла для $k=3$

Таблица 69. **Матрица планирования**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y	
1	0	0	0	0	0	0	0	y_1	
2	−1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	y_2	I
3	+1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	y_3	блок
4	+1	−1	+1	−1	+1	−1	−1	y_4	
5	−1	+1	+1	−1	−1	+1	−1	y_5	
6	0	0	0	0	0	0	0	y_6	
7	−1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	y_7	II
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_8	блок
9	+1	−1	−1	−1	−1	+1	+1	y_9	
10	−1	+1	−1	−1	+1	−1	+1	y_{10}	

Опыты блока II составляют другую полуреплику 2^{3-1} с определяющим контрастом $1=x_1x_2x_3$. Система оценок следующая:

$$B_1^{\mathrm{II}} \to \beta_1 + \beta_{23},$$
$$B_2^{\mathrm{II}} \to \beta_2 + \beta_{13}, \qquad \text{(V.194)}$$
$$B_3^{\mathrm{II}} \to \beta_3 + \beta_{12}.$$

Объединение опытов блоков I и II приводит к полному факторному эксперименту 2^3, который дает возможность получить несмешанные оценки для линейных эффектов и эффектов парного взаимодействия:

$$B_1 = \frac{1}{2}\left(B_1^{\mathrm{I}} + B_1^{\mathrm{II}}\right) \to \beta_1,$$
$$B_2 = \frac{1}{2}\left(B_2^{\mathrm{I}} + B_2^{\mathrm{II}}\right) \to \beta_2,$$
$$B_3 = \frac{1}{2}\left(B_3^{\mathrm{I}} + B_3^{\mathrm{II}}\right) \to \beta_3, \qquad \text{(V.195)}$$
$$B_{12} = \frac{1}{2}\left(B_3^{\mathrm{II}} - B_3^{\mathrm{I}}\right) \to \beta_{12},$$

$$B_{13} = \frac{1}{2}\left(B_2^{II} - B_2^{I}\right) \to \beta_{13},$$

$$B_{23} = \frac{1}{2}\left(B_1^{II} - B_1^{I}\right) \to \beta_{23}.$$

Рассмотрим порядок заполнения рабочих таблиц в трехфакторной задаче на примере промышленного эксперимента по минимизации потерь связанного азота. Вторую фазу эксперимента было решено начать с центром в точке *3* (см. рис. 58). Введем в рассмотрение третий фактор — температуру (x_3). Основной уровень, интервалы варьирования и границы области исследования приведены в табл. 70.

Таблица 70. **Область исследования**

Факторы	Кислотность, г/л	Нагрузка по NH_3, м³/ч	Температура, °С
Основной уровень	1,1	1930	65
Интервал варьирования	0,4	80	5
$x_j = +1$	1,5	2010	70
$x_j = -1$	0,7	1850	60

В результате трех циклов второй фазы получены следующие значения отклика y_1, г/л (табл. 71).

Таблица 71

Блок	I					II				
Номера точек эксперимента	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Цикл 1	5,8	6,2	4,8	6,1	6,0	6,5	5,9	5,5	5,8	6,3
Цикл 2	6,2	5,6	5,9	5,5	5,6	4,9	5,7	5,1	5,0	6,3
Цикл 3	4,5	6,2	4,0	5,0	5,9	6,6	5,8	4,3	4,7	6,5

Расчеты для каждого цикла выполняются в двух рабочих таблицах, отдельно для каждого блока. В табл. 72 приведена рабочая таблица блока I третьего цикла второй фазы промышленного эксперимента по минимизации потерь связанного азота в производстве аммиачной селитры, а в табл. 73 — блока II того же цикла той же фазы. В блоке «Расчет эффектов» (табл. 72, 73) вычисляются оценки эффектов в соответствии с (V.193) и (V.194). В блоке «Окончательный расчет эффектов» рабочей таблицы для блока II усредняются оценки для эффектов в соответствии с (V.195). Здесь же рассчитывается эффект изменения среднего по данным полного цикла усреднением соответствующих эффектов для блоков I и II.

Расчет ошибки опыта проводится по данным каждого из блоков, при этом размах определяется как сумма наибольших и наименьших

Таблица 72. **ЭВОП, фаза 2, цикл $n = 3$, блок I**

Расчет средних						Расчет ошибки опыта
	Номера точек эксперимента					
	1	2	3	4	5	
1. Сумма предыдущих циклов блока I	12,0	11,8	10,7	11,6	11,6	1. Сумма ошибок предыдущих циклов (все блоки) $s = 1{,}05$
2. Среднее предыдущих циклов блока I	6,0	5,9	5,4	5,8	5,8	2. Средияя ошибка предыдущих циклов (все блоки) $s_y = 0{,}52$
3. Новые наблюдения	4,5	6,2	4,0	5,0	5,9	3. Размах $= 1{,}8$; $f_{б,з} = 0{,}35$
4. Разности (2) − (3)	1,5	−0,3	1,4	0,8	−0,1	4. Новое значение ошибки s_y − размах $f_{N,n} = 0{,}63$
5. Новые суммы блока I (1) + (3)	16,5	18,0	14,7	16,6	17,5	5. Новая сумма ошибок (все блоки) $s = 1{,}68$
6. Новые средние блока I $\bar{y}_i = \frac{(5)}{n}$	5,5	6,0	4,9	5,5	5,8	6. Новая средняя ошибка $s_{\bar{y}} = \frac{(5)}{2n-3} = 0{,}56$

Расчет эффектов
1. Эффект кислотности
$B_1^{\mathrm{I}} = \frac{1}{2}(\bar{y}_3 + \bar{y}_4 - \bar{y}_2 - \bar{y}_5) = -0{,}7$
2. Эффект нагрузки
$B_2^{\mathrm{I}} = \frac{1}{2}(\bar{y}_3 + \bar{y}_5 - \bar{y}_2 - \bar{y}_4) = -0{,}4$
3. Эффект температуры
$B_3^{\mathrm{I}} = \frac{1}{2}(\bar{y}_2 + \bar{y}_3 - \bar{y}_4 - \bar{y}_5) = -0{,}2$
4. Эффект изменения среднего блока I
$\mu = \frac{1}{5}(\bar{y}_2 + \bar{y}_3 + \bar{y}_4 + \bar{y}_5 - 4y_1) = 0{,}04$

Выводы:

разностей данного блока. При определении сумм ошибок используют данные по всем уже реализованным блокам данной фазы.

Расчет доверительных интервалов выполняется только в рабочей таблице блока II (табл. 72). Доверительные интервалы в данном случае рассчитываются по следующим формулам:

для новых средних

$$\text{ДИ} = \frac{2}{\sqrt{n}} s_y, \qquad \text{(V.196)}$$

для эффектов

$$\text{ДИ} = 0{,}71 \frac{2}{\sqrt{n}} s_y, \qquad \text{(V.197)}$$

для эффекта изменения среднего

$$\text{ДИ} = 0{,}63 \frac{2}{\sqrt{n}} s_y. \qquad \text{(V.198)}$$

Таблица 73. **ЭВОП, фаза 2, цикл $n=3$, блок II**

Расчет средних						Расчет ошибки опыта
	Номера точек эксперимента					
	1	2	3	4	5	
1. Сумма предыдущих циклов	11,4	11,6	10,6	10,8	12,6	1. Сумма ошибок предыдущих циклов (все блоки) $s=1{,}68$
2. Среднее предыдущих циклов	5,7	5,8	5,3	5,4	6,3	2. Средняя ошибка предыдущих циклов (все блоки) $s_y=0{,}56$
3. Новые наблюдения	6,6	5,8	4,3	4,7	6,5	3. Размах $=1{,}9$
4. Разности (2) − (3)	−0,9	0	1,0	0,7	−0,2	4. Новое значение ошибки $s_y=$ размах $f_{N,n}=0{,}67$
5. Новые суммы (1) + (3)	18,0	17,4	14,9	15,5	19,1	5. Новая сумма ошибок (все блоки) $s=2{,}35$
6. Новые средние	6,0	5,8	4,9	5,1	6,7	6. Новая средняя ошибка $s_y=\frac{(5)}{2n-2}=0{,}59$

Расчет эффектов	Расчет доверительных интервалов (ДИ)
1. Эффект кислотности $B_1^{II}=\frac{1}{2}(\bar{y}_8+\bar{y}_9-\bar{y}_7-\bar{y}_{10})=-1{,}25$	1. ДИ для новых средних $\frac{2}{\sqrt{n}}s_y=0{,}69$
2. Эффект нагрузки $B_2^{II}=\frac{1}{2}(\bar{y}_8+\bar{y}_{10}-\bar{y}_7-\bar{y}_9)=+0{,}35$	2. ДИ для эффектов $0{,}71\frac{2}{\sqrt{n}}s_y=0{,}49$
3. Эффект температуры $B_3^{II}=\frac{1}{2}(\bar{y}_7+\bar{y}_8-\bar{y}_9-\bar{y}_{10})=-0{,}55$	3. ДИ для эффекта изменения среднего $0{,}63\frac{2}{\sqrt{n}}s_y=0{,}43$
4. Эффект изменения среднего $\mu_2=\frac{1}{5}(\bar{y}_7+\bar{y}_8+\bar{y}_9+\bar{y}_{10}-4\bar{y}_6)=-0{,}3$	

Окончательный расчет эффектов

$$B_1=\frac{1}{2}(B_1^I+B_1^{II})=-0{,}98; \qquad B_{12}=\frac{1}{2}(B_3^{II}-B_3^I)=-0{,}15$$
$$B_2=\frac{1}{2}(B_2^I+B_2^{II})=-0{,}025; \qquad B_{13}=\frac{1}{2}(B_2^{II}-B_2^I)=+0{,}375$$
$$B_3=\frac{1}{2}(B_3^I+B_3^{II})=-0{,}375; \qquad B_{23}=\frac{1}{2}(B_1^{II}-B_1^I)=-0{,}275$$

Эффект изменения среднего $\mu=\frac{1}{2}(\mu_1+\mu_2)=-0{,}13$

Выводы: эффект кислотности значим	Решение: начать новую фазу

В рассматриваемом примере после третьего цикла второй фазы (табл. 72) статистически значимым оказался эффект B_1 $(0{,}98>0{,}49)$, поэтому было принято решение перейти к новой фазе.

Таким образом, метод эволюционного планирования дает возможность проводить активный эксперимент в промышленных условиях без нарушения режима производства, при этом нет необходимости в спе-

циальном оборудовании и штате исследователей, все требуемые вычисления легко могут быть проведены обслуживающим персоналом производственного объекта.

В главе изложены методы планирования эксперимента, направленного на поиск экстремума в условиях, когда механизм процесса неизвестен. В этих случаях используют полиномиальную модель процесса.

Выбор плана определяется постановкой задачи исследования. Находясь достаточно далеко от экстремума, исследователь ставит эксперименты с целью приблизиться к оптимальным условиям. Для решения этой задачи применяются линейные ортогональные планы. Линейная модель используется для определения градиента в методе крутого восхождения по поверхности отклика. Для движения к экстремуму могут быть также использованы симплексные планы.

Для описания области, близкой к экстремуму, «почти стационарной области», можно использовать композиционные планы 2-го порядка.

Во многих экспериментальных исследованиях наряду с количественными факторами необходимо варьировать также и качественными факторами. В таких ситуациях очень эффективными оказываются сложные планы — факторный эксперимент 2^{2k}, совмещенный с латинскими квадратами.

Для многофакторных задач на первом этапе исследования проводят отсеивающие эксперименты. Для решения этой задачи могут быть использованы дробные реплики от факторного эксперимента высокой степени дробности, планы Плакетта—Бермана и метод случайного баланса.

Для поиска оптимума в промышленных условиях применяют метод эволюционного планирования эксперимента, с помощью которого решается задача выделения слабого полезного сигнала на фоне шума.

Упражнения

1. Какими свойствами обладает матрица планирования полного факторного эксперимента 2^k? Построить матрицы планирования для $k = 4$ и $k = 5$.

2. Построить линейные ортогональные планы для $k = 6$, используя дробные реплики от полного факторного эксперимента и симплексные планы. Какими свойствами обладают эти планы?

3. Полный факторный эксперимент 2^2, приведенный в таблице:

Номер опыта	z_1	z_2	y	
1	80	11,34	83,1	85,2
2	20	9,75	60,6	62,5
3	80	9,75	71,8	73,9
4	20	11,34	83,7	81,9

использовался для изучения зависимости соотношения между водной и общей формами P_2O_5 (y,%) от температуры процесса аммонизации (z_1, °С) и содержания воды в спиртовой фазе (z_2, %) при получении монокальцийфосфата кислотным разложением фосфатов с применением жидкостной экстракции. Каждый опыт повторялся 2 раза.

а) Определить уравнения регрессии в безразмерном и натуральном масштабах; б) оценить значимость коэффициентов; в) проверить адекватность уравнения регрессии эксперименту.

4. При дозревании суперфосфата, получаемого из апатита, исследовалась зависимость коэффициента разложения (y, %) от времени хранения (z_1, сут) при различном содержании H_2SO_4 (z_2, мас. части). Область исследования приведена в таблице

	z_1	z_2
z_j^{min}	5	60
z_j^{max}	20	72

Был использован ортогональный план 2-го порядка (табл. 43), получены следующие значения коэффициента разложения:

Номер опыта	y, %	Номер опыта	y, %
1	96	6	85
2	85	7	93
3	76	8	81
4	91	9	88
5	91		

Дисперсия воспроизводимости $s^2_{воспр}$ равна 4%, $f_{воспр} = 3$.

Определить: а) уравнение регрессии второго порядка; б) значимость коэффициентов и адекватность уравнения регрессии эксперименту; в) тип поверхности; г) оптимальные условия, обеспечивающие практически полное разложение ($y \simeq 100\%$); д) проанализировать чувствительность коэффициента разложения к изменению времени хранения и содержанию H_2SO_4.

5. По условиям примера 12 для исследования кинетики сополимеризации: а) составить D-оптимальный симплекс; б) используя результаты эксперимента (табл. 61) и свойства симплексного плана, начать движение в сторону увеличения скорости сополимеризации.

ГЛАВА VI

ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА ПРИ ИЗУЧЕНИИ ДИАГРАММ СОСТАВ — СВОЙСТВО

1. Метод симплексных решеток. При изучении свойств смеси, зависящих только от соотношений компонентов, факторное пространство представляет собой правильный $(q-1)$-мерный симплекс. Для систем выполняется соотношение

$$\sum_{i=1}^{q} x_i = 1, \qquad \text{(VI.1)}$$

где $x_i \geqslant 0$ — концентрация компонента; q — количество компонентов.

Для двухкомпонентных систем симплекс — прямая содержание компонентов определяется соотношением отрезков. При $q=3$ правильный симплекс — равносторонний треугольник. Каждая точка треугольника отвечает одному определенному составу тройной системы и, наоборот,

каждый состав представляется одной определенной точкой. Состав может быть выражен в мольных, весовых или объемных долях или процентах. Вершины треугольника соответствуют чистым веществам, стороны — двойным системам. Опустив из каждой вершины треугольника высоту, разделив каждую из них на десять равных по величине отрезков и проведя через полученные деления прямые, параллельные сторонам треугольника, получим треугольную сетку. Приближение от каждой данной стороны к противоположной вершине отвечает пропорциональному возрастанию содержания соответствующего компонента, поэтому прямые, параллельные данной стороне, при последовательном переходе от одной прямой к другой отражают возрастание третьего компонента на

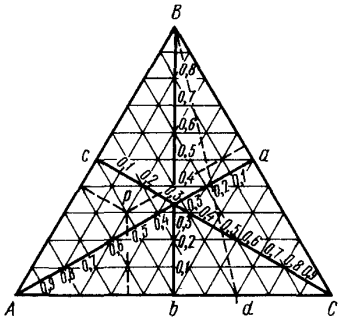


Рис. 59. Концентрационный треугольник Гиббса

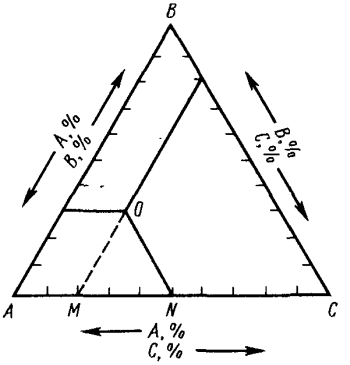


Рис. 60. Концентрационный треугольник Розебума

10%. На рис. 59 на соответствующих высотах треугольника указано содержание каждого из компонентов (в точке d — 30% А и 70% С). Практически большей частью не прибегают к построению высот, можно откладывать содержание компонентов непосредственно на сторонах треугольника. Такой способ отсчета принят в треугольнике Гиббса. В треугольнике Розебума состав тройной системы отсчитывается по трем отрезкам одной стороны треугольника (рис. 60). В концентрационном треугольнике точки, лежащие на прямой, выходящей из вершины треугольника, соответствуют смесям с постоянным отношением содержаний компонентов, изображаемых двумя другими вершинами. Свойство (y) обычно представляют проекциями линий равного значения на плоскость концентрационного треугольника.

При $q = 4$ правильный симплекс — тетраэдр, каждая вершина которого соответствует чистым компонентам. Ребро представляет собой двухкомпонентную систему, грань — трехкомпонентную. Точки внутри тетраэдра соответствуют четырехкомпонентным системам. Так, компонент x_1 отсутствует на грани x_2, x_3, x_4, а по сечениям тетраэдра, приближающимся к вершине x_1, содержание компонента x_1 увеличивается.

Графически такую систему представляют в виде сечений трехмерного симплекса плоскостями, перпендикулярными одной из его осей. Состав

четырехкомпонентных смесей, лежащих в плоскости сечения, определяется уже двумерным симплексом, что позволяет изменение свойств системы представлять в виде контурных кривых. При этом в одном сечении варьируют только тремя компонентами. Переход от одного сечения к другому соответствует изменению четвертого компонента.

При планировании эксперимента для решения задач на диаграммах состав — свойство предполагается, что изучаемое свойство является непрерывной функцией аргументов и может быть с достаточной точностью представлено полиномом. Использование методов планирования эксперимента позволяет значительно сократить объем эксперимента при изучении многокомпонентных систем, отпадает необходимость в пространственном представлении сложных поверхностей, так как свойства можно определять из уравнений. При этом сохраняется возможность графической интерпретации результатов.

Поверхности отклика в многокомпонентных системах имеют, как правило, очень сложный характер. Для адекватного описания таких поверхностей необходимы полиномы высоких степеней и, следовательно, большое количество опытов. Обычный полином степени n от q переменных имеет C_{q+n}^{n} коэффициентов:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{1<i<q} b_i x_i + \sum_{1<i<j<q} b_{ij} x_i x_j + \sum_{1<i<j<k<q} b_{ijk} x_i x_j x_k + \cdots \quad \text{(VI.2)}$$

Соотношение $\sum_{i=1}^{q} x_i = 1$ позволяет исключить q-й компонент и снизить число коэффициентов до C_{q+n-1}^{n}. Однако по существу задачи желательно ввести в модель все q компонентов.

Шеффе предложил описывать свойства смесей *приведенными полиномами*, получаемыми из (IV.2) с учетом условия нормированности суммы независимых переменных (VI.1). Покажем, например, как получить такой приведенный полином второй степени для тройной системы. Общий вид полинома

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + b_{33} x_3^2. \quad \text{(VI.3)}$$

Так как

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1, \quad \text{(VI.4)}$$

то

$$b_0 x_1 + b_0 x_2 + b_0 x_3 = b_0. \quad \text{(VI.5)}$$

Умножив (VI.4) последовательно на x_1, x_2 и x_3, получим

$$\begin{aligned} x_1^2 &= x_1 - x_1 x_2 - x_1 x_3, \\ x_2^2 &= x_2 - x_1 x_2 - x_2 x_3, \\ x_3^2 &= x_3 - x_1 x_3 - x_2 x_3. \end{aligned} \quad \text{(VI.6)}$$

Подставим (VI.5) и (VI.6) в (VI.3) и приведем подобные члены:

$$\hat{y} = (b_0 + b_1 + b_{11})\, x_1 + (b_0 + b_2 + b_{22})\, x_2 + (b_0 + b_3 + b_{33})\, x_3 +$$
$$+ (b_{12} - b_{11} - b_{22})\, x_1 x_2 + (b_{13} - b_{11} - b_{33})\, x_1 x_3 + (b_{23} - b_{22} - b_{33})\, x_2 x_3. \quad \text{(VI.7)}$$

Обозначим

$$\beta_i = b_0 + b_i + b_{ii}, \qquad \beta_{ij} = b_{ij} - b_{ii} - b_{jj}. \quad \text{(VI.8)}$$

Тогда получим приведенный полином второй степени от трех переменных:

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3. \quad \text{(VI.9)}$$

Таким образом, число коэффициентов уменьшилось с 10 до 6. Приведенный полином второй степени от q переменных

$$\hat{y} = \sum_{1 \leqslant i \leqslant q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \beta_{ij} x_i x_j \quad \text{(VI.10)}$$

содержит $q + C_q^2 = C_{q+1}^2$ коэффициентов. Приведенный полином неполного третьего порядка для трехкомпонентной смеси

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{123} x_1 x_2 x_3, \quad \text{(VI.11)}$$

для q-компонентной смеси

$$\hat{y} = \sum_{1 \leqslant i \leqslant q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leqslant i < j < k \leqslant q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k. \quad \text{(VI.12)}$$

Приведенный полином третьего порядка для трехкомпонентной смеси

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \gamma_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) +$$
$$+ \gamma_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \gamma_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3) + \beta_{123} x_1 x_2 x_3, \quad \text{(VI.13)}$$

для q-компонентной

$$\hat{y} = \sum_{1 \leqslant i \leqslant q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) +$$
$$+ \sum_{1 \leqslant i < j < k \leqslant q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k. \quad \text{(VI.14)}$$

Приведенный полином четвертого порядка для трехкомпонентной смеси

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \gamma_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) +$$
$$+ \gamma_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \gamma_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3) + \delta_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2)^2 + \delta_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3)^2 +$$
$$+ \delta_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3)^2 + \beta_{1123} x_1^2 x_2 x_3 + \beta_{1223} x_1 x_2^2 x_3 + \beta_{1233} x_1 x_2 x_3^2, \quad \text{(VI.15)}$$

для q-компонентной

$$\hat{y} = \sum_{1 \leqslant i \leqslant q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) +$$

$$+ \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)^2 + \sum_{1 \leqslant i < j < k \leqslant q} \beta_{iijk} x_i^2 x_j x_k +$$

$$+ \sum_{1 \leqslant i < j < k \leqslant q} \beta_{ijjk} x_i x_j^2 x_k + \sum_{1 \leqslant i < j < k \leqslant q} \beta_{ijkk} x_i x_j x_k^2 +$$

$$+ \sum_{1 \leqslant i < j < k < l \leqslant q} \beta_{ijkl} x_i x_j x_k x_l . \qquad \text{(VI.16)}$$

Нелинейная часть этих полиномов называется *синергизмом*, если она вызывает увеличение отклика по сравнению с откликом, предсказываемым линейной частью уравнения, а *антагонизмом* — при уменьшении отклика. Например, β_{ij} в полиноме второго порядка называют квадратичным коэффициентом бинарного синергизма компонентов i и j. В полиноме третьего порядка синергизм трехкомпонентной смеси равен

$$[\beta_{ij} x_i x_j + \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)] + [\beta_{ik} x_i x_k + \gamma_{ik} x_i x_k (x_i - x_k)] +$$
$$+ [\beta_{ik} x_j x_k + \gamma_{jk} x_j x_k (x_j - x_k)] + \beta_{ijk} x_i x_j x_k , \qquad \text{(VI.17)}$$

где в квадратных скобках — бинарные синергизмы в тройной системе; β_{ijk} — кубический коэффициент тройного синергизма компонентов i, j, k.

Возможно другое преобразование исходного полинома степени n от q переменных. Его можно свести к так называемому *однородному полиному* степени n, умножая члены степени $s < n$ на $(\sum_{1 \leqslant i \leqslant q} x_i)^{n-s} = 1$. Приведем полином (VI.3) к однородному:

$$\hat{y} = b_0 (x_1 + x_2 + x_3)^2 + b_1 x_1 (x_1 + x_2 + x_3) + b_2 x_2 (x_1 + x_2 + x_3) +$$
$$+ b_3 x_3 (x_1 + x_2 + x_3) + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + b_{33} x_3^2 =$$
$$= (2b_0 + b_1 + b_2 + b_{12}) x_1 x_2 + (2b_0 + b_1 + b_3 + b_{13}) x_1 x_3 + (2b_0 + b_2 +$$
$$+ b_3 + b_{23}) x_2 x_3 + (b_0 + b_1 + b_{11}) x_1^2 + (b_0 + b_2 + b_{22}) x_2^2 +$$
$$+ (b_0 + b_3 + b_{33}) x_3^2 . \qquad \text{(VI.18)}$$

Обозначим в (VI.18)

$$\beta'_{ij} = 2b_0 + b_i + b_j + b_{ij}, \quad \beta'_{ii} = b_0 + b_i + b_{ii}.$$

Получим однородный полином

$$\hat{y} = \beta'_{12} x_1 x_2 + \beta'_{13} x_1 x_3 + \beta'_{23} x_2 x_3 + \beta'_{11} x_1^2 + \beta'_{22} x_2^2 + \beta'_{33} x_3^2 . \qquad \text{(VI.19)}$$

Число неизвестных коэффициентов в (VI.19) то же, что и в (VI.9).

Приведенные полиномы получили более широкое применение и в дальнейшем будем использовать только их. Таким образом, минимальное

число экспериментальных точек для определения коэффициентов полинома степени n от q переменных составляет C^n_{q+n-1} (табл. 74).

