

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Пензенский государственный университет
архитектуры и строительства»
(ПГУАС)

А.М. Данилов, И.А. Гарькина

**ИНТЕРПОЛЯЦИЯ,
АППРОКСИМАЦИЯ, ОПТИМИЗАЦИЯ:
АНАЛИЗ И СИНТЕЗ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ**

Пенза 2014

УДК 69.001.5(035.3)
ББК [22.19+22.172]:32.817
Д18

Рецензенты: кафедра автоматизации и управления Пензенской государственной технологической академии (зав. кафедрой, доктор технических наук, профессор И.А. Прошин); доктор физико-математических наук, профессор О.А. Голованов (Пензенский артиллерийский инженерный институт)

Данилов А.М.

Д18 Интерполяция, аппроксимация, оптимизация: анализ и синтез сложных систем: моногр. / А.М. Данилов, И.А. Гарькина. – Пенза: ПГУАС, 2014. – 168 с.
ISBN 978-5-9282-1036-6

Содержит результаты многолетних исследований в области математического моделирования, непосредственно связанного с решением задач интерполяции, аппроксимации и оптимизации при анализе и синтезе сложных систем различного назначения.

Монография подготовлена на кафедре «Математика и математическое моделирование» и предназначена специалистам, научным работникам, аспирантам и студентам ВУЗов, связанным с вопросами моделирования, анализа, синтеза и управления сложными системами различной природы. Книга широко иллюстрирована прикладными примерами и может быть полезна специалистам, сталкивающимся в своей деятельности с необходимостью анализа зависимостей.

ISBN 978-5-9282-1036-6

© Пензенский государственный университет
архитектуры и строительства, 2014
© Данилов А.М., Гарькина И.А., 2014

*«...любая нужная цель достигается
через множество мелких и вполне обычных шагов».*
Питер Кохэн
«План — ничто, планирование — всё».
Дуайт Эйзенхауэр

ПРЕДИСЛОВИЕ

Предлагаемая Вашему вниманию книга написана по результатам многолетних исследований в области математического моделирования, непосредственно связанного с решением задач интерполяции, аппроксимации и оптимизации при анализе и синтезе сложных систем различного назначения.

Анализ каждой сложной системы – это уникальная проблема, требующая не только разносторонней культуры, но и изобретательства и таланта. Наука начинается с наблюдения изучаемых явлений, которое позволяет разработать теории, увязывающие факты, а также дающие умозрительное их описание и объяснение. Затем эти теории могут развиваться без обращения к наблюдениям и дают возможность предсказать, что произойдет под влиянием различных условий. Далее эти теоретические выводы проверяются путем новых наблюдений соответствующих явлений.

Если выводы теории согласуются с данными, полученными в результате наблюдений, то уверенность в правильности теории возрастает. В противном случае ее следует признать несостоятельной или продолжать совершенствовать.

Этот метод исследования реальной действительности, таким образом, отличается цикличностью. Факты, завершающие один цикл, являются началом и основой следующего цикла. Если наблюдения не подтверждают справедливость предсказаний, ведется поиск более совершенной теории.

Иногда указанная схема исследований не выдерживается: теории появляются до обнаружения соответствующих явлений или теории, обоснованные наблюдениями, остаются непроверенными.

Таким образом, исследование может начинаться с любого этапа. Однако окончательный синтез подтвержденных знаний достигается в соответствии с указанной выше схемой научного метода исследований.

Особое место в этом методе занимает моделирование процессов и явлений на основе интерполяции и аппроксимации экспериментальных зависимостей. Математическое моделирование позволяет исследовать процессы, имеющие различное физическое содержание, но описываемые одинаковыми математическими соотношениями. Заметим, что математическое моделирование успешно применяется и в самой математике (напри-

мер, решения, полученные численными методами, являются моделями истинных решений – моделями реальных объектов).

Сложность и многообразие процессов функционирования реальных систем не позволяют получить абсолютно адекватные математические модели. Математическая модель, описывающая формализованный процесс функционирования системы, в состоянии охватить только основные, характерные закономерности.

Надо помнить, что нет возможностей указать формальные правила для выбора характеристик состояний и параметров исследуемых реальных систем. Исследователь вынужден руководствоваться лишь собственной интуицией, опирающейся на постановку прикладной задачи и понимание природы процессов функционирования системы.

Излагаемый в книге материал сопровождается иллюстративными примерами, которые имеют и практический интерес.

Полагаем, что книга будет полезна специалистам, научным работникам, аспирантам и студентам ВУЗов, связанным с вопросами моделирования, анализа, синтеза и управления сложными системами различной природы.

Любые замечания и предложения по содержанию книги авторы примут с признательностью.

Авторы

ВВЕДЕНИЕ

Сложная система определяется как «составной объект, части которого можно рассматривать как системы, закономерно объединённые в единое целое в соответствии с определенными принципами или связанные между собой заданными отношениями». Ее можно (необязательно единственным образом) расчленить на конечное число частей (подсистем). Каждую подсистему (высшего уровня) можно, в свою очередь, расчленить на конечное число более мелких подсистем и т.д., вплоть до получения подсистем первого уровня (элементов; объективно не подлежат расчленению на части, либо относительно их дальнейшей неделимости имеется соответствующая договорённость). Свойства каждого из элементов в общем случае зависят от условий, определяемых поведением других элементов. Свойства же сложной системы в целом определяются не только свойствами элементов, но и характером взаимодействия между ними.

При моделировании систем обычно используется принцип моделируемости сложной системы: «сложная система представима конечным множеством моделей, отражающих определенную грань ее сущности». Этот важный принцип дает возможность исследовать определенное свойство или группу свойств сложной системы при помощи одной или нескольких упрощенных (узкоориентированных) моделей. Выявление новых свойств и сущностей необязательно должно сопровождаться построением обобщающих моделей, а может ограничиваться наращиванием множества упрощенных моделей. Отражение сложной системы в целом обеспечивается взаимодействием упрощенных моделей. Модель, ориентированная на определенную группу свойств сложной системы, всегда проще самой системы. Создание полной модели практически невозможно, ибо она будет столь же сложной, как сама система.

Принцип целенаправленности позволяет сопоставить сложной системе любого содержания некоторый функционал, описывающий ее существование как целого.

В соответствии с принципом физичности всякой системе независимо от ее природы присущи физические законы, возможно уникальные, определяющие внутренние причинно-следственные связи, существование и функционирование; никаких других законов для описания действия системы не требуется.

Только на первый взгляд принцип моделируемости выглядит противоречащим постулату целостности, а принципы физичности и целенаправленности могут показаться несовместимыми. Однако это не так. Законы физики известны достаточно хорошо – по крайней мере в части, непосредственно связанной с человеческими потребностями, кроме того они формализованы. Искусственные системы действуют в соответствии с зако-

номерностями, наделенными их создателем. В системе все взаимосвязано, но это не мешает ее рассмотрению с различных точек зрения.

При моделировании неизвестные параметры оцениваются посредством сравнения значений функциональных и структурных характеристик систем, устанавливаемых экспериментально и в результате моделирования. Здесь широко используются методы интерполяции и аппроксимации экспериментальных зависимостей (излагаются в первых двух разделах книги). Необходимые поправки к принятым первоначальным значениям параметров для получения достаточной точности оценки неизвестных параметров могут определяться методом последовательных приближений.

В книге с иллюстрацией на примерах приводятся методы как однокритериальной, так и многокритериальной оптимизации параметров сложных систем (разд. 3).

Нашли отражение и вероятностные методы для качественного исследования зависимостей (разд. 4).

1. ИНТЕРПОЛЯЦИЯ

Задачи интерполяции и экстраполяции в достаточно общей форме можно сформулировать так. Пусть на отрезке $[a, b]$ известны значения функции $f(x)$ и, возможно, некоторых производных лишь в точках $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ (все перечисленные величины называются исходными данными, а точки $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ — узлами интерполяции). Требуется найти приближённо значение функции $f(x)$ и, возможно, значения некоторых её производных в точках x , лежащих между узлами $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ (задача интерполяции), или в точках x , лежащих вне, справа, слева от узлов (задача экстраполяции). То есть необходимо по исходным данным построить такую интерполяционную функцию $\tilde{f}(x)$, чтобы её значения в узлах интерполяции совпали (с заданной точностью) с данными значениями $f(x)$, а в остальных точках отрезка были бы близки к неизвестным значениям функции $f(x)$.

Теоретическую возможность построения такой функции $\tilde{f}(x)$ дают известные результаты по теории аппроксимации, суть которых состоит в следующем.

Пусть $y = f(x)$ задана таблицей значений (результатами эксперимента):

x	x_0	x_1	x_2	...	x_n
y	y_0	y_1	y_2	...	y_n

$$y_k = f(x_k), x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n.$$

Тогда данная функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$, то её можно с любой точностью аппроксимировать многочленами, а также другими функциями достаточно простой структуры: кусочно-постоянными, кусочно-линейными и т.п.

Интерполяция кусочно-постоянной функцией. Здесь интерполяционная функция $\tilde{f}(x)$ на отрезке $[x_0, x_n]$ определяется формулой

$$\tilde{f}(x) = \begin{cases} y_k, & \text{если } x = x_k; \\ \frac{y_k + y_{k+1}}{2}, & \text{если } x_k < x < x_{k+1}. \end{cases}$$

Интерполяция кусочно-линейной функцией. Интерполяционная функция $\tilde{f}(x)$ на отрезке $[x_0, x_n]$ определяется формулой

$$\tilde{f}(x) = y_k + \frac{y_{k+1} - y_k}{x_{k+1} - x_k} (x - x_k), \text{ если } x_k \leq x \leq x_{k+1}. \quad (1.1)$$

Кусочно-линейная функция графически представляет собой ломанную линию, соединяющую точки $(x_0; y_0), (x_1; y_1), \dots, (x_n; y_n)$.

Для написания формулы (1.1) воспользовались уравнением прямой, проходящей через точки $A(x_k; y_k)$ и $B(x_{k+1}; y_{k+1})$. Кусочно-линейная интерполяция даёт более полную информацию о функции $f(x)$, в частности, о её графике. На практике такой интерполяцией пользуются значительно чаще, например, при решении дифференциальных уравнений (метод Эйлера).

Интерполяция кусочно-квадратичной функцией

Здесь интерполяционная кусочно-квадратичная функция $\tilde{f}(x)$ на отрезке $[x_0, x_n]$ определяется формулой

$$\begin{aligned} \tilde{f}(x) = & \frac{(x - x_k)(x - x_{k+1})}{(x_{k-1} - x_k)(x_{k-1} - x_{k+1})} y_{k-1} + \\ & + \frac{(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})}{(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})} y_k + \frac{(x - x_{k+1})(x - x_k)}{(x_{k+1} - x_{k-1})(x_{k+1} - x_k)}, \end{aligned}$$

если $x_{k-1} \leq x \leq x_{k+1}$, $k = 1, 3, 5, \dots, n-1$.

При получении интерполяционной функции каждые три точки: $(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2)$ далее $(x_2, y_2), (x_3, y_3), (x_4, y_4)$ и т.д. соединяются параболической кривой $y = ax^2 + bx + c$.

С практической точки зрения кусочно-квадратичная интерполяция для решения многих задач оказывается наиболее удобной, так как является достаточно простой для расчётов и даёт, как правило, очень малую погрешность.

Интерполяция многочленом n -й степени. В общем курсе высшей математики показывается, что существует *единственный* многочлен n -й степени, принимающий в точках $x_0, x_1, \dots, x_n$ заданные значения $y_0, y_1, \dots, y_n$.

Записать такой многочлен можно разными формулами (каждая из них может оказаться более удобной в той или другой ситуации).

Приведём две формулы, наиболее часто применяемые на практике.

Первая из них – *формула Лагранжа*. Она имеет вид

$$\begin{aligned} L_N^{(x)} = & \frac{(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \dots (x_0 - x_n)} y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2) \dots (x - x_n)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2) \dots (x_1 - x_n)} y_1 + \\ & + \dots + \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1})}{(x_n - x_0)(x_n - x_1) \dots (x_n - x_{n-1})} y_n. \end{aligned}$$

Отметим, что стоящий перед y_k множитель будет равен 1, если $x = x_k$, и 0, если $x = x_j, j \neq k$. Отсюда получаем, что $\tilde{f}(x_k) = y_k$.

Пример. В таблице приводятся данные по определению вязкости эпоксидного композита в зависимости от концентрации специальной добавки (машинного масла) при фиксированной температуре $t = 55^\circ \text{C}$.

x_i	0	1	5	10	15
y_i	119	145	160	65	91

Имеем:

$$\begin{aligned}
 L_4(x) &= \frac{(x-1)(x-5)(x-10)(x-15)}{(0-1)(0-5)(0-10)(0-15)} 119 + \\
 &+ \frac{(x-0)(x-5)(x-10)(x-15)}{(1-0)(1-5)(1-10)(1-15)} 145 + \frac{(x-0)(x-1)(x-10)(x-15)}{(5-0)(5-1)(5-10)(5-15)} 160 + \\
 &+ \frac{(x-0)(x-1)(x-5)(x-15)}{(10-0)(10-1)(10-5)(10-15)} 65 + \frac{(x-0)(x-1)(x-5)(x-10)}{(15-0)(15-1)(15-5)(15-10)} 91 = \\
 &= 0,0107 x^4 + 0,0203 x^3 + 4,9048 x^2 + 30,874 x + 119.
 \end{aligned}$$

При равноотстоящих узлах используется *формула Ньютона*

$$\begin{aligned}
 \tilde{f}(x) &= y_0 + \frac{\Delta y_0}{1!} \frac{x-x_0}{h} + \frac{\Delta^2 y_0}{2!} \left(\frac{x-x_0}{h} - 1 \right) + \dots \\
 &\dots + \frac{\Delta^n y_0}{n!} \frac{x-x_0}{h} \left(\frac{x-x_0}{h} - 1 \right) \left(\frac{x-x_0}{h} - 2 \right) \dots \left(\frac{x-x_0}{h} - n + 1 \right);
 \end{aligned}$$

здесь $\Delta y_0 = y_1 - y_0$, $\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0 = (y_2 - y_1) - (y_1 - y_0)$,
 $\Delta^3 y_0 = \Delta^2 y_1 - \Delta^2 y_0, \dots, \Delta^n y_0 = \Delta^{n-1} y_1 - \Delta^{n-1} y_0$, $h = x_k - x_{k-1}$.

Погрешность интерполяции $R(x)$ многочленом n -й степени (ошибка при замене функции $f(x)$ многочленом $\tilde{f}(x)$), то есть величина $R(x) = f(x) - \tilde{f}(x)$, удовлетворяет неравенству

$$|R(x)| \leq |x-x_0| |x-x_1| \dots |x-x_n| \frac{1}{(n+1)!} \max |f^{(n+1)}(x)|.$$

Многочисленные приложения методов интерполяции рассматриваются в [1–8].

2. АППРОКСИМАЦИЯ

2.1. Метод наименьших квадратов

Пусть результатом измерения физической величины, находящейся при проведении всей серии измерений в неизменном состоянии, является ряд чисел

$$x_1, x_2, \dots, x_n,$$

а истинным значением измеряемой величины является A . Тогда результаты измерения дают ряд ошибок:

$$\Delta_1 = A - x_1, \Delta_2 = A - x_2, \dots, \Delta_n = A - x_n.$$

Обозначим среднее арифметическое наблюждённых значений:

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

Оказывается, что если наиболее вероятным значением искомой величины A является $\bar{x}$, то законом распределения случайных ошибок является нормальный закон Гаусса с плотностью вероятности

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}},$$

где m – математическое ожидание;

σ – среднее квадратическое отклонение случайной величины X .

Напомним, что в соответствии с теоремой Чебышева (закон больших чисел) при достаточно большом числе независимых опытов среднее арифметическое $\bar{x}$ наблюждённых значений случайной величины X сходится по вероятности к её математическому ожиданию m . Отсюда следует, что при бесконечно большом числе измерений истинное значение измеряемой величины A равно среднеарифметическому значению $\bar{x}$ результатов всех произведённых измерений. Здесь и далее считается, что систематические погрешности отсутствуют.

Далее. Пусть сама измеряемая величина за время измерений меняется вследствие непостоянства другой величины, связанной с ней. И в этих случаях будет наблюдаться статистический разброс, приводящий к случайным погрешностям. Но здесь разброс будет уже проходить не относительно неизменного «истинного», или среднего значения измеряемой величины, как рассматривалось ранее, а относительно изменяющегося «истинного значения».

Пусть требуется установить эмпирическую зависимость между y и x по экспериментальным данным, которые можно представить в виде точек (x_i, y_i) , $i = \overline{1, n}$ (рис. 2.1).

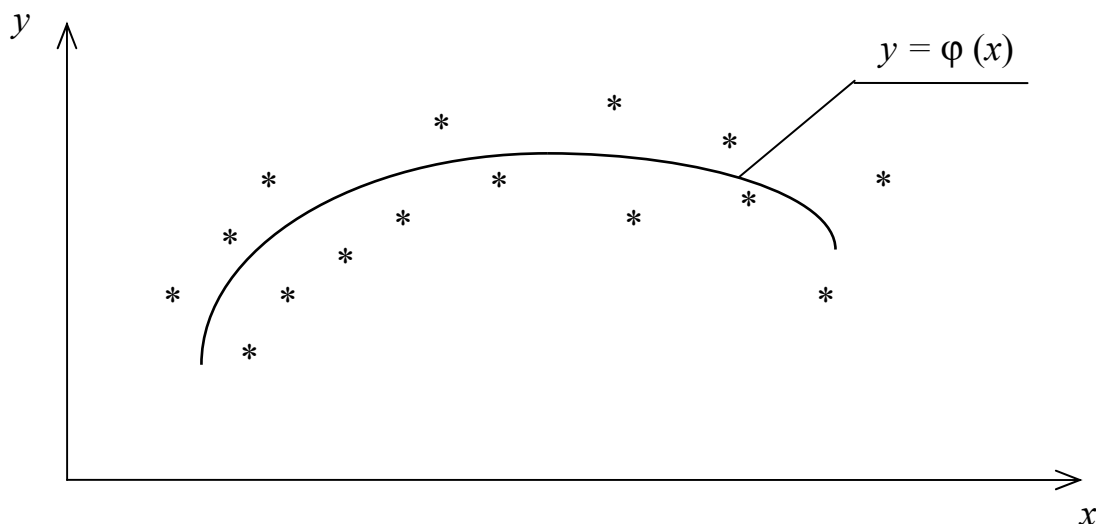


Рис. 2.1

Если последовательно соединить точки (x_i, y_i) ($i = \overline{1, n}$), то получится ломаная линия, форма которой не будет воспроизводиться при повторных сериях измерений. Измеренные значения y_i будут разбросаны относительно кривой $y = y_u(x)$, определяющей истинную зависимость между y и x .

Таким образом, задача установления эмпирической зависимости $y = \varphi(x)$ сводится к проведению по данным экспериментальным точкам кривой (не ломаной), которая проходила бы как можно ближе к истинной функциональной зависимости $y = y_u(x)$.

Рассмотрим какое-нибудь значение аргумента x_i . Ему соответствует истинное значение измеряемой величины $y_u(x_i)$. В результате измерения вместо $y_u(x_i)$ получим случайную величину y_i . Так как ошибки измерения величины $y_u(x_i)$ распределены по нормальному закону с математическим ожиданием, равным $y_u(x_i)$, и со средним квадратическим отклонением σ_i (характеризующим ошибку измерения), то случайная величина распределена по нормальному закону:

$$f_i(y_i) = \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{[y_i - y_u(x_i)]^2}{2\sigma_i^2}}, \quad (i = \overline{1, n}).$$

В результате ряда измерений произошло следующее событие B : случайные величины $(Y_1, Y_2, \dots, Y_n)$ приняли совокупность значений $(y_1, y_2, \dots, y_n)$.

Тогда установление эмпирической зависимости $y = \varphi(x)$ сводится к подбору математических ожиданий случайных величин y_i , равных $y_u(x_i)$, чтобы вероятность события B была максимальна (принцип максимального правдоподобия). Оказывается, если точность измерения при всех x_i одинакова и равна σ , то, для того чтобы совокупность наблюденных значений $y_1, y_2, \dots, y_n$ была наивероятнейшей, нужно выбрать функцию $\varphi(x)$ так, чтобы сумма квадратов отклонений наблюденных значений y_i от $\varphi(x_i)$ была минимальной:

$$\sum_{i=1}^n [y_i - \varphi(x_i)]^2 = \min.$$

Способ согласования кривой $y = \varphi(x)$ и экспериментальных точек, при котором выполняется это условие, и носит название *метода наименьших квадратов*.

На рис. 2.1 кривая $y = \varphi(x)$ построена по значениям (x_i, y_i) методом наименьших квадратов.

2.1.1. Сглаживание экспериментальных зависимостей по методу наименьших квадратов

Пусть из соображений, связанных с существом изучаемого явления или просто с внешним видом наблюденной зависимости (расположения точек (x_i, y_i) на плоскости), выбран общий вид функции $y = \varphi(x)$, зависящий от нескольких числовых параметров $a_0, a_1, \dots, a_m$, т.е.

$$y = \varphi(x_i, a_0, a_1, \dots, a_m).$$

Требуется выбрать a_k ($k = \overline{1, m}$) так, чтобы выполнялось условие

$$\sum_{i=1}^n [y_i - \varphi(x_i, a_0, a_1, \dots, a_m)]^2 = \min.$$

Найдём значения a_k , обращающие левую часть выражения в минимум. Для этого продифференцируем её по a_k и приравняем производную к нулю. Получим:

$$-2 \sum_{i=1}^n [y_i - \varphi(x_i, a_0, a_1, \dots, a_m)] \left(\frac{\partial \varphi}{\partial a_k} \right)_{x=x_i} = 0$$

или
$$\sum_{i=1}^n [y_i - \varphi(x_i, a_0, a_1, \dots, a_m)] \left(\frac{\partial \varphi}{\partial a_k} \right)_{x=x_i} = 0.$$

Из этой системы $(m+1)$ уравнений определяются неизвестные параметры $a_0, a_1, \dots, a_m$.

Составление и решение системы особенно просто в том случае, когда функция $\varphi(x_i, a_0, a_1, \dots, a_m)$ линейна относительно параметров, то есть когда

$$y = \varphi(x_i, a_0, a_1, \dots, a_m) = \varphi_0(x) a_0 + \varphi_1(x) a_1 + \dots + \varphi_m(x) a_m.$$

В этом случае будем иметь:

$$\sum_{i=1}^n [y_i - \varphi_0(x_i) a_0 - \varphi_1(x_i) a_1 - \dots - \varphi_m(x_i) a_m] \varphi_k(x_i) = 0$$

или

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n y_i \varphi_k(x_i) - a_0 \sum_{i=1}^n \varphi_0(x_i) \varphi_k(x_i) - a_1 \sum_{i=1}^n \varphi_1(x_i) \varphi_k(x_i) - \dots \\ \dots - a_m \sum_{i=1}^n \varphi_m(x_i) \varphi_k(x_i) = 0. \end{aligned}$$

Введя обозначения

$$\begin{aligned} [y, \varphi_k] &= \sum_{i=1}^n y_i \varphi_k(x_i); \\ [\varphi_0, \varphi_k] &= \sum_{i=1}^n \varphi_0(x_i) \varphi_k(x_i); \\ &\dots \\ [\varphi_m, \varphi_k] &= \sum_{i=1}^n \varphi_m(x_i) \varphi_k(x_i), \end{aligned}$$

для определения a_k получим систему в так называемой *нормальной форме*:

$$\begin{aligned} [\varphi_0, \varphi_0] a_0 + [\varphi_0, \varphi_1] a_1 + \dots + [\varphi_0, \varphi_m] a_m &= [y, \varphi_0]; \\ [\varphi_1, \varphi_0] a_0 + [\varphi_1, \varphi_1] a_1 + \dots + [\varphi_1, \varphi_m] a_m &= [y, \varphi_1]; \\ &\dots \\ [\varphi_m, \varphi_0] a_0 + [\varphi_m, \varphi_1] a_1 + \dots + [\varphi_m, \varphi_m] a_m &= [y, \varphi_m]. \end{aligned}$$

2.1.2. Сглаживание полиномами

Пусть по результатам наблюдений требуется определить наиболее вероятные значения коэффициентов полинома

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_m x^m,$$

сглаживающего экспериментальную зависимость y от x .