Таблица 74. **Число опытов для полиномов разных степеней**

Число компонентов	Степень полинома				Число компонентов	Степень полинома			
	2	3 (неполная)	3	4		2	3 (неполная)	3	4
3	6	7	10	15	6	21	41	56	126
4	10	14	20	35	8	36	92	120	330
5	15	25	35	70	10	55	175	220	715

2. Симплекс-решетчатые планы Шеффе. В настоящее время наибольшее применение получили *симплекс-решетчатые* планы, предложенные Шеффе. Эти планы обеспечивают равномерный разброс экспериментальных точек по $(q-1)$-мерному симплексу. Экспериментальные точки представляют $\{q, n\}$-решетку на симплексе, где q — число компонентов смеси; n — степень полинома. Симплекс-решетчатые планы являются насыщенными планами. По каждому компоненту имеется $(n+1)$ одинаково расположенных уровней $x_i = 0, 1/n, 2/n, \ldots, 1$ и берутся все возможные комбинации с такими значениями концентраций компонентов. Так, например, для квадратичной решетки $\{q, 2\}$, обеспечивающей приближение поверхности отклика полиномами второй степени $(n=2)$, должны быть использованы следующие уровни каждого из факторов: 0, 1/2 и 1, для кубической $(n=3)$ — 0, 1/3, 2/3 и 1 и т. д. Некоторые $\{3, n\}$-решетки представлены на рис. 61, а $\{4, n\}$ — на рис. 62. Эти планы частично композиционные. Неполную кубическую решетку $\{3, 3^*\}$, например, можно получить из $\{3, 2\}$, добавив только одну точку в центре симплекса, решетку $\{3, 4\}$ — добавлением точек к решетке $\{3, 2\}$.

Записав координаты точек симплексной решетки, получим матрицу планирования. Построим матрицы планирования для решеток $\{3, 2\}$, $\{3, 3\}$ и $\{3, 4\}$.

Индексы у свойства смеси указывают на относительное содержание каждого компонента в смеси. Например, смесь 1 (табл. 75)

Таблица 75. **Матрица планирования для {3, 2}-решетки**

N	x_1	x_2	x_3	$y_{\text{экс}}$	N	x_1	x_2	x_3	$y_{\text{экс}}$
1	1	0	0	y_1	4	1/2	1/2	0	y_{12}
2	0	1	0	y_2	5	1/2	0	1/2	y_{13}
3	0	0	1	y_3	6	0	1/2	1/2	y_{23}

состоит только из компонента x_1, свойство этой смеси обозначается y_1, смесь 4 состоит из $\frac{1}{2}x_1$ и $\frac{1}{2}x_2$, свойство обозначается y_{12}.

Матрица планирования для симплексной решетки $\{3, 3\}$ приведена в табл. 76.

В табл. 77 приведена матрица планирования для построения полинома четвертой степени в трехкомпонентной системе.

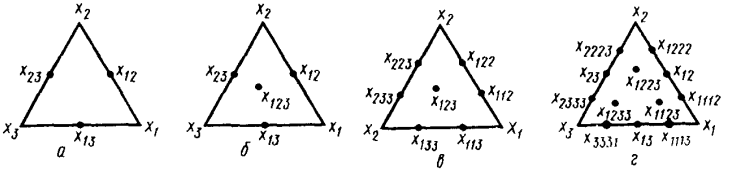


Рис. 61. {3, *n*}-решетки для полиномов:
а — второго порядка; *б* — неполного третьего порядка; *в* — третьего порядка; *г* — четвертого порядка

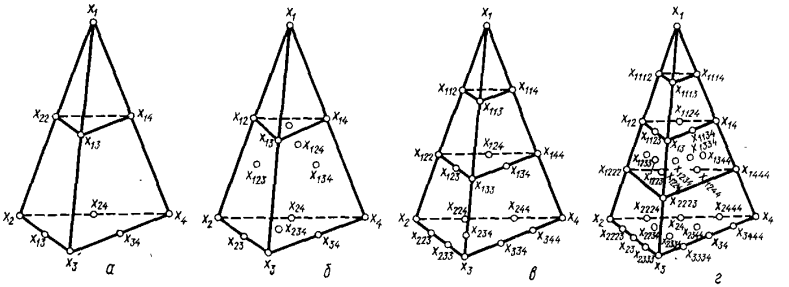


Рис. 62. {4, *n*}-решетки для полиномов:
а — второго порядка; *б* — неполного третьего порядка; *в* — третьего порядка; *г* — четвертого порядка

Таблица 76. **Симплекс-решетчатый план третьего порядка для трехкомпоиентиой смеси**

N	x_1	x_2	x_3	*y*	*N*	x_1	x_2	x_3	*y*
1	1	0	0	y_1	6	0	2/3	1/3	y_{223}
2	0	1	0	y_2	7	0	1/3	2/3	y_{233}
3	0	0	1	y_3	8	2/3	0	1/3	y_{113}
4	2/3	1/3	0	y_{112}	9	1/3	0	2/3	y_{133}
5	1/3	2/3	0	y_{122}	10	1/3	1/3	1/3	y_{123}

Таблица 77. **Матрица планирования для {3, 4}-решетки**

N	x_1	x_2	x_3	*y*	*N*	x_1	x_2	x_3	*y*
1	1	0	0	y_1	9	3/4	0	1/4	y_{1113}
2	0	1	0	y_2	10	1/4	0	3/4	y_{1333}
3	0	0	1	y_3	11	0	3/4	1/4	y_{2223}
4	1/2	1/2	0	y_{12}	12	0	1/4	3/4	y_{2333}
5	1/2	0	1/2	y_{13}	13	1/2	1/4	1/4	y_{1123}
6	0	1/2	1/2	y_{23}	14	1/4	1/2	1/4	y_{1223}
7	3/4	1/4	0	y_{1112}	15	1/4	1/4	1/2	y_{1233}
8	1/4	3/4	0	y_{1222}					

Коэффициенты приведенных полиномов получают, используя свойство насыщенности плана. Для получения коэффициентов полинома

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3$$

будем последовательно подставлять в уравнение координаты всех шести точек матрицы планирования (табл. 75). Тогда при подстановке координат первой точки ($x_1 = 1$, $x_2 = 0$, $x_3 = 0$) получим

$$y_1 = \beta_1. \tag{VI.20}$$

Соответственно

$$\beta_2 = y_2 \quad \text{и} \quad \beta_3 = y_3. \tag{VI.21}$$

При подстановке в уравнение координат четвертой точки получим

$$y_{12} = \beta_1 \cdot {}^1/_2 + \beta_2 \cdot {}^1/_2 + \beta_{12} \cdot {}^1/_4. \tag{VI.22}$$

Но так как $\beta_i = y_i$, то

$$y_{12} = y_1 \cdot {}^1/_2 + y_2 \cdot {}^1/_2 + \beta_{12} \cdot {}^1/_4, \tag{VI.23}$$

отсюда

$$\beta_{12} = 4y_{12} - 2y_1 - 2y_2. \tag{VI.24}$$

Соответственно

$$\beta_{13} = 4y_{13} - 2y_1 - 2y_3, \quad \beta_{23} = 4y_{23} - 2y_2 - 2y_3. \tag{VI.25}$$

Три точки, определяющие коэффициент β_{ij}, лежат на одном ребре. Коэффициенты приведенного полинома второго порядка для q-компонентной смеси

$$\hat{y} = \sum_{1 \leqslant i \leqslant q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \beta_{ij} x_i x_j$$

определяются аналогично:

$$\beta_i = y_i, \quad \beta_{ij} = 4y_{ij} - 2y_i - 2y_j. \tag{VI.26}$$

При последовательной подстановке в полином третьего порядка для трехкомпонентной смеси

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \gamma_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) + \\ + \gamma_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \gamma_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3) + \beta_{123} x_1 x_2 x_3$$

координат точек матрицы планирования (см. табл. 76) имеем:

$$\beta_1 = y_1, \quad \beta_2 = y_2, \quad \beta_3 = y_3, \tag{VI.27}$$

$$y_{112} = y_1 \cdot {}^2/_3 + y_2 \cdot {}^1/_3 + \beta_{12} \cdot {}^2/_9 + \gamma_{12} \cdot {}^2/_{27}, \tag{VI.28}$$

$$y_{122} = y_1 \cdot {}^1/_3 + y_2 \cdot {}^2/_3 + \beta_{12} \cdot {}^2/_9 - \gamma_{12} \cdot {}^2/_{27}. \tag{VI.29}$$

Просуммировав уравнения (VI.28) и (VI.29), получим

$$\beta_{12} = {}^9/_4 (y_{112} + y_{122} - y_1 - y_2). \tag{VI.30}$$

Вычитая из (VI.28) уравнение (VI.29), получим γ_{12}:

$$\gamma_{12} = {}^9/_4 (3y_{112} - 3y_{122} - y_1 + y_2). \tag{VI.31}$$

Подставляя приведенный полином координаты точек 6 и 7, получим:

$$\beta_{23} = {}^{9}/_{4}(y_{223} + y_{233} - y_2 - y_3),$$
$$\gamma_{23} = {}^{9}/_{4}(3y_{223} - 3y_{233} - y_2 + y_3). \qquad \text{(VI.32)}$$

И аналогично после подстановки координат точек *8* и *9*

$$\beta_{13} = {}^{9}/_{4}(y_{113} + y_{133} - y_1 - y_3),$$
$$\gamma_{13} = {}^{9}/_{4}(3y_{113} - 3y_{133} - y_1 + y_3). \qquad \text{(VI.33)}$$

Подставляя координаты последней точки с учетом соотношений (VI.27) — (VI.33), получим

$$y_{123} = y_1\,{}^{1}/_{3} + y_2\,{}^{1}/_{3} + y_3\,{}^{1}/_{3} + {}^{1}/_{4}(y_{112} + y_{122} - y_1 - y_2) +$$
$$+ {}^{1}/_{4}(y_{113} + y_{133} - y_1 - y_3) + {}^{1}/_{4}(y_{223} + y_{233} - y_2 - y_3) + {}^{1}/_{27}\beta_{123},$$
$$\beta_{123} = 27y_{123} - {}^{27}/_{4}(y_{112} + y_{122} + y_{113} + y_{133} + y_{223} + y_{233}) +$$
$$+ {}^{9}/_{2}(y_1 + y_2 + y_3). \qquad \text{(VI.34)}$$

Коэффициенты полинома третьего порядка для q-компонентной смеси

$$\hat{y} = \sum_{1\leqslant i\leqslant q}\beta_i x_i + \sum_{1\leqslant i<j\leqslant q}\beta_{ij}x_i x_j + \sum_{1\leqslant i<j\leqslant q}\gamma_{ij}x_i x_j (x_i - x_j) +$$
$$+ \sum_{1\leqslant i<j\leqslant q}\beta_{ijk}x_i x_j x_k,$$

$$\beta_i = y_i, \qquad \text{(VI.35)}$$

$$\beta_{ij} = {}^{9}/_{4}(y_{iij} + y_{ijj} - y_i - y_j), \qquad \text{(VI.36)}$$

$$\gamma_{ij} = {}^{9}/_{4}(3y_{iij} - 3y_{ijj} - y_i + y_j), \qquad \text{(VI.37)}$$

$$\beta_{ijk} = 27y_{ijk} - {}^{27}/_{4}(y_{iij} + y_{ijj} + y_{iik} + y_{ikk} + y_{jjk} +$$
$$+ y_{jkk}) + {}^{9}/_{2}(y_i + y_j + y_k). \qquad \text{(VI.38)}$$

Аналогично выводятся соотношения для определения коэффициентов любого приведенного полинома при любом числе компонентов. Так, для полинома неполного третьего порядка для трехкомпонентной смеси имеем:

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12}x_1 x_2 + \beta_{13}x_1 x_3 + \beta_{23}x_2 x_3 + \beta_{123}x_1 x_2 x_3,$$

$$\beta_i = y_i \text{ и т. д.}, \qquad \text{(VI.39)}$$

$$\beta_{12} = 4y_{12} - 2y_1 - 2y_2 \text{ и т. д.}, \qquad \text{(VI.40)}$$

$$\beta_{123} = 27y_{123} - 12(y_{12} + y_{13} + y_{23}) + 3(y_1 + y_2 + y_3). \qquad \text{(VI.41)}$$

Для q-компонентной смеси

$$\hat{y} = \sum_{1\leqslant i\leqslant q}\beta_i x_i + \sum_{1\leqslant i<j\leqslant q}\beta_{ij}x_i x_j + \sum_{1\leqslant i<j<k\leqslant q}\beta_{ijk}x_i x_j x_k,$$

$$\beta_i = y_i, \qquad \text{(VI.42)}$$

$$\beta_{ij} = 4y_{ij} - 2y_i - 2y_j, \tag{VI.43}$$

$$\beta_{ijk} = 27y_{ijk} - 12(y_{ij} + y_{ik} + y_{jk}) + 3(y_i + y_j + y_k). \tag{VI.44}$$

Полином четвертого порядка для трехкомпонентной смеси:

$$\begin{aligned}\hat{y} = {} & \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \gamma_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) + \\ & + \gamma_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \gamma_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3) + \delta_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2)^2 + \\ & + \delta_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3)^2 + \delta_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3)^2 + \beta_{1123} x_1^2 x_2 x_3 + \\ & + \beta_{1223} x_1 x_2^2 x_3 + \beta_{1233} x_1 x_2 x_3^2,\end{aligned} \tag{VI.45}$$

$$\beta_1 = y_1 \text{ и т. д.} \tag{VI.46}$$

$$\beta_{12} = 4y_{12} - 2y_1 - 2y_2, \tag{VI.47}$$

$$\begin{aligned}\gamma_{12} &= {}^8/_3(-y_1 + 2y_{1112} - 2y_{1222} + y_2), \\ \gamma_{13} &= {}^8/_3(-y_1 + 2y_{1113} - 2y_{1333} + y_3), \\ \gamma_{23} &= {}^8/_3(-y_2 + 2y_{2223} - 2y_{2333} + y_3),\end{aligned} \tag{VI.48}$$

$$\delta_{12} = {}^8/_3(-y_1 + 4y_{1112} - 6y_{12} + 4y_{1222} - y_2), \tag{VI.49}$$

$$\delta_{13} = {}^8/_3(-y_1 + 4y_{1113} - 6y_{13} + 4y_{1333} - y_3), \tag{VI.50}$$

$$\delta_{23} = {}^8/_3(-y_2 + 4y_{2223} - 6y_{23} + 4y_{2333} - y_3), \tag{VI.51}$$

$$\begin{aligned}\beta_{1123} = {} & 32(3y_{1123} - y_{1223} - y_{1233}) + {}^8/_3(6y_1 - y_2 - y_3) - 16(y_{12} + y_{13}) - \\ & - {}^{16}/_3(5y_{1112} + 5y_{1113} - 3y_{1222} - 3y_{1333} - y_{2223} - y_{2333}),\end{aligned} \tag{VI.52}$$

$$\begin{aligned}\beta_{1223} = {} & 32(3y_{1223} - y_{1123} - y_{1233}) + {}^8/_3(6y_2 - y_1 - y_3) - 16(y_{12} + y_{13}) - \\ & - {}^{16}/_3(5y_{1222} + 5y_{2223} - 3y_{1112} - 3y_{2333} - y_{1113} - y_{1333}).\end{aligned} \tag{VI.53}$$

$$\begin{aligned}\beta_{1233} = {} & 32(3y_{1233} - y_{1123} - y_{1223}) + {}^8/_3(6y_3 - y_1 - y_2) - 16(y_{13} + y_{23}) - \\ & - {}^{16}/_3(5y_{1333} + 5y_{2333} - 3y_{1113} - 3y_{2223} - y_{1112} - y_{1222}).\end{aligned} \tag{VI.54}$$

Для q-компонентной смеси

$$\begin{aligned}\hat{y} = {} & \sum_{1 \leqslant i \leqslant q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \\ & + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)^2 + \sum_{1 \leqslant i < j < k \leqslant q} \beta_{iijk} x_i^2 x_j x_k + \\ & + \sum_{1 \leqslant i < j < k \leqslant q} \beta_{ijjk} x_i x_j^2 x_k + \sum_{1 \leqslant i < j < k \leqslant q} \beta_{ijkk} x_i x_j x_k^2 + \\ & + \sum_{1 \leqslant i < j < k < l \leqslant q} \beta_{ijkl} x_i x_j x_k x_l,\end{aligned} \tag{VI.55}$$

$$\beta_i = y_i, \tag{VI.56}$$

$$\beta_{ij} = 4y_{ij} - 2y_i - 2y_j, \tag{VI.57}$$

$$\gamma_{ij} = {}^8/_3(-y_i + 2y_{iiij} - 2y_{ijjj} + y_j), \tag{VI.58}$$

$$\delta_{ij} = {}^{8}/_{3}(-y_i + 4y_{iiij} - 6y_{ij} + 4y_{ijjj} - y_j), \qquad \text{(VI.59)}$$

$$\beta_{iijk} = 32(3y_{iijk} - y_{ijjk} - y_{ijkk}) + {}^{8}/_{3}(6y_i - y_j - y_k) - 16(y_{ij} + y_{ik}) -$$
$$- {}^{16}/_{3}(5y_{iiij} + 5y_{iiik} - 3y_{ijjj} - 3y_{ikkk} - y_{jjjk} - y_{jkkk}), \qquad \text{(VI.60)}$$

$$\beta_{ijjk} = 32(3y_{ijjk} - y_{iijk} - y_{ijkk}) + {}^{8}/_{3}(6y_j - y_i - y_k) - 16\ y_{ij} + y_{jk}) -$$
$$- {}^{16}/_{3}(5y_{ijjj} + 5y_{jjjk} - 3y_{iiij} - 3y_{jkkk} - y_{iiik} - y_{ikkk}), \qquad \text{(VI.61)}$$

$$\beta_{ijkk} = 32(3y_{ijkk} - y_{iijk} - y_{ijjk}) + {}^{8}/_{3}(6y_k - y_i - y_j) - 16(y_{ik} + y_{jk}) -$$
$$- {}^{18}/_{3}(5y_{ikkk} + 5y_{jkkk} - 3y_{iiik} - 3y_{jjjk} - y_{iiij} - y_{ijjj}), \qquad \text{(VI.62)}$$

$$\beta_{ijkl} = 256y_{ijkl} - 32(y_{iijk} + y_{iijl} + y_{iikl} + y_{ijjk} + y_{ijjl} + y_{jjkl} +$$
$$+ y_{ijkk} + y_{ikkl} + y_{jkkl} + y_{ijil} + y_{jkll} + y_{ikll}) + {}^{32}/_{3}(y_{iiij} + y_{iiik} + y_{iiil} +$$
$$+ y_{ijjj} + y_{jjjk} + y_{jjjl} + y_{ikkk} + y_{jkkk} + y_{kkkl} + y_{illl} + y_{jlll} + y_{klll}). \qquad \text{(VI.63)}$$

После определения коэффициентов уравнения регрессии необходимо провести статистический анализ полученных результатов: проверить адекватность уравнения и построить доверительные интервалы значений отклика, предсказываемые по уравнению регрессии. При постановке эксперимента по симплекс-решетчатым планам нет степеней свободы для проверки адекватности уравнения, так как эти планы насыщенные. Для проверки адекватности ставят опыты в дополнительных, так называемых *контрольных точках*. Число контрольных точек и их координаты связаны с постановкой задачи и особенностями эксперимента. При этом стараются предусмотреть возможность использования контрольных точек для улучшения модели при неадекватности.

Точность предсказания отклика неодинакова в различных точках симплекса. Дисперсию предсказанного значения отклика $s^2_{\hat{y}}$ можно определить по закону накопления ошибок. Покажем это на примере полинома второго порядка для трехкомпонентной смеси. При этом предположим, что x_i определяются без ошибок, дисперсия воспроизводимости s^2_y во всех точках плана одинакова и значения откликов являются результатом усреднения n_i и n_{ij} параллельных опытов в соответствующих точках симплекса. Тогда дисперсии $\overline{y}_i$ и $\overline{y}_{ij}$ равны:

$$s^2_{\overline{y}_i} = s^2_y/n_i \qquad \text{(VI.64)}$$

и

$$s^2_{\overline{y}_{ij}} = s^2_y/n_{ij}. \qquad \text{(VI.65)}$$

Заменим в приведенном полиноме

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3$$

коэффициенты их выражениями через отклики:

$$\beta_i = \overline{y}_i, \qquad \beta_{ij} = 4\overline{y}_{ij} - 2\overline{y}_i - 2\overline{y}_j.$$

Тогда получим

$$\hat{y} = \overline{y}_1 x_1 + \overline{y}_2 x_2 + \overline{y}_3 x_3 + (4\overline{y}_{12} - 2\overline{y}_1 - 2\overline{y}_2) x_1 x_2 + (4\overline{y}_{13} - 2\overline{y}_1 - 2\overline{y}_3) x_1 x_3 +$$

$$+(4\bar{y}_{23}-2\bar{y}_2-2\bar{y}_3)x_2x_3=\bar{y}_1(x_1-2x_1x_2-2x_1x_3)+\bar{y}_2(x_2-2x_1x_2-2x_2x_3)+$$
$$+\bar{y}_3(x_3-2x_1x_3-2x_2x_3)+4\bar{y}_{12}x_1x_2+4\bar{y}_{13}x_1x_3+4\bar{y}_{23}x_2x_3. \quad \text{(VI.66)}$$

Используя условие $x_1+x_2+x_3=1$, преобразуем коэффициенты при $\bar{y}_i$:

$$x_1-2x_1x_2-2x_1x_3=x_1-2x_1(x_2+x_3)=x_1-2x_1(1-x_1)=$$
$$=x_1(2x_1-1) \text{ и т. д.} \quad \text{(VI.67)}$$

Получим

$$\hat{y}=x_1(2x_1-1)\bar{y}_1+x_2(2x_2-1)\bar{y}_2+x_3(2x_3-1)\bar{y}_3+$$
$$+4x_1x_2\bar{y}_{12}+4x_1x_3\bar{y}_{13}+4x_2x_3\bar{y}_{23}. \quad \text{(VI.68)}$$

Введя обозначение

$$a_i=x_i(2x_i-1), \quad a_{ij}=4x_ix_j, \quad \text{(VI.69)}$$

с учетом соотношений (VI.64) и (VI.65) получим выражение для дисперсии $s^2_{\hat{y}}$:

$$s^2_{\hat{y}}=s^2_y\left(\sum_{1\leqslant i\leqslant q}\frac{a_i^2}{n_i}+\sum_{1\leqslant i<j\leqslant q}\frac{a_{ij}^2}{n_{ij}}\right). \quad \text{(VI.70)}$$

Аналогично получены выражения для полиномов неполного третьего, третьего и четвертого порядков. Для неполного третьего порядка

$$s^2_{\hat{y}}=s^2_y\left[\sum_{1\leqslant i\leqslant q}\frac{b_i^2}{n_i}+\sum_{1\leqslant i<j\leqslant q}\frac{b_{ij}^2}{n_{ij}}+\sum_{1\leqslant i<j<k<q}\frac{b_{ijk}^2}{n_{ijk}}\right], \quad \text{(VI.71)}$$

где

$$b_i=\frac{1}{2}x_i\left(6x_i^2-2x_i+1\right)-3\sum_{j=1}^{q}x_j^2, \quad \text{(VI.72)}$$

$$b_{ij}=4x_ix_j(3x_i+3x_j-2), \quad \text{(VI.73)}$$

$$b_{ijk}=27x_ix_jx_k. \quad \text{(VI.74)}$$

Для полинома третьего порядка

$$s^2_{\hat{y}}=s^2_y\left[\sum_{1\leqslant i\leqslant q}\frac{c_i^2}{n_i}+\sum_{1\leqslant i<j\leqslant q}\frac{c_{iij}^2}{n_{iij}}+\sum_{1\leqslant i<j\leqslant q}\frac{c_{ijj}^2}{n_{ijj}}+\sum_{1\leqslant i<j<k<q}\frac{c_{ijk}^2}{n_{ijk}}\right], \quad \text{(VI.75)}$$

где

$$c_i=1/2\,x_i(3x_i-1)(3x_i-2), \quad \text{(VI.76)}$$

$$c_{iij}=9/2\,x_ix_j(3x_i-1), \quad \text{(VI.77)}$$

$$c_{ijj}=9/2\,x_ix_j(3x_j-1), \quad \text{(VI.78)}$$

$$c_{ijk}=27x_ix_jx_k. \quad \text{(VI.79)}$$

Для полинома четвертого порядка

$$s^2_{\underset{y}{\wedge}} = s^2_y \left[\sum_{1<i<q} \frac{d_i^2}{n_i} + \sum_{1<i<j<q} \frac{d_{ij}^2}{n_{ij}} + \sum_{1<i<j<q} \frac{d_{iiij}^2}{n_{iiij}} + \sum_{1<i<j<q} \frac{d_{ijjj}^2}{n_{ijjj}} + \right.$$

$$+ \sum_{1<i<j<k<q} \frac{d_{iijk}^2}{n_{iijk}} + \sum_{1<i<j<k<q} \frac{d_{ijjk}^2}{n_{ijjk}} + \sum_{1<i<j<k<q} \frac{d_{ijkk}^2}{n_{ijkk}} +$$

$$\left. + \sum_{1<i<j<k<l<q} \frac{d_{ijkl}^2}{n_{ijkl}} \right], \qquad \text{(VI.80)}$$

где

$$d_i = {}^1/_6\, x_i\,(4x_i - 1)\,(4x_i - 2)\,(4x_i - 3), \qquad \text{(VI.81)}$$

$$d_{ij} = 4x_i x_j\,(4x_i - 1)\,(4x_j - 1), \qquad \text{(VI.82)}$$

$$d_{ijjj} = {}^8/_3\, x_i x_j\,(4x_j - 1)\,(4x_j - 2), \qquad \text{(VI.83)}$$

$$d_{iiij} = {}^8/_3\, x_i x_j\,(4x_i - 1)\,(4x_i - 2), \qquad \text{(VI.84)}$$

$$d_{iijk} = 32 x_i x_j x_k\,(4x_i - 1), \qquad \text{(VI.85)}$$

$$d_{ijjk} = 32 x_i x_j x_k\,(4x_j - 1), \qquad \text{(VI.86)}$$

$$d_{ijkk} = 32 x_i x_j x_k\,(4x_k - 1). \qquad \text{(VI.87)}$$

Если число параллельных опытов во всех точках плана одинаково, т. е. $n_i = n_{ij} = n$, все формулы для $s^2_{\hat{y}}$ примут вид

$$s^2_{\underset{y}{\wedge}} = s^2_y \frac{\xi}{n}, \qquad \text{(VI.88)}$$

где для полинома второго порядка

$$\xi = \sum_{1<i<q} a_i^2 + \sum_{i<i<j<q} a_{ij}^2, \qquad \text{(VI.89)}$$

для полинома неполного третьего порядка

$$\xi = \sum_{1<i<q} b_i^2 + \sum_{1<i<j<q} b_{ij}^2 + \sum_{1<i<j<k<q} b_{ijk}^2, \qquad \text{(VI.90)}$$

для полинома третьего порядка

$$\xi = \sum_{1<i<q} c_i^2 + \sum_{1<i<j<q} c_{iij}^2 + \sum_{1<i<j<q} c_{ijj}^2 +$$

$$+ \sum_{1<i<j<k<q} c_{ijk}^2 + \sum_{1<i<j<q} c_{ij}^2, \qquad \text{(VI.91)}$$

для полинома четвертого порядка

$$\xi = \sum_{1<i<q} d_i^2 + \sum_{1<i<j<q} d_{ij}^2 + \sum_{1<i<j<q} d_{iiij}^2 + \sum_{1<i<j<q} d_{ijjj}^2 +$$

$$+\sum_{1\le i<j<k<q} d^2_{ijk} + \sum_{1\le i<j<k<q} d^2_{ijjk} + \sum_{1\le i<j<k<q} d^2_{ijkk} +$$

$$+\sum_{1\le i<j<k<l<q} d^2_{ijkl}\,. \qquad \text{(VI.92)}$$

Так как в выражениях (VI.89) — (VI.92) ξ зависит только от состава смеси, для трехкомпонентных смесей можно заранее построить линии равного значения ξ для полиномов различных степеней (рис. 63, 64).