В этом случае

$$\varphi_0(x) = 1, \varphi_1(x) = x, \dots, \varphi_m(x) = x^m;$$

$$[y, \varphi_k] = \sum_i y_i x_i^k ;$$

$$[\varphi_k, \varphi_k] = \sum_i x_i^{2k} ;$$

$$[\varphi_k, \varphi_s] = \sum_i x_i^{k+s} .$$

Для определения $a_0, a_1, \dots, a_m$ получим следующую систему уравнений:

$$a_0 n + a_1 \sum_i x_i + a_2 \sum_i x_i^2 + \dots + a_m \sum_i x_i^m = \sum_i y_i ;$$

$$a_0 \sum_i x_i + a_1 \sum_i x_i^2 + a_2 \sum_i x_i^3 + \dots + a_m \sum_i x_i^{m+1} = \sum_i x_i y_i ;$$

...

$$a_0 \sum_i x_i^m + a_1 \sum_i x_i^{m+1} + a_2 \sum_i x_i^{m+2} + \dots + a_m \sum_i x_i^{2m} = \sum_i x_i^m y_i .$$

Подбор параметров линейной функции. Здесь требуется подобрать параметры a и b линейной функции

$$y = ax + b .$$

Полагая, что

$$a_0 = b, a_1 = a, m = 1,$$

и решая указанную выше систему относительно a и b , находим:

$$a = \frac{K_{xy}^*}{D_x^*}, b = m_y^* - a m_x^*,$$

где

$$m_x^* = \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i; \quad m_y^* = \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i ;$$

$$K_{xy}^* = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - m_x^*)(y_i - m_y^*) ;$$

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

Так что искомая зависимость будет иметь вид:

$$y = \frac{K_{xy}^*}{D_x^*} x + \left(m_y^* - \frac{K_{xy}^*}{D_x^*} m_x^* \right) .$$

Откуда получим:

$$y - m_y^* = \frac{K_{xy}^*}{D_x^*} (x - m_x^*).$$

Справедливо следующее:

$$\begin{aligned} \frac{K_{xy}^*}{D_x^*} &= \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - m_x^*)(y_i - m_y^*)}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - m_x^*)^2} = \\ &= \frac{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - m_x^*)(y_i - m_y^*)}{\sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - m_x^*)^2}} \cdot \frac{\sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - m_y^*)^2}}{\sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - m_x^*)^2}} = r_{xy}^* \frac{\sigma_y^*}{\sigma_x^*}, \end{aligned}$$

где r_{xy}^* – эмпирический коэффициент корреляции;

σ_x^*, σ_y^* – средние квадратические отклонения величин x, y .

В силу предыдущего искомую зависимость можно представить в виде

$$y - m_y^* = r_{xy}^* \frac{\sigma_y^*}{\sigma_x^*} (x - m_x^*).$$

Но это – уравнение эмпирической прямой регрессии y на x . Таким образом, сглаживающая прямая, определённая методом наименьших квадратов, совпадает с эмпирической прямой регрессии y на x .

Пример. По результатам исследований (рис.2.2) для установления связи между коэффициентами пластичности ($k_{пл}$) и структуры ($k_{стр}$) эпоксидных композитов (см. таблицу) определить параметры линейной функции

$$k_{стр} = a_0 + a_1 k_{пл},$$

($x = k_{пл}, y = k_{стр}$).

$k_{пл}$	0,08	0,43	0,47	0,51	0,52	0,6	0,7	0,9	0,93	1,4
$k_{стр}$	16,1	13,2	14,8	14,2	13,8	14,2	7,8	14,5	15	5,4

Из системы уравнений:

$$n a_0 + a_1 \sum_{i=1}^{10} x_i = \sum_{i=1}^{10} y_i,$$

$$a_0 \sum_{i=1}^{10} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{10} x_i^2 = \sum_{i=1}^{10} x_i y_i$$

определим значения a_0 и a_1 и получим искомую зависимость в виде:

$$y = -6,5088x + 17,157.$$

Находим $r_{xy} = -0,68$, что свидетельствует о возможности линейной корреляционной связи между $k_{стр}$ и $k_{пл}$.

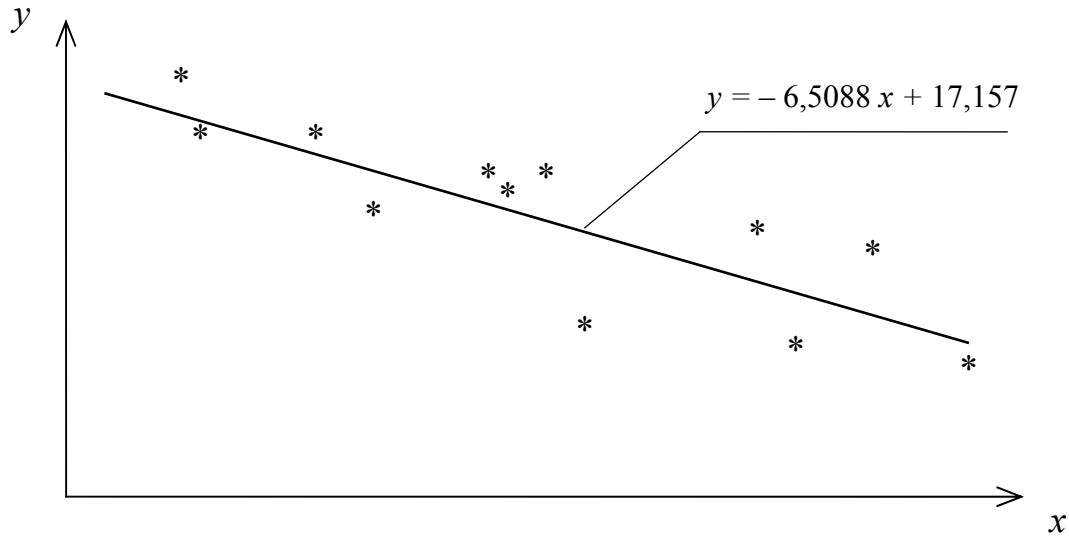


Рис.2.2

Подбор параметров квадратичной функции. Имеем:

$$y = ax^2 + bx + c.$$

Здесь при определении неизвестных параметров a, b, c принимаются $m = 2$; $a_0 = c$, $a_1 = b$, $a_2 = a$. В частном случае при $b = 0$:

$$a = \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2 y_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \sum_{j=1}^n x_j^2}{\sum_{i=1}^n x_i^4 - \frac{1}{n} \left[\sum_{i=1}^n x_i^2 \right]^2};$$

$$c = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 \cdot \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2 y_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \sum_{j=1}^n x_j^2}{\sum_{i=1}^n x_i^4 - \frac{1}{n} \left[\sum_{i=1}^n x_i^2 \right]^2}.$$

Пример. Зависимость влияния содержания водорода H [вес. ч.] в бетоне на толщину [см] защиты при расчёте по допустимой дозе излучений синхроциклотрона X_d и по допустимому потоку X_n при кратности ослабления 10^7 раз и плотности бетона 2350 кг/м^3 приводится в таблице:

H , вес. ч.	0,1	0,35	0,61	0,81	1,09
X_d , см	1005	991	983	980	975
X_n , см	1133	1095	1077	1069	1060

Определить параметры квадратичной зависимости X_d от H .

В соответствии с предыдущим:

$$X_d = 28,308 H^2 - 61,879 H + 1010,3.$$

2.1.3. Сглаживание функцией вида $y = \sum_{s=0}^m a_s \varphi_s(x)$.

Сглаживающая функция представляет собой сумму произвольно заданных функций $\varphi_s(x)$ с коэффициентами a_s . Эти коэффициенты определяются из системы уравнений:

$$a_0 \sum_{i=1}^n [\varphi_0(x_i)]^2 + a_1 \sum_{i=1}^n \varphi_1(x_i) \varphi_0(x_i) + \dots + a_m \sum_{i=1}^n \varphi_m(x_i) \varphi_0(x_i) = \sum_{i=1}^n y_i \varphi_0(x_i);$$

$$a_0 \sum_{i=1}^n \varphi_0(x_i) \varphi_1(x_i) + a_1 \sum_{i=1}^n [\varphi_1(x_i)]^2 + \dots + a_m \sum_{i=1}^n \varphi_m(x_i) \varphi_1(x_i) = \sum_{i=1}^n y_i \varphi_1(x_i);$$

...

$$a_0 \sum_{i=1}^n \varphi_0(x_i) \varphi_m(x_i) + a_1 \sum_{i=1}^n \varphi_1(x_i) \varphi_m(x_i) + \dots + a_m \sum_{i=1}^n [\varphi_m(x_i)]^2 = \sum_{i=1}^n y_i \varphi_m(x_i).$$

Сглаживание линейной комбинацией экспоненциальных функций. Принимается:

$$\varphi(x) = a_0 e^{\alpha x} + a_1 e^{\alpha_1 x} + \dots + a_m e^{\alpha_m x}.$$

Параметры a_s ($s = \overline{1, m}$) определяются из приведенной выше системы уравнений, α_s задаются.

Сглаживание тригонометрическим полиномом. Здесь сглаживание осуществляется функцией

$$\varphi(x) = \sum_{s=0}^m [a_s \cos(s\omega x) + b_s \sin(s\omega x)].$$

Круговая частота ω задаётся. Параметры a_s, b_s определяются из приведенной выше системы уравнений.

2.1.4. Приближение аналитически заданной функции полиномом

Пусть задана функция $y = f(x)$, непрерывная на отрезке $[a, b]$. Требуется подобрать коэффициенты полинома

$$P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m$$

так, чтобы величина S , определяемая формулой

$$S = \int_a^b [f(x) - P(x)]^2 dx,$$

была наименьшей.

До сих пор предполагались известными лишь n значений y_i . Здесь же, по существу, МНК распространяется на случай, когда значения y известны при всех $x \in [a, b]$.

Пример. Найти полином $P(x) = a_0 + a_1x$, дающий наилучшее приближение в среднем функции $f(x) = \sqrt{1+x^2}$ на отрезке $[0, 1]$.

Величина $S = \int_0^1 [\sqrt{1+x^2} - a_0 - a_1x]^2 dx$ должна иметь наименьшее возможное значение.

Дифференцируя S по параметрам a_0 и a_1 под знаком интеграла по известной формуле

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \int_a^b f(x, \alpha) dx = \int_a^b \frac{\partial f(x, \alpha)}{\partial \alpha} dx,$$

получим:

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \int_0^1 [\sqrt{1+x^2} - a_0 - a_1x]^2 dx;$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \int_0^1 [\sqrt{1+x^2} - a_0 - a_1x]^2 x dx.$$

Приравнявая $\frac{\partial S}{\partial a_0}$, $\frac{\partial S}{\partial a_1}$ нулю, будем иметь:

$$a_0 = \frac{1}{2}a_1 = \frac{1}{2}[\sqrt{2} + \ln(1 + \sqrt{2})];$$

$$\frac{1}{2}a_0 + \frac{1}{3}a_1 = \frac{1}{3}(2\sqrt{2} - 1).$$

Откуда

$$a_0 \approx 0,9343, \quad a_1 \approx 0,4269.$$

Таким образом, $\sqrt{1+x^2} \approx 0,9343 + 0,4269 x$.

Эта формула носит название **формулы Понселе**.

2.1.5. Приближение ортогональными полиномами Чебышева

Рассмотренный выше способ наименьших квадратов для приближения наблюденных значений имеет существенный недостаток. Пусть для полученных экспериментальных данных построен полином

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2,$$

но оказалось, что вычисленные по МНК значения y сильно отличаются от наблюденных значений y_i . В этом случае необходимо повысить степень полинома, скажем, до третьей, то есть искать полином вида

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3.$$

Однако здесь требуется не только нахождение коэффициента a_3 , но и пересчёт коэффициентов a_0, a_1, a_2 , так как изменяется система уравнений, из которой они определяются.

Способ Чебышева позволяет значительно упростить этот процесс. Приближающий полином в этом случае ищется в виде суммы полиномов повышающихся степеней, причём добавление новых слагаемых не изменяет коэффициенты при предыдущих. Прибавляя член за членом, можно установить, как убывает сумма квадратов отклонений

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_sx^s$$

от наблюденных значений. Тем самым облегчается и выбор степени приближающего полинома.

Запишем искомый полином в виде

$$y = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_m\varphi_m(x),$$

где $\varphi_0(x) = 1$;

$$\varphi_1(x) = x + a_1^{(1)};$$

$$\varphi_2(x) = x^2 + a_1^{(2)}x + a_2^{(2)};$$

...

$$\varphi_m(x) = x^m + a_1^{(m)}x^{m-1} + a_2^{(m)}x^{m-2} + \dots + a_m^{(m)}.$$

Подберём эти полиномы так, чтобы выполнялись условия:

$$[\varphi_i, \varphi_s] = \sum_{i=1}^n \varphi_i(x_i) \varphi_s(x_i) = 0, \quad i \neq k;$$

$$[\varphi_i, \varphi_i] = \sum_{i=1}^n [\varphi_i(x_i)]^2 \neq 0, \quad i = \overline{1, m}.$$

Последнее условие означает, что хотя бы в одной из точек $x_1, x_2, \dots, x_n$ полином $\varphi_i(x)$ не равен нулю. Такие полиномы называются ортогональными полиномами Чебышева.

В силу предыдущего будем иметь

$$a_j = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \varphi_j(x_i)}{\sum_{i=1}^n [\varphi_j(x_i)]^2}, \quad j = \overline{0, m}.$$

Легко показать, что полином $\varphi_{r+1}(x)$ можно представить рекуррентной формулой (это подтверждает возможность построения ортогональных полиномов Чебышева):

$$\varphi_{r+1}(x) = (x + \beta_{r+1}) \varphi_r(x) + \gamma_{r+1} \varphi_{r-1}(x),$$

где

$$\beta_{r+1} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i [\varphi_r(x_i)]^2}{\sum_{i=1}^n [\varphi_r(x_i)]^2};$$

$$\gamma_{r+1} = -\frac{\sum_{i=1}^n x_i \varphi_{r-1}(x_i) \varphi_r(x_i)}{\sum_{i=1}^n [\varphi_{r-1}(x_i)]^2}.$$

При этом

$$\varphi_0(x) = 1;$$

$$\varphi_1(x) = x - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i;$$

$$\varphi_2(x) = (x + \beta_2) \varphi_1(x) + \gamma_2 \varphi_0(x);$$

а коэффициенты β_2 и γ_2 вычисляются по формулам

$$\beta_2 = -\frac{\sum_{i=1}^n x_i [\varphi_1(x_i)]^2}{\sum_{i=1}^n [\varphi_1(x_i)]^2};$$

$$\gamma_2 = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \varphi_1(x_i).$$

Отметим, что для приближения наблюдаемых значений применяются не только ортогональные полиномы Чебышева, но и иные ортогональные функции. Например, автокорреляционные функции $R(\tau)$ многих реальных случайных процессов, встречающихся в технических приложениях, аппроксимируются функциями вида

$$a_0 \varphi_0(\tau) + a_1 \varphi_1(\tau) + \dots + a_m \varphi_m(\tau),$$

где $\varphi_1(\tau) = a_{11} e^{-c|\tau|}$;

$$\varphi_2(\tau) = a_{21} e^{-c|\tau|} + a_{22} e^{-2c|\tau|};$$

...

$$\varphi_m(\tau) = a_{m1} e^{-c|\tau|} + a_{m2} e^{-2c|\tau|} + \dots + a_{mm} e^{-mc|\tau|}.$$

Коэффициенты a_{ki} ($k \geq i$) определяются из условий ортогональности

$$\int_0^x \varphi_k(\tau) \varphi_i(\tau) d\tau = 0, \quad k \neq i,$$

и нормированности

$$\int_0^x \varphi_k^2(\tau) d\tau = 1.$$

Коэффициенты $a_0, a_1, \dots, a_m$ определяются из условия минимума среднего квадрата ошибки аппроксимации

$$I = \int_0^\infty \left[R(\tau) - \sum_{i=0}^m a_i \varphi_i(\tau_i) \right]^2 d\tau = \min.$$

2.1.6 Определение эмпирических формул

Нередко при обработке результатов наблюдений приходится встречаться и с более сложной задачей, нежели определение постоянных в формулах различных типов. Бывает так, что в результате наблюдений получен

ряд значений X и Y , однако характер функциональной зависимости между ними остаётся неизвестным. Требуется определить аналитическое выражение зависимости между X и Y . Такие формулы принято называть *эмпирическими*.

Необходимо отчётливо сознавать, что математическая обработка результатов наблюдений не даёт возможности разгадать истинный характер зависимости между имеющимися переменными в силу ограниченности числа измерений и наличия случайных ошибок измерений. Речь идёт лишь о том, чтобы охватить результаты опыта наиболее простой формулой, которая давала бы возможность производить интерполирование. Это позволит применить к наблюдаемым данным методы математического анализа.

Часто существенную помощь при определении эмпирических формул оказывает использование так называемых *функциональных шкал*. Использование их позволяет графики многих функций преобразовать к прямолинейному виду.

Функциональные шкалы. Пусть $y = f(x)$ – функция, непрерывная и монотонная на замкнутом интервале $[a, b]$.

Возьмём ось OM , на которой будет строиться шкала. Выберем на ней точку отсчёта. Установим масштаб

$$\mu = \frac{\ell}{f(b) - f(a)},$$

где ℓ – выбранная длина шкалы.

Разобьём $[a, b]$ на n равных частей. Получим точки деления:

$$x_0 = a, x_1, x_2, \dots, x_n = b.$$

Вычислим $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ и соответствующие им в выбранном масштабе длины отрезков, которые отложим на оси OM , указывая на ней значения аргумента $x_0, x_1, \dots, x_n$. Так получается функциональная шкала. Иногда начало шкалы помещают в точку отсчёта, то есть точку с надписью a совмещают с точкой O . Тогда точка x будет находиться в конце отрезка $\mu [f(x) - f(a)]$. Полученная шкала позволяет судить о поведении функции $y = f(x)$ на $[a, b]$. Если функция возрастает, то надписи на шкале будут возрастать в положительном направлении, если убывает – в противоположном. Большие промежутки между отметками укажут, что функция в этом случае возрастает быстрее, чем там, где эти промежутки малы.

Для примера построим функциональную шкалу для функции $y = x^2$ на отрезке $[1, 2]$. Здесь $f(b) - f(a) = 2^2 - 1^2 = 3$. Примем $\ell = 12$ см. Тогда масштаб $\mu = 12 / 3 = 4$ см.

Отрезок $[1, 2]$ разобьём на 10 равных частей.

Результаты необходимых вычислений приводятся в таблице

x	1,0	1,1	1,2	1,3	1,4	1,5	1,6	1,7	1,8	1,9	2,0
$f(x)$	1,00	1,21	1,44	1,69	1,96	2,25	2,56	2,89	3,24	3,61	4,00
$f(x) - f(a) = x^2 - 1$	0,00	0,21	0,44	0,69	0,96	1,25	1,56	1,89	2,24	2,61	3,00
$\mu [f(x) - f(a)] =$ $2(x^2 - 1) \text{ см}$	0,00	0,84	1,76	2,76	3,84	5,00	6,24	7,56	8,96	10,4	12,0

Перенеся полученные результаты на чертёж, получим функциональную шкалу для функции $y = x^2$ (рис.2.3)

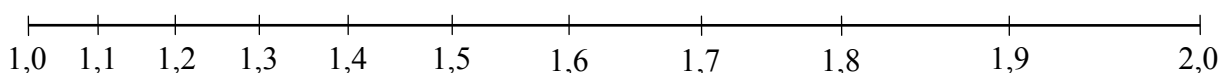


Рис. 2.3

Координаты сетки, построенные с помощью функциональных шкал, называют функциональными сетками.

Особенно часто используются различные *логарифмические сетки*, с помощью которых можно «выпрямлять» графики степенных и показательных функций.

Например, из

$$y = ae^{bx}$$

следует:

$$\ln y = bx + \ln a.$$

Полагая $\ln y = Y$, $\ln a = B$, $b = A$, получим:

$$Y = Ax + B,$$

откуда видно, что оставив равномерную шкалу на оси OX и построив на оси OY логарифмическую шкалу, функцию $y = ae^{bx}$ изобразим прямой линией. Получаемая при этом координатная сетка называется *полулогарифмической*.

Логарифмической называется функциональная сетка, у которой на каждой из осей OX и OY построена логарифмическая шкала. На такой сетке графики степенных функций

$$y = ax^b$$

изображаются прямыми линиями.

Действительно, логарифмируя и полагая затем

$$\lg x = X, \lg y = Y, \lg a = A,$$

получим прямую

$$Y = A + bX.$$

По методу наименьших квадратов получим:

$$\begin{cases} nA + b \sum_{i=1}^n \lg x_i = \sum_{i=1}^n \lg y_i, \\ A \sum_{i=1}^n \lg x_i + b \sum_{i=1}^n (\lg x_i)^2 = \sum_{i=1}^n x_i \lg y_i. \end{cases}$$

Пример. Определить зависимость предела прочности цементного камня и раствора при сжатии $R_{сж}$ от водоцементного отношения В / Ц по результатам исследований, приведённым в таблице.

$R_{сж}, \text{ кг / м}^3$	389	217	134	93	67	51
В / Ц	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8
$\lg (В / Ц)$	-0,5229	-0,3937	-0,3010	-0,2218	-0,1549	-0,0969
$\lg(R_{сж})$	2,5899	2,3365	2,1271	1,9685	1,8261	1,7076
$(\lg (В / Ц))^2$	0,2734	0,1583	0,0906	0,0492	0,0270	0,0094
$\lg(В / Ц) \cdot \lg(R_{сж})$	-1,3542	-0,9297	-0,6402	-0,4366	-0,2829	-0,1655
$\hat{R}_{сж}, \text{ кг / см}^2$	380	212	135	93	68	52
$\Delta = \hat{R}_{сж} - R_{сж}$	-9	-5	+1	-	+1	+1
Δ^2	81	25	1	-	1	1

Искомую зависимость будем искать в виде

$$y = a x^b.$$

Подставляя значения соответствующих величин из таблицы, получим два уравнения с двумя неизвестными:

$$6 A - 1,6954 b = 12,5557;$$

$$- 1,6954 A + 0,6079 b = - 3,8091.$$

Откуда

$$b = - 2,0279; A = 1,5196; a = 33,1$$

и конкретный вид искомой зависимости:

$$\hat{R}_{сж} = 31,1 (В / Ц)^{-2,0279}.$$

Ряд значений $\hat{R}_{сж}$, выравненный по способу наименьших квадратов, приближается к экспериментальным данным со среднеквадратичным отклонением

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\bar{x} - x_i)^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{109}{5}} = 4,66 \text{ кг/см}^2,$$

что составляет всего около 3 %.