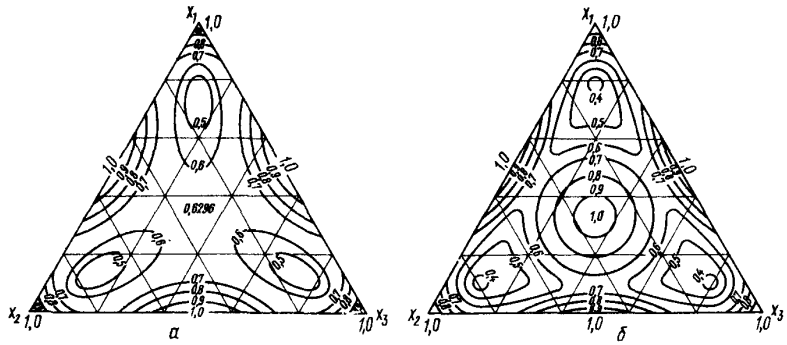


Рис. 63. Изолинии ξ для полиномов второго порядка (*а*) и неполного третьего порядка (*б*)

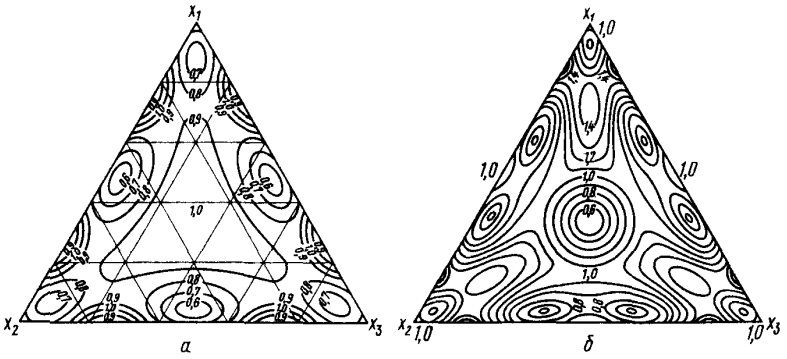


Рис. 64. Изолинии ξ для полиномов третьего порядка (*а*) и четвертого порядка (*б*)

Зная дисперсию воспроизводимости, число параллельных опытов *n*, легко найти ошибку предсказанных значений отклика в любой точке диаграммы состав — свойство, воспользовавшись для этого соответствующей величиной ξ, снятой с графика. Проверку адекватности

проводят в каждой контрольной точке. Для этого составляют отношение

$$t = \frac{\Delta y}{\sqrt{s_{\bar{y}}^2 + s_{\hat{y}}^2}} = \frac{\Delta y \sqrt{n}}{s_y^2 \sqrt{1+\xi}}, \qquad \text{(VI.93)}$$

где $\Delta y = |\bar{y}_{\text{эксп}} - y_{\text{расч}}|$; n — число параллельных опытов в каждой точке. Величина t, распределенная по закону Стьюдента, сравнивается с табличным значением $t_{p/l}\ (f)$, p — уровень значимости; l — число контрольных точек; f — число степеней свободы дисперсии воспроизводимости.

Гипотеза об адекватности уравнения принимается, если $t_{\text{эксп}} < t_{\text{табл}}$ для всех контрольных точек. Адекватность можно также проверять по нескольким точкам с использованием χ^2-критерия.

При построении доверительного интервала для значений отклика

$$\hat{y} - \Delta < y < \hat{y} + \Delta, \qquad \text{(VI.94)}$$

$$\Delta = t_{p/k,\,f}\, s_{\hat{y}}, \qquad \text{(VI.95)}$$

где k — число определяемых коэффициентов в полиноме. С учетом (VI.88)

$$\Delta = t_{p/k,\,f} \frac{s_y}{\sqrt{n}}\, \xi^{1/2}. \qquad \text{(VI.96)}$$

Для тройных систем при построении доверительных интервалов можно воспользоваться контурными картами (см. рис. 63, 64), подставляя в них к изолиниям вместо ξ значение $t_{p/k,f} \frac{s_y}{\sqrt{n}}\, \xi^{1/2}$.

Пример 1. Изучалась зависимость реакционной способности и пористости кокса от состава шихты. В качестве компонентов шихты были взяты угли четырех технологических групп: Г6 — x_1, 2Ж26 — x_2, К10 — x_3, К + К2 — x_4. Опыты проводились на укрупненной лабораторной установке. Характеристикой реакционной способности кокса ($y^{\text{р}}$) служила константа скорости реакции $C + CO_2 = 2CO$, определенная при 1000°С. Пористость кокса ($y^{\text{п}}$) определялась по отношению истинной и кажущейся плотностей. Полагая, что поверхности отклика физико-химических характеристик рассматриваемых смесей могут быть аппроксимированы полиномами невысоких порядков, определим уравнение регрессии в виде полинома второго порядка.

Решение. Для решения задачи был использован симплекс-решетчатый план (4, 2). Матрица планирования второго порядка для четырехкомпонентной смеси и результаты опытов (каждый опыт был повторен два раза) приведены в таблице.

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	Обозначение отклика	$y^{\text{р}}$	$y^{\text{п}}$
1	1	0	0	0	y_1	1,48	54,0
2	0	1	0	0	y_2	0,32	55,2
3	0	0	1	0	y_3	0,50	43,3
4	0	0	0	1	y_4	0,53	45,3
5	0,5	0,5	0	0	y_{12}	0,63	53,1
6	0,5	0	0,5	0	y_{13}	0,92	48,0
7	0,5	0	0	0,5	y_{14}	1,08	49,0
8	0	0,5	0,5	0	y_{23}	0,39	46,3
9	0	0,5	0	0,5	y_{24}	0,38	47,1
10	0	0	0,5	0,5	y_{34}	0,54	44,0

Коэффициенты уравнений рассчитаны по формулам (VI.26). Для зависимости реакционной способности от состава шихты имеем:

$$\beta_1 = 1{,}48, \quad \beta_2 = 0{,}32, \quad \beta_3 = 0{,}50, \quad \beta_4 = 0{,}53,$$

$$\beta_{12} = 4y_{12} - 2y_1 - 2y_2 = 4 \cdot 0{,}63 - 2 \cdot 1{,}48 - 2 \cdot 0{,}32 = -1{,}08,$$

$$\beta_{13} = 4y_{13} - 2y_1 - 2y_3 = 4 \cdot 0{,}92 - 2 \cdot 1{,}48 - 2 \cdot 0{,}50 = -0{,}22,$$

$$\beta_{14} = 4y_{14} - 2y_1 - 2y_4 = 4 \cdot 1{,}08 - 2 \cdot 1{,}48 - 2 \cdot 0{,}53 = 0{,}30,$$

$$\beta_{23} = 4y_{23} - 2y_2 - 2y_3 = 4 \cdot 0{,}39 - 2 \cdot 0{,}32 - 2 \cdot 0{,}50 = -0{,}08,$$

$$\beta_{24} = 4y_{24} - 2y_2 - 2y_4 = 4 \cdot 0{,}38 - 2 \cdot 0{,}32 - 2 \cdot 0{,}53 = -0{,}18,$$

$$\beta_{34} = 4y_{34} - 2y_3 - 2y_4 = 4 \cdot 0{,}54 - 2 \cdot 0{,}50 - 2 \cdot 0{,}53 = 0{,}1.$$

Таким образом, полином второго порядка для реакционной способности в четырехкомпонентной системе имеет вид

$$\hat{y}^{\text{р}} = 1{,}48\, x_1 + 0{,}32\, x_2 + 0{,}50\, x_3 + 0{,}53\, x_4 - 1{,}08\, x_1x_2 - 0{,}22\, x_1x_3 + \\ + 0{,}3\, x_1x_4 - 0{,}08\, x_2x_3 - 0{,}18\, x_2x_4 + 0{,}1\, x_3x_4. \qquad \text{(VI.97)}$$

Для пористости

$$\beta_1 = 54{,}0, \quad \beta_2 = 55{,}2, \quad \beta_3 = 43{,}3, \quad \beta_4 = 45{,}3, \quad \beta_{12} = -6{,}4,$$

$$\beta_{13} = -2{,}6, \quad \beta_{14} = -2{,}6, \quad \beta_{23} = -11{,}8, \quad \beta_{24} = -12{,}6, \quad \beta_{34} = -1{,}2$$

и уравнение регрессии

$$\hat{y}^{\text{п}} = 54{,}0\, x_1 + 55{,}2\, x_2 + 43{,}3\, x_3 + 45{,}3\, x_4 - 6{,}4\, x_1x_2 - 2{,}6\, x_1x_3 - \\ - 2{,}6\, x_1x_4 - 11{,}8\, x_2x_3 - 12{,}6\, x_2x_4 - 1{,}2\, x_3x_4. \qquad \text{(VI.98)}$$

Для проверки адекватности полученных уравнений были использованы 25 контрольных точек (таблица ниже).

Номер опыта	Обозначение отклика	$y^{\text{р}}_{\text{экс}}$	$\hat{y}^{\text{р}}$	$\Delta y^{\text{р}}$	$y^{\text{п}}_{\text{экс}}$	$\hat{y}^{\text{п}}$	$\Delta y^{\text{п}}$	ξ	$t^{\text{р}}$	$t^{\text{п}}$
1	y_{1112}	0,77	0,99	0,22	53,5	53,1	0,4	0,72	3,16	0,3
2	y_{1113}	1,15	1,19	0,04	51,0	50,8	0,2	0,72	0,575	0,15
3	y_{1114}	1,25	1,20	0,05	50,3	51,3	1,0	0,72	0,72	0,72
4	y_{2223}	0,31	0,34	0,03	49,0	50,1	1,1	0,72	0,43	0,80
5	y_{2224}	0,39	0,34	0,05	52,3	50,4	1,9	0,72	0,72	1,37
6	y_{3334}	0,55	0,52	0,03	45,0	43,6	1,4	0,72	0,43	0,5
7	y_{1222}	0,35	0,41	0,06	57,2	53,8	2,6	0,72	0,86	0,7
8	y_{1333}	0,75	0,70	0,05	44,0	45,5	1,5	0,72	0,72	1,2
9	y_{1444}	0,94	0,82	0,12	48,9	47,0	1,9	0,72	1,72	0,4
10	y_{2333}	0,51	0,44	0,07	43,4	44,0	0,7	0,72	1,0	0,75
11	y_{2444}	0,36	0,45	0,09	46,3	45,4	0,9	0,72	0,74	0,8
12	y_{3444}	0,57	0,50	0,07	44,5	44,6	0,1	0,72	1,34	0,6
13	y_{1123}	0,82	0,77	0,05	52,4	49,8	2,6	0,59	0,74	1,95
14	y_{1124}	0,90	0,81	0,09	51,5	50,1	1,4	0,59	1,3	1,2
15	y_{1134}	0,17	1,00	0,17	47,0	48,4	1,4	0,59	2,54	0,3
16	y_{1223}	0,49	0,51	0,02	50,6	49,5	1,1	0,59	0,3	0,5
17	y_{1224}	0,52	0,53	0,01	48,0	49,8	1,8	0,59	0,15	0,4
18	y_{1334}	0,76	0,75	0,01	46,7	45,8	0,9	0,59	0,15	1,3
19	y_{2234}	0,44	0,40	0,04	48,4	46,5	1,9	0.59	0,6	0,7

Продолжение

Номер опыта	Обозначение отклика	$y^{р}_{экс}$	$\hat{y}^{р}$	$\Delta y^{р}$	$y^{п}_{экс}$	$\hat{y}^{п}$	$\Delta y^{п}$	ξ	$t^{р}$	$t^{п}$
20	y_{2334}	0,48	0,46	0,02	46,8	44,4	2,4	0,59	0,3	1,0
21	y_{1233}	0,58	0,63	0,05	45,7	46,7	1,0	0,59	0,74	1,4
22	y_{1244}	0,59	0,68	0,09	47,0	47,6	0,6	0,59	1,34	0,8
23	y_{1344}	0,78	0,80	0,02	49,0	46,4	2,6	0,59	0,3	1,2
24	y_{2344}	0,42	0,44	0,02	46,0	44,8	1,2	0,59	0,3	0,8
25	y_{1234}	0,60	0,65	0,05	48,0	47,0	1,0	0,44	0,78	0,79

Координаты контрольных точек выбраны таким образом, чтобы иметь возможность при неадекватности уравнений регрессии (VI.97) и (VI.98) построить полином четвертого порядка (см. рис. 62, *г*).

Для каждой контрольной точки составлялось *t*-отношение:

$$t = \frac{\Delta y \sqrt{n}}{s_y \sqrt{1 + \xi}}.$$

Ошибка воспроизводимости при определении реакционной способности кокса $s^{р}_{y} = 0{,}075$, при определении пористости — $s^{п}_{y} = 1{,}5$. Число степеней свободы $f_y = 35$. Число параллельных опытов в каждой точке $n = 2$. Для каждой проверочной точки определялась величина

$$\xi = \sum_{1 < i < q} a_i^2 + \sum_{1 < i < j < q} a_{ij}^2,$$

где $a_i = x_i(2x_i - 1)$; $a_{ij} = 4x_i x_j$.

При уровне значимости $p = 0{,}05$ и $t_y = 35$ $t_{табл} = 3{,}6$. Следовательно, оба уравнения оказались адекватными эксперименту.

Полученные уравнения позволяют определить величины реакционной способности и пористости кокса для любого состава шихты из углей рассмотренных групп. На основании найденных уравнений регрессии (VI.97) и (VI.98) были построены проекции линий равных значений свойств на сечения (рис. 65) $x_1 = 0{,}0$ и $x_1 = 0{,}3$.

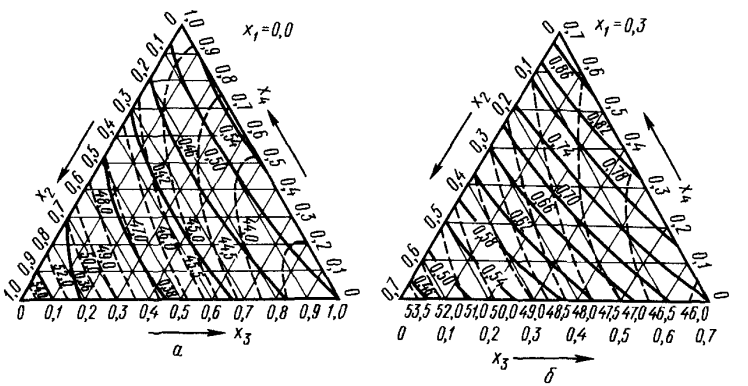


Рис. 65. Линии равных значений свойств:
а — $x_1 = 0$; *б* — $x_1 = 0{,}3$

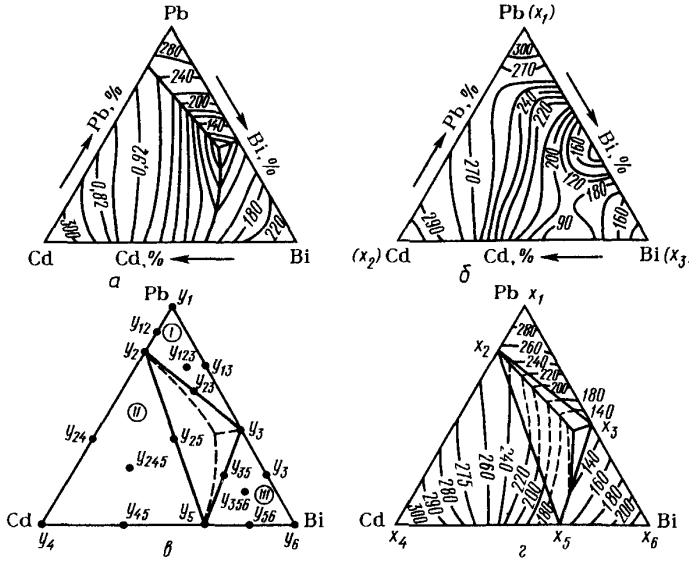


Рис. 66. Системы эвтектического типа

Симплекс-решетчатые планы Шеффе наиболее успешно используют для описания закономерностей в однофазных системах, для однофазных участков сложных систем или если изучаемое свойство определяется только одной фазой. Попытки использовать метод симплексных решеток для построения зависимостей свойств от состава целиком во всей многофазной системе часто оказываются неудачными. Точки симплекс-решетчатого плана могут не совпадать с критическими точками диаграммы, и аналитическое описание не улавливает участки скачкообразного изменения свойств. Например, попытки построения зависимости температуры начала кристаллизации целиком для всей системы эвтектического типа Pb – Cd – Bi не привели к успеху, хотя были построены полиномы от второй до четвертой степени включительно (рис. 66, *а* и *б*). При построении зависимости свойств от состава для многофазной системы необходимо учитывать априорную информацию о строении изучаемой системы. Поверхность ликвидуса в системе эвтектического типа представляет собой три пересекающиеся поверхности первичной кристаллизации каждой фазы. Предлагается аналитически описать каждую из этих поверхностей, применяя симплекс-решетчатые планы, затем найти линии их пересечения и точку пересечения этих линий. Поверхности первичной кристаллизации можно выделить при помощи вспомогательного треугольника, вершинами которого служат точки двойных эвтектик двойных диаграмм (рис. 66, *в*). Образовавшиеся новые треугольники I, II и III рассматриваются как исходные. Для рассматриваемой

системы Pd – Cd – Bi внутри каждого треугольника был реализован неполно-кубический симплекс-решетчатый план (табл. 78).

Таблица 78. **Матрица планирования для получения неполно-кубических полиномов в треугольниках I, II, III**

Номер опыта	В кодированном масштабе						В натуральном масштабе			Температура ликвидуса y, °С
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	Pb	Cd	Bi	
1	1	0	0	0	0	0	100	0	0	$y_1 = 327$
2	0	1	0	0	0	0	82	18	0	$y_2 = 248$
3	0	0	1	0	0	0	45	0	55	$y_3 = 127$
4	½	½	0	0	0	0	91	9	0	$y_{12} = 276$
5	½	0	½	0	0	0	72,5	0	27,5	$y_{13} = 228$
6	0	½	½	0	0	0	63,5	9	27,5	$y_{23} = 180$
7	⅓	⅓	⅓	0	0	0	75,7	6	18,3	$y_{123} = 230$
8	0	0	0	1	0	0	0	100	0	$y_4 = 321$
9	0	0	0	0	1	0	0	40	60	$y_5 = 149$
10	0	½	0	½	0	0	41	59	0	$y_{24} = 278$
11	0	½	0	0	½	0	41	29	30	$y_{25} = 220$
12	0	0	0	½	½	0	0	70	30	$y_{45} = 254$
13	0	⅓	0	⅓	⅓	0	27	53	20	$y_{245} = 257$
14	0	0	0	0	0	1	0	0	100	$y_6 = 271$
15	0	0	½	0	½	0	22,5	20	57,5	$y_{36} = 127$
16	0	0	½	0	0	½	22,5	0	77,5	$y_{36} = 204$
17	0	0	0	0	½	½	0	20	80	$y_{56} = 185$
18	0	0	⅓	0	⅓	⅓	15	13,3	71,7	$y_{356} = 160$

По результатам опытов (табл. 78) были найдены неполные кубические полиномы:

треугольник I

$$\hat{y} = 327\,x_1 + 248\,x_2 + 127\,x_3 - 46\,x_1x_2 + 4\,x_1x_3 - 30\,x_2x_3 + 108\,x_1x_2x_3; \qquad \text{(VI.99)}$$

треугольник II

$$\hat{y} = 248\,x_2 + 321\,x_4 + 149\,x_5 - 26\,x_2x_4 + 86\,x_2x_5 + 76\,x_4x_5 + 69\,x_2\,x_4\,x_5; \qquad \text{(VI.100)}$$

треугольник III

$$\hat{y} = 127\,x_3 + 149\,x_5 + 271\,x_6 - 44\,x_3x_5 + 20\,x_3x_6 + 100\,x_5x_6 + 39\,x_3x_5x_6, \qquad \text{(VI.101)}$$

где y – температура ликвидуса, °С, x_1 – Pb; x_2 – сплав Pb с 18% Cd; x_3 – сплав Bi с 45% Pb; x_4 – Cd; x_5 – сплав Bi с 40% Cd; x_6 – Bi.

Все полиномы оказались адекватными. Затем была проведена графическая экстраполяция (рис. 66, *г*), давшая возможность весьма точно определить линии кристаллизации двойных эвтектик в тройных сплавах и координаты точки тройной эвтектики.

В симплекс-решетчатых планах при получении полиномов невысоких степеней коэффициенты определяют по результатам опытов, в большинстве которых присутствуют не все компоненты. Естественно, что результаты опытов с чистыми компонентами несут мало информации о свойствах изучаемой системы. Для систем компонен-

тов $q \geqslant 4$ можно использовать паланы Ламбракиса — обычные симплексные решетки Шеффе, но не включать в эти решетки чистые компоненты, а вместо них ставить опыты в q точках с координатами

$$x_1 = x_2 = \ldots = x_q = \frac{1}{q-1}.$$

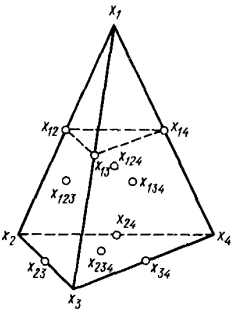


Рис. 67. План Ламбракиса

Например, при построении полинома второй степени в четырехкомпонентной системе следует четыре точки с координатами $x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = 1$ (см. рис. 61, *а*) заменить четырьмя точками с координатами $x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = 1/3$ (рис. 67). Таким образом, план Ламбракиса вместо четырех опытов в вершинах тетраэдра включает четыре опыта в центрах треугольников, образующих данный тетраэдр (x_{123}, x_{124}, x_{134} и x_{234}), и шесть опытов в центрах граней тетраэдра (x_{12}, x_{13}, x_{14}, x_{23}, x_{24} и x_{34}).

3. Симплекс-центроидное планирование. В симплекс-центроидных планах Шеффе содержится $2^q - 1$ точек, q из которых приходится на чистые компоненты, C_q^2 — на двухкомпонентные смеси, C_q^3 — на трехкомпонентные смеси и т. д. и одно наблюдение — на q-компонентную смесь. Координаты точек в симплекс-центроидных планах (1, 0,...,0), (½, ½, 0,...,0),...,($1/q$, $1/q$,...,$1/q$), а также все точки, которые можно получить из этих перестановками координат. Таким образом, план содержит точку в центре (центроид) симплекса и центроиды всех симплексов низшей размерности, его составляющих.

Полиномы, получаемые по симплекс-центроидным планам, содержат столько же коэффициентов, сколько точек в плане, и для q-компонентной смеси имеют вид

$$\hat{y} = \sum_{1 \leqslant i \leqslant q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leqslant i < j < k \leqslant q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \ldots + \beta_{12 \ldots q} x_1 x_2 \ldots x_q. \quad \text{(VI.102)}$$

Для данного числа компонентов q можно составить единственный симплекс-центроидный план. Симплекс-решетчатый план для построения полинома неполной третьей степени является симплекс-центроидным планом для трехкомпонентных систем (см. рис. 61, *б*). Построим в качестве примера симплекс-центроидный план для четырехкомпонентной системы ($q = 4$). Число опытов в плане $N = 2^q - 1 = 2^4 - 1 = 15$. Расположение точек на концентрационном тетраэдре показано на рис. 61, *в*, а соответствующий симплекс-центроидный план приведен в табл. 79.