Подбор коэффициентов для показательных функций. Рассмотрим зависимость вида

$$y = a e^{bx}.$$

В полулогарифмической системе координат экспериментальными точками будут $(x_i, \ln y_i)$.

Дифференцируя $\sum_{i=1}^n [\ln y_i - (Ax + B)]^2$ по B и A и приравнявая к нулю частные производные, получим:

$$A \sum_{i=1}^n x_i + Bn = \sum_{i=1}^n \ln y_i; \quad A \sum_{i=1}^n x_i^2 + B \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n x_i \ln y_i.$$

Определив из полученной системы A и B , найдём:

$$a = e^B; b = A.$$

Пример. Зависимость вязкости эпоксидных композитов B от температуры t , °С, при 5 %-й концентрации машинного масла приводится в таблице.

$x_i = t_i, ^\circ\text{C}$	45	50	55	60	65	70	75	80	85	90	95	100
$y_i = B_i$	500	250	160	115	90	75	60	48	40	33	30	28

Определить параметры предполагаемой зависимости вида

$$y = a e^{bx}.$$

В соответствии с предыдущим найдём:

$$B = 2603,6 e^{-0,0484 t}.$$

Вопросы обеспечения единства измерений, применения метода наименьших квадратов регламентируются, в частности, рекомендацией МИ 2175-91 «Государственная система обеспечения единства измерений» Госстандарта России, ВНИИМ им. Д.И. Менделеева. С-Петербург, 1994.

2.2. Аппроксимация функций многих переменных

В общем случае задача аппроксимации (приближения функций) формулируется для функции

$$f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

векторного аргумента, заданного на некоторой области.

Самой простой и грубой является ступенчатая аппроксимация. Она применяется или при мелкой сетке в пространстве аргумента $\mathbf{x}$ (т.е., по существу, при табличном способе задания функции), или при специальном виде самой функции.

Задачу приближения функции нескольких переменных можно решать на основе метода наименьших квадратов, представляя её суммой функций одной переменной.

Для функции двух переменных $f(x_1, x_2)$ с прямоугольной областью изменения аргументов

$$d_{11} \leq x_1 \leq d_{12}, d_{21} \leq x_2 \leq d_{22}$$

соответствующее выражение имеет вид

$$\min_{f_1, f_2} \int_{d_{21}}^{d_{22}} \int_{d_{11}}^{d_{12}} [f(x_1, x_2) - f_1(x_1) - f_2(x_2)]^2 dx_1 dx_2.$$

Решение задачи получается в виде

$$f_1(x_1) + f_2(x_2) = \bar{f}^{x_1} + \bar{f}^{x_2} - \bar{\bar{f}}^{x_1 x_2},$$

где $\bar{f}^{x_1} = \frac{1}{d_{12} - d_{11}} \int_{d_{11}}^{d_{12}} f(x_1, x_2) dx_1,$

$$\bar{f}^{x_2} = \frac{1}{d_{22} - d_{21}} \int_{d_{21}}^{d_{22}} f(x_1, x_2) dx_2,$$

$$\bar{\bar{f}}^{x_1 x_2} = \frac{1}{(d_{12} - d_{11})(d_{22} - d_{21})} \int_{d_{21}}^{d_{22}} \int_{d_{11}}^{d_{12}} f(x_1, x_2) dx_1 dx_2.$$

Задача приближения функции двух аргументов посредством произведения двух одномерных аргументов может быть сведена к только что рассмотренной. Действительно, если вместо исходной функции $f(x_1, x_2)$ взять функцию $\varphi(x_1, x_2) = \ln f(x_1, x_2)$, выполнить приближение этой функции суммой $\varphi_1(x_1) + \varphi_2(x_2)$, а затем образовать функции

$$f_1(x_1) = \exp \varphi_1(x_1), f_2(x_2) = \exp \varphi_2(x_2),$$

то

$$\ln f(x_1, x_2) \approx \ln f_1(x_1) + \ln f_2(x_2),$$

$$f(x_1, x_2) \approx f_1(x_1) f_2(x_2).$$

При переходе к многомерным процессам задача аппроксимации существенно усложняется. Известные в настоящее время методы многомерной аппроксимации менее эффективны, чем методы приближения одномерных функций. При этом трудоёмкость вычислений с ростом размерности решаемых задач резко возрастает.

Приведём относительно простой способ приближения многомерных таблично заданных функций обобщёнными многочленами частного вида.

Ограничимся пока случаем двумерной аппроксимации. Пусть значения $W(x, y)$ заданы табл. 2.1.

Т а б л и ц а 2.1

	y_1	y_2	...	y_j	...	y_m
x_1	W_{11}	W_{12}	...	W_{1j}	...	W_{1m}
x_2	W_{21}	W_{22}	...	W_{2j}	...	W_{2m}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
x_i	W_{i1}	W_{i2}	...	W_{ij}	...	W_{im}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
x_n	W_{n1}	W_{n2}	...	W_{nj}	...	W_{nm}

Определим аппроксимирующий многочлен в виде

$$Q_q = a_1 f_1(x) \varphi_1(y) + a_2 f_2(x) \varphi_2(y) + \dots + a_q f_q(x) \varphi_q(y),$$

где $f_p(x)$, $\varphi_p(y)$, $p = \overline{1, q}$ – функции, выбранные из каких-то соображений; a_p – неизвестные коэффициенты.

Для определения коэффициентов a_p воспользуемся методом наименьших квадратов, т.е. из условий минимума

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \left[\sum_{p=1}^q a_p f_p(x_i) \varphi_p(y_j) - W_{ij} \right]^2.$$

Приравнивая частные производные по a_p нулю, получаем для определения неизвестных

$$a_1, a_2, \dots, a_q$$

систему уравнений

$$\begin{cases} c_{1,1} a_1 + c_{1,2} a_2 + \dots + c_{1,q} a_q = b_1 \\ c_{2,1} a_1 + c_{2,2} a_2 + \dots + c_{2,q} a_q = b_2 \\ \dots \\ c_{q,1} a_1 + c_{q,2} a_2 + \dots + c_{q,q} a_q = b_q, \end{cases}$$

где $c_{\alpha,\beta} = f_{\alpha,\beta} \varphi_{\alpha,\beta}$, $\alpha = 1, 2, \dots, q$, $\beta = 1, 2, \dots, q$,

$$f_{\alpha,\beta} = \sum_{i=1}^n f_{\alpha}(x_i) f_{\beta}(x_i), \varphi_{\alpha,\beta} = \sum_{j=1}^m \varphi_{\alpha}(y_j) \varphi_{\beta}(y_j),$$

$$b_p = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m W_{ij} f_p(x_i) \varphi_p(y_j), p = 1, 2, \dots, q.$$

$$(c_{\alpha,\beta} = c_{\beta,q}).$$

В случае трёхмерной аппроксимации для каждого $z = z_k, k = 1, 2, \dots, I$, значения функции $W(x, y, z)$ задаются в виде прямоугольной таблицы $n \times m$:

$z = z_k$						
	y_1	y_2	...	y_j	...	y_m
x_1	W_{11k}	W_{12k}	...	W_{1jk}	...	W_{1mk}
x_2	W_{21k}	W_{22k}	...	W_{2jk}	...	W_{2mk}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
x_i	W_{i1k}	W_{i2k}	...	W_{ijk}	...	W_{imk}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
x_n	W_{n1k}	W_{n2k}	...	$W_{nj k}$	...	$W_{nm k}$

Аппроксимирующий многочлен представляется в виде

$$Q_q = a_1 f_1(x) \varphi_1(y) \psi_1(z) + a_2 f_2(x) \varphi_2(y) \psi_2(z) + \dots + a_q f_q(x) \varphi_q(y) \psi_q(z),$$

где $f_q(x)$, $\varphi_q(y)$, $\psi_q(z)$ – выбранные функции; $a_1, a_2, \dots, a_p$ – неизвестные коэффициенты.

Вычисляя частные производные по a_p и приравнивая их нулю, получаем систему уравнений, где

$$\begin{aligned} c_{\alpha, \beta} &= f_{\alpha, \beta} \varphi_{\alpha, \beta} \psi_{\alpha, \beta}, \\ f_{\alpha, \beta} &= \sum_{i=1}^n f_{\alpha}(x_i) f_{\beta}(x_i), \\ \varphi_{\alpha, \beta} &= \sum_{j=1}^m \varphi_{\alpha}(y_j) \varphi_{\beta}(y_j), \\ \psi_{\alpha, \beta} &= \sum_{k=1}^{\ell} \psi_{\alpha}(z_k) \psi_{\beta}(z_k), \\ b_p &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^{\ell} W_{ijk} f_p(x_i) \varphi_p(y_j) \psi_p(z_k), \\ \alpha &= 1, 2, \dots, q; \beta = 1, 2, \dots, q; p = 1, 2, \dots, q. \end{aligned}$$

Описанный способ аппроксимации легко распространяется и на функции с большим числом переменных.

Аппроксимирующему многочлену можно придать более общий вид, например,

$$Q_q = \sum_{p=1}^q a_p f_p(x, y, z).$$

Величины $c_{\alpha, \beta}$ и β_{α} вычисляются по формулам:

$$c_{\alpha, \beta} = \sum_{i=1}^n f_{\alpha}(x_i, y_i, z_i) f_{\beta}(x_i, y_i, z_i),$$

$$b_{\alpha} = \sum_{i=1}^n W_i f_{\alpha}(x_i, y_i, z_i),$$

где n – общее число точек, пронумерованных произвольным образом, причём $n \geq q$. Здесь отпадает необходимость иметь прямоугольную таблицу значений аппроксимируемой функции.

Более общее выражение для аппроксимирующего многочлена может быть взято в виде

$$Q_q = \sum_{p=1}^q f_p(x, y, z, a_1, a_2, \dots, a_m),$$

где m – число подлежащих определению параметров аппроксимации.

Определение параметров $a_1, a_2, \dots, a_m$ в общем случае можно осуществить поиском минимума

$$\sum_{i=1}^n \left[\sum_{p=1}^q f_p(x_i, y_i, z_i, a_1, a_2, \dots, a_m) - W_i \right]^2$$

известными методами оптимизации.

При решении практических задач [9...12], как уже отмечалось, выбор вида аппроксимирующей функции во многом определяется интуицией экспериментатора.

2.3. Идентификация временных рядов

Под временными рядами [13–15] понимаются значения исследуемой величины (остаточная прочность строительного материала по годам эксплуатации; процесс разрушения декоративного покрытия; устойчивость материала во времени к радиационному воздействию и др.) $U(t)$, полученные через *одинаковые* интервалы времени (рис.2.4).

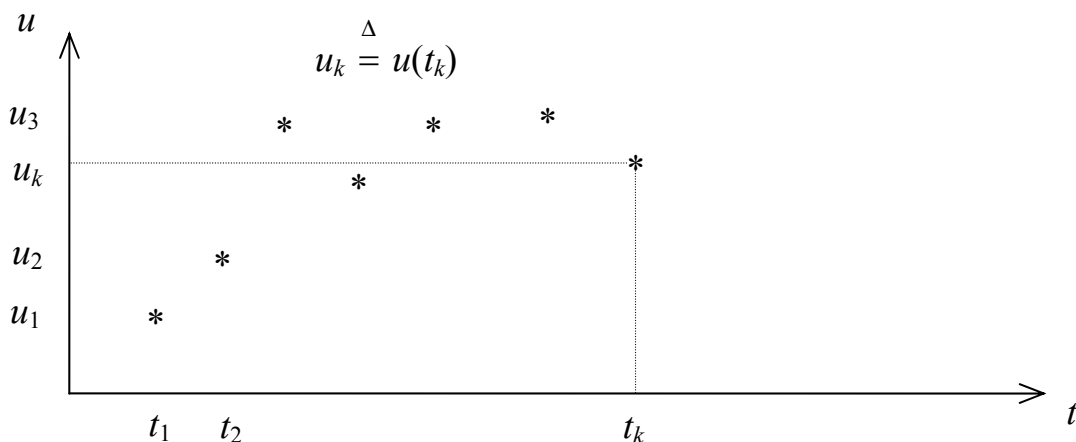


Рис. 2.4

Временные ряды имеют различную природу. В зависимости от вида решаемых задач временные ряды часто представляются как:

- стационарные случайные процессы (последовательности случайных величин, вероятностные свойства которых не изменяются во времени); используются в радиотехнике, метеорологии, сейсмологии и т.д.;
- диффузионные процессы (отражают взаимопроникновение жидкостей и газов);
- точечные процессы (описывают последовательности событий, например, поступление заявок на обслуживание); изучаются в теории массового обслуживания; стихийных и техногенных катастроф.

На основе практического изучения временного ряда выявляются свойства ряда, и определяется вероятностный механизм, порождающий этот ряд; строится модель временного ряда, определяется алгоритм предсказания будущих значений ряда на основе прошлых наблюдений; разрабатывается методика управления процессом, порождающим временной ряд.

Целью анализа временных рядов является описание, объяснение и прогнозирование поведения объекта на основе построения математических моделей. В модели выделяются две основные составляющие: детерминированная и случайная. Под *детерминированной составляющей* временного ряда $u_1, u_2, \dots, u_N$ понимается числовая последовательность, элементы которой вычисляются по определенному правилу (как функция времени t). После исключения детерминированной составляющей получается колеблющийся вокруг нуля ряд, который может в одном предельном случае представлять чисто случайные скачки, а в другом – плавное колебательное движение. Детерминированная составляющая может содержать структурные компоненты:

- тренд $g(t)$, представляющий собой плавное изменение процесса во времени и обусловленный действием долговременных факторов;
- сезонный эффект $s(t)$, связанный с наличием факторов, действующих циклически с заранее известной периодичностью.

Случайная составляющая ряда отражает воздействие многочисленных факторов случайного характера и может иметь разнообразную структуру (белый шум, модели авторегрессии).

В общем случае временной ряд включает четыре компоненты:

- тренд или долгосрочное движение;
- колебания относительно тренда;
- сезонная компонента;
- случайная составляющая.

Тренд отражает действие постоянных долговременных факторов и носит плавный характер; объясняется наличием постоянных влияющих величин, а краткосрочные колебания относительно этого долгосрочного движения происходят по совокупности причин. В общем случае содержится

некоторое возмущение, присущее случайным процессам. Существенным в понятии тренда является гладкость (возможность представления непрерывной и дифференцируемой функцией времени). Для описания тренда могут использоваться различные функции, в частности, полиномы невысокого порядка, гармонические функции и т.д.

Процедура выбора коэффициентов полинома состоит из этапов:

- весь временной ряд делится на группы из $(2m + 1)$ первых членов ряда и подбирается полином для определения тренда в $(m + 1)$ -ой средней точке группы;

- подбирается полином ко второй группе, состоящий из второго, третьего,..., $(2m + 1)$ -го членов ряда и определяется тренд в $(m + 2)$ -й средней точке этой группы и т.д. до последней группы (в действительности нет необходимости подбора полинома каждый раз, поскольку эта процедура эквивалентна линейной комбинации членов ряда с коэффициентами, которые могут быть определены один раз).

Наряду с полиномиальными моделями используются (особенно в экономике) и другие:

- экспоненциальная модель $g(t) = e^{a_0 + a_1 t}$ (описывает процесс с постоян-

ным темпом прироста $\frac{dg}{dt} = a_1$);

- логистическая модель $g(t) = \frac{a_0}{1 + a_1 e^{-at}}$ (описывает процесс, когда

температура изучаемой характеристики $\frac{dg}{dt} = \frac{k(a_0 - g)}{a_0}$ линейно падает с увеличением g);

- модель Гомперца $g(t) = a_0 e^{-a_1 e^{-at}}$ (описывает процесс, в котором темп

прироста $\frac{dg}{dt} = k \ln\left(\frac{a_0}{g}\right) = k(\ln a_0 - \ln g)$ исследуемой характеристики пропорционален ее логарифму).

При подборе подходящей функциональной зависимости (спецификации тренда) весьма полезным является графическое представление временного ряда. Две последние модели задают кривые тренда S-образной формы, представляя процессы с нарастающим темпом роста в начальной стадии с постепенным замедлением в конце. Тренд, отражая действие долговременных факторов, является определяющим при построении долговременных прогнозов.

Сезонный эффект во временном ряде проявляется на фоне тренда и его выделение оказывается возможным после предварительной оценки тренда. Действительно, линейно растущий ряд помесечных данных будет иметь схожие эффекты в одноименных точках – наименьшее значение в январе и наибольшее в декабре; однако вряд ли здесь уместно говорить о сезонном эффекте: исключив линейный тренд, мы получим ряд, в котором сезонность полностью отсутствует. В то же время ряд, описывающий помесечные объемы продаж новогодних открыток, хотя и будет иметь такую же особенность (минимум продаж в январе и максимум в декабре) будет носить скорее всего колебательный характер относительно тренда, что позволяет специфицировать эти колебания как сезонный эффект. В простейшем случае сезонный эффект проявляется как строго периодическая зависимость. Тренд и сезонность обычно трудно отделить одно от другого.

Пример. Пусть требуется подобрать полином третьего порядка к группам по семь точек. Без потери общности примем, что рассматриваются моменты

$$t = \{ -3; -2; -1; 0; 1; 2; 3 \}.$$

Представим искомый полином в виде

$$\tilde{y}_t = a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3.$$

Коэффициенты полинома a_0, a_1, a_2, a_3 могут быть найдены методом наименьших квадратов, т.е. путём минимизации:

$$I = \sum_{t=-3}^3 (\tilde{y}_t - \tilde{y}_t)^2.$$

Дифференцирование по каждому из коэффициентов даёт четыре уравнения типа

$$\sum \tilde{y}_t t^j - a_0 \sum t^j - a_1 \sum t^{j+1} - a_2 \sum t^{j+2} - a_3 \sum t^{j+3} = 0,$$

где $j = 0, 1, 2, 3$.

Поскольку суммы нечётных порядков t от -3 до $+3$ равны 0, уравнения сводятся к виду

$$\begin{aligned} \sum \tilde{y}_t &= 7a_0 + 28a_2 \\ \sum t \tilde{y}_t &= 28a_1 + 196a_3 \\ \sum t^2 \tilde{y}_t &= 28a_0 + 196a_2 \\ \sum t^3 \tilde{y}_t &= 196a_1 + 1588a_3 \end{aligned} \quad (2.1)$$

Из первого и третьего уравнений в момент времени $t = 0$

$$\sum t \tilde{u}_t = \sum t^2 \tilde{u}_t = \sum t^3 \tilde{u}_t = 0$$

получим:

$$\begin{aligned} \tilde{u}_t = a_0 &= \frac{1}{21} \left[7 \sum_{t=-3}^3 \tilde{u}_t - \sum_{t=-3}^3 t^2 \tilde{u}_t \right] = \frac{1}{21} \left[7(\tilde{u}_{-3} + \tilde{u}_{-2} + \tilde{u}_{-1} + \tilde{u}_0 + \right. \\ &\quad \left. + \tilde{u}_1 + \tilde{u}_2 + \tilde{u}_3) - (9\tilde{u}_{-3} + 4\tilde{u}_{-2} + \tilde{u}_{-1} + 0 + \tilde{u}_1 + 4\tilde{u}_2 + 9\tilde{u}_3) \right] = \\ &= \frac{1}{21} [-2\tilde{u}_{-3} + 3\tilde{u}_{-2} + 6\tilde{u}_{-1} + 7\tilde{u}_0 + 6\tilde{u}_1 + 3\tilde{u}_2 - 2\tilde{u}_3]. \end{aligned}$$

Следовательно, значение тренда в какой-либо точке равно средневзвешенному значению семи точек с данной точкой в качестве центральной и весами

$$\frac{1}{21} [-2; 3; 6; 7; 6; 3; -2],$$

которые в силу симметрии можно записать короче:

$$\frac{1}{21} [-2; 3; 6; 7; \dots].$$

Такое средневзвешенное значение нескольких точек называется *скользящим средним*.

Предположим, что имеем ряд $u_t = (t-1)^3$, который представлен в табл. 2.2.

Т а б л и ц а 2 . 2

t	1	2	3	4	5	6	7	8
u_t	0	1	8	27	64	125	216	343

Значение тренда в точке $t = 4$ согласно описанной процедуре будет равно:

$$\begin{aligned} a_0 = \hat{u}_t &= \frac{1}{21} (-2 \cdot 0 + 3 \cdot 1 + 6 \cdot 8 + 7 \cdot 27 + 6 \cdot 64 + 3 \cdot 125 - 2 \cdot 216) = \\ &= \frac{0 + 3 + 48 + 189 + 384 + 375 - 432}{21} = \frac{567}{21} = 27. \end{aligned}$$

Аналогично можно определить значения весовых коэффициентов членов ряда в случае произвольного порядка p полинома, которые представлены в табл. 2.3.

Т а б л и ц а 2 . 3

Число $2m+1$ членов в группе	Коэффициенты	
	второй и третий порядок полинома	четвёртый и пятый порядок полинома
5	$\frac{1}{35} [-3; 12; 17; \dots]$	-
7	$\frac{1}{21} [-2; 3; 6; 7; \dots]$	$\frac{1}{231} [5; -30; 75; 131; \dots]$
9	$\frac{1}{231} [-21; 14; 39; 54; 59; \dots]$	$\frac{1}{429} [15; -55; 30; 135; 179; \dots]$
11	$\frac{1}{429} [-36; 9; 44; 69; 84; 89; \dots]$	$\frac{1}{429} [18; -45; -10; 60; 120; 143; \dots]$

Для скользящих средних справедливо:

- сумма весов равна 1;
- значения весов симметричны относительно середины;
- значения тренда не зависят от направления отсчёта времени;
- значение a_0 не зависит от того, является ли полином степени $2k$ или $(2k+1)$;
- приведённая методика позволяет вычислять значения тренда для первых и последних m значений ряда;
- при чётном числе точек в группе могут быть получены значения тренда в серединах временных интервалов между наблюдениями.

Значения скользящих средних иногда более удобно определять через конечные разности:

$$\Delta u_t = u_{t+1} - u_t;$$

$$\Delta^2 u_t = u_{t+2} - 2 u_{t+1} + u_t \text{ и т.д.}$$

Получим

$$\hat{u}_t = \frac{1}{21} [-2; 3; 6; 7; 6; 3; -2] =$$

$$= \frac{1}{21} [-2 u_{t+3} + 3 u_{t+2} + 6 u_{t+1} + 7 u_t + 6 u_{t-1} + 3 u_{t-2} - 2 u_{t-3}] =$$

$$y = u_t - \frac{1}{21} [9 \Delta^4 + 9 \Delta^5 + 2 \Delta^6] u_{t-3}.$$

Преимущество такой записи состоит в представлении в явном виде разности между рядом и трендом.

В частности, для рассмотренного примера $u_t = (t-1)^3$ конечные разности четвёртого и более высоких порядков равны 0. Поэтому $\hat{u}_t = u_t$.

Скользящее среднее можно также рассматривать как среднее разностей. Например (табл. 2.4),

$$\begin{aligned}\hat{u}_t &= \frac{1}{21} [-2; 3; 6; 7; 6; 3; -2] = \\ &= u_t + \frac{1}{21} [2 \Delta^3 u_{t-3} + 3 \Delta^3 u_{t-2} - 3 \Delta^3 u_{t-1} - 2 \Delta^3 u_t] = \\ &= u_t + \frac{1}{21} [2; 3; -3; -2] \Delta^3 u_{t-3} = u_t - \frac{1}{21} [2; 5; 2] \Delta^4 u_{t-3}\end{aligned}$$

Т а б л и ц а 2 . 4

Число $2m+1$ членов в группе	Выражение для $\hat{u}_t$	
	второй и третий порядок полинома	четвёртый и пятый порядок полинома
5	$u_3 - \frac{3}{35} [1] \Delta^4 u_1$	-
7	$u_4 - \frac{1}{21} [2; 5; 2] \Delta^4 u_2$	$u_4 + \frac{5}{231} [1] \Delta^6 u_1$
9	$u_5 - \frac{1}{231} [21; 70; 115; 70; 21] \Delta^4 u_3$	$u_5 + \frac{5}{429} [3; 7; 3] \Delta^6 u_2$
11	$u_6 - \frac{1}{429} [36; 135; 280; 385; \dots] \Delta^4 u_4$	$u_6 + \frac{1}{429} [18; 63; 98; 63; 18] \Delta^6 u_3$

Пример. Вычислим значения конечных разностей и определим $\tilde{y}_t$ двумя приведёнными выше способами для ряда:

t	1	2	3	4	5	6	7
u_t	0	1	8	26	64	125	216

Справедливо:

t	u_t	Δu_t	$\Delta^2 u_t$	$\Delta^3 u_t$	$\Delta^4 u_t$	$\Delta^5 u_t$	$\Delta^6 u_t$
1	0	1	6	5	4	-10	20
2	1	7	11	9	-6	10	
3	8	18	20	3	4		
4	26	38	23	7			
5	64	61	30				
6	125	91					
7	216						

Вычислим значение $\tilde{u}_t$:

$$\begin{aligned}\tilde{u}_t &= \frac{1}{21} [-2; 3; 6; 7; 6; 3; -2] = \\ &= \frac{1}{21} [-2 \cdot 0 + 3 \cdot 1 + 8 \cdot 6 + 7 \cdot 26 + 64 \cdot 6 + 125 \cdot 3 - 216 \cdot 2] = 26 \frac{2}{3}.\end{aligned}$$

Аналогично

$$\begin{aligned}\hat{u}_t &= u_t - \frac{1}{21} [9 \Delta^4 + 9 \Delta^5 + 2 \Delta^6] u_{t-3} = \\ &= 26 - \frac{1}{21} [9 \cdot 4 + 9 \cdot (-10) + 2 \cdot 20] = 26 \frac{2}{3}.\end{aligned}$$

Или

$$\begin{aligned}\hat{u}_t &= u_t - \frac{1}{21} [2; 5; 2] \Delta^4 u_2 = 26 - \frac{1}{21} [2 \Delta^4 u_1 + 5 \Delta^4 u_2 + 2 \Delta^4 u_3] = \\ &= 26 - \frac{1}{21} [2 \cdot 4 + 5 \cdot (-6) + 2 \cdot 4] = 26 \frac{2}{3}.\end{aligned}$$

Указанные формулы не дают значений тренда для первых и последних членов ряда. Отсутствие этих значений в начале ряда не столь важно; иметь же их в конце, как правило, просто необходимо.

Значения $\hat{u}_t$ определяются через весовые коэффициенты a_1, a_2, a_3 , которые находятся из системы (2.1):

$$\begin{aligned}a_1 &= \frac{1}{1512} \left[397 \sum_{t=-3}^3 t u_t - 49 \sum_{t=-3}^3 t^3 u_t \right]; \\ a_2 &= \frac{1}{84} \left[-4 \sum_{t=-3}^3 t u_t + \sum_{t=-3}^3 t^3 u_t \right]; \\ a_3 &= \frac{1}{216} \left[-7 \sum_{t=-3}^3 t u_t + \sum_{t=-3}^3 t^3 u_t \right].\end{aligned}$$

Выражая эти коэффициенты в виде скользящих средних семи последних членов, получим:

$$\begin{aligned}\hat{u}_t &= \frac{1}{21} [-2; 3; 6; 7; 6; 3; -2] + \frac{1}{252} [22; -67; -58; 0; 58; 67; -22] t + \\ &+ \frac{1}{84} [5; 0; -3; -4; -3; 0; 5] t^2 + \frac{1}{36} [-1; 1; 1; 0; -1; -1; 1] t^3.\end{aligned}$$

При $t = 1, 2, 3$ соответственно имеем:

$$\tilde{u}_1 = \frac{1}{42} [1; -4; 2; 12; 19; 16; -4];$$

$$\tilde{u}_2 = \frac{1}{42} [4; -7; -4; 6; 16; -19; 8];$$

$$\tilde{u}_3 = \frac{1}{42} [-2; 4; 1; -4; -4; 8; 39].$$

В частности, при последних семи членах ряда соответственно равных 0, 1, 8, 27, 64, 125, 216:

$$\tilde{u}_1 = \frac{1}{42} (1 \cdot 0 - 4 \cdot 1 + 2 \cdot 8 + 12 \cdot 27 + 19 \cdot 64 + 16 \cdot 125 - 4 \cdot 216) = 64;$$

$$\tilde{u}_2 = \frac{1}{42} (4 \cdot 0 - 7 \cdot 1 - 4 \cdot 8 + 6 \cdot 27 + 16 \cdot 64 + 19 \cdot 125 - 8 \cdot 216) = 125;$$

$$\tilde{u}_3 = \frac{1}{42} (-2 \cdot 0 + 4 \cdot 1 + 1 \cdot 8 - 4 \cdot 27 - 4 \cdot 64 + 8 \cdot 125 + 39 \cdot 216) = 216.$$

Рассмотрим далее, как влияет исключение тренда с помощью скользящего среднего на случайные колебания, которые могут присутствовать в исходном ряде.

Усреднение обычно приводит к уменьшению дисперсии колебаний. Члены ряда, полученного в результате усреднения, в общем случае *не являются независимыми*.

Для членов u_i и u_{i+k} *серийные коэффициенты корреляции* порядка k определяются в виде:

$$r_k = \frac{\frac{1}{n-k} \sum_{i=1}^k (u_i - \bar{u})(u_{i+k} - \bar{u})}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^k (u_i - \bar{u})^2}.$$

Для приведённого выше примера (табл.2.5.):

$$\bar{u} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n u_i = \frac{1}{7} (0 + 1 + 8 + 27 + 64 + 125 + 216) = 63.$$

Т а б л и ц а 2 . 5

t	u_i	$u_i - \bar{u}$	$(u_i - \bar{u})^2$
1	0	- 63	3969
2	1	- 62	3844
3	8	- 55	3025
4	27	- 36	1296
5	64	1	1
6	125	62	3844
7	216	153	23409
Σ	441		39388

Имеем

$$r_1 = \frac{\frac{1}{7-1} [(-63)(-62) + (-62)(-55) + (-55)(-36) - 36 \cdot 1 + 1 \cdot 62 + 62 \cdot 153]}{\frac{1}{7} \cdot 39388} = 0,56;$$

$$r_2 = \frac{\frac{1}{7-2} [(-63)(-55) + (-62)(-36) + (-55) \cdot 1 - 36 \cdot 62 + 1 \cdot 153]}{\frac{1}{7} \cdot 39388} = 0,13.$$

Если ряд рассматривается как генеральная совокупность бесконечной длины, то говорят об *автокорреляциях* ρ_k . Можно показать:

$$\rho_k = \frac{\sum_{i=1}^{2m+1-k} a_i a_{i+k}}{\sum_{i=1}^{2m+1} a_i^2}.$$

Для того же примера

$$\sum_{i=1}^{2m+1} a_i^2 = (-2)^2 + 3^2 + 6^2 + 7^2 + 6^2 + 3^2 + (-2)^2 = (4 + 9 + 36) \cdot 2 + 49 = 147,$$

$$\rho_1 = \frac{-2 \cdot 3 + 3 \cdot 6 + 6 \cdot 7 + 7 \cdot 6 + 6 \cdot 3 + 3 \cdot (-2)}{147} = \frac{2(-6 + 18 + 42)}{147} = 0,73.$$

Аналогично

$$\rho_2 = \frac{-2 \cdot 6 + 3 \cdot 7 + 6 \cdot 6 + 7 \cdot 3 + 6 \cdot (-2)}{147} = \frac{54}{147} = 0,37.$$

Если ряд имеет постоянное среднее (тренд исключен) и колеблется вокруг среднего с постоянной дисперсией, то этот *ряд стационарен* как по среднему, так и по дисперсии. Тогда

$$M[x_t] = \mu;$$

$$M[x_t - \mu]^2 = D[x_t] = \sigma^2;$$

$$M[(x_t - \mu)(x_{t+k} - \mu)] = \gamma_k, \text{ } k\text{-я автоковариация};$$

$$\frac{M[(x_t - \mu)(x_{t+k} - \mu)]}{M[x_t - \mu]^2} = \frac{\gamma_k}{\sigma^2}, \text{ } k\text{-я автокорреляция}.$$

Как и в теории вероятностей, здесь математическое ожидание рассматривается как среднее значение случайной величины. Однако в этом случае математическое ожидание оценивается не по множеству значений, извлечённых случайным образом из вероятностного распределения X , а по

множеству X_t , которые имеют одно и то же одномерное распределение, но при этом *коррелированы*.

Если ряд является выборкой из всех рядов такой же длины, сгенерированных тем же «механизмом», то её можно рассматривать как *реализацию* изучаемого «механизма» (*стохастического* процесса). Параметры стохастического процесса можно определить по одной его реализации.

При изучении кинетических процессов представляет интерес определение значения ряда в момент t через прошлые значения (*систематическая зависимость от прошлой истории*), а также значения «возмущения» ε в момент t . Решение этой задачи связано с изучением *авторегрессионных процессов* порядка k с постоянными коэффициентами вида

$$x_{t+k} + \alpha_1 x_{t+k-1} + \alpha_2 x_{t+k-2} + \dots + \alpha_k x_t = \varepsilon_{t+k}$$

или (полагая $k = 0$)

$$x_t = -\alpha_1 x_{t-1} - \alpha_2 x_{t-2} - \alpha_3 x_{t-3} - \dots - \alpha_k x_{t-k} + \varepsilon_t.$$

Последнее выражение можно рассматривать как регрессию x_t на x_{t-1} , $x_{t-2}, \dots$ со случайным остатком ε_t . Рассмотрим подробнее два наиболее важных частных случаев.

Марковский процесс. Этот *наипростейший авторегрессионный процесс*, отличный от чисто случайного ряда, определяется выражением

$$x_t = -\alpha_1 x_{t-1} + \varepsilon_t.$$

Умножив это выражение на x_{t-1} и беря математические ожидания, получим:

$$M[x_t x_{t-1}] = M[(-\alpha_1 x_{t-1} + \varepsilon_t) x_{t-1}].$$

Если ε имеет нулевое среднее, то такое же нулевое среднее имеет и x . При этом

$$M[(x_t - \mu)(x_{t-1} - \mu)] = \alpha_1 M[(x_{t-1} - \mu)^2],$$

или

$$-\alpha_1 = \frac{M[(x_t - \mu)(x_{t-1} - \mu)]}{M[(x_{t-1} - \mu)^2]} = \rho.$$

Следовательно,

$$x_t = \rho x_{t-1} + \varepsilon_t = \varepsilon_t + \rho x_{t-1} = \varepsilon_t + \rho x_{t-1} + \rho^2 x_{t-2} = \dots$$

Для ряда, имеющего бесконечное прошлое:

$$x_t = \sum_{j=0}^{\infty} \rho^j \varepsilon_{t-j}$$

(x_t представляется как скользящее среднее с бесконечной длиной отрезка усреднения; сумма весов равна $\frac{1}{1-\rho}$).

Для марковского процесса все корреляции можно выразить через первую автокорреляцию ρ :

$$\rho_k = \rho^k$$

(совокупность значений ρ_k , как и их представление на графике, называется *коррелограммой*).

Процесс Юла. Авторегрессионный процесс Юла определяется как

$$x_t = -\alpha_1 x_{t-1} - \alpha_2 x_{t-2} + \varepsilon_t. \quad (2.2)$$

Как и в марковском процессе ε_t независима от x_{t-1} и x_{t-2} .

Умножая это уравнение последовательно на x_{t-1} и x_{t-2} и беря математические ожидания, получим:

$$\begin{cases} \rho_1 + \alpha_1 + \alpha_2 \rho_1 = 0; \\ \rho_2 + \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 = 0. \end{cases}$$

Откуда

$$\rho_1 = -\frac{\alpha_1}{1 + \alpha_2};$$

$$\rho_2 = -\alpha_2 + \frac{\alpha_1^2}{1 + \alpha_2},$$

или

$$\alpha_1 = -\frac{\rho_1(1 - \rho_2)}{1 - \rho_1^2};$$

$$\alpha_2 = -1 + \frac{1 - \rho_2}{1 - \rho_1^2} = -\frac{\rho_2 - \rho_1^2}{1 - \rho_1^2}.$$

И, вообще, умножая выражение (2.2) на x_{t-k} ($k \geq 1$), получим ряд уравнений

$$\rho_k + \alpha_1 \rho_{k-1} + \alpha_2 \rho_{k-2} = 0.$$

Они могут быть использованы для выражения ρ более высоких порядков через первые две автокорреляции, которые полностью определяют коррелограмму.

Для стационарности процесса Юла должны соблюдаться условия:

$$\begin{aligned} |\alpha_1| &< 2; \\ -\alpha_2 &< 1 - |\alpha_1|. \end{aligned}$$

Коэффициенты α_j общего линейного авторегрессионного процесса определяются из так называемых *уравнений Юла-Уолкера*:

$$\alpha_1 + \rho_1 \alpha_2 + \rho_2 \alpha_3 + \dots + \rho_{h-1} \alpha_h = -\rho_1$$

$$\begin{aligned}\rho_1 \alpha_1 + \alpha_2 + \rho_2 \alpha_3 + \dots + \rho_{h-2} \alpha_h &= -\rho_2 \\ \rho_2 \alpha_1 + \rho_1 \alpha_2 + \alpha_3 + \dots + \rho_{h-3} \alpha_h &= -\rho_3 \\ &\dots \\ \rho_{h-1} \alpha_1 + \rho_{h-2} \alpha_2 + \rho_{h-3} \alpha_3 + \dots + \alpha_h &= -\rho_h.\end{aligned}$$

Как видим, все автокорреляции ряда определяются первыми h автокорреляциями.

Значения автокорреляций определяются в виде:

$$\rho_k = \frac{\gamma_k}{\sigma^2}, \quad k = \overline{1, h}, \quad h \leq \frac{N}{4},$$

где N – число членов ряда;

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (x_t - \mu)^2 = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N x_t^2; \\ \gamma_k &= \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-k} (x_t - \mu)(x_{t+k} - \mu) = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-k} x_t x_{t+k}.\end{aligned}$$

Для авторегрессионной модели порядка h

$$x_t = -\alpha_1 x_{t-1} - \alpha_2 x_{t-2} - \dots - \alpha_h x_{t-h}$$

справедлива рекуррентная формула, позволяющая определить оценку α_{h+1} для модели порядка $(h + 1)$ по оценкам $\alpha_j(h)$ (алгоритм Левинсона-Дурбина):

$$\alpha_{h+1} = \frac{\sigma^2}{\sigma_e^2} \left[\rho_{h+1} + \sum_{j=1}^h \alpha_j(h) \rho_{h+1-j} \right].$$

Здесь $\sigma_e^2 = M[e_o e_t] = 1 + \sum_{j=1}^h \alpha_j \rho_j$ – дисперсия случайного остатка

$$e_t = x_t - \hat{x}_t; \quad \rho_{h+1} = \frac{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-(p-1)} x_t x_{t+p+1}}{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N x_t^2}.$$

В этом случае модель порядка $(h + 1)$ будет иметь вид

$$x_t = -\alpha_1 x_{t-1} - \alpha_2 x_{t-2} - \dots - \alpha_h x_{t-h} - \alpha_{h+1} x_{t-(h+1)}.$$

Если авторегрессионная модель имеет истинный порядок, равный h , то должно выполняться условие

$$\alpha_m(h) = \begin{cases} \neq 0, & \text{если } \leq h; \\ = 0, & \text{если } > h \end{cases}$$

(что даёт условие проверки правильности выбранного порядка модели).

Для проверки правильности выбранного порядка модели при $h=2$ следует определить

$$\rho_3 = \frac{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-3} x_t x_{t+3}}{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N x_t^2}, \quad \alpha_3 = \frac{\sigma^2}{1 + (\alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2)} [\rho_3 + (\alpha_1 \rho_2 + \alpha_2 \rho_1)].$$

Если $\alpha_3 = 0$, то можно считать, что

$$x_t = -\alpha_1 x_{t-1} - \alpha_2 x_{t-2}.$$

Изложенное выше приводит к следующим алгоритмам построения моделей кинетических процессов (временных рядов) по данным нормального функционирования.

Алгоритм составления авторегрессионной модели (АР – модели):

1. Определение дискретных центрированных значений

$$\{x_t\} = \{x(\Delta t), \dots, x(N \Delta t)\} = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$$

(при использовании нецентрированных значений обязательно последующее центрирование с предварительным определением скользящих средних).

2. Вычисление оценок автоковариаций с задержкой k :

$$\hat{\gamma}_0 = M[x_t^2] = \sigma_x^2 = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N x_t^2;$$

$$\hat{\gamma}_k = M[x_t x_{t+k}] = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-k} x_t x_{t+k}, \quad k = \overline{1, p}$$

(p предварительно следует задать).

3. Вычисление коэффициентов автокорреляции с задержкой k :

$$r_k = \frac{\hat{\gamma}_k}{\hat{\gamma}_0}; \quad k = \overline{1, p}; \quad p \leq \frac{N}{4}; \quad r_0 = 1.$$

4. Решение системы уравнений Юла-Уолкера (относительно $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \dots, \hat{a}_p$):

$$\hat{a}_1 + \hat{r}_1 \hat{a}_2 + \hat{r}_2 \hat{a}_3 + \dots + \hat{r}_{p-1} \hat{a}_p = \hat{r}_1;$$

$$\hat{r}_1 \hat{a}_1 + \hat{a}_2 + \hat{r}_1 \hat{a}_3 + \dots + \hat{r}_{p-2} \hat{a}_p = \hat{r}_2;$$

$$\hat{r}_2 \hat{a}_1 + \hat{r}_1 \hat{a}_2 + \hat{a}_3 + \dots + \hat{r}_{p-3} \hat{a}_p = \hat{r}_3;$$

...

$$\hat{r}_{p-1} \hat{a}_1 + \hat{r}_{p-2} \hat{a}_2 + \hat{r}_{p-3} \hat{a}_3 + \dots + \hat{a}_p = \hat{r}_p.$$

В матричной форме

$$pA = R,$$

где

$$p = \begin{bmatrix} 1 & \hat{r}_1 & \hat{r}_2 & \dots & \hat{r}_{p-1} \\ \hat{r}_1 & 1 & \hat{r}_1 & \dots & \hat{r}_{p-2} \\ & & \dots & & \\ \hat{r}_{p-1} & \hat{r}_{p-2} & \hat{r}_{p-3} & \dots & 1 \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \\ \vdots \\ \hat{a}_p \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} \hat{r}_1 \\ \hat{r}_2 \\ \vdots \\ \hat{r}_p \end{bmatrix}.$$

Оценка искоемых коэффициентов $\hat{a}_j$ получится в виде

$$A = p^{-1} R.$$

Искомая АР-модель будет иметь вид

$$x_t = \hat{a}_1 x_{t-1} + \hat{a}_2 x_{t-2} + \dots + \hat{a}_p x_{t-p}.$$

Для АР-модели 2-го порядка

$$\hat{a}_1 = \frac{\hat{r}_1(1 - \hat{r}_2)}{1 - \hat{r}_1^2}; \quad \hat{a}_2 = \frac{\hat{r}_2 - \hat{r}_1^2}{1 - \hat{r}_1^2}; \quad \hat{\gamma}_0 = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N x_t^2; \quad \hat{\gamma}_1 = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-1} x_t x_{t+1};$$

$$\hat{\gamma}_2 = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-2} x_t x_{t+2}; \quad \hat{r}_1 = \frac{\hat{\gamma}_1}{\hat{\gamma}_0}; \quad \hat{r}_2 = \frac{\hat{\gamma}_2}{\hat{\gamma}_0}.$$

Откуда искомая модель

$$x_t = \hat{a}_1 x_{t-1} + \hat{a}_2 x_{t-2}.$$

Рассмотрим далее определение оценки $\hat{a}_{p+1}$ по оценкам $\hat{a}_j(p)$ (алгоритм Левинсона-Дурбина).

Пусть решением уравнения Юла-Уолкера определена АР – модель порядка p :

$$x_t = \hat{a}_1 x_{t-1} + \hat{a}_2 x_{t-2} + \dots + \hat{a}_p x_{t-p}.$$

Для определения $\hat{a}_p$ справедлива рекуррентная формула

$$\hat{a}_{p+1} = \frac{\hat{\gamma}_0}{\sigma_e^2} \left[\hat{r}_{p+1} - \sum_{j=1}^p \hat{a}_j(p) \hat{r}_{p+1-j} \right],$$

где

$$\hat{r}_{p+1} = \frac{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-(p+1)} x_t x_{t+p+1}}{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N x_t^2} = \frac{\hat{\gamma}_{p+1}}{\hat{\gamma}_0}.$$

Модель $(p + 1)$ -го порядка будет иметь вид

$$x_t = \hat{a}_1 x_{t-1} + \hat{a}_2 x_{t-2} + \dots + \hat{a}_{p+1} x_{t-(p+1)}.$$

Если АР-модель имеет истинный порядок, равный m , должно выполняться

$$a_m(p) = \begin{cases} \neq 0, & m \leq p; \\ = 0, & m > p. \end{cases}$$

Это даёт условие проверки правильности выбранного порядка модели.

В частности, для проверки правильности выбора порядка модели при $p = 2$ следует определить

$$\hat{r}_3 = \frac{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-3} x_t x_{t+3}}{\hat{\gamma}_0};$$

$$\hat{a}_3 = \frac{\hat{\gamma}_0}{1 - (\hat{a}_1 \hat{r}_1 + \hat{a}_2 \hat{r}_2)} [\hat{r}_3 - (\hat{a}_1 \hat{r}_1 + \hat{a}_2 \hat{r}_2)].$$

Если $\hat{a}_3 = 0$, то можно считать, что

$$x_t = \hat{a}_1 x_{t-1} + a_2 x_{t-2}.$$

Дисперсия оценки $\{x_t\}$ по МНК определится в виде:

$$\hat{\sigma}^2(p) = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N \left[x_t - \sum_{j=1}^p \hat{a}_j \hat{r}_{t-j} \right]^2.$$

Оказывается, при $N \rightarrow \infty$

$$M[\hat{\sigma}^2(p)] \rightarrow \left[1 - \frac{p+1}{N} \right] \sigma_e^2.$$

Поэтому естественно принять

$$\hat{\sigma}_e^2 = \frac{\sigma^2(p)}{1 - \frac{p+1}{N}} = \frac{N}{N - (p+1)} \sigma^2(p).$$

Оценку порядка p для АР-модели можно получить из условия

$$\frac{N + p + 1}{N - m - 1} \hat{\sigma}^2(p) = \min_m \frac{N + m + 1}{N - m - 1} \hat{\sigma}^2(m), m = \overline{0, L},$$

L – установленный предельный порядок модели.