Полином (VI.102) для $q = 4$ содержит 15 членов и имеет вид

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_4 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{14} x_1 x_4 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{24} x_2 x_4 + \beta_{34} x_3 x_4 + \beta_{123} x_1 x_2 x_3 + \beta_{124} x_1 x_2 x_4 + \beta_{134} x_1 x_3 x_4 + \beta_{234} x_2 x_3 x_4 + \beta_{1234} x_1 x_2 x_3 x_4. \quad \text{(VI.103)}$$

Таблица 79. **Матрица симплекс-центроидного плана в четырехкомпонентной системе**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	y	Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	y
1	1	0	0	0	y_1	9	0	½	0	½	y_{24}
2	0	1	0	0	y_2	10	0	0	½	½	y_{34}
3	0	0	1	0	y_3	11	⅓	⅓	⅓	0	y_{123}
4	0	0	0	1	y_4	12	⅓	⅓	0	⅓	y_{124}
5	½	½	0	0	y_{12}	13	⅓	0	⅓	⅓	y_{134}
6	½	0	½	0	y_{13}	14	0	⅓	⅓	⅓	y_{234}
7	½	0	0	½	y_{14}	15	¼	¼	¼	¼	y_{1234}
8	0	½	½	0	y_{23}						

Воспользовавшись свойством насыщенности плана, последовательно подставляя координаты экспериментальных точек $1 \div 15$ в полином (VI.103), определим коэффициенты полинома:

$$\beta_1 = y_1; \quad \beta_2 = y_2; \quad \beta_3 = y_3; \quad \beta_4 = y_4; \tag{VI.104}$$

$$\left.\begin{aligned} \beta_{12} &= 4y_{12} - 2y_1 - 2y_2 \\ \beta_{13} &= 4y_{13} - 2y_1 - 2y_3 \\ \beta_{14} &= 4y_{14} - 2y_1 - 2y_4 \\ \beta_{23} &= 4y_{23} - 2y_2 - 2y_3 \\ \beta_{24} &= 4y_{24} - 2y_2 - 2y_4 \\ \beta_{34} &= 4y_{34} - 2y_3 - 2y_4 \end{aligned}\right\} \tag{VI.105}$$

$$\begin{aligned} \beta_{123} &= 27y_{123} - 12(y_{12} + y_{13} + y_{23}) + 3(y_1 + y_2 + y_3), \\ \beta_{124} &= 27y_{124} - 12(y_{12} + y_{14} + y_{24}) + 3(y_1 + y_2 + y_4), \\ \beta_{134} &= 27y_{134} - 12(y_{13} + y_{14} + y_{34}) + 3(y_1 + y_3 + y_4), \\ \beta_{234} &= 27y_{234} - 12(y_{23} + y_{24} + y_{34}) + 3(y_2 + y_3 + y_4), \end{aligned} \tag{VI.106}$$

$$\begin{aligned} \beta_{1234} = 256y_{1234} - 108(y_{123} + y_{124} + y_{134} + y_{234}) + 32(y_{12} + y_{13} + y_{14} + y_{23} + \\ + y_{24} + y_{34}) - 4(y_1 + y_2 + y_3 + y_4). \end{aligned} \tag{VI.107}$$

Аналогично, для полинома (VI.102) q-компонентной смеси имеем:

$$\beta_i = y_i, \tag{VI.108}$$

$$\beta_{ij} = 4y_{ij} - 2y_i - 2y_j = 2[2y_{ij} - (y_i + y_j)], \tag{VI.109}$$

$$\begin{aligned} \beta_{ijk} &= 27y_{ijk} - 12(y_{ij} + y_{ik} + y_{jk}) + 3(y_i + y_j + y_k) = \\ &= 3[9y_{ijk} - 4(y_{ij} + y_{ik} + y_{jk}) + (y_i + y_j + y_k)], \end{aligned} \tag{VI.110}$$

$$\begin{aligned} \beta_{ijkm} = 256y_{ijkm} - 108(y_{ijk} + y_{ijm} + y_{ikm} + y_{jkm}) + 32(y_{ij} + y_{ik} + \\ + y_{im} + y_{jk} + y_{jm} + y_{km}) - 4(y_i + y_j + y_k + y_m) = 4[64y_{ijkm} - 27(y_{ijk} + \\ + y_{ijm} + y_{ikm}) + 8(y_{ij} + y_{ik} + y_{im} + y_{jk} + y_{jm} + y_{km}) - \\ - (y_i + y_j + y_k + y_m)]. \end{aligned} \tag{VI.111}$$

В общем случае формула для коэффициентов уравнения регрессии, полученного по симплекс-центроидному плану, имеет вид

$$\beta_{ij\ldots} = r \sum_{t=1} (-1)^{r-t}\, t^{r-1}\, SS_t, \qquad \text{(VI.112)}$$

где r — число индексов у коэффициента $\beta_{ij\ldots}$; SS_t — сумма результатов опытов всех смесей из t-компонентов, взятых в равных пропорциях $(1/t)$. Например, для коэффициента β_{ijk} имеем $r=3(i, j, k)$ и три суммы:

$$y_i + y_j + y_k = SS_1 \text{ — для } 1/t = 1. \qquad \text{(VI.113)}$$

$$y_{ij} + y_{jk} + y_{ik} = SS_2 \text{ — для } 1/t = 1/2, \qquad \text{(VI.114)}$$

$$y_{ijk} = SS_3 \text{ — для } 1/t = 1/3. \qquad \text{(VI.115)}$$

Таким образом,

$$\beta_{ijk} = 3\left[(-1)^{3-1}\, 1^{3-1}\, SS_1 + (-1)^{3-2}\, 2^{3-1}\, SS_2 + (-1)^{3-3}\, 3^{3-1}\, SS_3\right] =$$
$$= 3\left[(y_i + y_j + y_k) - 4\,(y_{ij} + y_{ik} + y_{jk}) + 9y_{ijk}\right]. \qquad \text{(VI.116)}$$

Проверку адекватности уравнения регрессии, полученного по симплекс-центроидному плану, и построение доверительных интервалов значений свойств, предсказанных уравнением, осуществляют теми же способами, что и в методе симплексных решеток.

Пример 2. Изучалось влияние состава на активность (y_1) и прочность (y_2) платинового катализатора на непористом металлическом носителе при 350°С. Суммарное массовое количество компонентов от опыта к опыту поддерживалось постоянным. Приняв его за единицу, можно записать, что $\sum_{i=1}^{3} x_i = 1$, где x_i — компонент Pt / Al_2O_3 — измельченный отработанный катализатор риформинга; x_2 и x_3 — компоненты — неорганические окислы металлов II и III групп периодической системы элементов Д. И. Менделеева.

Р е ш е н и е. Был применен симплекс-центроидный план для $q=3$. Матрица планирования и результаты экспериментов представлены в таблице.

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	y_1, %	y_2, %
1	1	0	0	97,4	62
2	0	1	0	3,0	73
3	0	0	1	4,7	47
4	0,5	0,5	0	70,0	64
5	0,5	0	0,5	66,0	55
6	0	0,5	0,5	6,8	72
7	0,333	0,333	0,333	95,4	67

По формулам (VI.39) и (VI.40) определены коэффициенты уравнений регрессии для активности

$$\hat{y}_1 = 97,4x_1 + 3,0x_2 + 4,7x_3 + 79,3x_1x_2 + 59,9x_1x_3 + 11,8x_2x_3 +$$
$$+ 1175,35x_1x_2x_3 \qquad \text{(VI.117)}$$

и прочности катализатора

$$\hat{y}_2 = 62x_1 + 73x_2 + 47x_3 - 14x_1x_2 + 2x_1x_3 + 48x_2x_3 + 63x_1x_2x_3. \quad \text{(VI.118)}$$

Ошибка воспроизводимости при измерении активности катализатора $s_{y_1} = 3{,}24$, при измерении прочности $s_{y_2} = 2{,}37$.

Адекватность уравнений регрессии (VI.117) и (VI.118) проверялась по критерию Стьюдента в контрольных точках 8, 9 и 10 (таблица).

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	y_1	$\hat{y}_1$	y_2	$\hat{y}_2$
8	0,333	0,667	0	46	52	72	66
9	0,667	0,333	0	96	84	63	70
10	0,580	0,320	0,097	91	98	62	65

Для всех контрольных точек значения t-критерия для уровня значимости $p = 0{,}05$ меньше табличного. На рис. 68 показаны линии равного значения активности катализатора y_1 и прочности y_2, построенные по уравнениям (VI.117) и (VI.118). Наибольшая активность катализатора соответствует области, где значения компонента $x_1 > 0{,}4$. Прочность, равная 65%, является вполне удовлетворительной. Наибольший интерес представляют точки, лежащие на пересечении линии равного выхода $\hat{y}_2 = 65\%$ с линией равного выхода $\hat{y}_1 = 100\%$. Опыт 10 (см. таблицу и рис. 68), поставленный в указанной области, дал хорошее (в пределах ошибки опыта) совпадение расчетных и экспериментальных результатов.

4. Планирование эксперимента при исследовании локальных участков диаграмм. При изучении диаграмм состав — свойство q-компонентных смесей часто возникает необходимость исследовать зависимость свойства от состава не во всей области изменения концентрации компонентов $0 \leqslant x_i \leqslant 1$, а в локальном участке диаграммы:

$$0 < a_i < x_i < b_i < 1, \quad i = 1, 2, \ldots, q.$$

1. Исследуемая область — симплекс. Изучаемая локальная область на диаграмме может представлять собой неправильный симплекс, координаты вершин которого $A_1(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \ldots, x_q^{(1)})$, $A_2(x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, \ldots, x_q^{(2)}), \ldots, A_q(x_1^{(q)}, x_2^{(q)}, \ldots, x_q^{(q)})$ известны.

Чтобы иметь возможность применять в этом случае планы, используемые для изучения полных диаграмм, проводят перенормиров-

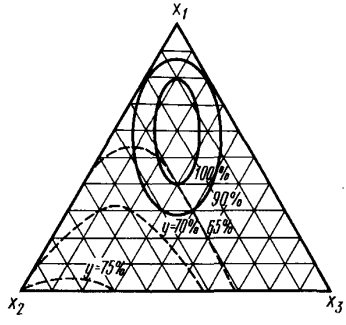


Рис. 68. Линии равных значений y_1 (—) и y_2 (— — —)

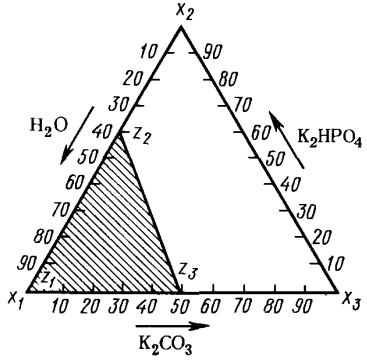


Рис. 69. Область исследования температуры кипения в системе K_2HPO_4 – K_2CO_3 – H_2O

ку и принимают составы в вершинах A_j, $j = 1, 2,...,q$ за самостоятельные псевдокомпоненты так, чтобы для всей области локального симплекса выполнялось условие

$$\sum_{i=1}^{q} z_i = 1. \qquad \text{(VI.119)}$$

Планирование экспериментов осуществляется в системе координат псевдокомпонентов. Относительно новых переменных z_1, $z_2,...,z_q$, удовлетворяющих условию (VI.119), могут быть построены все ранее описанные планы. Для проведения экспериментов необходимо перейти от псевдокомпонентов z_i к исходным компонентам x_i. Для любой u-й точки плана этот пересчет осуществляется по формуле

$$x_i^{(u)} = x_i^{(1)} + z_2^{(u)}\left(x_i^{(2)} - x_i^{(1)}\right) + z_3^{(u)}\left(x_i^{(3)} - x_i^{(1)}\right) + \cdots + \\ + z_q^{(u)}\left(x_i^{(q)} - x_i^{(1)}\right), \qquad \text{(VI.120)}$$

где x_i — содержание i-го компонента в вершине $z_j(A_j)$.

Реализовав план, рассчитывают коэффициенты уравнения регрессии в координатах псевдокомпонентов

$$\hat{y} = f(z_1, z_2, \ldots, z_q), \qquad \text{(VI.121)}$$

используя ранее приведенные формулы для соответствующих планов, и проверяют его адекватность. Для практического использования уравнение (VI.121) записывают в исходной системе координат при помощи формул перевода координат из одной афинной системы в другую:

$$\begin{aligned}
z_1 &= z_1^{(1)} + x_2\left(z_1^{(2)} - z_1^{(1)}\right) + x_3\left(z_1^{(3)} - z_1^{(1)}\right) + \cdots + x_q\left(z_1^{(q)} - z_1^{(1)}\right), \\
z_2 &= z_2^{(1)} + x_2\left(z_2^{(2)} - z_2^{(1)}\right) + x_3\left(z_2^{(3)} - z_2^{(1)}\right) + \cdots + x_q\left(z_2^{(q)} - z_2^{(1)}\right), \qquad \text{(VI.122)} \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
z_{q-1} &= z_{q-1}^{(1)} + x_2\left(z_{q-1}^{(2)} - z_{q-1}^{(1)}\right) + x_3\left(z_{q-1}^{(3)} - z_{q-1}^{(1)}\right) + \cdots + x_q\left(z_{q-1}^{(q)} - z_{q-1}^{(1)}\right).
\end{aligned}$$

Значения $z_i^{(j)}$ находятся при решении $(q-1)$ систем уравнений:

$$\left.\begin{aligned}
&x_1^{(1)} z_1^{(1)} + x_2^{(1)} z_1^{(2)} + x_3^{(1)} z_1^{(3)} + \cdots + x_q^{(1)} z_1^{(q)} = 1 \\
&x_1^{(2)} z_1^{(1)} + x_2^{(2)} z_1^{(2)} + x_3^{(2)} z_1^{(3)} + \cdots + x_q^{(2)} z_1^{(q)} = 0 \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
&x_1^{(q)} z_1^{(1)} + x_2^{(q)} z_1^{(2)} + x_3^{(q)} z_1^{(3)} + \cdots + x_q^{(q)} z_1^{(q)} = 0
\end{aligned}\right\}$$

$$\left.\begin{aligned}
&x_1^{(1)} z_2^{(1)} + x_2^{(1)} z_2^{(2)} + x_3^{(1)} z_2^{(3)} + \cdots + x_q^{(1)} z_2^{(q)} = 0 \\
&x_1^{(2)} z_2^{(1)} + x_2^{(2)} z_2^{(2)} + x_3^{(2)} z_2^{(3)} + \cdots + x_q^{(2)} z_2^{(q)} = 1 \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
&x_1^{(q)} z_2^{(1)} + x_2^{(q)} z_2^{(2)} + x_3^{(q)} z_2^{3} + \cdots + x_q^{(q)} z_2^{(q)} = 0
\end{aligned}\right\}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \qquad \text{(VI.123)}$$

$$\left.\begin{aligned}
&x_1^{(1)} z_{q-1}^{(1)} + x_2^{(1)} z_{q-1}^{(2)} + x_3^{(1)} z_{q-1}^{(3)} + \cdots + x_q^{(1)} z_{q-1}^{(q)} = 0\\
&x_1^{(2)} z_{q-1}^{(1)} + x_2^{(2)} z_{q-1}^{(2)} + x_3^{(2)} z_{q-1}^{(3)} + \cdots + x_q^{(2)} z_{q-1}^{(q)} = 0\\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\
&x_1^{(q)} z_{q-1}^{(1)} + x_2^{(q)} z_{q-1}^{(2)} + x_3^{(q)} z_{q-1}^{(3)} + \cdots + x_q^{(q)} z_{q-1}^{(q)} = 1
\end{aligned}\right\}$$

где $z_i^{(j)}$ — содержание псевдокомпонента z_i в вершинах исходного симплекса; $x_i^{(j)}$ — содержание i-го компонента в вершинах $z_j(A_j)$, $j = 1, 2, \ldots, q$. Поскольку такой перевод координат возможен только для уравнений с независимыми переменными, исходное уравнение регрессии необходимо преобразовать, исключив одну переменную, например последнюю q-ю:

$$z_q = 1 - \sum_{i=1}^{q-1} z_i. \qquad \text{(VI.124)}$$

Пример 3. Изучалась температура кипения тройной смеси H_2O – K_2HPO_4 – K_2CO_3. Необходимо было определить уравнение регрессии температуры кипения (y, °С) от состава смеси (%). Исследованию подвергался не весь концентрационный треугольник, а лишь подобласть ненасыщенных растворов при 20°С — локальный участок диаграммы в виде треугольника с вершинами z_1 (100, 0, 0), z_2 (40, 60, 0), z_3 (50, 0, 50), рис. 69.

Р е ш е н и е. Для получения уравнения регрессии был составлен симплекс-решетчатый план относительно псевдокомпонент z_1, z_2, z_3; по формуле (VI.120) определено содержание исходных компонентов в экспериментальных точках. Уравнения регрессии второго и неполного третьего порядков оказались неадекватными. Используя свойство композиционности симплекс-решетчатых планов, матрица планирования была достроена для получения уравнения регрессии четвертого порядка.

Матрица планирования и результаты опытов

Номер опыта	z_1	z_2	z_3	x_1	x_2	x_3	$\bar{y}$
1	1	0	0	100	0	0	99,9
2	0	1	0	40	60	0	113,5
3	0	0	1	50	0	50	115,7
4	0,5	0,5	0	70	30	0	103,1
5	0,5	0	0,5	75	0	25	104,8
6	0	0,5	0,5	45	30	25	114,8
7	0,333	0,333	0,333	63,33	20	16,67	105,6
8	0,75	0,25	0	85	15	0	101,5
9	0,25	0,75	0	55	45	0	107,2
10	0,75	0	0,25	87,5	0	12,5	101,6
11	0,25	0	0,75	62,5	0	37,5	107,7
12	0	0,75	0,25	42,5	45	12,5	112,5
13	0	0,25	0,75	47,5	15	37,5	116,4
14	0,5	0,25	0,25	72,5	15	12,5	103,4
15	0,25	0,5	0,25	57,5	30	12,5	104,4
16	0,25	0,25	0,5	60	15	25	109,0
17	0,2	0,2	0,6	58	12	30	108,3*
18	0,5	0,125	0,375	73,75	7,5	18,75	103,3*
19	0,4	0,15	0,45	68,5	9	22,5	104,2*
20	0,3	0,175	0,525	63,25	10,5	26,25	106,2*

* Контрольные точки.

Условия опытов выражены в псевдокомпонентах z_j и в натуральном масштабе x_j, %. Средние результаты $\bar{y}$ измерения температуры получены по двум параллельным опытам. Ошибка воспроизводимости равна $s_y = 0{,}86$. Число степеней свободы ошибки воспроизводимости $f_y = 20$.

Коэффициенты уравнения регрессии четвертого порядка рассчитаны с использованием свойства насыщенности матрицы планирования по формулам (VI.46). Уравнение регрессии в псевдокомпонентах имеет вид

$$\hat{y} = 99{,}88z_1 + 113{,}51z_2 + 115{,}69z_3 - 14{,}22z_1z_2 - 12{,}13z_1z_3 + 0{,}91z_2z_3 + \\ + 6{,}18z_1z_2(z_1 - z_2) + 10{,}12z_1z_3(z_1 - z_3) - 15{,}34z_2z_3(z_2 - z_3) + \\ + 6{,}90z_1z_2(z_1 - z_2)^2 - 17{,}61z_1z_3(z_1 - z_3)^2 + 6{,}32z_2z_3(z_2 - z_3)^2 + \\ + 1{,}07z_1^2z_2z_3 - 274{,}61z_1z_2^2z_3 + 142{,}21z_1z_2z_3^2. \qquad \text{(VI.125)}$$

В таблице сведены результаты проверки адекватности полученного уравнения регрессии.

Номер опыта	$\bar{y}$	$\hat{y}$	Δy	ξ	t
17	108,3	110,7	2,4	1,3	2,16
18	103,3	100,9	2,4	1,0	2,27
19	104,2	107,0	2,8	1,0	2,66
20	106,3	108,7	2,4	1,1	2,16

Табличное значение критерия Стьюдента $t_{0,01;20} = 2{,}8$. Уравнение (VI.125) адекватно эксперименту. Перейдем в уравнении (VI.125) от псевдокомпонент z_j к натуральным переменным x_j. Системы уравнений (VI.123) для рассматриваемой задачи имеют вид

$$\begin{aligned} 1z_1^{(1)} + 0z_1^{(2)} + 0z_1^{(3)} &= 1, \\ 0{,}4z_1^{(1)} + 0{,}6z_1^{(2)} + 0z_1^{(3)} &= 0, \\ 0{,}5z_1^{(1)} + 0z_1^{(2)} + 0{,}5z_1^{(3)} &= 0, \\ 1z_2^{(1)} + 0z_2^{(2)} + 0z_2^{(3)} &= 0, \\ 0{,}4z_2^{(1)} + 0{,}6z_2^{(2)} + 0z_2^{(3)} &= 1, \\ 0{,}5z_2^{(1)} + 0z_2^{(2)} + 0{,}5z_2^{(3)} &= 0. \end{aligned} \qquad \text{(VI.126)}$$

В результате решения систем (VI.126) получаем

$$\begin{aligned} z_1^{(1)} &= 1, \quad z_2^{(1)} = 0, \\ z_1^{(2)} &= 0{,}7, \quad z_2^{(2)} = 1{,}7, \\ z_1^{(3)} &= -1, \quad z_2^{(3)} = 0. \end{aligned} \qquad \text{(VI.127)}$$

Использовав полученные решения в системе уравнений (VI.122), получим формулы связи между натуральными координатами x_j и системой координат z_j:

$$\begin{aligned} z_1 &= 1 - 1{,}7x_2 - 2x_3, \\ z_2 &= 1{,}7x_2, \end{aligned} \qquad \text{(VI.128)}$$

$$z_3 = 1 - z_1 - z_2 = 2x_3.$$

Подставив (VI.128) в (VI.125), получим уравнение регрессии в исходных координатах:

$$\hat{y} = 99{,}88 + 20{,}82x_2 - 7{,}63x_3 + 92{,}88x_2x_3 - 107{,}83x_2^2 + 279{,}28x_3^2 -$$
$$- 1373{,}69x_2^2x_3 - 243{,}59x_2x_3^2 + 2230{,}35x_2^2x_3^2 + 312{,}78x_2^3 - 965{,}12x_3^3 +$$
$$+ 2146{,}05x_2^3x_3 - 179{,}60x_2x_3^3 - 212{,}96x_2^4 + 1127{,}1x_3^4. \qquad \text{(VI.129)}$$

Для удобства использования по уравнению регрессии построены линии равных температур (рис. 70).

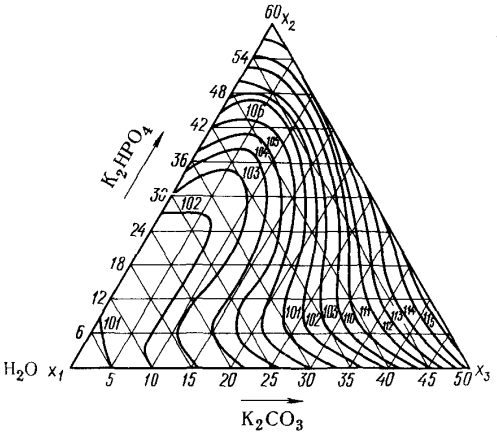


Рис. 70. Линии равных значений температур

2. Исследуемая область — многогранник. При наличии ограничений на изменение концентраций компонентов исследуемая область в общем случае образует некоторый многогранник. При построении плана экспериментов надо некоторым образом распределить экспериментальные точки по получающемуся из условия

$$0 \leqslant a_i \leqslant x_i \leqslant b_i \leqslant 1 \qquad \text{(VI.130)}$$

многограннику. При этом вырожденные случаи

$$\sum_{i=1}^{q} a_i \geqslant 1 \quad \text{и} \quad \sum_{i=1}^{q} b_i \leqslant 1 \qquad \text{(VI.131)}$$

исключаются.

Экспериментальные точки предложено выбирать следующим образом:

1) выписываются все возможные комбинации двух уровней a_i и b_i для каждого из компонентов, но в каждой комбинации пропускается содержание одного компонента. Число таких комбинаций для q-компонентной смеси равно $q2^{q-1}$;

2) среди всех комбинаций выбирают те, где сумма компонентов меньше единицы и выполняются ограничения (VI.130). В выбранные комбинации добавляют пропущенные компоненты в количестве, удовлетворяющем соотношению $\sum_{i=1}^{q} x_i = 1$. Полученные таким образом точки плана, удовлетворяющие условию (VI.130), расположены в вершинах ограничивающего многогранника;

3) к полученным таким образом точкам плана добавляют центры двух-, трех-,...,$(q-1)$-мерных граней многогранника и его центр.

С ростом q число комбинаций условий эксперимента быстро растет и становится значительно больше числа коэффициентов обычно применяемого для этих планов полинома второго порядка. Определение коэффициентов уравнения регрессии второго порядка проводится по методу наименьших квадратов. Поскольку план эксперимента ненасыщенный, проверку адекватности уравнения регрессии можно проводить, используя F-критерий.

Рассмотрим построение плана Мак Лина и Андерсона для исследования и оптимизации яркости свечения смеси, компонентами которой являются магний (x_1), сода (x_2), нитрат стронция (x_3) и связующее вещество (x_4). На содержание компонентов в смеси накладываются следующие ограничения:

$$0{,}40 \leqslant x_1 \leqslant 0{,}60, \quad 0{,}10 \leqslant x_2 \leqslant 0{,}50, \quad 0{,}10 \leqslant x_3 \leqslant 0{,}50, \quad 0{,}03 \leqslant x_4 \leqslant 0{,}08.$$

В табл. 80 приведены все возможные комбинации составов смеси с пропусками в комбинациях одного из компонентов.

Таблица 80. **Выбор вершин многогранника в плане Мак Лина и Андерсона**

Номер опыта	Содержание компонентов				Номер опыта	Содержание компонентов			
	x_1	x_2	x_3	x_4		x_1	x_2	x_3	x_4
1	0,40	0,10	0,10	—	17(1)	0,40	0,10	0,47*	0,03
2	0,40	0,10	0,50	—	18(2)	0,40	0,10	0,42*	0,08
3	0,40	0,50	0,10	—	19	0,40	0,50	—	0,03
4	0,40	0,50	0,50	—	20	0,40	0,50	—	0,08
5	0,60	0,10	0,10	—	21(3)	0,60	0,10	0,27*	0,03
6	0,60	0,10	0,50	—	22(4)	0,60	0,10	0,22*	0,08
7	0,60	0,50	0,10	—	23	0,60	0,50	—	0,03
8	0,60	0,50	0,50	—	24	0,60	0,50	—	0,08
9(5)	0,40	0,47*	0,10	0,03	25	—	0,10	0,10	0,03
10(6)	0,40	0,42*	0,10	0,08	26	—	0,10	0,10	0,08
11	0,40	—	0,50	0,03	27	—	0,10	0,50	0,03
12	0,40	—	0,50	0,08	28	—	0,10	0,50	0,08
13(7)	0,60	0,27*	0,10	0,03	29	—	0,50	0,10	0,03
14(8)	0,60	0,22*	0,10	0,08	30	—	0,50	0,10	0,08
15	0,60	—	0,50	0,03	31	—	0,50	0,50	0,03
16	0,60	—	0,50	0,08	32	—	0,50	0,50	0,08

* Количество добавленного компонента.

Таким образом получено 8 точек плана — вершин многогранника (рис. 71). Эти точки необходимо дополнить координатами центров всех граней многогранника и центра многогранника (табл. 81).

Таблица 81. **Выбор центров граней в плане Мак Лина и Андерсона**

Номер опыта	Содержание компонентов				Точки, образующие грань
	x_1	x_2	x_3	x_4	
(9)	0,50	0,10	0,345	0,055	(1), (2), (3), (4)
(10)	0,50	0,345	0,10	0,055	(5), (6), (7), (8)
(11)	0,40	0,2725	0,2725	0,055	(1), (2), (5), (6)
(12)	0,60	0,1725	0,1725	0,055	(3), (4), (7), (8)
(13)	0,50	0,2350	0,2350	0,030	(1),(3),(5),(7)
(14)	0,50	0,2100	0,2100	0,080	(2), (4), (6), (8)
(15)	0,50	0,2225	0,2225	0,055	Центр многогранника

Координаты центра многогранника определяются усреднением соответствующих координат всех восьми вершин плана, координаты центров граней — усреднением координат точек, образующих грань (табл. 81 и рис. 71).

Целиком план Мак Лина и Андерсона для четырехкомпонентной смеси и результаты эксперимента приведены в табл. 82.

Таблица 82. **План Мак Лина и Андерсона для четырехкомпонентной смеси**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	$y_{св}$	Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	$y_{св}$
1	0,40	0,10	0,47	0,03	75	9	0,50	0,10	0,345	0,055	220
2	0,40	0,10	0,42	0,08	180	10	0,50	0,345	0,10	0,055	200
3	0,60	0,10	0,27	0,03	195	11	0,40	0,2725	0,2725	0,055	190
4	0,60	0,10	0,22	0,08	300	12	0,60	0,1725	0,1725	0,055	310
5	0,40	0,47	0,10	0,03	145	13	0,50	0,235	0,235	0,030	200
6	0,40	0,42	0,10	0,08	230	14	0,50	0,210	0,210	0,080	410
7	0,60	0,27	0,10	0,03	220	15	0,50	0,2225	0,2225	0,055	425
8	0,60	0,22	0,10	0,08	350						

Коэффициенты приведенного полинома второго порядка определены по методу наименьших квадратов.

Уравнение регрессии имеет вид

$$\hat{y} = -1,558x_1 - 2,851x_2 - 2,426x_3 + 14,372x_4 + 8,300x_1x_2 + 8,076x_1x_3 - 6,625x_1x_4 + 3,213x_2x_3 - 16,998x_2x_4 - 17,127x_3x_4. \quad (VI.132)$$

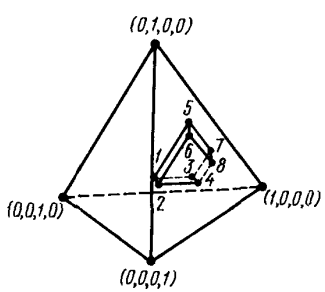


Рис. 71. План Мак Лина и Андерсона

Так как зависимость свойства от состава адекватно описывается уравнением регрессии второго порядка, оказалось возможным определить оптимальные условия, применив метод нелинейного программирования. Усло-

вия, обеспечивающие максимальную яркость свечения, определялись при ограничениях (VI.131):

$$\hat{y}_{max} = 397{,}48 \text{ при } x_1 = 0{,}5233, \quad x_2 = 0{,}2299, \quad x_3 = 0{,}1608, \quad x_4 = 0{,}080.$$

С увеличением числа компонентов смеси число экспериментальных точек в плане Мак Лина и Андерсона быстро возрастает. Для сокращения числа экспериментов можно исключить некоторые из центров граней или такие точки, после исключения которых оставшиеся оказываются распределенными по исследуемой области более или менее равномерно.

5. *D*-Оптимальные планы. Среди различных известных критериев оптимальности планов важнейшими являются требования *D*- и *G*-оптимальности *D*-Оптимальным называется план, минимизирующий объем эллипсоида рассеяния оценок коэффициентов уравнения регрессии. Свойство *G*-оптимальности обеспечивает наименьшую максимальную величину дисперсии предсказанных значений отклика в области исследования. Симплекс-решетчатые планы обладают свойствами *D*- и *G*-оптимальности только при построении полиномов второго и неполного третьего порядка. Планы Шеффе более высокого порядка не являются *D*-оптимальными. *D*-оптимальная симплексная решетка для полинома третьего порядка была построена позднее Кифером. Если рассмотреть множество планов с координатами точек

$$\begin{gathered} x_i = 1, \quad x_j = x_k = 0, \\ x_i = 1 - x_j = b, \quad x_k = 0, \quad b < {}^1/_2, \\ x_i = x_j = x_k = {}^1/_3, \end{gathered} \qquad \text{(VI.133)}$$

то для построения полинома третьего порядка план будет *D*-оптимальным при $b = (1 - \sqrt{5})/2$, т. е. точки на сторонах симплекса берут с координатами $x_i = 0{,}2764$; $x_j = 0{,}7236$.

В табл. 83 приведен *D*-оптимальный план для построения полинома третьего порядка в трехкомпонентной системе.

Таблица 83. ***D*-Оптимальный план для полинома третьего порядка в трехкомпонентной системе**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	y
1	1	0	0	y_1
2	0	1	0	y_2
3	0	0	1	y_3
4	0,7236	0,2764	0	y_{112}
5	0,2764	0,7236	0	y_{122}
6	0,7236	0	0,2764	y_{113}
7	0,2764	0	0,7236	y_{133}
8	0	0,7236	0,2764	y_{223}
9	0	0,2764	0,7236	y_{233}
10	0,3333	0,3333	0,3333	y_{123}

По этому плану определяются коэффициенты полинома третьего порядка того же вида, что и при реализации обычной симплексной решетки:

$$\hat{y} = \sum_{1 \leqslant i \leqslant q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \\ + \sum_{1 \leqslant i < j < k \leqslant q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k. \qquad \text{(VI.134)}$$

Формулы для расчета коэффициентов полинома получены подстановкой координат экспериментальных точек в уравнение регрессии:

$$\beta_i = y_i,$$

$$\beta_{ij} = {}^{5}/_{2}(y_{iij} + y_{ijj} + y_i - y_j),$$

$$\gamma_{ij} = {}^{5}/_{2}[5(y_{iij} - y_{ijj}) - y_i + y_j], \qquad \text{(VI.135)}$$

$$\beta_{ijk} = 27y_{ijk} - {}^{15}/_{2}(y_{iij} + y_{ijj} + y_{iik} + y_{ikk} + y_{jkk} + y_{jjk}) + 6(y_i + y_j + y_k).$$

Проверка адекватности и построение доверительных интервалов при использовании D-оптимального плана (табл. 83) проводятся так же, как и в методе симплексных решеток. Зависимость ξ от состава приведена на рис. 72.

При построении полинома четвертого порядка для трехкомпонентной системы план будет D-оптимальным при

$$x_i = \frac{7 - \sqrt{21}}{14}; \quad x_j = 1 - x_i; \quad x_k = 0,$$

или

$$x_i = 0{,}1727; \quad x_j = 0{,}8273; \quad x_k = 0. \qquad \text{(VI.136)}$$

Таблица 84. **D-Оптимальный план для полинома четвертого порядка в трехкомпонентной системе**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	y
1	1	0	0	y_1
2	0	1	0	y_2
3	0	0	1	y_3
4	0,5	0,5	0	y_{12}
5	0,5	0	0,5	y_{13}
6	0	0,5	0,5	y_{23}
7	0,8273	0,1727	0	y_{1112}
8	0,1727	0,8273	0	y_{1222}
9	0,8273	0	0,1727	y_{1113}
10	0,1727	0	0,8273	y_{1333}
11	0	0,8273	0,1727	y_{2223}
12	0	0,1727	0,8273	y_{2333}
13	0,567	0,2165	0,2165	y_{1123}
14	0,2165	0,567	0,2165	y_{1223}
15	0,2165	0,2165	0,567	y_{1233}

Кроме того, в D-оптимальном плане четвертого порядка имеются точки с координатами

$$x_i = x_j = \frac{7 - \sqrt{5}}{22}; \quad x_k = 1 - (x_i + x_j),$$

или

$$x_i = x_j = 0{,}2165; \quad x_k = 0{,}567. \tag{VI.137}$$

В табл. 84 приведен D-оптимальный план четвертого порядка для трехкомпонентной системы.

По этому плану определяются коэффициенты уравнения регрессии вида

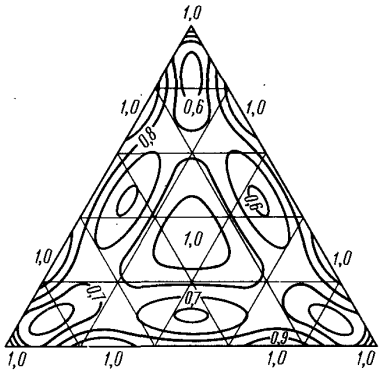


Рис. 72. Изолинии ξ для D-оптимального плана третьего порядка

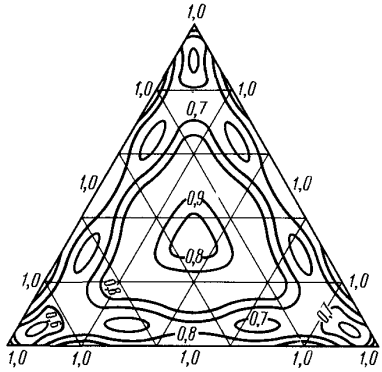


Рис. 73. Изолинии ξ для D-оптимального плана четвертого порядка

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \gamma_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) +$$
$$+ \gamma_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \gamma_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3) + \delta_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2)^2 + \delta_{13} x_1 x_3 (x_1 -$$
$$- x_3)^2 + \delta_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3)^2 + \beta_{1123} x_1^2 x_2 x_3 + \beta_{1223} x_1 x_2^2 x_3 + \beta_{1233} x_1 x_2 x_3^2 . \tag{VI.138}$$

Формулы для расчета коэффициентов полинома четвертого порядка получены подстановкой координат экспериментальных точек в уравнение регрессии:

$$\beta_i = y_i, \tag{VI.139}$$

$$\beta_{ij} = 4y_{ij} - 2y_i - 2y_j, \tag{VI.140}$$

$$\gamma_{ij} = {}^7/_6 \left[3(-y_i + y_j) + \sqrt{21}\,(y_{iiij} - y_{ijjj})\right], \tag{VI.141}$$

$$\delta_{ij} = {}^7/_6 \left[-3(y_i + y_j) - 8y_{ij} + 7(y_{iiij} + y_{ijjj})\right], \tag{VI.142}$$

$$\beta_{iijk} = 26{,}657\, y_i - 6{,}167\,(y_j + y_k) - 16{,}96\,(y_{ij} + y_{ik}) + 0{,}511 y_{jk} -$$
$$- 32{,}18\,(y_{iiij} + y_{iiik}) + 17{,}196\,(y_{ijjj} + y_{ikkk}) + 5{,}72\,(y_{jjjk} + y_{jkkk}) +$$
$$+ 84{,}11\, y_{iijk} - 23{,}237\,(y_{ijjk} + y_{ijkk}); \tag{VI.143}$$
$$i \neq j \neq k; \quad i,\ j,\ k = 1,2,3.$$

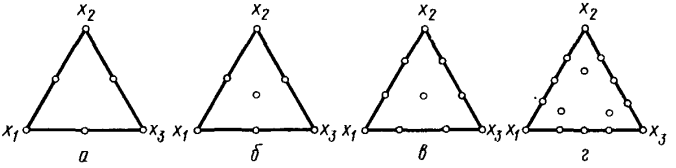


Рис. 74. Расположение точек в *D*-оптимальных планах:
а — второго порядка; *б* — неполного третьего порядка; *в* — третьего порядка; *г* — четвертого порядка

При проверке адекватности для определения зависимости ξ от состава можно пользоваться контурной картой (рис. 73). *D*-Оптимальность плана обеспечила отсутствие на этой контурной карте изолиний $\xi > 1{,}0$ (см. для сравнения рис. 62, *б* для простой симплексной решетки). Однако готовить смеси с содержанием компонентов 0,8273 и 0,1727 труднее, чем смеси с соотношением компонентов ¾ и ¼.

Существенным недостатком рассмотренных *D*-оптимальных планов третьего и четвертого порядка является отсутствие композиционности. На рис. 74 показано расположение экспериментальных точек в *D*-оптимальных планах для трехкомпонентных систем. При необходимости можно от плана второго порядка или неполного третьего (рис. 74, *а, б*) перейти к плану четвертого порядка (рис. 74, *г*), сохранив свойство *D*-оптимальности. При этом точку в центре можно использовать как контрольную. При переходе от плана третьего порядка (рис. 74, *в*) к плану четвертого приходится или переделывать опыты, или работать по плану, не обладающему свойством *D*-оптимальности.

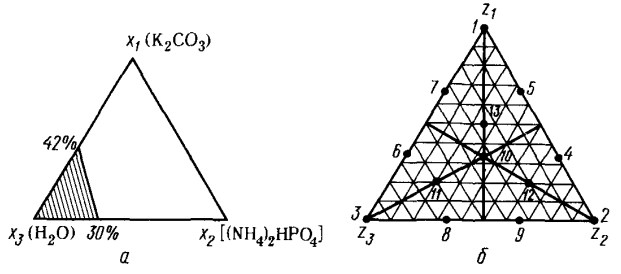


Рис. 75. Область исследования вязкости в системе $(NH_4)_2HPO_4 - K_2CO_3 - H_2O$ (*а*) и план эксперимента (*б*)

Пример 4. Изучалась зависимость вязкости (y) растворов в системе $(NH_4)_2HPO_4 - K_2CO_3 - H_2O$ от состава и температуры. Планирование эксперимента проводилось на локальном участке концентрационного треугольника, ограниченного линией насыщения при 0°С (рис. 75). Локальный участок диаграммы представлял собой треугольник с вершинами z_1 (42, 0, 58), z_2 (0, 30, 70), z_3 (0, 0, 100).

Р е ш е н и е. *D*-Оптимальный план третьего порядка был составлен относительно псевдокомпонентов z_1, z_2, z_3 и по формуле (VI.120) определено содержание исходных компонентов в экспериментальных точках. Условия опытов выражены в псевдокомпонентах z_j и в натуральном масштабе (%) (см. табл.).

Матрица планирования и результаты измерения вязкости

Номер опыта	z_1	z_2	z_3	x_1	x_2	x_3	y_1 (0°C)	y_2 (30°C)
1	1	0	0	42,0	0	58,0	8,33	3,83
2	0	1	0	0	30,0	70,0	4,99	2,54
3	0	0	1	0	0	100,0	1,79	0,80
4	0,2764	0,7236	0	11,6	21,71	66,69	4,22	2,09
5	0,7236	0,2764	0	30,4	8,29	61,31	6,32	2,77
6	0,2764	0	0,7236	11,6	0	88,4	2,20	1,13
7	0,7236	0	0,2764	30,4	0	69,6	4,30	2,26
8	0	0,2764	0,2736	0	8,29	91,71	2,30	1,09
9	0	0,7236	0,2764	0	21,71	78,29	3,93	1,90
10	0,333	0,333	0,333	14,0	10,0	76,0	3,59	1,64
11	0,22	0,22	0,56	9,1	6,5	84,4	2,00	1,23
12	0,22	0,56	0,22	9,1	17,0	73,9	3,68	1,82
13	0,56	0,22	0,22	23,9	6,5	69,6	4,70	2,12

Ошибка воспроизводимости $s_y = 0{,}53$. Число степеней свободы ошибки воспроизводимости $f_y = 13$. По формулам (VI.135) были рассчитаны коэффициенты уравнений регрессии третьего порядка вязкости при 0°C:

$$\hat{y}_1 = 8{,}33\,z_1 + 4{,}99\,z_2 + 1{,}79\,z_3 - 6{,}95\,z_1z_2 - 9{,}05\,z_1z_3 - 1{,}37\,z_2z_3 + \\ + 17{,}90\,z_1z_2\,(z_1 - z_2) + 9{,}90\,z_1z_3\,(z_1 - z_3) + 12{,}37\,z_2z_3\,(z_2 - z_3) + \\ + 18{,}06\,z_1\,z_2\,z_3 \qquad \text{(VI.144)}$$

и при 30°C:

$$\hat{y}_2 = 3{,}83\,z_1 + 2{,}54\,z_2 + 0{,}80\,z_3 - 8{,}77\,z_1z_2 - 3{,}10\,z_1z_3 - 0{,}87\,z_2z_3 + \\ + 5{,}27\,z_1z_2\,(z_1 - z_2) + 6{,}55\,z_1z_3\,(z_1 - z_3) + 5{,}77\,z_2\,z_3\,(z_2 - z_3) + 3{,}00\,z_1z_2z_3. \qquad \text{(VI.145)}$$

Точки 11, 12, 13 (см. табл.) служат для проверки адекватности полученных уравнений регрессии. Результаты проверки адекватности уравнений (VI.144) и (VI.145) сведены в таблицу:

Номер опыта	y_1	$\hat{y}_1$	Δy_1	y_2	$\hat{y}_2$	Δy_2	ξ	t_1	t_2
11	2,00	1,68	0,32	1,23	0,72	0,51	0,8	0,77	1,22
12	3,68	3,68	0	1,82	1,82	0	0,8	0	0
13	4,70	5,70	1,00	2,12	2,59	0,47	0,9	2,33	1,09

Табличное значение критерия Стьюдента $t_{0,016;\,13} = 2{,}85$. Для всех контрольных точек значения t-отношения оказались меньше табличного, следовательно, уравнения регрессии (VI.144) и (VI.145) адекватны эксперименту. Для объединения уравнений регрессии (VI.144) и (VI.145) в одно примем линейную зависимость коэффициентов β от температуры (таблица):

T, °C	T_1	β_1	β_2	β_3	β_{12}	β_{13}	β_{23}	γ_{12}	γ_{13}	γ_{23}	β_{123}
0	−1	8,33	4,99	1,79	−6,95	−9,05	−1,37	17,90	9,90	12,37	13,06
30	+1	3,83	2,54	0,80	−8,77	−3,10	−0,87	5,27	6,55	5,77	3,00

Для удобства расчета зависимости коэффициента β от температуры воспользуемся линейным преобразованием вида (V.3). Для данного случая

$$T_1 = (T - 15)/15. \qquad \text{(VI.146)}$$

Рассмотрим линейную зависимость β_j от безразмерного параметра T_1:

$$\beta_j = \beta_{1j} + \beta_{2j} T_1. \qquad \text{(VI.147)}$$

Тогда

$$\beta_{1j} = \frac{\beta_j^{(0)} + \beta_j^{(30)}}{2}, \qquad \text{(VI.148)}$$

$$\beta_{2j} = \frac{\beta_j^{(30)} - \beta_j^{(0)}}{2}, \qquad \text{(VI.149)}$$

где $\beta_j^{(0)}$ – соответствующий коэффициент в уравнении (VI.144); $\beta_j^{(30)}$ – соответствующий коэффициент в уравнении (VI.145). Подставив (VI.146), (VI.148) и (VI.149) в (VI.147), получим

$$\beta_j = \beta_j^{(0)} + \frac{\beta_j^{(30)} - \beta_j^{(0)}}{2 \cdot 15} T. \qquad \text{(VI.150)}$$

Окончательное уравнение регрессии вязкости растворов от температуры и состава имеет вид

$$\hat{y} = (8{,}33 - 0{,}150\,T)\,z_1 + (4{,}99 - 0{,}082\,T)\,z_2 + (1{,}79 - 0{,}001\,T)z_3 + \\ + (-6{,}95 + 0{,}106\,T)\,z_1z_2 + (-9{,}05 + 0{,}347\,T)\,z_1z_3 + (1{,}37 + 0{,}166T)\,z_2z_3 + \\ + (17{,}90 - 0{,}069\,T)\,z_1z_2\,(z_1 - z_2) + (9{,}90 - 0{,}008T)\,z_1z_3\,(z_1 - z_3) + \\ + (12{,}37 - 0{,}017\,T)\,z_2z_3\,(z_2 - z_3) + (13{,}06 - 0{,}720\,T)\,z_1z_2z_3. \qquad \text{(VI.151)}$$

Получим уравнения связи псевдокомпонентов z_j с натуральным переменным x_j. Системы уравнений (VI.123) для рассматриваемой задачи имеют вид

$$\left.\begin{aligned} 0{,}42\,z_1^{(1)} + 0\,z_1^{(2)} + 0{,}58\,z_1^{(3)} &= 1 \\ 0\,z_1^{(1)} + 0{,}3z_1^{(2)} + 0{,}7z_1^{(3)} &= 0 \\ 0\,z_1^{(1)} + 0z_1^{(2)} + 1z_1^{(3)} &= 0 \end{aligned}\right\}$$

$$\left.\begin{aligned} 0{,}42\,z_2^{(1)} + 0z_2^{(2)} + 0{,}58\,z_2^{(3)} &= 0 \\ 0\,z_2^{(1)} + 0{,}3z_2^{(2)} + 0{,}7z_2^{(3)} &= 1 \\ 0\,z_2^{(1)} + 0z_2^{(2)} + 1z_2^{(3)} &= 0 \end{aligned}\right\} \qquad \text{(VI.152)}$$

Решения систем (VI.152) имеют вид

$$\begin{aligned} z_1^{(1)} &= 2{,}38, \quad & z_2^{(1)} &= 0, \\ z_1^{(2)} &= 0, \quad & z_2^{(2)} &= 3{,}33, \\ z_1^{(3)} &= 0, \quad & z_2^{(3)} &= 0. \end{aligned} \qquad \text{(VI.153)}$$

Подставив (VI.153) в систему уравнений (VI.122), получим

$$\begin{aligned} z_1 &= 2{,}38\,(1 - x_2 - x_3), \\ z_2 &= 3{,}33\,x_2, \end{aligned} \qquad \text{(VI.154)}$$

$$z_3 = 1 - z_1 - z_2 = 2{,}38x_3 - 0{,}95x_2 - 1{,}38.$$

Пример 5. Определяли оптимальный состав многокомпонентного растворителя, применяемого в процессе очистки дрожжей от углеводородов. Основным показателем очистки дрожжей является содержание углеводородов в биомассе после экстракции (y). Исходя из технологических и технико-экономических соображений, планирование эксперимента проводили на локальном участке концентрационного треугольника (рис. 76). В области исследования содержание в смеси (%): ацетона $x_1 \leqslant 74$, гексана $x_2 \leqslant 90$; воды $x_3 \leqslant 10$. Локальный участок диаграммы представляет собой треугольник с вершинами z_1 (9,5; 89,5; 1), z_2 (58,5; 40; 1,5), z_3 (74, 16, 10).

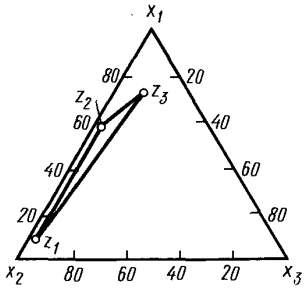


Рис. 76. Область исследования состава многокомпонентного растворителя

Р е ш е н и е. D-Оптимальный план четвертого порядка составлен относительно псевдокомпонентов z_1, z_2, z_3 (табл. см. ниже). Для псевдокомпонентов удовлетворяется основное условие (VI.1) планов Шеффе.

Номер опыта	z_1	z_2	z_3	x_1	x_2	x_3	y
1	1	0	0	9,5	89,5	1	0,1
2	0	1	0	58,5	40	1,5	0,3
3	0	0	1	74	16	10,0	0,04
4	0,5	0,5	0	34	64,7	1,3	0,08
5	0,5	0	0,5	41,7	52,8	5,5	0,06
6	0	0,5	0,5	56,2	28,2	5,8	0,06
7	0,176	0,824	0	49,9	48,7	1,4	0,05
8	0,824	0,176	0	18,12	80,79	1,09	0,09
9	0,176	0	0,824	62,6	29,0	8,4	0,12
10	0,824	0	0,176	20,85	76,55	2,6	0,1
11	0	0,176	0,824	71,22	20,30	8,49	0,2
12	0	0,824	0,176	61,25	35,75	3,0	0,11
13	0,216	0,216	0,568	56,7	37,12	6,18	0,11
14	0,216	0,568	0,216	51,2	45,65	3,15	0,091
15	0,568	0,216	0,216	34,0	62,97	3,03	0,11
16	0,333	0,333	0,333	47,3	48,5	4,2	0,108

Переход к исходным компонентам для любой точки исследуемого локального симплекса осуществляется по формуле (VI.120).