Таким образом,

$$\sigma_e^2 = \frac{1}{N - (p + 1)} \sum_{t=1}^N \left[x_t - \sum_{j=1}^p \hat{a}_j x_{t-j} \right]^2.$$

Справедлива формула для оценки энергетического спектра

$$G_{xx}(f) = \frac{2\sigma_e^2}{\left| 1 - \sum_{k=1}^p \hat{a}_k e^{-j2\pi f} \right|^2}.$$

В частности, при $p = 2$

$$G_{xx}(f) = \frac{2\sigma_e^2}{1 + \hat{a}_1^2 + \hat{a}_2^2 - 2\hat{a}_1(1 - \hat{a}_2)\cos 2\pi f - 2\hat{a}_2\cos 4\pi f} = \frac{2\sigma_e^2}{F};$$

$$\sigma_x^2 = \frac{1 - \hat{a}_2}{1 + \hat{a}_2} \frac{\sigma_e^2}{(1 - \hat{a}_2)^2 - \hat{a}_1^2}; \quad G_{xx}(f) = \frac{1}{F} \frac{(1 + \hat{a}_2) \left[(1 - \hat{a}_2)^2 - \hat{a}_1^2 \right]}{1 - \hat{a}_2}.$$

Рассмотрим далее построение авторегрессионной модели со скользящим средним (АРСС-модели). Здесь модель представляется в виде

$$x_t = a_1 x_{t-1} + \dots + \hat{a}_p x_{t-p} + e_t + b_1 e_{t-1} + \dots + b_q e_{t-q}.$$

Введя

$$A(z^{-1}) = 1 - a_1 z^{-1} - \dots - a_p z^{-p};$$

$$B(z^{-1}) = 1 + b_1 z^{-1} + \dots + b_q z^{-q}.$$

получим

$$A(z^{-1})x_t = B(z^{-1})e_t.$$

Определение $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \dots, \hat{a}_p, \hat{b}_1, \hat{b}_2, \dots, \hat{b}_q$ осуществляется с помощью модифицированной системы уравнений Юла-Уолкера

$$\hat{r}_q \hat{a}_1 + \hat{r}_{q-1} \hat{a}_2 + \dots + \hat{a}_{q+1} + \hat{r}_1 \hat{a}_{q+2} + \dots + \hat{r}_{p-(q+1)} \hat{a}_p = \hat{r}_{q+1};$$

$$\hat{r}_{q+(p-1)} \hat{a}_1 + \hat{r}_{q+(p-2)} \hat{a}_2 + \dots + \hat{r}_{p-1} \hat{a}_{q+1} + \hat{r}_{p-2} \hat{a}_{q+2} + \dots + \hat{r}_q \hat{a}_p = \hat{r}_{q+p}$$

или, введя

$$P_M = \begin{bmatrix} \hat{r}_q & \hat{r}_{q-1} & \dots & \hat{r}_1 & 1 & \hat{r}_1 & \dots & \hat{r}_{p-(q+1)} \\ \hat{r}_{q+1} & \hat{r}_q & \dots & \hat{r}_2 & \hat{r}_2 & 1 & \dots & \hat{r}_{p-(q+2)} \\ & & & \dots & & & & \\ \hat{r}_{q+(p-1)} & \hat{r}_{q+(p-2)} & \dots & \hat{r}_p & \hat{r}_{p-1} & \hat{r}_{p-2} & \dots & \hat{r}_p \end{bmatrix},$$

$$A = \begin{bmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \\ \vdots \\ \hat{a}_p \end{bmatrix}; R_M = \begin{bmatrix} \hat{r}_{q+1} \\ \hat{r}_{q+2} \\ \vdots \\ \hat{r}_{q+p} \end{bmatrix},$$

получим

$$\hat{A} = p_M^{-1} R_M.$$

Чтобы оценить параметры скользящего среднего, введём

$$\tilde{x}_t = x_t - \sum_{j=1}^p \hat{a}_j x_{t-j}.$$

Тогда

$$\tilde{x}_t \approx e_t + b_1 e_{t-1} + \dots + b_q e_{t-q}.$$

Получили СС-модель процесса $\tilde{x}_t$.

Автокорреляция $\hat{r}_k$ для $\tilde{x}_t$:

$$\hat{r}_k = \begin{cases} (1 + b_1^2 + \dots + b_q^2) \frac{\sigma_e^2}{\hat{\gamma}}, & k = 0; \\ (b_0 b_k + b_1 b_{k+1} + \dots + b_{q-k} b_q) \frac{\sigma_e^2}{\hat{\gamma}}, & k = \overline{1, q}; \\ 0, & k > q; \\ b_0 = 1. \end{cases}$$

Пусть оценки $\hat{a}_j$, $j = \overline{1, p}$, уже определены решением уравнения

$$A = p_M^{-1} R_M.$$

Пусть затем определены значения

$$\tilde{x}_t = x_t - \sum_{j=1}^p \hat{a}_j x_{t-j}.$$

Определим

$$r_k = \frac{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-k} \tilde{x}_t \tilde{x}_{t+k}}{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N \tilde{x}_t^2}, \quad k = \overline{1, q} \quad (\tilde{r}_0 = 1).$$

Тогда для определения $\hat{b}_1, \hat{b}_2, \dots, \hat{b}_q$, σ_e^2 получим уравнения

$$(1 + \hat{b}_1^2 + \dots + \hat{b}_q^2) \hat{\sigma}_e^2 = \hat{\gamma}_0;$$

$$\left(\hat{b}_0 \hat{b}_1 + \hat{b}_1 \hat{b}_2 + \dots + \hat{b}_{q-1} \hat{b}_q\right) \hat{\sigma}_e^2 = \hat{r}_1 \hat{\gamma}_0;$$

...

$$\left(\hat{b}_0 \hat{b}_{q-1} + \hat{b}_1 \hat{b}_q\right) \hat{\sigma}_e^2 = \hat{r}_{q-1} \hat{\gamma}_0;$$

$$\left(\hat{b}_0 \hat{b}_q\right) \hat{\sigma}_e^2 = \hat{r}_q \hat{\gamma}_0.$$

Отметим, что эти уравнения *нелинейны*.

В частности, для $q = 2$ получим:

$$\left(1 + \hat{b}_1^2 + \hat{b}_2^2\right) \hat{\sigma}_e^2 = \hat{\gamma};$$

$$\frac{\hat{b}_1(1 + \hat{b}_2)}{1 + \hat{b}_1^2 + \hat{b}_2^2} = \hat{r}_1, \quad \frac{\hat{b}_2}{1 + \hat{b}_1^2 + \hat{b}_2^2} = \hat{r}_2.$$

Откуда

$$\hat{b}_1 = \frac{\hat{r}_1 \hat{\gamma}_0}{\hat{\sigma}_e^2 + \hat{r}_2 \hat{\gamma}_0}; \quad \hat{b}_2 = \frac{\hat{r}_2 \hat{\gamma}_0}{\hat{\sigma}_e^2};$$

$$\begin{aligned} \hat{D}^4 + \left[\hat{\gamma}_0(2\hat{r}_2 - 1)\right] \hat{D}^3 + \left[\hat{r}_1^2 + 2\hat{r}_2(\hat{r}_2 - 1)\hat{\gamma}_0\right] \hat{D}^2 + \\ + \left[\hat{r}_2^2 + (2\hat{r}_2 - 1)\hat{\gamma}_0^3\right] \hat{D} + \hat{r}_2^4 \hat{\gamma}_0^4 = 0, \quad \left(\hat{D} = \hat{\sigma}_e^2\right). \end{aligned}$$

Определив $\hat{b}_1, \hat{b}_2, \dots, \hat{b}_q$ по найденному значению $\hat{D}$, получим модель СС-процесса $\tilde{x}_t$:

$$\tilde{x}_t = e_t + \hat{b}_1 e_{t-1} + \dots + \hat{b}_q e_{t-q}.$$

Окончательно получим *АРСС-модель процесса* x_t в виде

$$x_t = \hat{a}_1 x_{t-1} + \dots + \hat{a}_p x_{t-p} + e_t + \hat{b}_1 e_{t-1} + \dots + \hat{b}_q e_{t-q}.$$

Определение $\tilde{r}_k$ производится на основе формул

$$\tilde{\gamma}_k = \sum_{i=0}^p \sum_{j=0}^p \hat{a}_i \hat{a}_j \gamma_{k+j-i}; \quad \hat{a}_0 = 1; \quad \tilde{r}_k = \frac{\tilde{\gamma}_k}{\tilde{\gamma}_0}.$$

2.4. Регрессионные методы идентификации

2.4.1. Система с одним выходом. Статическая задача

Рассмотрим линейную статическую систему, имеющую m входов $X_1, \dots, X_m$ и один выход Z (рис. 2.5). Она описывается следующим линейным уравнением:

$$Z = a_0 + a_1 X_1 + a_2 X_2 + \dots + a_m X_m. \quad (2.3)$$

Используя серию измерений величин Z, X_j ($j = 0, 1, \dots, m$) в r моментов времени, можно определить параметры a_i . По r совокупностям измерений вычисляются $\bar{Z}$ и $\bar{X}_j$, где $\bar{Z}$, $\bar{X}_j$ – средние значения Z, X_j для указанных серий измерений. Введём

$$\overset{\Delta}{z} = Z - \bar{Z}, \quad (2.4)$$

$$\overset{\Delta}{x} = X - \bar{X}. \quad (2.5)$$

Тогда уравнение (2.3) принимает вид

$$z = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_m x_m, \quad (2.6)$$

или в векторной форме

$$\mathbf{z} = \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{a} \quad (2.7)$$

где $\mathbf{x}, \mathbf{a}$ – вектор-столбцы с элементами x_j, a_j соответственно.



Рис. 2.5

Количество r последовательных измерений удовлетворяют соотношениям

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^{(1)} &= \mathbf{x}^{(1)T} \mathbf{a}, \\ &\vdots \\ \mathbf{z}^{(\mu)} &= \mathbf{x}^{(\mu)T} \mathbf{a}, \\ &\vdots \\ \mathbf{z}^{(r)} &= \mathbf{x}^{(r)T} \mathbf{a}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

где μ обозначает момент измерений z , x^T ($\mu = 1, 2, \dots, r$). Введём вектор χ и матрицу U следующим образом:

$$\chi \stackrel{\Delta}{=} \begin{bmatrix} z^{(1)} & \dots & z^{(\mu)} & \dots & z^{(r)} \end{bmatrix}^T, \quad (2.9)$$

$$U \stackrel{\Delta}{=} \begin{bmatrix} x^{(1)T} \\ \vdots \\ x^{(\mu)T} \\ \vdots \\ x^{(r)T} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^{(1)} & \dots & x_j^{(1)} & \dots & x_m^{(1)} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_1^{(\mu)} & \dots & x_j^{(\mu)} & \dots & x_m^{(\mu)} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_1^{(r)} & \dots & x_j^{(r)} & \dots & x_m^{(r)} \end{bmatrix}. \quad (2.10)$$

Следовательно, система уравнений (2.8) может быть записана в векторной форме:

$$\chi = Ua. \quad (2.11)$$

Предполагая, что компоненты вектора a в уравнении (2.11) являются оценками $\hat{a}$ истинного вектора a , можно с помощью уравнения (2.11) получить такие оценки $\hat{\chi}$ вектора χ , что

$$\hat{\chi} = U\hat{a}. \quad (2.12)$$

Легко показать, что наилучшая в смысле наименьших квадратов оценка $\hat{a}$ вектора a удовлетворяет уравнению

$$U^T U \hat{a} = U^T \cdot \chi, \quad (2.13)$$

так что

$$\hat{a} = (U^T U)^{-1} U^T \chi = [\hat{a}_1, \hat{a}_2, \dots, \hat{a}_m]^T, \quad (2.14)$$

что и позволяет построить процедуру идентификации вектора a на основе линейной регрессии и метода наименьших квадратов. Отметим, что матрица $(U^T U)^{-1}$ существует только тогда, когда матрица U не является особенной.

Число измерений r должно быть больше числа идентифицируемых параметров ($r \geq m$). Если $r = m$, то в оценке χ шум измерений не будет сглажен. Поэтому для адекватной идентификации требуется по крайней мере $m + 1$ измерений, причём в течение этого периода система предполагается стационарной.

Пример. Установить зависимость предела прочности при сжатии $R_{сж}$ от твёрдости T и модуля деформации E_{15} эпоксидных композитов.

Результаты экспериментов приводятся в табл.2.6.

Таблица 2.6

Z	117	100	120	57	99	102	79	64	74	87
X ₁	6,01	5,05	6,15	2,94	5,06	5,23	4,05	3,40	3,79	4,44
X ₂	3,62·10 ⁴	4,71·10 ⁴	3,51·10 ⁴	1,06·10 ⁴	4,71·10 ⁴	4,48·10 ⁴	6,57·10 ⁴	8,52·10 ⁴	7,25·10 ⁴	5,71·10 ⁴

Принято: $X_1 = T$, $X_2 = E_{15}$, $Z = R_{сж}$.

Имеем: $\bar{X}_1 = 4,61$; $\bar{X}_2 = 5,01 \cdot 10^4$; $\bar{Z} = 89,9$.

Для центрированных значений переменных данные эксперимента приводятся в табл. 2.7.

Таблица 2.7

Z	27,1	10,1	30,1	-32,9	9,1	12,1	-10,9	-25,9	-15,9	-2,9
X ₁	1,40	0,44	1,54	-1,67	0,45	0,62	-0,56	-1,21	-0,82	-0,17
X ₂	-1,39·10 ⁴	-0,3·10 ⁴	-1,5·10 ⁴	-3,95·10 ⁴	-0,3·10 ⁴	-0,53·10 ⁴	1,56·10 ⁴	3,51·10 ⁴	2,24·10 ⁴	0,7·10 ⁴

В соответствии с предыдущим значение $z^{(\mu)}$ при μ -измерении

$$z^{(\mu)} \approx a_1 x_1^{(\mu)} + a_2 x_2^{(\mu)},$$

и для параметров линейной модели будем иметь:

$$\hat{\mathbf{a}} = (\hat{a}_1, \hat{a}_2) = (19,1; -1,26 \cdot 10^{-5}).$$

Окончательно получим

$$R_{сж} = 2,48 + 19,1 T - 1,26 \cdot 10^{-5} E_{15}.$$

Как видим, относительная ошибка вычисления $R_{сж}$ по модели не превышает приблизительно 1 %. Одновременно отметим, что исходная таблица измерений обладает избыточностью (достаточно знания одного из двух параметров $R_{сж}$ или T).

При этом $R_{сж}$ и T практически от E_{15} не зависят.

2.4.2. Система с несколькими входами и выходами.

Статическая задача

По аналогии с процессом с одним выходом процесс, имеющий m входов и n выходов, описывается системой уравнений:

$$\begin{aligned} z_1 &= a_{11} x_1 + \dots + a_{1j} x_j + \dots + a_{1m} x_m, \\ &\vdots \\ z_i &= a_{i1} x_1 + \dots + a_{ij} x_j + \dots + a_{im} x_m, \\ &\vdots \\ z_n &= a_{n1} x_1 + \dots + a_{nj} x_j + \dots + a_{nm} x_m, \end{aligned} \quad (2.15)$$

или в векторной форме

$$\mathbf{z} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}, \quad (2.16)$$

где

$$\mathbf{z}^{\Delta} = (z_1 \cdots z_i \cdots z_n)^T, \quad (2.17)$$

$$\mathbf{x}^{\Delta} = (x_1 \cdots x_j \cdots x_m)^T \quad (2.18)$$

и

$$\mathbf{A}^{\Delta} = \begin{bmatrix} a_{11} \cdots a_{1m} \\ \vdots \\ a_{n1} \cdots a_{nm} \end{bmatrix}. \quad (2.19)$$

Каждая строка в уравнениях (2.15) или (2.16) имеет точно такой вид, как и в уравнениях (2.6) или (2.7) для системы с одним выходом. Так что i -ю строку уравнения (2.15) можно записать в виде:

$$\mathbf{z}_i = \mathbf{x}^T \mathbf{a}_i, \quad (2.20)$$

где

$$\mathbf{a}_i^{\Delta} = [a_{i1} \ a_{i2} \ \cdots \ a_{ij} \ \cdots \ a_{im}]^T. \quad (2.21)$$

Подобно процессу с одним выходом для r измерений ($r \geq m + 1$), величины z_i, x_j ($i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, m$) определяются в виде

$$\chi_i^{\Delta} = \begin{bmatrix} z_i^{(1)} \\ \vdots \\ z_i^{(\mu)} \\ \vdots \\ z_i^{(r)} \end{bmatrix}, \quad (2.22)$$

$$\mathbf{U}^{\Delta} = \begin{bmatrix} x_1^{(1)} & \cdots & x_m^{(1)} \\ \vdots & & \\ x_1^{(\mu)} & \cdots & x_m^{(\mu)} \\ \vdots & & \\ x_1^{(r)} & \cdots & x_m^{(r)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x^{(1)T} \\ \vdots \\ x^{(\mu)T} \\ \vdots \\ x^{(r)T} \end{bmatrix}. \quad (2.23)$$

Индекс в скобках (μ) означает μ -ю совокупность измерений ($\mu = 1, 2, \dots, r$), а $\mathbf{x}$ – то же самое, что и в уравнении (2.10). Поэтому указанные выше r измерений удовлетворяют для i -го выхода соотношениям

$$\begin{aligned} z_i^{(1)} &= \mathbf{x}^{(1)\top} \mathbf{a}_i \\ &\vdots \\ z_i^{(\mu)} &= \mathbf{x}^{(\mu)\top} \mathbf{a}_i \\ &\vdots \\ z_i^{(r)} &= \mathbf{x}^{(r)\top} \mathbf{a}_i \end{aligned} \quad (2.24)$$

или в матричной форме

$$\mathbf{z}_i = \mathbf{U} \mathbf{a}_i. \quad (2.24')$$

Поскольку уравнения (2.24) аналогичны уравнениям (2.7) и (2.10) для системы с одним выходом, то наилучшие в смысле регрессии по методу наименьших квадратов оценки $\hat{\mathbf{a}}_i \forall i$ удовлетворяют соотношению

$$\hat{\mathbf{a}}_i = (\mathbf{U}^\top \mathbf{U})^{-1} \mathbf{U}^\top \boldsymbol{\chi}_i = (\hat{a}_{1i} \cdots \hat{a}_{mi}). \quad (2.25)$$

При идентификации $\hat{\mathbf{a}}_i$ в соответствии с (2.25) предполагается, что $r \geq m + 1$, как и для случая с одним выходом. Поскольку для всех i рассматривается одна и та же матрица измерений $\mathbf{U}$ (i обозначает i -ю строку уравнения (2.16)), все элементы матрицы $\mathbf{A}$ можно полностью идентифицировать по $m + 1$ измерениям; при этом одновременно идентифицируются $\mathbf{a}_i$ для всех i .

2.4.3. Регрессионная идентификация динамических процессов

Рассмотрим в качестве примера динамическую систему, описываемую уравнением

$$\dot{\mathbf{x}} = \boldsymbol{\alpha} \mathbf{x} + \boldsymbol{\beta} \mathbf{u}, \quad (2.26)$$

где $\mathbf{x}$, $\mathbf{u}$ – n -мерный вектор состояния и m -мерный вектор управления (вход) соответственно; $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$ – матрицы коэффициентов.

Пусть

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_k &\stackrel{\Delta}{=} \mathbf{x}(t_k) \stackrel{\Delta}{=} \mathbf{x}(k \Delta t); \\ \mathbf{x}_{k+1} &\stackrel{\Delta}{=} \mathbf{x}(t_{k+1}) \stackrel{\Delta}{=} \mathbf{x}[(k+1) \Delta t]. \end{aligned}$$

Тогда при $t = t_k = k \Delta t$ из выражения (2.26) получим

$$\frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta t} \approx \boldsymbol{\alpha} \mathbf{x}_k + \boldsymbol{\beta} \mathbf{u}_k,$$

или

$$\mathbf{x}_{k+1} \approx \mathbf{x}_k + (\alpha \Delta t) \mathbf{x}_k + (\beta \Delta t) \mathbf{u}_k.$$

Откуда

$$\mathbf{x}_{k+1} \approx \mathbf{E} \mathbf{x}_k + (\alpha \Delta t) \mathbf{x}_k + (\beta \Delta t) \mathbf{u}_k = (\mathbf{E} + \alpha \Delta t) \mathbf{x}_k + (\beta \Delta t) \mathbf{u}_k.$$

Введём матрицы

$$\mathbf{A}^{\Delta} = \mathbf{E} + \alpha \Delta t = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + \alpha_{11} \Delta t & \cdots & \alpha_{1n} \Delta t \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \alpha_{n1} \Delta t & \cdots & 1 + \alpha_{nn} \Delta t \end{bmatrix};$$

$$\mathbf{B}^{\Delta} = \beta \Delta t = \begin{bmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1m} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ b_{n1} & \cdots & b_{nm} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} \Delta t & \cdots & b_{1n} \Delta t \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ b_{n1} \Delta t & \cdots & b_{nm} \Delta t \end{bmatrix}.$$

Тогда из выражения (2.26) получим приближённое уравнение

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{A} \mathbf{x}_k + \mathbf{B} \mathbf{u}_k. \quad (2.27)$$

Введём теперь $(n + m)$ -мерный вектор

$$\mathbf{W}_k^{\Delta} = (x_1^k, x_2^k, \dots, x_n^k, u_1^k, u_2^k, \dots, u_m^k)^T$$

и $(n \times (n + m))$ -матрицу

$$\Phi = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} & b_{11} & \cdots & b_{1m} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} & b_{n1} & \cdots & b_{nm} \end{bmatrix}.$$

Тогда уравнение (2.27) можно записать в виде

$$\mathbf{x}_{k+1} = \Phi \mathbf{W}_k. \quad (2.28)$$

Отметим, что выражение (2.28) справедливо при всех k в силу стационарности матрицы Φ . В развёрнутом виде (2.28) представляется следующим образом:

$$\begin{aligned} x_1^{k+1} &= a_{11} x_1^k + \dots + a_{1n} x_n^k + b_{11} u_1^k + \dots + b_{1m} u_m^k, \\ x_2^{k+1} &= a_{21} x_1^k + \dots + a_{2n} x_n^k + b_{21} u_1^k + \dots + b_{2m} u_m^k, \\ &\dots \\ x_n^{k+1} &= a_{n1} x_1^k + \dots + a_{nn} x_n^k + b_{n1} u_1^k + \dots + b_{nm} u_m^k. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Эти уравнения соответствуют системе, указанной на рис. 2.7.

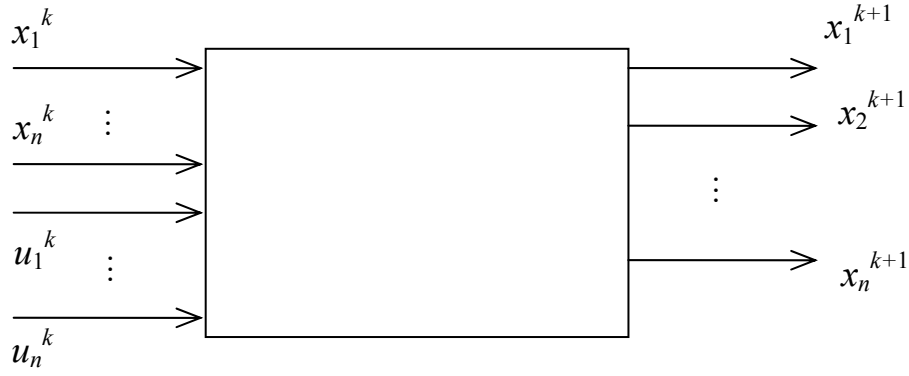


Рис. 2.7

Так как $x_1^{k+1}, \dots, x_n^{k+1}$ в соответствии с системой уравнений (2.29) определяются изолированно, то для x_i^{k+1} , определяемой i -м уравнением, справедлива схема, приведённая на рис. 2.8.

Известно, для регрессионной идентификации параметров управления

$$x_i^{k+1} = a_{i1} x_1^k + \dots + a_{in} x_n^k + b_{i1} u_1^k + \dots + b_{im} u_m^k \quad (i = \overline{1, n})$$

необходимо иметь $r \geq n + m + 1$ совокупностей синхронных измерений x_i^{k+1} и $x_1^k, \dots, x_n^k, u_1^k, \dots, u_m^k$.

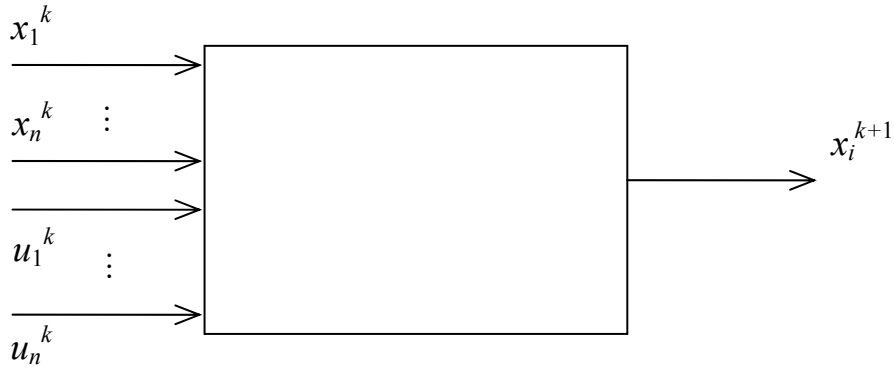


Рис. 2.8

В качестве таких измерений возьмём

$$x_{i(1)}^{k+1} = x_i^1; \quad x_{1(1)}^k = x_1^0, \dots, \quad x_{n(1)}^k = x_n^0, \quad u_{1(1)}^k = u_1^0, \dots, \quad u_{m(1)}^k = u_m^0;$$

...

$$x_{i(r)}^{k+1} = x_i^r; \quad x_{1(r)}^k = x_1^{r-1}, \dots, \quad x_{n(r)}^k = x_n^{r-1}, \quad u_{1(r)}^k = u_1^{r-1}, \dots, \quad u_{m(r)}^k = u_m^{r-1}.$$

Это можно сделать, так как указанные совокупности должны удовлетворять системе уравнений (2.29).

Вводя

$$\mathbf{u}_{(\mu)} = \left[x_1^{\mu-1}, \dots, x_n^{\mu-1}, u_1^{\mu-1}, \dots, u_m^{\mu-1} \right]^T = \mathbf{W}_{(\mu-1)};$$

$$\mathbf{a}_i = \left[a_{i1}, \dots, a_{in}, b_{i1}, \dots, b_{im} \right]^T,$$

получим, что указанные выше r измерений удовлетворяют для i -го выхода x_i^{k+1} соотношениям:

$$x_{i(1)}^{k+1} = \bar{u}_{(1)}^T \bar{a}_i;$$

...

$$x_{i(\mu)}^{k+1} = \bar{u}_{(\mu)}^T \bar{a}_i;$$

...

$$x_{i(r)}^{k+1} = \bar{u}_{(r)}^T \bar{a}_i,$$

или в матричной форме

$$\chi = \mathbf{U} \cdot \alpha_i,$$

где

$$\chi = [x_i^1, x_i^2, \dots, x_i^n]^T;$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} x_1^0 & \dots & x_n^0 & u_1^0 & \dots & u_m^0 \\ x_1^{\mu-1} & \dots & x_n^{\mu-1} & u_1^{\mu-1} & \dots & u_m^{\mu-1} \\ x_1^{r-1} & \dots & x_n^{r-1} & u_1^{r-1} & \dots & u_m^{r-1} \end{bmatrix}.$$

Тогда в соответствии с выражением (2.6) оценки параметров $\mathbf{a}_i \forall_i$, удовлетворяют соотношению

$$\hat{\mathbf{a}}_i = (\mathbf{U}^T \mathbf{U})^{-1} \mathbf{U}^T \chi_i = \begin{bmatrix} a_{i1} \\ \vdots \\ a_{in} \\ b_{i1} \\ \vdots \\ b_{im} \end{bmatrix}.$$

Введём

$$\chi = \begin{bmatrix} x_1^1 & x_2^1 & \dots & x_n^1 \\ x_1^2 & x_2^2 & \dots & x_n^2 \\ \dots & & & \\ x_1^n & x_2^n & \dots & x_n^n \end{bmatrix}.$$

Тогда

$$\Phi^T = (\mathbf{U}^T \mathbf{U})^{-1} \mathbf{U}^T \chi.$$

3. ОПТИМИЗАЦИЯ

3.1. Однокритериальная оптимизация. Функционалы качества

Для наглядности рассмотрим оптимизацию кинетических процессов формирования основных физико-механических характеристик композиционных материалов. Для их описания можно использовать известную обобщенную динамическую модель [12, 16]. Здесь кинетический процесс $x(t)$ рассматривается как решение задачи Коши:

$$\ddot{z} + 2n\dot{z} + \omega_0^2 z = 0;$$

$$z = x - x_m;$$

$$x(0) = x_0;$$

$$\dot{x}(0) = \dot{x}_0;$$

$$n^2 - \omega_0^2 \geq 0,$$

где x_0 , $\dot{x}_0$, x_m определяются видом исследуемого кинетического процесса.

Оно имеет вид

$$z = \frac{\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} x_m e^{-\lambda_1 t} - \frac{\lambda_1}{\lambda_1 - \lambda_2} x_m e^{-\lambda_2 t};$$

$$x = \frac{x_m}{\lambda_1 - \lambda_2} (\lambda_2 e^{-\lambda_1 t} - \lambda_1 e^{-\lambda_2 t}) + x_m.$$

Здесь с увеличением ω_0 значения λ_2 и $\frac{1}{r} = \frac{\lambda_2}{\lambda_1}$ возрастают, а $\frac{1}{\lambda_2}$ и $r = \frac{\lambda_1}{\lambda_2}$ – убывают; при увеличении n значения λ_2 и $\frac{1}{r} = \frac{\lambda_2}{\lambda_1}$ убывают, а $\frac{1}{\lambda_2}$ и $r = \frac{\lambda_1}{\lambda_2}$ – возрастают.

Безразмерный коэффициент демпфирования величина $\xi \geq 1$ определяется структурой и физико-химическими свойствами материала; $\xi = \frac{n}{\omega_0}$, $n \geq \omega_0$; $\lambda_1 = (\xi + \sqrt{\xi^2 - 1}) \cdot \omega_0$, $\lambda_2 = (\xi - \sqrt{\xi^2 - 1}) \cdot \omega_0$;

Также очевидно, что увеличение λ_2 ведет к уменьшению абсциссы t_n точки перегиба процесса $x(t)$ при значениях ξ , близких к 1. При $t \gg t_n$ процесс $x(t)$ определяется значением λ_2 . Таким образом, значение λ_2 должно находиться в некотором интервале: большие значения λ_2 могут привести к чрезмерно быстрому увеличению контролируемого параметра в начале процесса; малые значения λ_2 могут привести к чрезмерно длительному времени

его выхода на эксплуатационное значение. Отметим, что увеличение λ_2 (уменьшение t_n) соответствует увеличению ω_0 . Отсюда следует, что увеличение λ_2 ведет к постепенному переходу гетерогенной системы в гомогенную ($t_n = 0$), возможно, и с потерей необходимых свойств. Так что, как и следовало ожидать, *гомогенная система является предельной для гетерогенной при $t_n \rightarrow 0$.*

Качество композиционного материала определяется и значением λ_1 (или $r = \frac{\lambda_1}{\lambda_2}$), которое также должно лежать в определенном диапазоне.

Указанное выше естественным образом приводит к возможности использования для оценки качества композиционного материала функционала [8, 17]:

$$\Phi(S) = f \cdot \lambda_2 + a \cdot \frac{1}{\lambda_2} + b \cdot \frac{\lambda_1}{\lambda_2} + c \cdot \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \quad (3.1)$$

или

$$\Phi(S) = f \cdot \lambda_2 + a \cdot \frac{1}{\lambda_2} + br + c \cdot \frac{1}{r},$$

где f, a, b, c – весовые константы.

Без ограничения общности рассуждений можно принять $f = 1$ (это равносильно масштабированию $\Phi(S)$).

Подставляя $\lambda_1(\xi, \omega_0)$ и $\lambda_2(\xi, \omega_0)$ в (3.1), получим:

$$\begin{aligned} \Phi(S) = & \left(\xi - \sqrt{\xi^2 - 1} \right) \cdot \omega_0 + \frac{a}{\left(\xi - \sqrt{\xi^2 - 1} \right) \cdot \omega_0} + \\ & + b \cdot \frac{\xi + \sqrt{\xi^2 - 1}}{\xi - \sqrt{\xi^2 - 1}} + c \cdot \frac{\xi - \sqrt{\xi^2 - 1}}{\xi + \sqrt{\xi^2 - 1}}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Границы областей D_k равных оценок качества композиционного материала определяются как линии уровня $\Phi = \Phi(\xi, \omega_0) = d_k = \text{const}$, а области D_k – двойными неравенствами

$$d_{k-1} \leq \Phi(S) < d_k, \quad k = 1, 2, 3, \dots, N,$$

где N – балльность шкалы;

k – класс (оценка качества) композиционного материала в баллах в выбранной шкале.

Границы областей равных оценок определяются функциями

$$\omega_{01} = -p + \sqrt{p^2 - q};$$

$$\omega_{02} = -p - \sqrt{p^2 - q};$$

$$\omega_{01}, \omega_{02} \geq 0,$$

где
$$-p = \frac{1}{2} \left[b \cdot \frac{\left(\xi + \sqrt{\xi^2 - 1} \right)^2}{\xi - \sqrt{\xi^2 - 1}} + c \cdot \left(\xi - \sqrt{\xi^2 - 1} \right) - d \cdot \frac{1}{\xi - \sqrt{\xi^2 - 1}} \right] \geq 0,$$

$$q = a \cdot \left(\xi + \sqrt{\xi^2 - 1} \right)^2, \quad p^2 - q \geq 0.$$

Уточнение весовых констант a, b, c осуществляется в соответствии с нижеприводимой методикой, пригодной и для случая *глобального аддитивного критерия*

$$K = \sum_{j=1}^s \alpha_j K_j$$

(K_j – нормированные частные критерии, α_j – весовые константы).

А именно:

1. Задаются начальные значения весов

$$\alpha_j^{(0)} = \frac{1}{s}.$$

2. Вычисляется интегральная оценка

$$K = \sum_{j=1}^s \alpha_j^{(0)} K_j.$$

3. Определяются коэффициенты корреляции частных оценок K_j оценкой K :

$$\rho_j = \frac{\sum_{\gamma} \left(K_j^{(\gamma)} - \overline{K_j} \right) \cdot \left(K^{(\gamma)} - \overline{K} \right)}{\sqrt{\sum_{\gamma} \left(K_j^{(\gamma)} - \overline{K_j} \right)^2} \cdot \sqrt{\sum_{\gamma} \left(K^{(\gamma)} - \overline{K} \right)^2}}, \quad j = \overline{1, s}.$$

4. Определяются уточненные значения весовых констант α_j :

$$\alpha_j^{(1)} = \frac{\rho_j}{\sum_{j=1}^s \rho_j}, \quad j = \overline{1, s}.$$

5. Определяется уточненное значение оценки:

$$K = \sum_{j=1}^s \alpha_j^{(1)} K_j.$$

6. Итерационная процедура по пп. 3-5 осуществляется до выполнения условия

$$\left| \alpha_j^{(l)} - \alpha_j^{(l-1)} \right| < \varepsilon, \quad j = \overline{1, s}.$$

В результате будет получена оценка

$$K = \sum_{j=1}^s \alpha_j^{(l)} K_j.$$

Здесь полученные значения весовых констант не зависят от их начальных значений $\alpha_j^{(0)}$, а определяются только долей участия частных критериев K_j в общем функционале качества K .

Очевидна возможность использования предложенной методики и в случае

$$K = \sum_{j=1}^s \alpha_j \sum_{v=1}^{m_j} \beta_{jv} K_{jv},$$

где K_j – частные критерии (например, прочность, твердость, реологические свойства и т.д.);

K_{jv} – параметры, определяющие K_j (например, параметры, определяющие кинетические процессы набора прочности, твердости и т.д.).

Весовые константы β_{jv} определяются аналогично α_j на основе коэффициентов корреляции

$$r_{iv} = r_{K_{jv}K_j} = \frac{\sum_{\delta} (K_{jv}^{(\delta)} - \bar{K}_{jv}) \cdot (K_j^{(\delta)} - K_j)}{\sqrt{\sum_{\delta} (K_{jv}^{(\delta)} - \bar{K}_{jv})^2} \sqrt{\sum_{\delta} (K_j^{(\delta)} - K_j)^2}}.$$

Идентификация областей D_k равных оценок осуществляется выбором числовых значений d_k на основе сравнения расчетных границ областей с экспериментальными.

Выбором ω_0 и n всегда можно отнести рассматриваемую систему к требуемому классу, определяемому функционалом $\Phi(S)$.

Если ω_0 и n мало связаны между собой, то улучшение качества материала можно осуществить с использованием направления вектора-градиента $\mathbf{grad} \Phi(\xi, \omega_0) = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi}, \frac{\partial \Phi}{\partial \omega_0} \right)$. А именно, класс системы улучшается

при движении в антиградиентном направлении.

На рис. 3.1 приводятся области равных оценок при значениях весовых констант $f = a = b = c = 1/4$ и значениях $d_k = 2,5; 5; 7,5$.

На рис. 3.2, 3.3 приводятся границы областей равных оценок на плоскости (ω_0, n) . При известных весовых константах выбор чисел ω_{01} и ω_{02} относит рассматриваемый материал к соответствующему классу в исполь-

зуемой шкале. Так, точка T соответствует композиционному материалу с параметрами $\omega_0 = 0,174$, $n = 0,175$; $\omega_{01} = \omega_{02}$ в точке A , $\xi = 1$ в точке B .

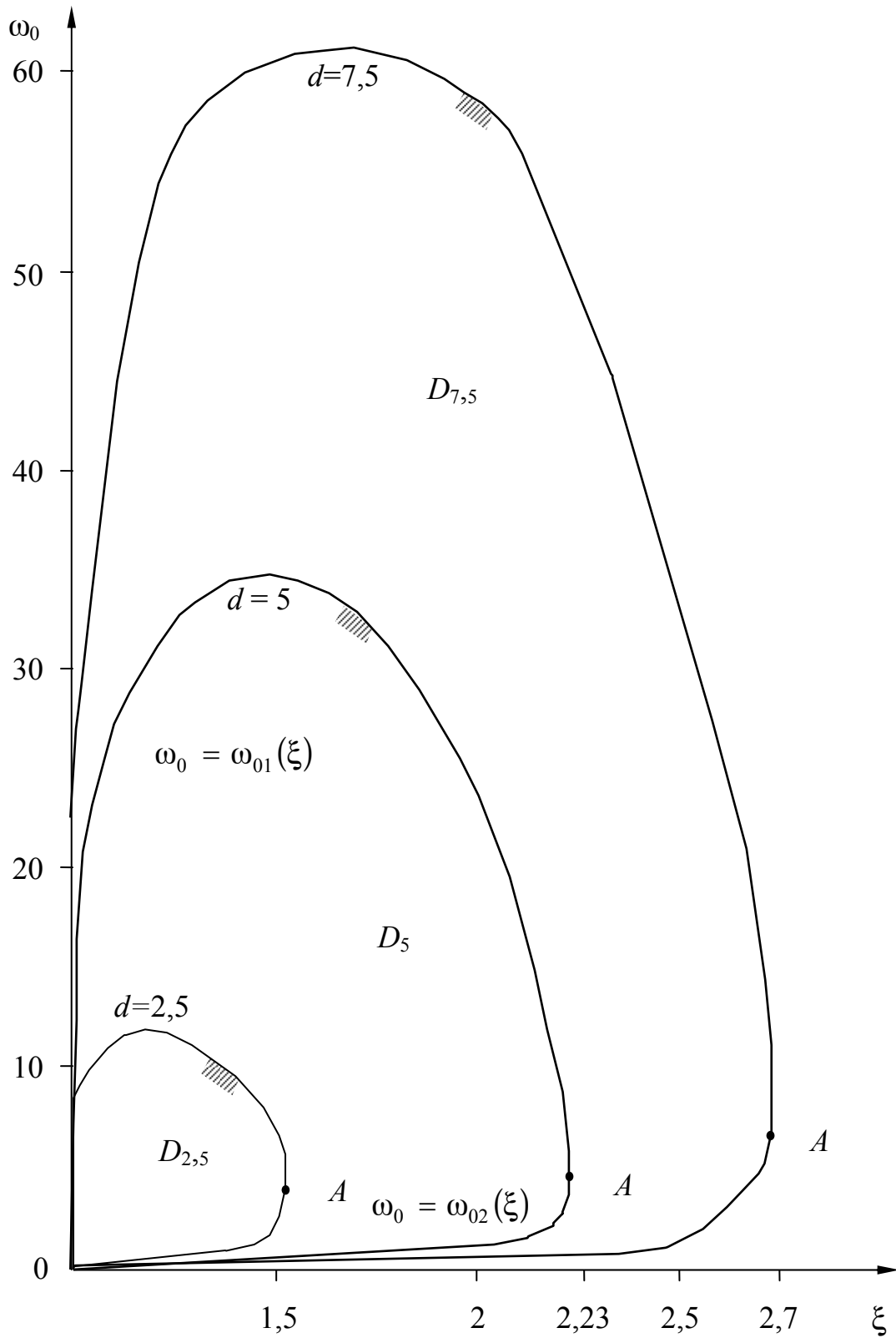


Рис. 3.1. Вид областей равных оценок в плоскости $\xi\omega_0$

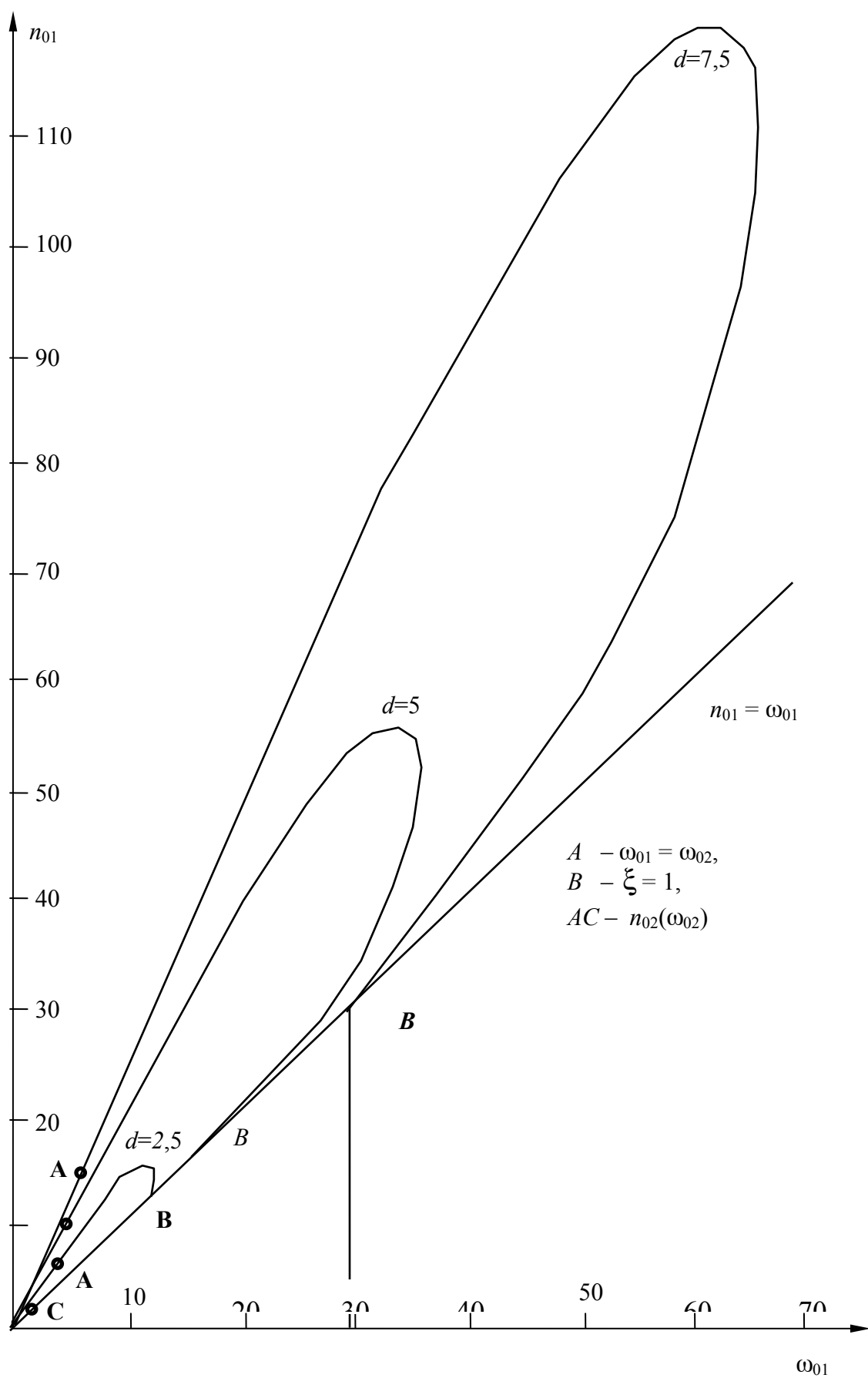


Рис. 3.2. Границы областей равных оценок в плоскости $\omega_{01}0n_{01}$

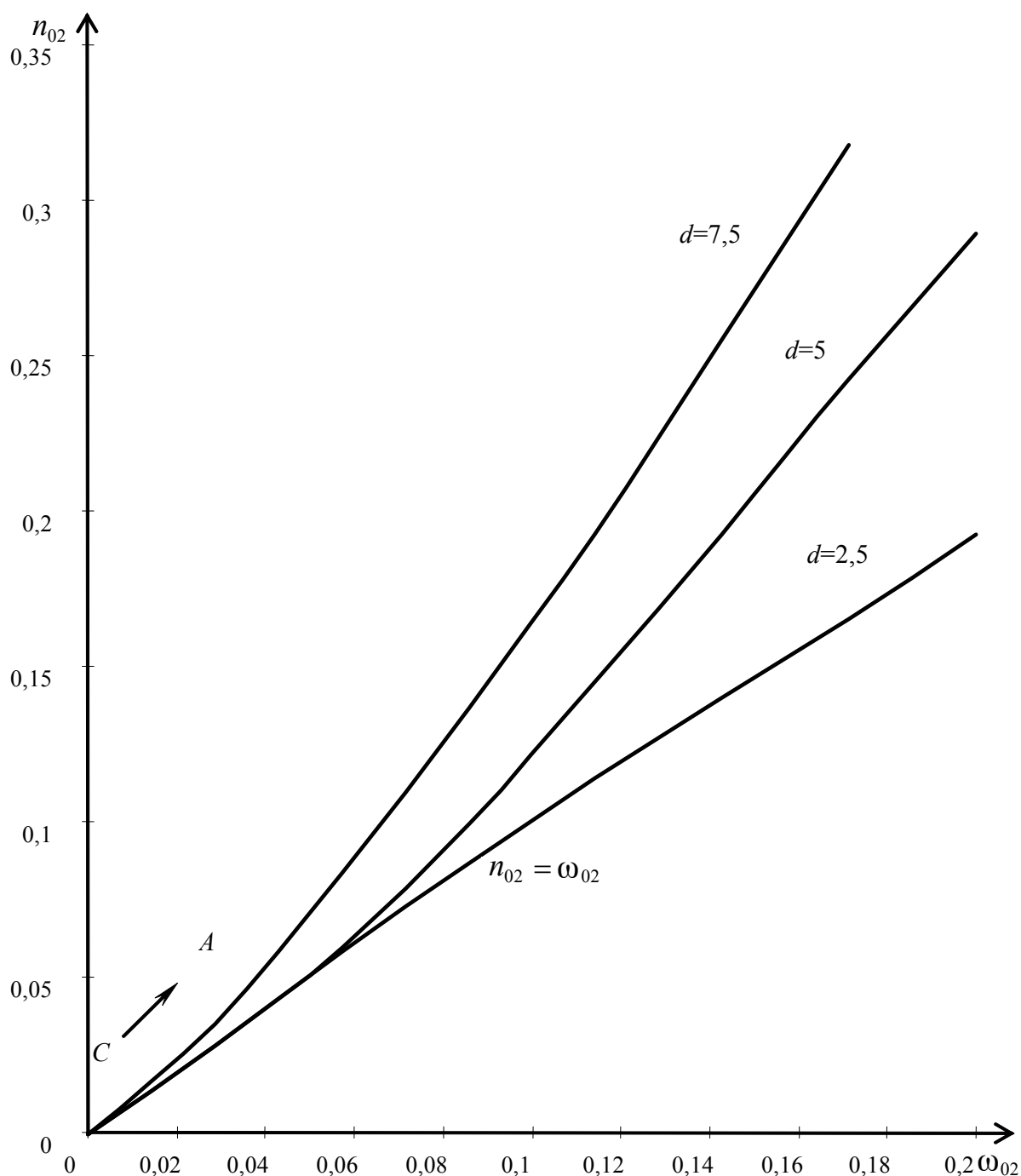


Рис. 3.3. Границы областей равных оценок в плоскости $\omega_{02}0n_{02}$

Связь характеристик материала с параметрами модели определяется экспериментально.