Согласно этому плану был поставлен эксперимент на смесях, каждый опыт повторяли два раза. По формулам (VI.139) – (VI.143) рассчитаны коэффициенты уравнения регрессии четвертого порядка в псевдокомпонентах:

$$\hat{y} = 0{,}1\,z_1 + 0{,}3\,z_2 + 0{,}04\,z_3 - 0{,}48\,z_1z_2 - 0{,}04\,z_1z_3 - 0{,}44\,z_2z_3 + $$
$$+ 0{,}914\,z_1z_2(z_1 - z_2) - 0{,}312\,z_1z_3(z_1 - z_3) - 1{,}39\,z_2z_3(z_2 - z_3) -$$
$$- 1{,}003\,z_1z_2(z_1 - z_2)^2 + 0{,}747\,z_1z_3(z_1 - z_3)^2 + 0{,}782\,z_2z_3(z_2 - z_3)^2 +$$
$$+ 1{,}398\,z_1^2z_2z_3 + 8{,}416\,z_1z_2^2z_3 - 4{,}703z_1z_2z_3^2 . \qquad \text{(VI.155)}$$

Системы уравнений (VI.123) с учетом ограничений на содержание компонентов в растворителе имеют вид

$$\left.\begin{aligned} 9{,}5\,z_1^{(1)} + 89{,}5\,z_1^{(2)} + 1z_1^{(3)} &= 1 \\ 58{,}5\,z_1^{(1)} + 40z_1^{(2)} + 1{,}5z_1^{(3)} &= 0 \\ 74\,z_1^{(1)} + 16z_1^{(2)} + 10z_1^{(3)} &= 0 \end{aligned}\right\} \qquad \text{(IV.156)}$$

$$\left.\begin{aligned} 9{,}5\,z_2^{(1)} + 89{,}5\,z_2^{(2)} + 1z_2^{(3)} &= 0 \\ 58{,}5\,z_2^{(1)} + 40z_2^{(2)} + 1{,}5z_2^{(3)} &= 1 \\ 74\,z_2^{(1)} + 16z_2^{(2)} + 10z_2^{(3)} &= 1 \end{aligned}\right\}$$

В результате решения системы (VI.156) имеем

$$z_1^{(1)} = 0{,}0092;\ z_1^{(2)} = 0{,}0116;\ z_1^{(3)} = 0{,}0495;$$

$$z_2^{(1)} = 0{,}0215;\ z_2^{(2)} = 0{,}00051;\ z_2^{(3)} = -0{,}1583.$$

Использовав найденные решения, получим формулы связи между натуральными координатами x и системой координат z:

$$\begin{aligned} z_1 &= -0{,}92 + 0{,}0208x_2 + 0{,}058x_3, \\ z_2 &= 2{,}15 - 0{,}022x_2 - 0{,}18x_3, \\ z_3 &= 1 - z_1 - z_2 = -0{,}23 + 0{,}001x_2 + 0{,}121x_3. \end{aligned} \qquad \text{(VI.157)}$$

Проверка адекватности полученного уравнения регрессии проводилась по критерию Стьюдента в четырех контрольных точках. Результаты проверки адекватности приведены в таблице.

x_1	x_2	x_3	y	$\hat{y}$	t	$t_{табл}$
47,3	48,5	4,2	0,1022	0,108	0,365	2,83
53	44	3,0	0,079	0,072	0,392	2,83
19	79	2,0	0,1	0,07	1,778	2,83
37,9	58,7	3,4	0,13	0,12	0,547	2,83
44,5	54,0	1,5	0,04	0,05	0,57	2,83

Уравнение (VI.155) адекватно эксперименту при уровне значимости $p = 0{,}05$.

Качество получаемого продукта считается удовлетворительным, если содержание остаточных углеводородов в биомассе менее 0,05%. Для определения составов растворителя, обеспечивающих это требование, по уравнению (VI.155) построены линии равных значений $\hat{y}$ (рис. 77). Составы растворителя, удовлетворяющие требованию $\hat{y} < 0{,}05\%$, находятся в заштрихованной области симплекса.

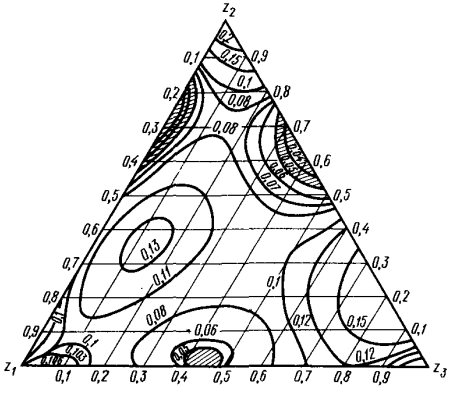


Рис. 77. Изолинии остаточного содержания углеводородов в биомассе

6. Планы с минимизацией систематического смещения. В планах, предложенных Дрейпером и Лоуренсом, в отличие от симплексных решеток все точки расположены внутри области исследования, т. е. эксперимент проводится только с q-компонентными составами. В этих планах учитывается отсутствие априорной информации о поверхности отклика и тот факт, что желательно аппроксимировать неиз-

вестную поверхность отклика полиномами низких степеней. Экспериментальные точки выбираются таким образом, чтобы обеспечить наилучшее представление сложной поверхности простыми полиномами.

Точки плана для построения полинома степени n_1 выбирают таким образом, чтобы получить минимальную величину систематической ошибки, связанной с тем, что функция отклика есть полином степени $n_2 > n_1$. Принципы, используемые при выборе подходящих планов, были предложены ранее Боксом и Дрейпером.

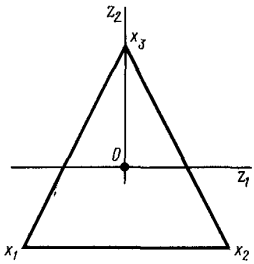


Рис. 78. Система координат для планов Дрейпера – Лоуренса

Дрейпером и Лоуренсом построены планы для трех- и четырехкомпонентных систем для степеней полиномов $n_1 = 1$, $n_2 = 2$, $n_1 = 2$ и $n_2 = 3$. Для удобства построения планов Дрейпер и Лоуренс вводят новую систему координат. В трехкомпонентных системах в плоскости концентрационного треугольника (x_1, x_2, x_3) новая система координат выбирается таким образом, чтобы начало координат совпадало с центром тяжести треугольника, одна из вершин треугольника лежит на оси z_2, а две другие симметричны относительно этой оси (рис. 78). Между треугольной системой координат (x_1, x_2, x_3) и прямоугольной (z_1, z_2) существует следующая связь.

$$z_1 = \frac{1}{2}\left(-x_1 + x_2\right); \quad z_2 = \frac{\sqrt{3}}{6}\left(-x_1 - x_2 + 2x_3\right) \qquad \text{(VI.158)}$$

и

$$\begin{aligned} x_1 &= {}^1/_3\left(-3z_1 - z_2\sqrt{3} + m\right), \\ x_2 &= {}^1/_3\left(3z_1 - z_2\sqrt{3} + m\right), \\ x_3 &= {}^1/_3\left(2z_2\sqrt{3} + m\right), \end{aligned} \qquad \text{(VI.159)}$$

где m – длина стороны концентрационного треугольника. При изучении всей диаграммы $m = 1$, при исследовании локальных участков диаграммы $m < 1$.

Точки плана для трехкомпонентных систем выбираются (в координатах z_1, z_2) из следующих множеств:

1) вершины треугольника, подобного концентрационному, с центром в начале координат и со стороной p:

$$\left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}p\right), \left(\pm\frac{1}{2}p, -\frac{\sqrt{3}}{6}p\right);$$

2) вершины треугольника, подобного концентрационному, с центром в начале координат и со стороной g:

$$\left(0, -\frac{1}{\sqrt{3}}g\right), \left(\pm\frac{1}{2}g, \frac{\sqrt{3}}{6}g\right);$$

3) вершины квадрата с центром в начале координат и со сторонами $2a$, параллельными осям $(\pm a; \pm a)$;

4) точки на осях координат $(\pm b, 0), (0, \pm b)$;

5) вершины прямоугольника $(c, d), (-c, -d), (c, -d), (-c, d)$.

После реализации того или иного плана Дрейпера — Лоуренса для трехкомпонентных систем строят полиномы для двух независимых переменных z_1 и z_2 первого порядка ($n_1 = 1$ при $n_2 = 2$)

$$\hat{y} = b_0 + b_1 z_1 + b_2 z_2 \qquad \text{(VI.160)}$$

или второго порядка ($n_1 = 2$ при $n_2 = 3$)

$$\hat{y} = b_0 + b_1 z_1 + b_2 z_2 + b_{12} z_1 z_2 + b_{11} z_1^2 + b_{22} z_2^2 . \qquad \text{(VI.161)}$$

Таблица 85. **Параметры планов Дрейпера — Лоуренса для $q = 3$, $n_1 = 1$, $n_2 = 2$**

Множество точек	Число опытов в центре n_0	Общее число опытов N	Параметры	
(1, 2)	0	6	$p = 0{,}621$,	$g = 0{,}339$
(1, 2)	1	7	$p = 0{,}662$,	$g = 0{,}381$
(1, 2)	2	8	$p = 0{,}699$,	$g = 0{,}421$
(1, 2)	3	9	$p = 0{,}733$,	$g = 0{,}457$
(1, 3)	0	7	$p = 0{,}616$,	$a = 0{,}160$
(1, 4)	0	7	$p = 0{,}616$,	$b = 0{,}226$
(1, 5)	0	7	$p = 0{,}616$,	$c = \sqrt{0{,}051 m^2 - d^2}$*
(1, 1, 2)	0	9	$p_1 = 0{,}606$, $g = 0{,}364$	$p_2 = 0{,}500$
(1, 2, 2)	0	9	$p = 0{,}727$, $g_2 = 0{,}200$	$g_1 = 0{,}425$

* Значение d выбирается произвольно.

Для построения полинома первой степени применительно к трехкомпонентным системам ($q = 3$) Дрейпер и Лоуренс предложили планы, содержащие от 6 до 9 экспериментальных точек. Параметры для некоторых планов Дрейпера — Лоуренса (в долях от m) при $q = 3$, $n_1 = 1$ и $n_2 = 2$ приведены в табл. 85. Если число точек плана больше числа точек в выбранных множествах, добавляется соответствующее число точек в центре треугольника (с координатами $z_1 = 0$, $z_2 = 0$).

Построим в качестве примера план Дрейпера — Лоуренса (1, 2), содержащий шесть точек (табл. 85). Точки множества 1 при $m = 1$ имеют координаты (z_1, z_2):

$$\left(0{,}0;\ \frac{0{,}621}{\sqrt{3}}\right),\ \left(\frac{0{,}621}{2};\ -\frac{0{,}621\sqrt{3}}{6}\right),\ \left(-\frac{0{,}621}{2};\ -\frac{0{,}621\sqrt{3}}{6}\right);$$

или

$$(0,0;\ 0,366);\quad (0,3105;\ -0,18);\quad (-0,3105;\ -0,18).$$

Точки множества 2 имеют координаты

$$\left(0,0;\ -\frac{0,339}{\sqrt{3}}\right);\quad \left(+{}^1/_2\cdot 0,339;\ \frac{0,339\sqrt{3}}{6}\right),\quad \left(-{}^1/_2\cdot 0,339;\ \frac{0,339\sqrt{3}}{6}\right),$$

или

$$(0,0;\ -0,196),\quad (0,170;\ 0,098),\quad (-0,170;\ 0,098).$$

От координат точек в системе $(z_1,\ z_2)$ по формулам (VI.159) перейдем к координатам в треугольнике $x_1 - x_2 - x_3$. Переведем, например, первую точку с координатами $z_1 = 0,0$; $z_2 = 0,366$ $(m = 1)$. Для этой точки

$$x_1 = {}^1/_3\left(-0,366\sqrt{3} + 1\right) = 0,12;$$

$$x_2 = {}^1/_3\left(-0,366\sqrt{3} + 1\right) = 0,12;$$

$$x_3 = {}^1/_3\left(2\cdot 0,366\sqrt{3} + 1\right) = 0,76.$$

Можно проверить правильность расчета:

$$x_1 + x_2 + x_3 = 0,12 + 0,12 + 0,76 = 1,0.$$

Расположение точек на концентрационном треугольнике показано на рис. 79, план эксперимента приведен в табл. 86.

Таблица 86. **Матрица планирования (1, 2) для $q = 3$, $n_1 = 1$, $n_2 = 2$**

Номер опыта	z_1	z_2	x_1	x_2	x_3
1	0	0,366	0,12	0,12	0,76
2	0,311	–0,18	0,127	0,748	0,125
3	–0,311	–0,18	0,748	0,127	0,125
4	0,0	–0,196	0,447	0,447	0,106
5	0,170	0,098	0,106	0,447	0,447
6	–0,170	0,098	0,447	0,106	0,447

Для построения полинома второго порядка (VI. 161) применительно к трехкомпонентным системам Дрейпер и Лоуренс построили планы, содержащие от 8 до 15 экспериментальных точек. Параметры для планов Дрейпера – Лоуренса (в долях от m) при $q = 3$, $n_1 = 2$, $n_2 = 3$ приведены в табл. 87.

Так, например, построим план (1, 3, 4), содержащий 13 точек: 11 точек из множеств 1, 3, 4 и 2 точки в центре треугольника (рис. 80). Точки множества 1 при $m = 1$ имеют координаты $(z_1,\ z_2)$:

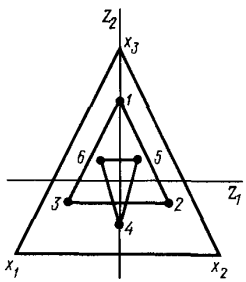


Рис. 79. План Дрейпера – Лоуренса (1, 2)

$$\left(0;\ \frac{0{,}756}{\sqrt{3}}\right),\ \left(\frac{0{,}756}{2};\ -\frac{0{,}756\sqrt{3}}{6}\right),\ \left(-\frac{0{,}756}{2};\ \frac{0{,}756\sqrt{3}}{6}\right);$$

или (0,0; 0,437), (0,378; — 0,218), (— 0,348; — 0,218).

Таблица 87. **Параметры планов Дрейпера — Лоуренса для $q=3$, $n_1=2$, $n_2=3$**

Множество точек	Число опытов в центре n_0	Общее число опытов N	Параметры
(1, 2)	1	7	$p=0{,}670$, $g=0{,}385$
(1, 2)	2	8	$p=0{,}698$, $g=0{,}421$
(1, 2)	3	9	$p=0{,}723$, $g=0{,}450$
(1, 1, 2)	0	9	$p_1=0{,}715$, $p_2=0{,}233$, $g=0{,}430$
(1, 1, 2)	1	10	$p_1=0{,}729$, $p_2=0{,}323$, $g=0{,}445$
(1, 1, 2)	2	11	$p_1=0{,}738$, $p_2=0{,}398$, $g=0{,}462$
(1, 1, 2)	3	12	$p_1=0{,}743$, $p_2=0{,}465$, $g=0{,}450$
(1, 1, 2)	4	13	$p_1=0{,}742$, $p_2=0{,}532$, $g=0{,}485$
(1, 2, 2)	0	9	$p=0{,}716$, $g_1=0{,}342$, $g=0{,}342$
(1, 2, 2)	1	10	$p=0{,}739$, $g_1=0{,}367$, $g_2=0{,}367$
(1, 1, 1, 2)	0	12	$p_1=0{,}751$, $p_2=0{,}422$, $p_3=0{,}189$, $g=0{,}47$
(1, 1, 2, 2)	0	12	$p_1=0{,}748$, $p_2=0{,}445$, $g_1=0{,}468$, $g_2=0{,}156$
(1, 2, 2, 2)	0	12	$p=0{,}782$, $g_1=0{,}348$, $g_2=0{,}348$, $g_3=0{,}348$
(1, 3, 4)	2	13	$p=0{,}756$, $a=0{,}183$, $b=0{,}258$
(1, 3, 5)	2	13	$p=0{,}756$, $a=0{,}300$, $c=0{,}547$, $d=0{,}130$
(1, 4, 5)	2	13	$p=0{,}756$, $b=0{,}212$, $c=0{,}130$, $d=0{,}257$
(1, 5, 5)	2	13	$p=0{,}756$, $c_1=0{,}094$, $d_1=0{,}272$, $c_2=0{,}172$, $d_2=0{,}125$
(1, 1, 2, 5)	0	13	$p_1=0{,}297$, $p_2=0{,}756$, $g=0{,}295$, $c=0{,}111$, $g=0{,}268$
(1, 1, 2, 5)	0	13	$p_1=0{,}478$, $p_2=0{,}756$, $g=0{,}477$, $c=0{,}045$, $d=0{,}109$
(1, 1, 2, 5)	1	14	$p=0{,}369$, $p_2=0{,}766$, $g=0{,}319$, $c=0{,}112$, $d=0{,}270$
(1, 1, 2, 5)	1	14	$p_1=0{,}514$, $p_2=0{,}762$, $g=0{,}481$, $c=0{,}058$, $d=0{,}140$
(1, 1, 2, 5)	2	15	$p_1=0{,}545$, $p_2=0{,}766$, $g=0{,}480$, $c=0{,}071$, $d=0{,}171$

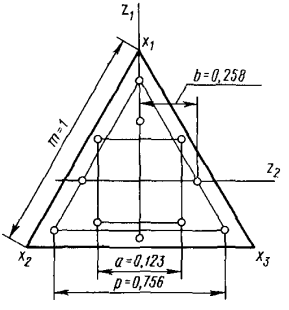


Рис. 80. План Дрейпера — Лоуренса (1, 3, 4)

Точки множества 3:

(0,183; 0,183), (0,183; — 0,183),

(— 0,183; 0,183), (— 0,183; —0,183).

Точки множества 4:

(0,258; 0), (— 0,258; 0),

(0; 0,258), (0; — 0,258)

План эксперимента приведен в табл. 88.

Координаты $x_1 - x_2 - x_3$ связаны с $z_1 - z_2$ соотношениями (VI.159).

Таблица 88. **Матрица планирования (1, 3, 4) для $q=3$, $n_1=2$, $n_2=3$, $N=13$**

Номер опыта	z_1	z_2	x_1	x_2	x_3
1	0	0,437	0,081	0,081	0,838
2	0,378	-0,218	0,081	0,837	0,082
3	-0,378	-0,218	0,837	0,081	0,082
4	0,183	0,183	0,044	0,410	0,546
5	0,183	-0,183	0,256	0,622	0,122
6	-0,183	0,183	0,410	0,045	0,545
7	-0,183	-0,183	0,622	0,256	0,122
8	0,258	0	0,076	0,591	0,333
9	-0,258	0	0,592	0,075	0,333
10	0	0,258	0,184	0,184	0,632
11	0	-0,258	0,482	0,482	0,036
12	0	0	0,333	0,333	0,333
13	0	0	0,333	0,333	0,333

Коэффициенты уравнения регрессии второго порядка $\hat{y}=f(z_1, z_2)$ определяют методом наименьших квадратов. Проверку адекватности проводят по результатам опытов в контрольных точках по t-критерию. Уравнение адекватно, если экспериментальное значение t-критерия для всех контрольных точек меньше табличного. Экспериментальные значения t-критерия определяются по формуле (VI.93). Величины ξ берут при этом с соответствующих контурных карт. При использовании планов Дрейпера — Лоуренса расчет зависимости ξ от состава можно провести только на ЦВМ. Такая контурная карта для плана (1, 3, 4), приведенного в табл. 88, показана на рис. 81. Как видно из рис. 81, уравнение регрессии хуже всего предсказывает значение свойства вблизи вершин концентрационного треугольника ($\xi=1{,}5 \div 3$).

Для построения планов применительно к четырехкомпонентным системам Дрейпером и Лоуренсом также вводится система координат (z_1, z_2, z_3). Центр новой системы координат совпадает с центром тяжести концентрационного тетраэдра (x_1, x_2, x_3, x_4), а координатные оси расположены таким образом, чтобы четыре вершины тетраэдра в новой системе координат образовывали полуреплику от полного факторного эксперимента 2^3 с определяющим контрастом $1=z_1z_2z_3$. Координаты вершин тетраэдра в новой системе (z_1, z_2, z_3):

$$(m, m, -m), \quad (m, -m, m),$$

$$(-m, m, m), \quad (-m, -m, -m)$$

в общем случае и

$$(1, 1, -1), \quad (1, -1, 1),$$

$$(-1, 1, 1), \quad (-1, -1, -1)$$

при стороне тетраэдра $m=1$.

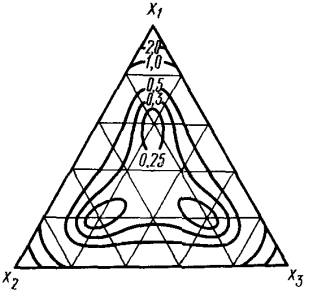


Рис. 81. Изолинии ξ в плане Дрейпера — Лоуренса (1, 3, 4)

Между системами координат (x_1, x_2, x_3, x_4) и (z_1, z_2, z_3) существует следующая связь:

$$\begin{aligned} z_1 &= x_1 + x_2 - x_3 - x_4, \\ z_2 &= x_1 - x_2 + x_3 - x_4, \\ z_3 &= -x_1 + x_2 + x_3 - x_4, \end{aligned} \tag{VI.162}$$

и

$$\begin{aligned} x_1 &= {}^1/_4 (z_1 + z_2 - z_3 + m), \\ x_2 &= {}^1/_4 (z_1 - z_2 + z_3 + m), \\ x_3 &= {}^1/_4 (-z_1 + z_2 + z_3 + m), \\ x_4 &= {}^1/_4 (-z_1 - z_2 - z_3 + m), \end{aligned} \tag{VI.163}$$

Точки плана для четырехкомпонентных систем выбираются (в координатах z_1, z_2, z_3) из следующих множеств: 1) вершины тетраэдра, подобного концентрационному, с координатами вершин

$$(a, a, -a), \quad (a, -a, a), \quad (-a, a, a), \quad (-a, -a, -a);$$

2) вершины тетраэдра

$$(b, b, b), \quad (b, -b, -b), \quad (b, b, -b), \quad (-b, -b, b);$$

3) точки на осях

$$(\pm h, 0, 0), \quad (0, \pm h, 0), \quad (0, 0, \pm h);$$

4) вершины тетраэдров с координатами

$$(-r, -s, -t), \quad (-r, s, t), \quad (r, -s, t) \quad (r, s, -t);$$
$$(-t, r, s), \quad (t, -r, s), \quad (t, r, -s), \quad (-t, -r, -s);$$
$$(-s, t, r), \quad (s, -t, r), \quad (s, t, -r), \quad (-s, -t, -r).$$

Таблица 89. **Параметры планов Дрейпера – Лоуренса для $q = 4$, $n_1 = 1$, $n_2 = 2$**

Множество точек	Число опытов в центре n_0	Общее число опытов N	Параметры	
(1, 2)	0	8	$a = 0{,}548$,	$b = 0{,}315$
(1, 2)	1	9	$a = 0{,}567$,	$b = 0{,}344$
(1, 2)	2	10	$a = 0{,}602$,	$b = 0{,}371$
(1, 2)	3	11	$a = 0{,}626$,	$b = 0{,}397$
(1, 2)	4	12	$a = 0{,}650$,	$b = 0{,}421$
(1, 3)	0	10	$a = 0{,}550$,	$h = 0{,}628$
(1, 3)	1	11	$a = 0{,}568$,	$h = 0{,}674$
(1, 3)	2	12	$a = 0{,}585$,	$h = 0{,}718$
(4)	0	12	$r = 0{,}539$, $t = 0{,}500$,	$s = 0{,}248$
(4)	6	12	$r = 0{,}616$, $t = 0{,}300$,	$s = 0{,}360$

После реализации того или иного плана Дрейпера — Лоуренса для четырехкомпонентных систем строят полиномы для трех независимых переменных z_1, z_2 и z_3 первого порядка ($n_1 = 1$ при $n_2 = 2$)

$$\hat{y} = b_0 + b_1 z_1 + b_2 z_2 + b_3 z_3 \qquad \text{(VI.164)}$$

или второго порядка ($n_1 = 2$ при $n_2 = 3$)

$$\hat{y} = b_0 + b_1 z_1 + b_2 z_2 + b_3 z_3 + b_{12} z_1 z_2 + b_{13} z_1 z_3 + b_{23} z_2 z_3 + b_{11} z_1^2 + b_{22} z_2^2 + b_{33} z_3^2 \; . \qquad \text{(VI.165)}$$

Параметры (в долях от m) некоторых планов Дрейпера — Лоуренса, содержащих не более 12 точек (при $q = 4$, $n_1 = 1$, $n_2 = 2$), приведены в табл. 89.

Таблица 90. **Параметры планов Дрейпера — Лоуренса для $q = 4$, $n_1 = 2$, $n_2 = 3$**

Множество точек	Число опытов в центре n_0	Общее число опытов N	Параметры				
			a_1	a_2	r	s	t
(1,1,4)	0	20	0,673	0,0945	0,684	0,260	0,0524
(1,1,4)	1	21	0,679	0,179	0,694	0,270	0,0564
(1,1,4)	2	22	0,685	0,248	0,702	0,274	0,0532
(1,1,4)	3	23	0,690	0,315	0,708	0,268	0,0406
(1,1,4)	4	24	0,694	0,393	0,710	0,242	0,00912
			a	b	r	s	t
(1,2,4)	1	21	0,676	0,165	0,696	0,274	0,0784
(1,2,4)	2	22	0,680	0,220	0,706	0,281	0,106
(1,2,4)	3	23	0,683	0,272	0,717	0,274	0,144
(1,2,4)	4	24	0,685	0,317	0,727	0,226	0,225
			a	h	r	s	t
(1,3,4)	0	22	0,682	0,319	0,0807	0,291	0,702
(1,3,4)	1	23	0,686	0,390	0,0925	0,306	0,708
(1,3,4)	2	24	0,690	0,459	0,104	0,321	0,710
			a_1	a_2	b	h	
(1,1,2,3)	0	18	0,292	0,667	0,279	0,765	
(1,1,3,3)	1	19	0,337	0,672	0,292	0,776	
(1,1,2,3)	2	20	0,380	0,674	0,305	0,786	
(1,1,2,3)	3	21	0,420	0,676	0,318	0,795	
(1,1,2,3)	4	22	0,460	0,674	0,332	0,805	
(1,1,2,3)	5	23	0,501	0,669	0,346	0,814	
(1,1,2,3)	6	24	0,548	0,656	0,359	0,822	
			a_1	a_2	a_3	b	h
(1,1,1,2,3)	0	22	0,679	0,442	0,132	0,326	0,805
(1,1,1,2,3)	1	23	0,683	0,455	0,191	0,332	0,814
(1,1,1,2,3)	2	24	0,691	0,441	0,288	0,340	0,822
			a_1	a_2	b_1	b_2	h
(1,1,2,2,3)	0	22	0,677	0,451	0,126	0,321	0,805
(1,1,2,2,3)	1	23	0,677	0,479	0,181	0,315	0,814
(1,1,2,2,3)	2	24	0,672	0,517	0,275	0,275	0,822
(1,1,2,3,3)	0	24	0,680	0,494	0,329	0,317	0,818

При $N \geqslant 12$ значения параметров r, s, t и N определяются из системы уравнений

$$r^2 + s^2 + t^2 = Nm^2/20,$$
$$rst = Nm^3/180, \qquad \text{(VI.166)}$$

где m — длина стороны концентрационного тетраэдра.

Параметры планов (в долях от m) для четырехкомпонентных смесей при $n_1 = 2$, $n_2 = 3$, удовлетворяющих условию $18 \leqslant N \leqslant 24$, приведены в табл. 90.

Все приведенные планы построены в предположении, что существует только систематическое смещение. На практике обычно кроме систематической ошибки экспериментальные данные содержат также и случайную ошибку.

При минимизации общей ошибки можно сохранить основную форму планов и только умножить координаты точек плана на величину $\theta > 1$, т. е. для трехкомпонентных систем следует брать точки с координатами (θz_1, θz_2), а для четырехкомпонентных — с координатами (θz_1, θz_2, θz_3). Парметр θ зависит от случайной ошибки и коэффициентов полинома и близок к единице, если случайная ошибка не доминирует. Поскольку в каждой конкретной задаче нахождение точного значения θ затруднительно, в достаточно грубом приближении θ можно считать равным 1,1 для трехкомпонентных систем и 1,2 для четырехкомпонентных. Трансформируем, например, для минимизации общей ошибки план (1, 3, 4) для $q = 3$, $n_1 = 2$, $n_2 = 3$, приведенный в табл. 88. Координаты первой точки с учетом параметра $\theta = 1{,}1$ получаются следующим образом:

$$x_1 = {}^1/_3 \left(-3\theta z_1 - \theta z_2 \sqrt{3} + m\right) = {}^1/_3 \left(-1{,}1 \cdot 0{,}437\ \sqrt{3} + 1\right) = 0{,}056,$$

$$x_2 = {}^1/_3 \left(+3\theta z_1 - \theta z_2 \sqrt{3} + m\right) = {}^1/_3 \left(+3 \cdot 1{,}1 \cdot 0{,}0 - 1{,}1 \cdot 0{,}437\ \sqrt{3} + 1\right) =$$
$$= 0{,}056,$$

$$x_3 = {}^1/_3 \left(2\theta z_2 \sqrt{3} + m\right) = {}^1/_3 \left(2 \cdot 1{,}1 \cdot 0{,}437\ \sqrt{3} + 1\right) = 0{,}888.$$

Полностью план (1, 3, 4) для $q = 3$, $n_1 = 2$, $n_2 = 3$, минимизирующий общую ошибку, приведен в табл. 91.

Таблица 91. **Матрица планирования (1, 3, 4) для $q = 3$, $n_1 = 2$, $n_2 = 3$, $\theta = 1{,}1$**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	Номер опыта	x_1	x_2	x_3
1	0,056	0,056	0,888	8	0,05	0,617	0,333
2	0,056	0,888	0,056	9	0,617	0,05	0,333
3	0,888	0,056	0,056	10	0,17	0,17	0,66
4	0,016	0,418	0,566	11	0,5	0,5	0
5	0,248	0,651	0,101	12	0,333	0,333	0,333
6	0,418	0,016	0,566	13	0,333	0,333	0,333
7	0,651	0,248	0,101				

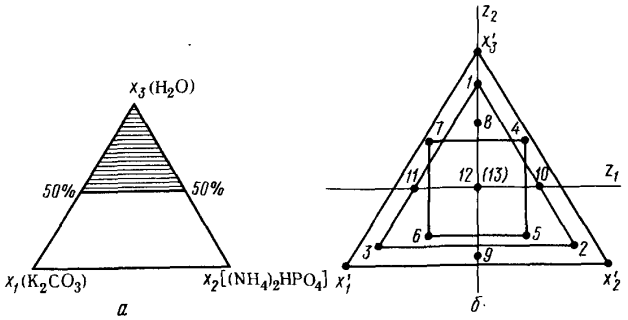


Рис. 82. Область исследования вязкости в системе $(NH_4)_2HPO_4 - K_2CO_3 - H_2O$ при 30°С (*а*) и план эксперимента (*б*)

Пример 6. Исследовалась зависимость вязкости при 30°С жидкого комплексного удобрения на основе диаммонийфосфата, поташа и воды от состава. В качестве области исследования была выбрана область ненасыщенных растворов по обеим солям при 30°С (рис. 82), сторона концентрационного треугольника при этом равна 0,5.

Р е ш е н и е. Был использован план Дрейпера – Лоуренса, содержащий 13 точек (см. табл. 88). Исследуемую подобласть удобно рассматривать как концентрационный треугольник в новой системе координат (x_1', x_2', x_3'):

$$x_1' + x_2' + x_3' = 0{,}5.$$

Связь между координатами x_j' и x_j задается соотношениями:

$$x_1' = 2x_1,$$

$$x_2' = 2x_2, \qquad \text{(VI.167)}$$

$$x_3' = 1 - x_1' - x_2' = 1 - 2x_1 - 2x_2.$$

Учитывая соотношения (VI.159), получим также

$$z_1 = {}^1/_2\left(-x_1' + x_2'\right) = \left(-x_1 + x_2\right), \qquad \text{(VI.168)}$$

$$z_2 = \frac{\sqrt{3}}{6}\left(-x_1' + x_2' + 2x_3'\right) = \frac{\sqrt{3}}{3}\left(1 - 3x_1 - 3x_2\right) = \frac{\sqrt{3}}{3}\left(x_3 - 2x_1 - 2x_2\right).$$

План эксперимента и результаты измерения вязкости (y) по двум параллельным опытам приведены в табл. 92.

По данным табл. 92 методом наименьших квадратов на ЦВМ были определены коэффициенты уравнения регрессии вида (VI.161)

$$y = 1{,}54 - 0{,}94\,z_1 - 1{,}01\,z_2 - 8{,}93\,z_1z_2 + 10{,}48z_1^2 + 0{,}76\,z_2^2.$$

Полученное уравнение адекватно эксперименту. В натуральном масштабе с учетом соотношений (VI.168) уравнение регрессии имеет вид

$$\hat{y} = 1{,}54 + 2{,}1x_1 + 0{,}22x_2 - 0{,}58\,x_3 + 1{,}18\,x_1^2 + 21{,}81\,x_2^2 - 18{,}93\,x_1x_2 + \\ + 4{,}14\,x_1\,x_3 - 6{,}17\,x_2x_3 + 0{,}25\,x_3^2.$$

Таблица 92. **Матрица планирования и результаты опытов**

Номер опыта	z_1	z_2	x'_1	x'_2	x'_3	x_1	x_2	x_3	$\bar{y}$
1	0	0,437	0,081	0,081	0,838	0,040	0,040	0,920	1,033
2	0,378	−0,218	0,081	0,837	0,082	0,040	0,418	0,542	4,873
3	−0,378	−0,218	0,837	0,081	0,082	0,418	0,040	0,542	4,722
4	0,183	0,183	0,044	0,410	0,546	0,022	0,205	0,772	1,481
5	0,183	−0,183	0,256	0,622	0,122	0,128	0,311	0,561	3,294
6	−0,183	0,183	0,410	0,045	0,545	0,311	0,128	0,561	2,996
7	−0,183	−0,183	0,622	0,256	0,122	0,205	0,023	0,772	2,160
8	0,258	0	0,076	0,591	0,333	0,092	0,092	0,816	1,430
9	−0,258	0	0,592	0,075	0,333	0,241	0,241	0,518	3,624
10	0	0,258	0,184	0,184	0,632	0,038	0,296	0,666	2,423
11	0	−0,258	0,482	0,482	0,036	0,296	0,038	0,666	2,165
12	0	0	0,333	0,333	0,333	0,167	0,167	0,666	2,191
13	0	0	0,333	0,333	0,333	0,167	0,167	0,666	2,207

7. Планирование эксперимента при изучении зависимости свойства от соотношений компонентов. В некоторых практических задачах целесообразно рассматривать зависимость свойства от соотношений компонентов, а не от их абсолютных количеств. Если процентное содержание каждого компонента больше нуля, при наличии верхних и нижних ограничений на компоненты можно использовать отношения компонентов для построения обычных факторных планов. Число отношений в q-компонентной системе, для которой справедливо условие

$$x_1 + x_2 + \ldots + x_q = 1,$$

равно $q-1$;

$$z_1 = \frac{x_1}{x_2}, \quad z_2 = \frac{x_3}{x_2}, \quad \ldots, \quad z_i = \frac{x_i}{x_j}, \quad \ldots, \quad z_{q-1} = \frac{x_{q-1}}{x_q}. \qquad \text{(VI.169)}$$

Таким образом, при использовании отношений компонентов в качестве независимых факторов размерность задачи уменьшается на единицу и, следовательно, уменьшается количество опытов.

На рис. 83 показаны планы Кенворси 2^2*(а)* и 2^3*(б)* для изучения зависимости свойства от соотношений компонентов $z_1 = x_1/x_3$ и $z_2 = x_3/x_2$. Точки, лежащие на линии, исходящей из вершины x_2, имеют постоянное соотношение компонентов x_1 и x_3. Аналогично линия, исходящая из вершины x_1, является линией равных соотношений x_3 и x_2. Для выполнения условий ортогональности матрицы планирования используется обычное линейное преобразование (V. 3).

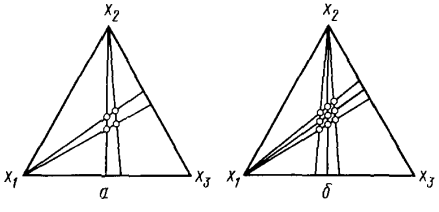


Рис. 83. Планы, использующие соотношения компонентов

Пример 7. Исследовалось влияние состава исходного раствора на

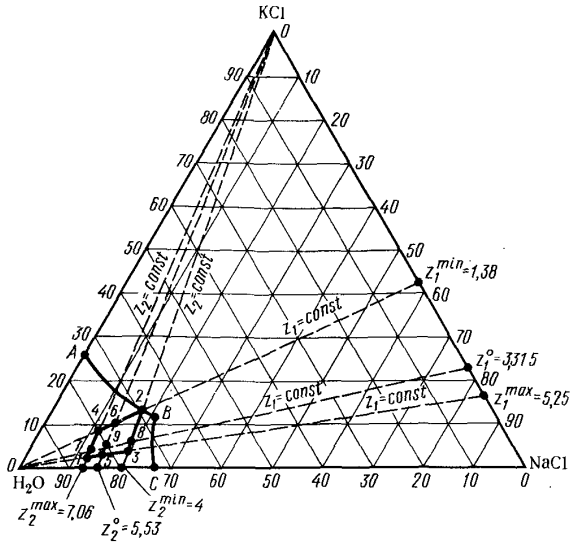


Рис. 84. Область исследования состава исходного раствора сильвинита и план эксперимента

процесс получения гидрокарбонатов натрия и калия из сильвинита. Показателем процесса (y) был выбран коэффициент использования калия в процессе карбонизации. В качестве независимых переменных приняты процентные соотношения двух компонентов из числа трех, входящих в систему:

$$z_1 = [NaCl]/[KCl] \text{ и } z_2 = [H_2O]/[NaCl].$$

Р е ш е н и е. Для получения уравнения регрессии был использован ортогональный план второго порядка для $k=2$, $N=9$, $\alpha=1$ (рис. 84). Область исследования независимых факторов приведена в таблице

	z_1	z_2
z_j^0	3,315	5,53
Δz_j	1,935	1,53
+1	5,25	7,06
−1	1,38	4,0

матрица планирования — в табл. 93.

Выборочные дисперсии однородны. Дисперсия воспроизводимости

$$s^2_{\text{воспр}} = \frac{\sum_{i=1}^{9} s_i^2}{9} = \frac{30,28}{9} = 3,37,$$

$$f_{\text{воспр}} = N(m-1) = 9,$$

где m — число параллельных опытов.

Таблица 93. **Матрица планирования**

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x_1'	x_2'	y'	y''	$\bar{y}$	$s_{\bar{y}}^2$	$\hat{y}$	$\bar{y}-\hat{y}$	$(\bar{y}-\hat{y})^2$
1	+1	+1	+1	+1	+⅓	+⅓	10	14	12	8	10,74	1,26	1,59
2	+1	−1	−1	+1	+⅓	+⅓	77,5	79,5	78,5	2	77,74	0,76	0,58
3	+1	+1	−1	−1	+⅓	+⅓	27	28,6	27,8	1,28	27,84	0,04	0,001
4	+1	−1	+1	−1	+⅓	+⅓	59,5	62,5	61	4,5	60,64	0,36	0,13
5	+1	+1	0	0	+⅓	−⅔	18,5	17,5	18	0,5	19,3	1,3	1,69
6	+1	−1	0	0	+⅓	−⅔	68,2	67,8	68	0,08	69,19	1,19	1,42
7	+1	0	+1	0	−⅔	+⅓	30	34	32	8	32,59	0,59	0,35
8	+1	0	−1	0	−⅔	+⅓	51	49	50	2	49,69	0,31	0,09
9	+1	0	0	0	−⅔	−⅔	43	40,2	41,6	3,92	41,14	0,46	0,21

Коэффициенты уравнения регрессии и их ошибки определены по формулам (V.56) и (V.57):

$$b_0 = 43{,}21, \quad b_{12} = +0{,}425,$$
$$b_1 = -24{,}95, \quad b_{11} = +3{,}1,$$
$$b_2 = -8{,}55, \quad b_{22} = +1{,}1,$$
$$s_{b_j} = 0{,}75, \quad s_{b_{uj}} = 0{,}92, \quad s_{b_{jj}} = 1{,}3.$$

Табличное значение критерия Стьюдента $t_{0{,}05}(9) = 2{,}26$. Коэффициенты b_{12} и b_{22} незначимы. Уравнение регрессии имеет вид

$$\hat{y} = 41{,}14 - 24{,}95\,x_1 - 8{,}55\,x_2 + 3{,}1\,x_1^2 .$$

Дисперсия адекватности определена по формуле

$$s_{\text{ад}}^2 = \frac{m\sum_{i=1}^{N}\left(\bar{y}_i - \hat{y}_i\right)^2}{N-l} = 2{,}46,$$

где l — число значимых коэффициентов.

Уравнение адекватно эксперименту, так как $s_{\text{ад}}^2 < s_{\text{воспр}}^2$. Из анализа последнего уравнения регрессии следует, что коэффициент использования калия в процессе получения $KHCO_3$ из сильвинита тем больше, чем выше в нем содержание KCl и чем меньшее количество воды используется для растворения исходной смеси сухих NaCl и KCl.

В главе описаны методы планирования эксперимента для систем, являющихся смесями q различных компонентов. Факторное пространство при этом представляет собой $(q-1)$-мерный симплекс.

Целью исследования сложных многокомпонентных систем являются построение графиков зависимости свойств от состава и решение задачи оптимизации.

Если порядок аппроксимирующего полинома неизвестен, в общем случае целесообразно применение планов Дрейпера — Лоуренса, минимизирующих систематическое смещение.

При отсутствии априорной информации о поверхности отклика применение композиционных планов даст возможность подобрать адекватную модель.

Если порядок полинома задан, применение *D*-оптимальных планов позволит построить полином с минимальными ошибками оценок коэффициентов.

Упражнения

1. Каковы преимущества аналитического представления зависимостей состав — свойство для многокомпонентных смесей?

2. Составить симплекс-решетчатые планы для построения моделей третьей и четвертой степени для четырехкомпонентной системы.

3. Построить симплекс-центроидный план для пятикомпонентной системы.

4. Построить *D*-оптимальный план четвертого порядка для трехкомпонентной системы.

5. Записать координаты точек плана Дрейпера и Лоуренса (1, 2), содержащего 7 точек (табл. 87), для построения полинома второго порядка в трехкомпонентной системе.

6. Изучалась зависимость pH растворов в системе $(NH_4)_2HPO_4 - K_2CO - H_2O$ от состава. Планирование эксперимента проводилось на локальном участке концентрационного треугольника (см. рис. 75, *а*), ограниченного линией насыщения при 0°С. Локальный участок представлял собой треугольник с вершинами z_1 (42, 0, 58), z_2 (0, 30, 70), z_3(0, 0, 100). Был использован *D*-оптимальный план третьего порядка (см. табл. на с. 297). Результаты измерения pH в системе приведены ниже:

Номер опыта	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
pH	12,52	9,25	7,42	9,75	11,45	11,50	12,15	9,25	9,0	10,7	10,61	9.50	11,75

1) Определить зависимость pH от состава. 2) По опытам в контрольных точках 11, 12, 13 проверить адекватность уравнения регрессии третьего порядка эксперименту; ошибка воспроизводимости $s_{воспр} = 0{,}45$, число степеней свободы $f_{воспр} = 13$.

ЛИТЕРАТУРА

Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. — М.: Химия, 1976.

Налимов В. В., Чернова Н. А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. — М.: Наука, 1965.

Налимов В. В. Теория эксперимента. — М.: Наука, 1971.

Налимов В. В., Голикова Т. И. Логические основания планирования эксперимента. — М.: Наука, 1971.

Ахназарова С. Л., Кафаров В. В. Статистические методы планирования и обработки экспериментов. — М.: Изд-во МХТИ, 1972.

Химмельблау Д. Анализ процессов статистическими методами. — М.: Мир, 1973.

Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ. — М.: Стастистика, 1973.

Налимов В. В. Применение математической статистики при анализе вещества. — М.: Физматгиз, 1960.

Адлер Ю. П., Маркова Е. В., Грановский Ю. В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. — М.: Наука, 1976.

Адлер Ю. П., Грановский Ю. В., Маркова Е. В. Теория эксперимента: прошлое, настоящее, будущее. — М.: Знание, 1982.

Хикс Ч. Основные принципы планирования эксперимента. — М.: Мир, 1967.

Рузинов Л. П. Статистические методы оптимизации химических процессов. — М.: Химия, 1972.

Маркова Е. В., Лисенков А. Н. Планирование эксперимента в условиях неоднородностей. — М.: Наука, 1973.

Горский В. Г., Адлер Ю. П. Планирование промышленных экспериментов (модели статики). — М.: Металлургия, 1974.

Маркова Е. В., Лисенков А. Н. Комбинаторные планы в задачах многофакторного эксперимента. — М.: Наука, 1979.

Хьютсон А. Дисперсионный анализ. — М.: Статистика, 1971.

Балакирев В. С., Володин В. М., Цирлин А. М. Оптимальное управление процессами химической технологии. — М.: Химия, 1978.

Дубров А. М. Обработка статистических данных методом главных компонент. — М.: Статистика, 1978.

Рузинов Л. П., Слободчикова Р. И. Планирование эксперимента в химии и химической технологии. — М.: Химия, 1980.

Хартман К., Лецкий Э., Шефер В. Планирование эксперимента в исследовании технологических процессов. — М.: Мир, 1977.

Писаренко В. Н., Погорелов А. Г. Планирование кинетических исследований. — М.: Наука, 1969.

Федоров В. В. Теория оптимального эксперимента. — М.: Наука, 1971.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Таблица 1. **Значения функции Лапласа** $\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^x e^{-\frac{x^2}{2}} dx$

x	$\Phi(x)$	x	$\Phi(x)$	x	$\Phi(x)$	x	$\Phi(x)$
0,00	0,0000	0,54	0,2054	1,08	0,3599	1,62	0,4474
0,01	0,0040	0,55	0,2088	1,09	0,3621	1,63	0,4484
0,02	0,0080	0,56	0,2123	1,10	0,3643	1,64	0,4495
0,03	0,0120	0,57	0,2157	1,11	0,3665	1,65	0,4505
0,04	0,0160	0,58	0,2190	1,12	0,3686	1,66	0,4515
0,05	0,0199	0,59	0,2224	1,13	0,3708	1,67	0,4525
0,06	0,0239	0,60	0,2257	1,14	0,3729	1,68	0,4535
0,07	0,0279	0,61	0,2291	1,15	0,3749	1,69	0,4545
0,08	0,0319	0,62	0,2324	1,16	0,3770	1,70	0,4554
0,09	0,0359	0,63	0,2357	1,17	0,3790	1,71	0,4564
0,10	0,0398	0,64	0,2389	1,18	0,3810	1,72	0,4573
0,11	0,0438	0,65	0,2422	1,19	0,3830	1,73	0,4582
0,12	0,0478	0,66	0,2454	1,20	0,3849	1,74	0,4591
0,13	0,0517	0,67	0,2486	1,21	0,3869	1,75	0,4599
0,14	0,0557	0,68	0,2517	1,22	0,3883	1,76	0,4608
0,15	0,0596	0,69	0,2549	1,23	0,3907	1,77	0,4616
0,16	0,0636	0,70	0,2580	1,24	0,3925	1,78	0,4625
0,17	0,0675	0,71	0,2611	1,25	0,3944	1,79	0,4633
0,18	0,0714	0,72	0,2642	1,26	0,3962	1,80	0,4641
0,19	0,0753	0,73	0,2673	1,27	0,3980	1,81	0,4649
0,20	0,0793	0,74	0,2703	1,28	0,3997	1,82	0,4656
0,21	0,0832	0,75	0,2734	1,29	0,4015	1,83	0,4664
0,22	0,0871	0,76	0,2764	1,30	0,4032	1,84	0,4671
0,23	0,0910	0,77	0,2794	1,31	0,4049	1,85	0,4678
024	0,0948	0,78	0,2823	1,32	0,4066	1,86	0,4686
0,25	0,0987	0,79	0,2852	1,33	0,4082	1,87	0,4693
0,26	0,1026	0,80	0,2881	1,34	0,4099	1,88	0,4699
0,27	0,1064	0,81	0,2910	1,35	0,4115	1,89	0,4706
0,28	0,1103	0,82	0,2939	1,36	0,4131	1,90	0,4713
0,29	0,1141	0,83	0,2967	1,37	0,4147	1,91	0,4719
0,30	0,1179	0,84	0,2995	1,38	0,4162	1,92	0,4726
0,31	0,1217	0,85	0,3023	1,39	0,4177	1,93	0,4732
0,32	0,1255	0,86	0,3051	1,40	0,4192	1,94	0,4738
0,33	0,1293	0,87	0,3078	1,41	0,4207	1,95	0,4744
0,34	0,1331	0,88	0,3106	1,42	0,4222	1,96	0,4750
0,35	0,1368	0,89	0,3133	1,43	0,4236	1,97	0,4756
0,36	0,1406	0,90	0,3159	1,44	0,4251	1,98	0,4761
0,37	0,1443	0,91	0,3186	1,45	0,4265	1,99	0,4767
0,38	0,1480	0,92	0,3212	1,46	0,4279	2,00	0,4772
0,39	0,1517	0,93	0,3238	1,47	0,4292	2,02	0,4783
0,40	0,1554	0,94	0,3264	1,48	0,4306	2,04	0,4793
0,41	0,1591	0,95	0,3289	1,49	0,4319	2,06	0,4803
0,42	0,1628	0,96	0,3315	1,50	0,4332	2,08	0,4812
0,43	0,1664	0,97	0,3340	1,51	0,4345	2,10	0,4821
0,44	0,1700	0,98	0,3365	1,52	0,4357	2,12	0,4830
0,45	0,1736	0,99	0,3389	1,53	0,4370	2,14	0,4838
0,46	0,1772	1,00	0,3413	1,54	0,4382	2,16	0,4846
0,47	0,1808	1,01	0,3438	1,55	0,4394	2,18	0,4854
0,48	0,1844	1,02	0,3461	1,56	0,4406	2,20	0,4861
0,49	0,1879	1,03	0,3485	1,57	0,4418	2,22	0,4868
0,50	0,1915	1,04	0,3508	1,58	0,4429	2,24	0,4875
0,51	0,1950	1,05	0,3531	1,59	0,4441	2,26	0,4881
0,52	0,1985	1,06	0,3554	1,60	0,4452	2,28	0,4887
0,53	0,2019	1,07	0,3577	1,61	0,4463	2,30	0,4893

Продолжение

x	$\Phi(x)$	x	$\Phi(x)$	x	$\Phi(x)$	x	$\Phi(x)$
2,32	0,4898	2,52	0,4941	2,72	0,4967	2,92	0,4982
2,34	0,4904	2,54	0,4945	2,74	0,4969	2,94	0,4984
2,36	0,4909	2,56	0,4948	2,76	0,4971	2,96	0,49846
2,38	0,4913	2,58	0,4951	2,78	0,4973	2,98	0,49856
2,40	0,4918	2,60	0,4953	2,80	0,4974	3,00	0,49865
2,42	0,4922	2,62	0,4956	2,82	0,4976	3,20	0,49931
2,44	0,4927	2,64	0,4959	2,84	0,4977	3,40	0,49966
2,46	0,4931	2,66	0,4961	2,86	0,4979	3,60	0,49984
2,48	0,4934	2,68	0,4963	2,88	0,4980	3,80	0,499928
2,50	0,4938	2,70	0,4965	2,90	0,4981	4,00	0,499968
						5,00	0,499997

Таблица 2. **Квантили нормального распределения**

p	$1-\frac{p}{2}$	$u_{1-\frac{p}{2}}$	p	$1-\frac{p}{2}$	$u_{1-\frac{p}{2}}$
0,80	0,60	0,25	0,05	0,975	1,96
0,50	0,75	0,67	0,04	0,980	2,05
0,40	0,80	0,84	0,02	0,990	2,33
0,30	0,85	1,04	0,01	0,995	2,58
0,25	0,875	1,15	0,005	0,9975	2,81
0,20	0,90	1,28	0,002	0,999	3,09
0,15	0,925	1,44	0,001	0,9995	3,29
0,10	0,95	1,64	0,0001	0,99995	3,89