В качестве примера рассмотрим синтез материала на основе Вольского ПЦ 400 Д-20 с суперпластификатором С-3 (товарного, легкой и тяжелой фракций) из условия обеспечения требуемой кинетики набора прочности.

Параметрическая идентификация рассматриваемого процесса сводится к определению одной из совокупностей (t_n, λ_2, x_m) , (ξ, ω_0, x_m) , $(\lambda_1, \lambda_2, x_m)$, (ω_0, n, x_m) .

Значения x_m, t_n, λ_2 определялись по экспериментальным зависимостям $x(t)$.

В результате уточнения значений параметров из условий обеспечения адекватности модели и процесса $x(t)$ в соответствии с предыдущим получим $x_m = 0,85$; $t_n = 2,8$; $\lambda_2 = 0,77$; $\lambda_1 = 0,77$; $\xi = 1,81$; $\omega_0 = 0,232$; $n = 0,42$.

Оценка качества материала *с точки зрения кинетики набора прочности* с использованием функционала $\Phi(S)$ дает балльную оценку $\Phi(S) = 6,36$.

Улучшение класса системы осуществляется с использованием направления **grad** Φ . Для рассматриваемого случая он является направляющим вектором нормали к линии уровня $\Phi(S) = 6,36$, проходящей через точку $M_0(1,81; 0,232)$ (рис.3.4):

$$\omega_0 - 0,232 = -5(\xi - 1,81).$$

Как следует из расположения линий уровня, для улучшения класса системы следует уменьшить ξ . Тогда, задав шаг $\Delta\xi$, найдем соответствующее изменение $\Delta\omega_0$ из условия, чтобы точка $M_1(\xi + \Delta\xi; \omega + \omega_0)$ лежала на нормали со стороны вектора **–grad** Φ .

Таким образом, для улучшения класса системы требуется на указанные величины уменьшить ξ и ω_0 .

Как показывают эксперименты по определению влияния молекулярных фракций суперпластификатора С-3 на кинетику набора прочности цемента, можно считать $\lambda_2 = \text{const}$.

При этом, как следует из

$$t_n = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_2},$$

в окрестности M_0 значение $t_n(\lambda_1) < 0$, то есть для уменьшения t_n следует увеличить λ_1 .

В частности, при $\Delta\xi = -0,1$ получим $M_1(1,71; 0,682)$. При этом $\Phi(M_1) = 2,46 < \Phi(M_0) = 6,36$ (качество материала в т. M_1 лучше, чем в т. M_0). При этом в т. M_1 : $\lambda_1 = 2,11$; $t_n = 1$ (соответствует использованию легкой фракции).

Таким образом, задача синтеза композиционного материала *с точки зрения получения оптимальных параметров кинетических процессов* с применением областей равных оценок решена полностью.

Свертывание критериев позволяет использовать указанную методику в случае многокритериальной оптимизации.

Решение рецептурно-технологических вопросов при разработке материала в большинстве случаев облегчит использование функций $\lambda_2 = \lambda_2(\omega_0, n)$; $\lambda_1 = \lambda_1(\omega_0, n)$; $r = r(\omega_0, n)$. Займемся их определением.

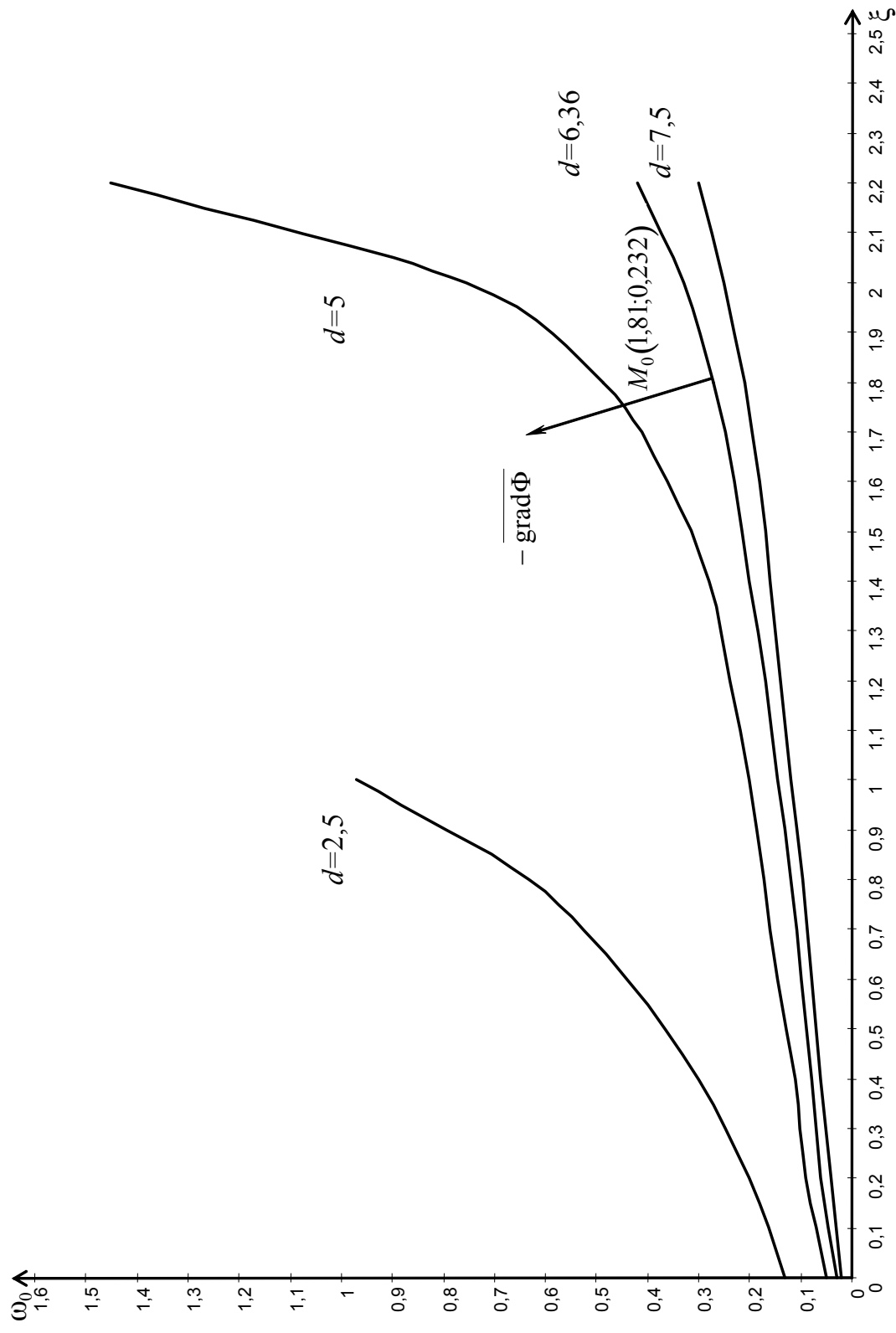


Рис. 3.4. Пример синтеза строительных материалов с использованием областей равных оценок

Линии уровня функции $\lambda_2(\omega_0, n)$ определяются уравнением

$$n - \sqrt{n^2 - \omega_0^2} = \lambda_2^{(0)} = \text{const}.$$

Имеем:

$$\sqrt{n^2 - \omega_0^2} = n - \lambda_2^{(0)},$$

откуда

$$n = \frac{\lambda_2^{(0)}}{2} + \frac{1}{2\lambda_2^{(0)}} \omega_0^2.$$

Вид линий уровня приводится на рис. 3.5.

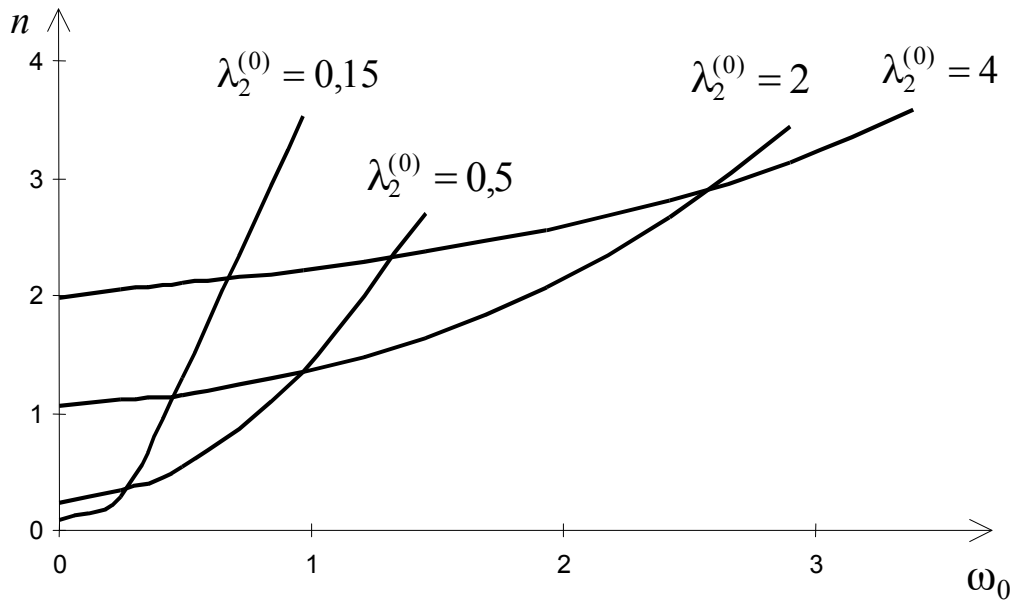


Рис. 3.5. Вид линий уровня $\lambda_2^{(0)} = \text{const}$

Таким образом, при движении вдоль параболы $n = \frac{\lambda_2^{(0)}}{2} + \frac{1}{2\lambda_2^{(0)}} \omega_0^2$ значение λ_2 постоянно и равно $\lambda_2^{(0)}$.

Рассмотрим две линии уровня $\lambda_2 = \lambda_2^{(1)} > 0$, $\lambda_2 = \lambda_2^{(2)} > 0$, $\lambda_2^{(2)} > \lambda_2^{(1)}$. Абсцисса их точки пересечения определяется уравнением

$$\frac{\lambda_2^{(1)}}{2} + \frac{1}{\lambda_2^{(1)}} \omega_0^2 = \frac{\lambda_2^{(2)}}{2} + \frac{1}{2\lambda_2^{(2)}} \omega_0^2.$$

Откуда

$$\omega_0^n = \sqrt{\lambda_2^{(1)} \cdot \lambda_2^{(2)}}.$$

При $\omega_0 = \sqrt{\lambda_2^{(1)} \cdot \lambda_2^{(2)}}$ линия уровня $n = \frac{\lambda_2^{(2)}}{2} + \frac{1}{2\lambda_2^{(2)}} \omega_0^2$ проходит выше линии уровня $n = \frac{\lambda_2^{(1)}}{2} + \frac{1}{2\lambda_2^{(1)}} \omega_0^2$, а при значениях $\omega_0 > \sqrt{\lambda_2^{(1)} \cdot \lambda_2^{(2)}}$ первая линия уровня проходит ниже второй (рис. 3.6).

Направление наискорейшего роста λ_2 совпадает с направлением $\text{grad } \lambda_2(\omega_0, n)$ и перпендикулярно направлению касательной к линии уровня в заданной точке.

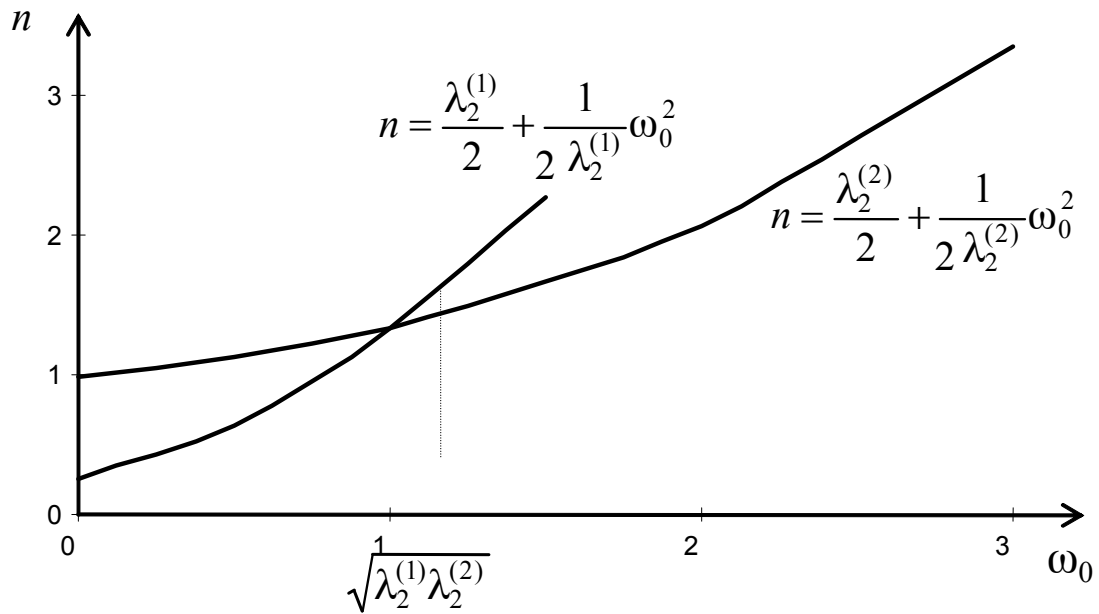


Рис. 3.6

Аналогично определим далее линии уровня функции $\lambda_1(\omega_0, n)$:

$$n = \frac{\lambda_1^{(0)}}{2} + \frac{1}{\lambda_1^{(0)}} \omega_0^2.$$

Линии уровня $r = r_0 = \text{const}$ определяются из условия

$$r = \left(\xi + \sqrt{\xi^2 - 1} \right)^2 = \left(\frac{n}{\omega_0} + \sqrt{\left(\frac{n}{\omega_0} \right)^2 - 1} \right)^2 = r_0.$$

Откуда искомая линия уровня:

$$n = \frac{1+r_0}{2 \cdot \sqrt{r_0}} \cdot \omega_0^2 \quad (\omega_0, n > 0, r > 1).$$

Пусть, например, при получении материала выбирается направление движения, обеспечивающее выполнение условия $\xi = \text{const}$. Тогда корни λ_1 , λ_2 и переменная r станут функциями лишь одной переменной ω_0 . При этом будем иметь:

$$\frac{d\lambda_1}{d\omega_0} = \xi + \sqrt{\xi^2 - 1};$$

$$\frac{d\lambda_2}{d\omega_0} = \xi - \sqrt{\xi^2 - 1},$$

то есть скорости изменения корней вдоль прямой $\xi = \text{const}$ постоянны при изменении ω_0 , а r равняется квадрату мгновенной скорости изменения $\lambda_1(\omega_0)$:

$$r = \left(\frac{d\lambda_1}{d\omega_0} \right)^2.$$

Соответствующие зависимости приводятся на рис. 3.7, 3.8, 3.9.

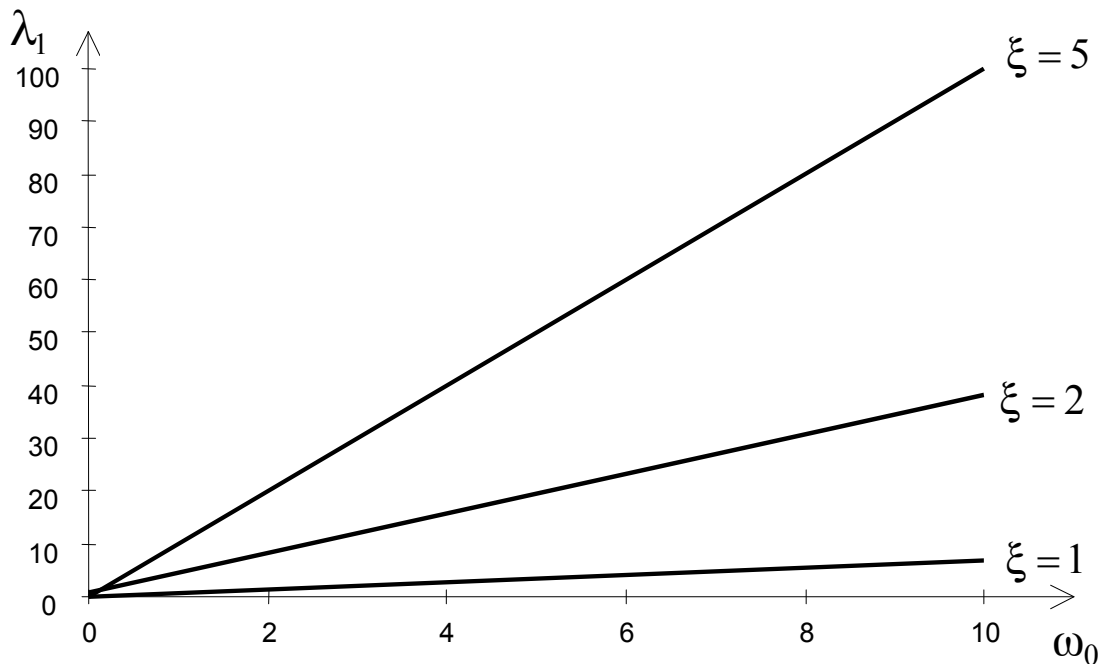


Рис. 3.7. Зависимость $\lambda_1 = \lambda_1(\omega_0, \xi)$

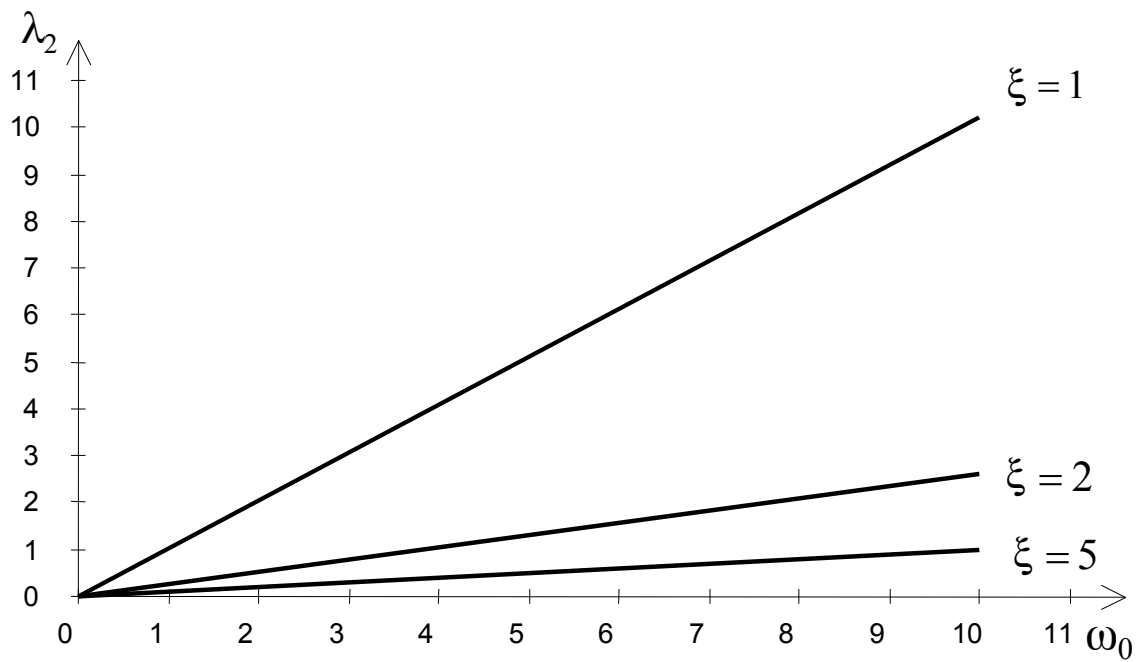


Рис. 3.8. Зависимость $\lambda_2 = \lambda_2(\omega_0, \xi)$

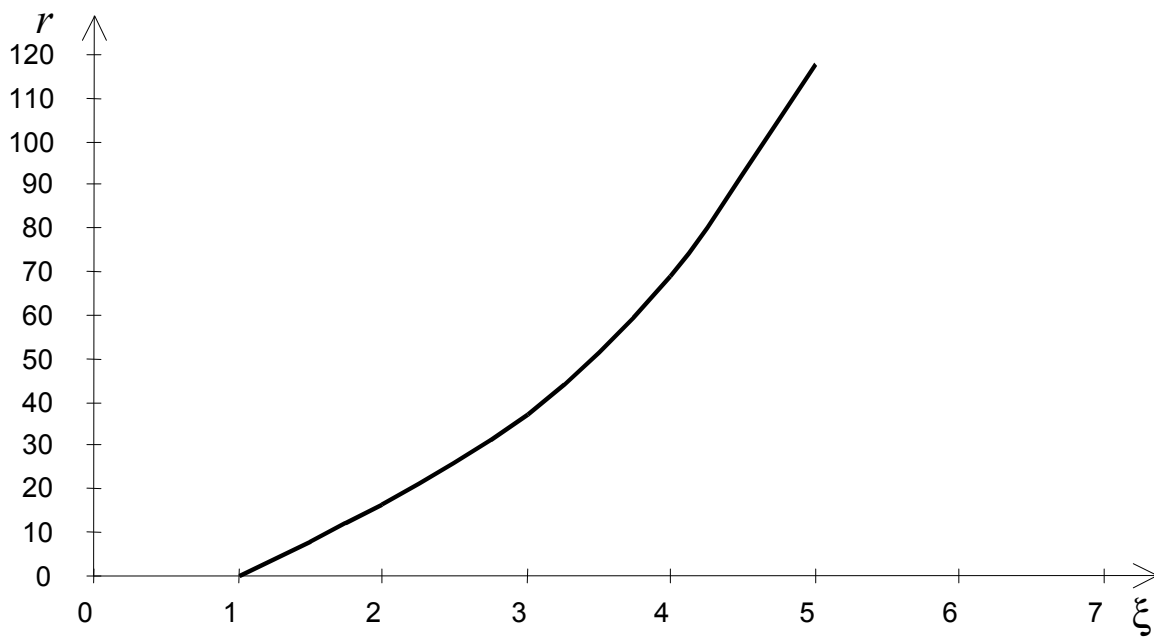


Рис. 3.9. Зависимость $r = r(\xi)$

При изменении ξ в 10 раз от 1 до 10 скорость изменения λ_2 уменьшается в 20 раз, а скорость изменения λ_1 увеличивается в 20 раз. Значение r увеличивается в 400 раз.