Таблица 3. **Квантили распределения Стьюдента**

Число степеней свободы f	Уровни значимости p						
	0,20	0,10	0,05	0,02	0,01	0,005	0,001
1	3,08	6,31	12,71	31,82	63,66	127,32	636,62
2	1,89	2,92	4,30	6,97	9,93	14,09	31,60
3	1,64	2,35	3,18	4,54	5,84	7,45	12,94
4	1,53	2,13	2,78	3,75	4,60	5,60	8,61
5	1,48	2,02	2,57	3,37	4,03	4,77	6,86
6	1,44	1,94	2,45	3,14	3,71	4,32	5,96
7	1,42	1,90	2,37	3,00	3,50	4,03	5,41
8	1,40	1,86	2,31	2,90	3,36	3,83	5,04
9	1,38	1,83	2,26	2,82	3,25	3,69	4,78
10	1,37	1,81	2,23	2,76	3,17	3,58	4,59
11	1,36	1,80	2,20	2,72	3,11	3,50	4,44
12	1,36	1,78	2,18	2,68	3,06	3,43	4,32
13	1,35	1,77	2,16	2,65	3,01	3,37	4,22
14	1,34	1,76	2,15	2,62	2,98	3,33	4,14
15	1,34	1,75	2,13	2,60	2,95	3,29	4,07
16	1,34	1,75	2,12	2,58	2,92	3,25	4,02
17	1,33	1,74	2,11	2,57	2,90	3,22	3,97
18	1,33	1,73	2,10	2,55	2,88	3,20	3,92
19	1,33	1,73	2,09	2,54	2,86	3,17	3,88
20	1,33	1,73	2,09	2,53	2,85	3,15	3,85

Продолжение

Число степеней свободы f	Уровни значимости p						
	0,20	0,10	0,05	0,02	0,01	0,005	0,001
21	1,32	1,72	2,08	2,52	2,83	3,14	3,82
22	1,32	1,72	2,07	2,51	2,82	3,12	3,79
23	1,32	1,71	2,07	2,50	2,81	3,10	3,77
24	1,32	1,71	2,06	2,49	2,80	3,09	3,75
25	1,32	1,71	2,06	2,48	2,79	3,08	3,73
26	1,32	1,71	2,06	2,48	2,78	3,07	3,71
27	1,31	1,70	2,05	2,47	2,77	3,06	3,69
28	1,31	1,70	2,05	2,47	2,76	3,05	3,67
29	1,31	1,70	2,04	2,46	2,76	3,04	3,66
30	1,31	1,70	2,04	2,46	2,75	3,03	3,65
40	1,30	1,68	2,02	2,42	2,70	2,97	3,55
60	1,30	1,67	2,00	2,39	2,66	2,91	3,46
120	1,29	1,66	1,98	2,36	2,62	2,86	3,37
∞	1,28	1,64	1,96	2,33	2,58	2,81	3,29

Таблица 4. **Квантили распределения Пирсона χ^2_{1-p}**

Число степеней свободы f	Уровни значимости p							
	0,99	0,98	0,95	0,90	0,80	0,70	0,50	0,30
1	0,00016	0,0006	0,0039	0,016	0,064	0,148	0,455	1,07
2	0,020	0,040	0,103	0,211	0,446	0,713	1,386	2,41
3	0,115	0,185	0,352	0,584	1,005	1,424	2,336	3,66
4	0,30	0,43	0,71	1,06	1,65	2,19	3,36	4,9
5	0,55	0,75	1,14	1,61	2,34	3,00	4,35	6,1
6	0,87	1,13	1,63	2,20	3,07	3,83	5,35	7,2
7	1,24	1,56	2,17	2,83	3,82	4,67	6,35	8,4
8	1,65	2,03	2,73	3,49	4,59	5,53	7,34	9,5
9	2,09	2,53	3,32	4,17	5,38	6,39	8,34	10,7
10	2,56	3,06	3,94	4,86	6,18	7,27	9,34	11,8
11	3,1	3,6	4,6	5,6	7,0	8,1	10,3	12,9
12	3,6	4,2	5,2	6,3	7,8	9,0	11,3	14,0
13	4,1	4,8	5,9	7,0	8,6	9,9	12,3	15,1
14	4,7	5,4	6,6	7,8	9,5	10,8	13,3	16,2
15	5,2	6,0	7,3	8,5	10,3	11,7	14,3	17,3
16	5,8	6,6	8,0	9,3	11,2	12,6	15,3	18,4
17	6,4	7,3	8,7	10,1	12,0	13,5	16,3	19,5
18	7,0	7,9	9,4	10,9	12,9	14,4	17,3	20,6
19	7,6	8,6	10,1	11,7	13,7	15,4	18,3	21,7
20	8,3	9,2	10,9	12,4	14,6	16,3	19,3	22,8
21	8,9	9,9	11,6	13,2	15,4	17,2	20,3	23,9
22	9,5	10,6	12,3	14,0	16,3	18,1	21,3	24,9
23	10,2	11,3	13,1	14,8	17,2	19,0	22,3	26,0
24	10,9	12,0	13,8	15,7	18,1	19,9	23,3	27,1
25	11,5	12,7	14,6	16,5	18,9	20,9	24,3	28,2
26	12,2	13,4	15,4	17,3	19,8	21,8	25,3	29,3
27	12,9	14,1	16,2	18,1	20,7	22,7	26,3	30,3
28	13,6	14,8	16,9	18,9	21,6	23,6	27,3	31,4
29	14,3	15,6	17,7	19,8	22,4	24,6	28,3	32,5
30	15.0	16,3	18,5	20,6	23,4	25,5	29,3	33,5

Продолжение

Число степеней свободы f	Уровни значимости p							
	0,20	0,10	0,05	0,02	0,01	0,005	0,002	0,001
1	1,64	2,7	3,8	5,4	6,6	7,9	9,5	10,8
2	3,22	4,6	6,0	7,8	9,2	10,6	12,4	13,8
3	4,64	6,3	7,8	9,8	11,3	12,8	14,8	16,3
4	6,0	7,8	9,5	11,7	13,3	14,9	16,9	18,5
5	7,3	9,2	11,1	13,4	15,1	16,3	18,9	20,5
6	8,6	10,6	12,6	15,0	16,8	18,6	20,7	22,5
7	9,8	12,0	14,1	16,6	18,5	20,3	22,6	24,3
8	11,0	13,4	15,5	18,2	20,1	21,9	24,3	26,1
9	12,2	14,7	16,9	19,7	21,7	23,6	26,1	27,9
10	13,4	16,0	18,3	21,2	23,2	25,2	27,7	29,6
11	14,6	17,3	19,7	22,6	24,7	26,8	29,4	31,3
12	15,8	18,5	21,0	24,1	26,2	28,3	31	32,9
13	17,0	19,8	22,4	25,5	27,7	29,8	32,5	34,5
14	18,2	21,1	23,7	26,9	29,1	31,3	34	36,1
15	19,3	22,3	25,0	28,3	30,6	32,8	35,5	37,7
16	20,5	23,5,	26,3	29,6	32,0	34,3	37	39,2
17	21,6	24,8	27,6	31,0	33,4	35,7	38,5	40,8
18	22,8	26,0	28,9	32.3	34,8	37,2	40	42,3
19	23,9	27,2	30,1	33,7	36,2	38,6	41,5	43,8
20	25,0	28,4	31,4	35,0	37,6	40,0	43	45,3
21	26,2	29,6	32,7	36,3	38,9	41,4	44,5	46,8
22	27,3	30,8	33,9	37,7	40,3	42,8	46	48,3
23	28,4	32,0	35,2	39,0	41,6	44,2	47,5	49,7
24	29,6	33,2	36,4	40,3	43,0	45,6	48,5	51,2
25	30,7	34,4	37,7	41,6	44,3	46,9	50	52,6
26	31,8	35,6	38,9	42,9	45,6	48,3	51,5	54,1
27	32,9	36,7	40,1	44,1	47,0	49,6	53	55,5
28	34,0	37,9	41,3	45,4	48,3	51,0	54,5	56,9
29	35,1	39,1	42,6	46,7	49,6	52,3	56	58,3
30	36,3	40,3	43,8	48,0	50,9	53,7	57,5	59,7

Таблица 5. **Квантили распределения Фишера F_{1-p} для $p = 0{,}05$**

f_2	f_1								
	1	2	3	4	5	6	12	24	∞
1	164,4	199,5	215,7	224,6	230,2	234,0	244,9	249,0	254,3
2	18,5	19,2	19,2	19,3	19,3	19,3	19,4	19,5	19,5
3	10,1	9,6	9,3	9,1	9,0	8,9	8,7	8,6	8,5
4	7,7	6,9	6,6	6,4	6,3	6,2	5,9	5,8	5,6
5	6,6	5,8	5,4	5,2	5,1	5,0	4,7	4,5	4,4
6	6,0	5,1	4,8	4,5	4,4	4,3	4,0	3,8	3,7
7	5,6	4,7	4,4	4,1	4,0	3,9	3,6	3,4	3,2
8	5,3	4,5	4,1	3,8	3,7	3,6	3,3	3,1	2,9
9	5,1	4,3	3,9	3,6	3,5	3,4	3,1	2,9	2,7
10	5,0	4,1	3,7	3,5	3,3	3,2	2,9	2,7	2,5
11	4,8	4,0	3,6	3,4	3,2	3,1	2,8	2,6	2,4
12	4,8	3,9	3,5	3,3	3,1	3,0	2,7	2,5	2,3
13	4,7	3,8	3,4	3,2	3,0	2,9	2,6	2,4	2,2
14	4,6	3,7	3,3	3,1	3,0	2,9	2,5	2,3	2,1
15	4,5	3,7	3,3	3,1	2,9	2,8	2,5	2,3	2,1

Продолжение

f_2	f_1								
	1	2	3	4	5	6	12	24	∞
16	4,5	3,6	3,2	3,0	2,9	2,7	2,4	2,2	2,0
17	4,5	3,6	3,2	3,0	2,8	2,7	2,4	2,2	2,0
18	4,4	3,6	3,2	2,9	2,8	2,7	2,3	2,1	1,9
19	4,4	3,5	3,1	2,9	2,7	2,6	2,3	2,1	1,8
20	4,4	3,5	3,1	2,9	2,7	2,6	2,3	2,1	1,8
22	4,3	3,4	3,1	2,8	2,7	2,6	2,2	2,0	1,8
24	4,3	3,4	3,0	2,8	2,6	2,5	2,2	2,0	1,7
26	4,2	3,4	3,0	2,7	2,6	2,4	2,1	1,9	1,7
28	4,2	3,3	2,9	2,7	2,6	2,4	2,1	1,9	1,6
30	4,2	3,3	2,9	2,7	2,5	2,4	2,1	1,9	1,6
40	4,1	3,2	2,9	2,6	2,5	2,3	2,0	1,8	1,5
60	4,0	3,2	2,8	2,5	2,4	2,3	1,9	1,7	1,4
120	3,9	3,1	2,7	2,5	2,3	2,2	1,8	1,6	1,3
∞	3,8	3,0	2,6	2,4	2,2	2,1	1,8	1,5	1,0

Таблица 6. **Квантили распределения Кохрена G^*_{1-p} для $p = 0{,}05$**

n	f													
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	16	36	144	∞
2	9985	9750	9392	9057	8772	8534	8332	8159	8010	7880	7341	6602	5813	5000
3	9669	8709	7977	7454	7071	6771	6530	6333	6167	6025	5466	4748	4031	3333
4	9065	7679	6841	6287	5895	5598	5365	5175	5017	4884	4366	3720	3093	2500
5	8412	6838	5981	5441	5065	4783	4564	4387	4241	4118	3645	3066	2513	2000
6	7808	6161	5321	4803	4447	4184	3980	3817	3682	3568	3135	2612	2119	1667
7	7271	5612	4800	4307	3974	3726	3535	3384	3259	3154	2756	2278	1833	1429
8	6798	5157	4377	3910	3595	3362	3185	3043	2926	2829	2462	2022	1616	1250
9	6385	4775	4027	3584	3286	3067	2901	2768	2659	2568	2226	1820	1446	1111
10	6020	4450	3733	3311	3029	2823	2666	2541	2439	2353	2032	1655	1308	1000
12	5410	3924	3264	2880	2624	2439	2299	2187	2098	2020	1737	1403	1100	0833
15	4709	3346	2758	2419	2195	2034	1911	1815	1736	1671	1429	1144	0889	0667
20	3894	2705	2205	1921	1735	1602	1501	1422	1357	1303	1108	0879	0675	0500
24	3434	2354	1907	1656	1493	1374	1286	1216	1160	1113	0942	0743	0567	0417
30	2929	1980	1593	1377	1237	1137	1061	1002	0958	0921	0771	0604	0457	0333
40	2370	1576	1259	1082	0968	0887	0827	0780	0745	0713	0595	0462	0347	0250
60	1737	1131	0895	0765	0682	0623	0583	0552	0520	0497	0411	0316	0234	0167
120	0998	0632	0495	0419	0371	0337	0312	0292	0279	0266	0218	0165	0120	0083
∞	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000	0000

* Все квантили G_{1-p} меньше единицы, поэтому в табл. 6 приведены лишь десятичные знаки, следующие после запятой, перед которой при пользовании таблицей нужно ставить ноль целых. Например, при $n = 6, f = 3$ имеем $G_{0,95} = 0{,}5321$.

Таблица 7. **Значимые ранги множественного рангового критерия Дункана при $p = 0{,}05$**

n_D	p															
	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	14	16	18	20	50	100
1	18,00	18,00	18,00	18,00	18,00	18,00	18,00	18,00	18,00	18,00	18,00	18,00	18,00	18,00	18,00	18,00
2	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09	6,09
3	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50	4,50
4	3,98	4,01	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02	4,02
5	3,64	3,74	3,79	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83	3,83
6	3,46	3,58	3,64	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68	368	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68	3,68
7	3,35	3,47	3,54	3,58	3,60	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61	3,61
8	3,26	3,39	3,47	3,52	3,55	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56	3,56
9	3,20	3,34	3,41	3,47	3,50	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52	3,52
10	3,15	3,30	3,37	3,43	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47	3,47	3,47	3,47	3,47	3,48	3,48	3,48
11	3,11	3,27	3,35	3,39	3,43	3,44	3,45	3,46	3,46	3,46	3,46	3,46	3,47	3,48	3,48	3,48
12	3,08	3,23	3,33	3,36	3,40	3,42	3,44	3,44	3,46	3,46	3,46	3,46	3,47	3,48	3,48	3,48
13	3,06	3,21	3,30	3,35	3,38	3,41	3,42	3,44	3,45	3,45	3,46	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
14	3,03	3,18	3,27	3,33	3,37	3,39	3,41	3,42	3,44	3,45	3,46	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
15	3,01	3,16	3,25	3,31	3,36	3,38	3,40	3,42	3,43	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
16	3,00	3,15	3,23	3,30	3,34	3,37	3,39	3,41	3,43	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
17	2,98	3,13	3,22	3,28	3,33	3,36	3,38	3,42	3,42	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
18	2,97	3,12	3,21	3,27	3,32	3,35	3,37	3,39	3,41	3,43	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
19	2,96	3,11	3,19	3,26	3,31	3,35	3,37	3,39	3,41	3,43	3,44	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
20	2,95	3,10	3,18	3,25	3,30	3,34	3,36	3,38	3,40	3,43	3,44	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
22	2,93	3,08	3,17	3,24	3,29	3,32	3,35	3,37	3,39	3,42	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47
24	2,92	3,07	3,15	3,22	3,28	3,31	3,34	3,37	3,38	3,41	3,44	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47
26	2,91	3,06	3,14	3,21	3,27	3,30	3,34	3,36	3,38	3,41	3,43	3,45	3,46	3,47	3,47	3,47
28	2,90	3,04	3,13	3,20	3,26	3,30	3,33	3,35	3,37	3,40	3,43	3,46	3,47	3,47	3,47	3,47
30	2,89	3,04	3,12	3,20	3,25	3,29	3,32	3,35	3,37	3,40	3,43	3,44	3,46	3,47	3,47	3,47
40	2,86	3,01	3,10	3,17	3,22	3,27	3,30	3,33	3,35	3,39	3,42	3,44	3,46	3,47	3,47	3,47
60	2,83	2,98	3,08	3,14	3,20	3,24	3,28	3,31	3,33	3,37	3,40	3,43	3,45	3,47	3,48	3,48
100	2,80	2,95	3,05	3,12	3,18	3,22	3,26	3,29	3,32	3,36	3,40	3,42	3,45	3,47	3,53	3,53
∞	2,77	2,92	3,02	3,09	3,15	3,19	3,23	3,26	3,29	3,34	3,38	3,41	3,44	3,47	3,61	3,67

Таблица 8. **Матрица случайного баланса**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}	x_{11}	x_{12}
1	−1	+1	−1	+1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	+1	+1
2	−1	−1	+1	−1	−1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	−1
3	−1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	−1	−1	+1	+1
4	+1	−1	−1	−1	+1	+1	−1	−1	−1	+1	−1	−1
5	+1	−1	−1	+1	−1	−1	−1	+1	−1	+1	+1	+1
6	−1	+1	−1	−1	+1	−1	−1	−1	+1	−1	−1	−1
7	+1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	+1
8	−1	−1	+1	+1	+1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	−1
9	−1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	+1
10	−1	+1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	+1	+1	−1
11	+1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	−1	−1	+1	−1	+1
12	−1	−1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	−1
13	+1	+1	+1	+1	+1	+1	−1	−1	−1	+1	−1	+1
14	−1	−1	−1	+1	−1	+1	+1	−1	−1	−1	−1	−1
15	−1	−1	−1	+1	−1	+1	−1	+1	+1	−1	−1	+1
16	+1	−1	−1	−1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	−1

Продолжение

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}	x_{11}	x_{12}
17	+1	+1	+1	+1	−1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	+1
18	+1	−1	+1	−1	+1	−1	+1	+1	−1	−1	−1	−1
19	+1	−1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	+1
20	−1	+1	−1	+1	−1	+1	+1	+1	+1	+1	−1	−1
21	−1	+1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	−1	−1	+1	+1
22	+1	−1	+1	+1	+1	−1	−1	−1	+1	−1	+1	−1
23	+1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	−1	−1	+1
24	+1	+1	−1	−1	+1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	−1

Таблица 9. **Матрица случайного баланса**

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}	x_{11}	x_{12}	x_{13}	x_{14}	x_{15}	x_{16}	x_{17}	x_{18}	x_{19}
1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1
2	+1	−1	−1	+1	+1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	+1	−1	+1	+1	−1	+1	+1	−1
3	−1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	+1
4	+1	+1	+1	+1	+1	−1	+1	−1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	−1	+1	−1
5	−1	−1	−1	−1	+1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	+1	−1	+1
6	+1	−1	+1	−1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	+1	−1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	+1
7	−1	+1	+1	−1	+1	−1	+1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	−1
8	+1	+1	−1	−1	+1	+1	−1	−1	−1	−1	+1	−1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	−1
9	−1	−1	+1	−1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	−1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	+1
10	+1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	+1
11	−1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	−1
12	+1	+1	+1	−1	−1	−1	−1	+1	−1	+1	+1	−1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	−1
13	−1	−1	−1	+1	−1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	−1	+1	+1
14	+1	−1	+1	+1	−1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	−1	−1	−1	+1	+1	−1	−1
15	−1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	−1	+1	+1	−1	+1	+1
16	+1	+1	−1	+1	−1	+1	+1	+1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	+1	−1	+1	−1	+1
17	−1	−1	+1	+1	−1	+1	−1	+1	−1	−1	+1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	−1	−1
18	+1	−1	−1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	−1	−1	−1	−1
19	−1	+1	−1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	−1	+1	+1	+1
20	+1	+1	+1	+1	−1	−1	+1	−1	+1	−1	−1	+1	−1	−1	+1	+1	−1	−1	−1
21	−1	−1	−1	−1	−1	−1	+1	−1	−1	−1	−1	−1	+1	−1	−1	+1	+1	+1	−1
22	+1	−1	+1	−1	−1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	−1	−1	+1	−1	+1	−1	+1	−1
23	−1	+1	+1	−1	−1	+1	−1	−1	−1	+1	−1	−1	−1	−1	+1	−1	+1	+1	+1
24	+1	+1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	−1	+1	+1	+1	+1	−1	−1	+1	−1
25	−1	−1	+1	−1	+1	−1	+1	+1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	−1	+1	+1	−1	−1
26	+1	−1	−1	−1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	+1	+1	−1	−1	+1	−1	+1
27	−1	+1	−1	−1	+1	+1	−1	−1	+1	+1	−1	+1	−1	+1	−1	+1	+1	+1	+1
28	+1	+1	+1	−1	+1	−1	+1	−1	−1	−1	−1	−1	+1	+1	−1	−1	−1	+1	+1
29	−1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	−1	+1	+1	+1	+1	+1	−1	−1	−1	−1	−1	+1
30	+1	−1	+1	+1	+1	−1	−1	+1	+1	+1	−1	−1	+1	+1	−1	+1	−1	−1	+1
31	−1	+1	+1	+1	+1	−1	−1	−1	+1	−1	−1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	+1	−1
32	+1	+1	−1	+1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	−1	+1	+1	−1	+1	+1	+1	−1	+1

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие 3
Введение 4

Часть первая

МЕТОДЫ СТАТИСТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ЭКСПЕРИМЕНТА

Глава I. **Основные характеристики случайных величин** 8

1. Случайные величины. Аксиомы теории вероятностей. Законы распределения (8). 2. Числовые характеристики (11). 3. Свойства математического ожидания и дисперсии (14). 4. Равномерное распределение (16). 5. Нормальное распределение (17). 6. Системы случайных величин (20). 7. Стохастическая связь (23)

Упражнения 27

Глава II. **Определение параметров функции распределения** 27

1. Генеральная совокупность и случайная выборка (27). 2. Метод максимального правдоподобия (30). 3. Оценка математического ожидания и дисперсии (33). 4. Классификация ошибок измерения (35). 5. Закон сложения ошибок (35). 6. Ошибки косвенных измерений (36). 7. Определение дисперсии по текущим измерениям (37). 8. Доверительные интервалы и доверительная вероятность (40). 9. Проверка статистических гипотез (43). 10. Оценка математического ожидания нормально распределенной случайной величины (45). 11. Оценка дисперсии нормально распределенной случайной величины (47). 12. Сравнение двух дисперсий (50). 13. Сравнение нескольких дисперсий (52). 14. Сравнение двух средних (54). 15. Сравнение нескольких средних (57). 16. Проверка однородности результатов измерений (59). 17. Сравнение выборочного распределения и распределения генеральной совокупности (60). 18. Критерий согласия ω^2 (65). 19. Критерий Вилькоксона (67). 20. Проверка гипотезы нормальности по совокупности малых выборок (70)

Упражнения 74

Глава III. **Дисперсионный анализ** 74

1. Задача дисперсионного анализа (74). 2. Однофакторный дисперсионный анализ (76). 3. Двухфакторный дисперсионный анализ (83). 4. Планирование эксперимента при дисперсионном анализе. Латинские и гипер-греко-латинские квадраты (95). 5. Латинские кубы (108)

Упражнения 119

Глава IV. **Методы корреляционного и регрессионного анализов** 120

1. Выборочный коэффициент корреляции (120). 2. Коэффициенты частной корреляции (123). 3. Приближенная регрессия. Метод наименьших квадратов (125). 4. Линейная регрессия от одного параметра (128). 5. Параболическая регрессия (134). 6. Полиномы Чебышева (135). 7. Трансцендентная регрессия (140). 8. Оценка тесноты нелинейной связи (141). 9. Метод множественной корреляции (142). 10. Регрессионный анализ в матричной форме (146). 11. Метод группового учета аргументов (МГУА) (150). 12. Метод главных компонент (153)

Упражнения 157

Часть вторая

МЕТОДЫ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

Глава V. **Методы планирования экстремальных экспериментов** 159

1. Полный факторный эксперимент (159). 2. Дробные реплики (166). 3. Оптимизация методом крутого восхождения по поверхности отклика (174). 4. Описание области, близкой к экстремуму. Композиционные планы Бокса – Уилсона (177). 5. Ортогональные планы второго порядка (183). 6. Ротатабельные планы второго порядка Бокса – Хантера (188). 7. Критерии оптимальности планов (196). 8. Исследование поверхности отклика. Решение задачи оптимизации (198). 9. Функция

желательности (205). 10. Сложные планы. Факторный эксперимент 2^{2k}, совмещенный с латинским квадратом (218). 11. Метод последовательного симплекс-планирования (228). 12. Ортогональные насыщенные планы Плакетта — Бермана (237). 13. Отсеивающие эксперименты. Метод случайного баланса (241). 14. Планирование эксперимента при определении констант уравнений формальной кинетики (247). 15. Планирование эксперимента в производственных условиях (254)

Упражнения 267

Глава VI. **Планирование эксперимента при изучении диаграмм состав — свойство** 268

1. Метод симплексных решеток (268). 2. Симплекс-решетчатые планы Шеффе (273). 3. Симплекс-центроидное планирование (287). 4. Планирование эксперимента при исследовании локальных участков диаграмм (290). 5. *D*-Оптимальные планы (297). 6. Планы с минимизацией систематического смещения (304). 7. Планирование эксперимента при изучении зависимости свойства от соотношений компонентов (314)

Упражнения 317

Литература 318

Приложение 319

Светлана Лазаревна Ахназарова,
Виктор Вячеславович Кафаров

Методы оптимизации эксперимеита в химической технологии

Зав. редакцией С. Ф. Кондрашкова
Редактор Т. С. Костян
Мл. редактор С. М. Ерохина
Художник В. М. Боровков
Художественный редактор Т. М. Скворцова
Технический редактор А. К. Нестерова
Корректор С. К. Завьялова

ИБ № 4782

Изд. № Хим — 738. Сдано в набор 12.06.84. Подп. в печать 17.12.84. Формат 60 × 90¹/₁₆. Бум. офс. кн.-журн. Гарнитура литературная. Печать офсетная. Объем 20,5 усл. печ. л. 20,5 усл. кр.-отт. 21,75 уч.-изд. л. Тираж 8000 экз. Зак. 529. Цена 1 р. 20 к.
Издательство «Высшая школа», 101430, Москва, ГСП-4, Неглинная ул., д. 29/14.

Ярославский полиграфкомбинат Союзполиграфпрома при Государственном комитете СССР по делам издательств, полиграфии и книжной торговли. 150014, Ярославль, ул. Свободы, 97.