При увеличении $t = \arctg \xi$ от $\frac{\pi}{4}$ до $\frac{\pi}{2}$ ($\xi \in (1, \infty)$) λ_2 уменьшается, а λ_1 и r — увеличиваются.

Пусть исходная точка $M_0(\xi, \omega_0)$ находится между прямыми $\xi = \xi_1$ и $\xi = \xi_2$, $1 < \xi_1 < \xi_2$ (рис.3.10, 3.11), и пусть граница класса системы определяется линией уровня $\Phi(\xi, \omega_0) = d$. Тогда для улучшения класса системы следует точку M_1 взять в направлении $\overline{M_0N}$. При этом M_1 может находиться как левее, так и правее линии $\xi = \text{const}$ и $\Phi = \text{const}$, угол между касательными которых определится по

$$\cos \varphi = \frac{\frac{\partial \Phi}{\partial \xi}}{\sqrt{\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \omega_0}\right)^2}}.$$

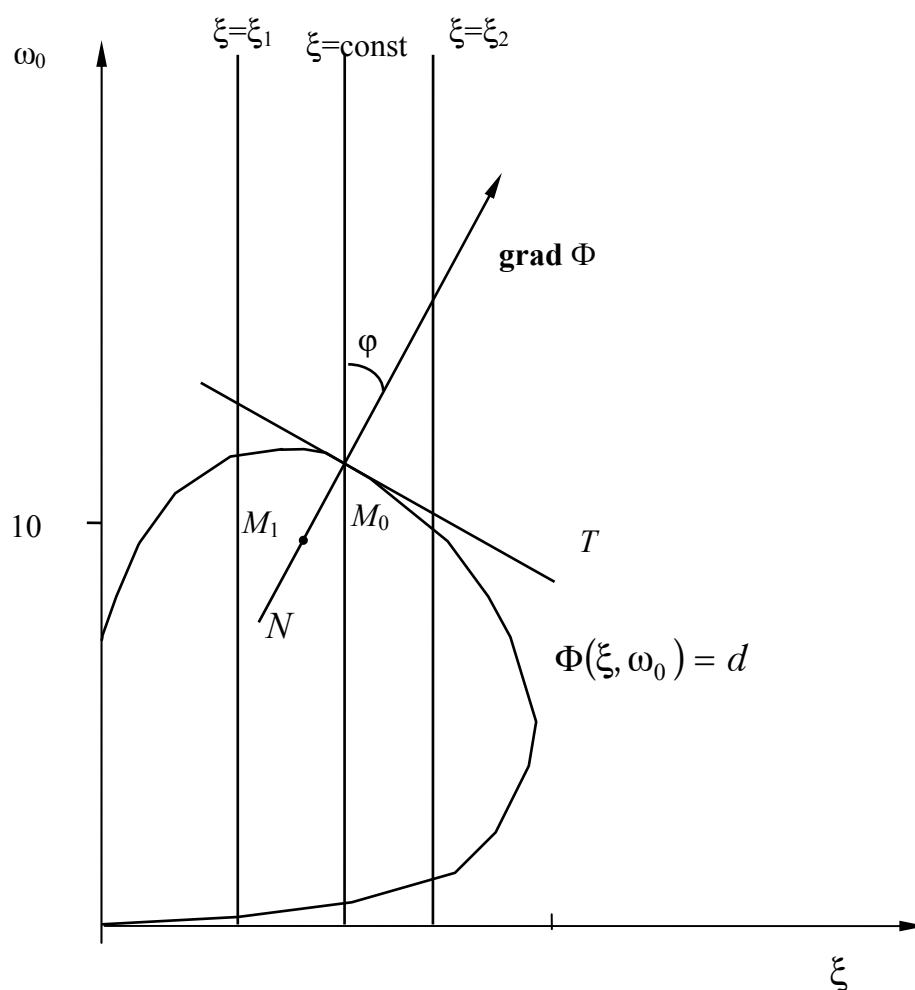


Рис. 3.10. Взаимное расположение областей равных оценок в плоскости $\xi 0 \omega_0$ и линий уровня $\xi = \text{const}$

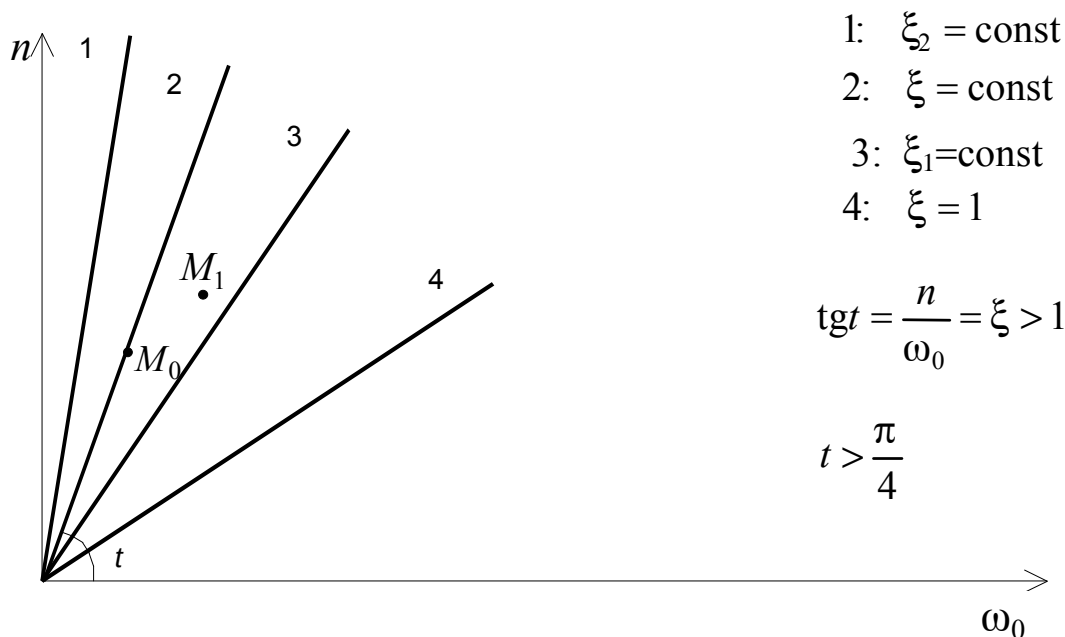


Рис. 3.11. Расположение M_1 относительно линий уровня $\xi = \text{const}$

Укажем *обобщение приведенных методов идентификации кинетических процессов и оценки качества материалов* на случай кинетических процессов более общего вида, описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями с постоянными коэффициентами более высокого порядка. Такое обобщение требуется, например, для случая кинетики набора прочности, имеющей не одну, а две точки перегиба. Здесь для оценки качества материала можно использовать функционал вида

$$\Phi(S) = f \lambda_m + a \frac{1}{\lambda_m} + b r + c \frac{1}{r},$$

$$\lambda_m = \min_i \{\lambda_i\}, \quad r = \max_i \left\{ \frac{\lambda_i}{\lambda_m} \right\},$$

где $(-\lambda_i)$ – корни характеристического полинома, $\lambda_i > 0$, $i = \overline{1, k}$;
 f, a, b, c – весовые константы.

3.1.1. Оптимизация структуры и свойств эпоксидных композитов повышенной плотности

Композиционные строительные материалы для защиты от радиации должны обладать некоторыми специфическими свойствами, высокой средней плотностью, наличием элементов с большими атомными номерами, отсутствием кристаллической решетки, минимальным содержанием элементов, образующих долгоживущие нуклиды и т.д.

Формирование структуры эпоксидных композитов повышенной плотности в определенной степени описывается полиструктурной теорией В.И. Соломатова. Сущность ее состоит в выделении в единой структуре взаимозависимых структур, прорастающих одна в другую («структура в структуре»). Оптимизация режимов формирования отдельных структур в полиструктуру и определяет рецептуру и технологию изготовления композитов.

В частности, полимерные композиционные материалы имеют сложную структуру. Они состоят из полидисперсных наполнителей, заполнителей и полимерных материалов с различными свойствами и могут иметь комплекс новых свойств, не присущих исходным материалам. Их микроструктура образуется при совмещении дисперсного наполнителя и вяжущего и в полимеррастворах выполняет роль связующего. Свойства микроструктуры определяются процессами, протекающими на границе раздела фаз, вязкостью связующего, активностью и дисперсностью наполнителя, степенью наполнения, наличием ПАВ и т.д. Макроструктура образуется при совмещении связующего и заполнителей. Свойства макроструктуры в значительной мере определяются степенью заполнения композиционного материала.

С учетом указанного оптимизация структуры композиционных материалов сводится к оптимизации полимерной матрицы и полифракционной смеси наполнителей и заполнителей с последующим их совмещением с целью получения композита с оптимальными, в принятом смысле, характеристиками.

При решении рецептурно-технологических и технико-экономических задач возможно применение предложенного метода в сочетании с полиномиальными моделями вида

$$\bar{Y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^k b_{ii} x_i^2 + \dots + \epsilon,$$

где b_0, b_i, b_{ij}, b_{ii} – определяются с использованием статистических методов планирования эксперимента;

ϵ – случайная величина, учитывающая совокупность ошибок эксперимента.

Ниже приводятся результаты апробации оптимизации структуры и свойств эпоксидных композитов с использованием областей равных оценок с точки зрения получения требуемых видов двух кинетических процессов, а именно, набора прочности и тепловыделения. На рис. 3.12, 3.13 приводятся указанные процессы для эпоксидных композитов повышенной плотности при различных П/Н и модификаторов. Соответствующие точки перегиба получены на основе экспериментального изучения пластично-вязких свойств эпоксидных композитов с использованием пластометра

КП-3 по методике, основанной на внедрении в смесь конуса, с последующим расчетом пластической прочности (рис. 3.12).

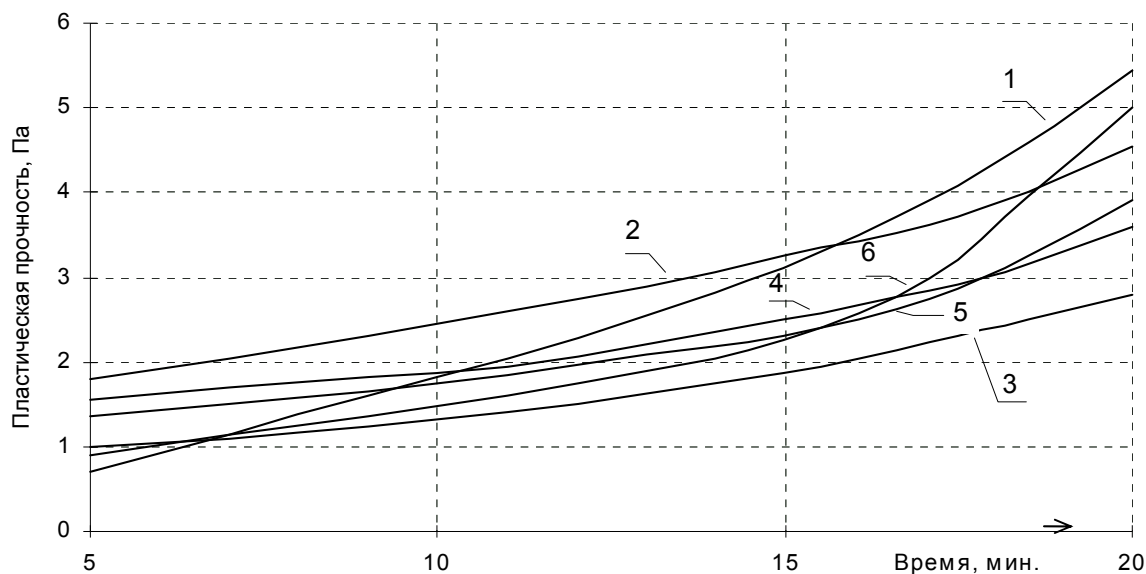


Рис. 3.12. Влияние степени наполнения и пластификаторов оптимальной концентрации на пластическую прочность ЭК повышенной плотности:
1 – П:Н=1:5; 2 – П:Н=1:20; 3 – П:Н=1:10 и ММ; 4 – П:Н=1:10;
5 – П:Н=1:18 и ММ, 6 – П:Н=1:15

В исходном эксперименте (рис. 3.13 кривая 1) применялась эпоксидная смола ЭД-16, отверждаемая ПЭПА 15 % от массы смолы. Остальные кривые на рис. 3.12, 3.13 с возрастающими номерами соответствуют последовательному синтезу композитов с использованием областей равных оценок качества материала на основе разработанного функционала $\Phi(S)$. Композитам с оптимальными характеристиками соответствуют кривые 5 на этих рисунках со следующими значениями параметров моделей:

$\lambda_1 = 2,45 \cdot 10^5$; $\lambda_2 = 0,7$; $x_0 = 0$; $\dot{x}_0 = 0$ – для набора прочности,

$\lambda_1 = 0,03$; $\lambda_2 = 0,0149$; $x_0 = 40$; $\dot{x}_0 = 0,81$ – для процесса тепловыделения.

В соответствии с предыдущим кинетические процессы набора прочности имеют вид

$$x = \frac{x_m}{\lambda_1 - \lambda_2} (\lambda_2 e^{-\lambda_1 t} - \lambda_1 e^{-\lambda_2 t} + x_m),$$

значения параметров кинетических процессов, приведенных на рис. 3.13, приводятся в табл. 3.1.

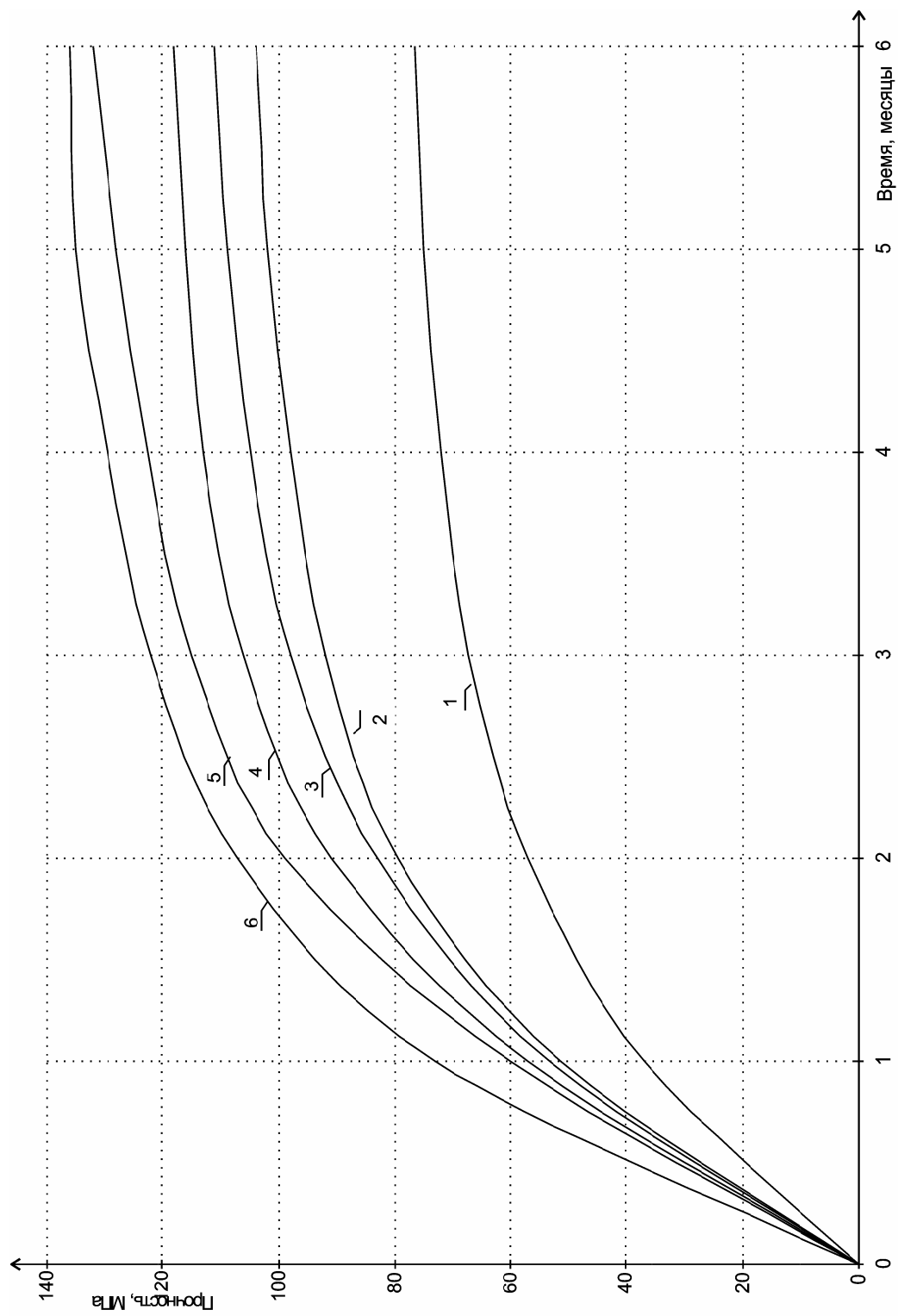


Рис. 3.13. Влияние степени наполнения и пластификаторов оптимальной концентрации на кинетику набора прочности ЭП повышенной плотности:
 1 – П:Н=1:5; 2 – П:Н=1:20; 3 – П:Н=1:10; 4 – П:Н=1:10 и ММ; 5 – П:Н=1:15; 6 – П:Н=1:18 и ММ

Т а б л и ц а 3 . 1

Значения параметров кинетических процессов набора прочности,
приводимых на рис. 3.13

№	x_m	t_n	λ_2	$v=\lambda_2 t_n$	r	λ_1	ξ	ω_0	n	$\Phi(S)$
1	75	$4,17 \cdot 10^{-4}$	0,7	$2,9 \cdot 10^{-4}$	$3,51 \cdot 10^5$	$2,45 \cdot 10^5$	295	414	$1,22 \cdot 10^5$	$8,77 \cdot 10^4$
2	103	$4,04 \cdot 10^{-4}$	0,73	$2,95 \cdot 10^{-4}$	$3,42 \cdot 10^5$	$2,5 \cdot 10^5$	293	426	$1,25 \cdot 10^5$	$8,55 \cdot 10^4$
3	110	$4,08 \cdot 10^{-4}$	0,74	$3,02 \cdot 10^{-4}$	$3,3 \cdot 10^5$	$2,44 \cdot 10^5$	286	426	$1,22 \cdot 10^5$	$8,25 \cdot 10^4$
4	118	$4,06 \cdot 10^{-4}$	0,75	$3,05 \cdot 10^{-4}$	$3,25 \cdot 10^5$	$2,44 \cdot 10^5$	285	427	$1,22 \cdot 10^5$	$8,12 \cdot 10^4$
5	128	$3,99 \cdot 10^{-4}$	0,77	$3,08 \cdot 10^{-4}$	$3,2 \cdot 10^5$	$2,46 \cdot 10^5$	282	435	$1,22 \cdot 10^5$	$8,00 \cdot 10^4$
6	135	$4,00 \cdot 10^{-4}$	0,8	$3,2 \cdot 10^{-4}$	$3,01 \cdot 10^5$	$2,41 \cdot 10^5$	275	438	$1,20 \cdot 10^5$	$7,52 \cdot 10^4$

Как видим, во всех случаях t_n мало, мало и v , в связи с чем r принимает большие значения, так что из $r = \frac{\lambda_1}{\lambda_2}$ следует $\lambda_1 \gg \lambda_2$.

Справедливо

$$\frac{x_m}{\lambda_1 - \lambda_2} \approx \frac{x_m}{\lambda_1}.$$

При рассматриваемых значениях t

$$e^{-\lambda_1 t} \ll e^{-\lambda_2 t};$$

$$\lambda_2 e^{-\lambda_1 t} - \lambda_1 e^{-\lambda_2 t} \approx -\lambda_1 e^{-\lambda_2 t}.$$

Откуда

$$x \approx \frac{x_m}{\lambda_1} (-\lambda_1 e^{-\lambda_2 t}) + x_m = x_m (1 - e^{-\lambda_2 t}).$$

Что касается функционала, используемого для оценки качества строительных материалов с точки зрения оптимизации параметров кинетических процессов, то в данном случае определяющим параметром будет единственный параметр $\lambda_2 = \lambda$. При этом справедливо $\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \gg \lambda_2$, $\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \approx 0$,

$\lambda_2 \approx 0$, $\frac{1}{\lambda_2}$ достаточно велико, так что

$$\Phi(S) = a \frac{1}{\lambda_2} + b \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{a + b\lambda_1}{\lambda_2}.$$

Учитывая $b\lambda_1 \gg a$, получим

$$\Phi(S) \approx b \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = br.$$

Границы областей равных оценок (в плоскости $\Phi 0r$) будут определяться значениями r и будут представлять собой прямые, выходящие из начала координат (заметим, $r \geq 1$).

Имеем

$$\Phi(S) = b \left(\xi + \sqrt{\xi^2 - 1} \right)^2.$$

Таким образом, для улучшения класса системы следует двигаться в сторону уменьшения ξ , что хорошо согласуется с приведенным ранее.

Установим взаимное расположение кривых $x(t)$ в зависимости от λ_2 и x_m .

Имеем

$$x(t) = x_m - x_m e^{-\lambda_2 t},$$

$$\frac{\partial x}{\partial \lambda_2} = x_m t e^{-\lambda_2 t} > 0, \quad \forall t \geq 0,$$

$$\frac{\partial x}{\partial x_m} = 1 - e^{-\lambda_2 t}.$$

Отсюда следует, $x(\lambda_2, t)$ возрастает с ростом λ_2 (рис. 3.14).

Из $\frac{\partial x}{\partial x_m} > 0$ следует $e^{-\lambda_2 t} < 1$. Откуда $-\lambda_2 t < 0, \quad \forall t > 0$ (рис. 3.15).

Из $\frac{\partial x}{\partial \lambda_2} < 0$ следует $e^{-\lambda_2 t} > 1$ или $t < 0$ ($\lambda_2 > 0!$). Таким образом, этот

случай не имеет места.

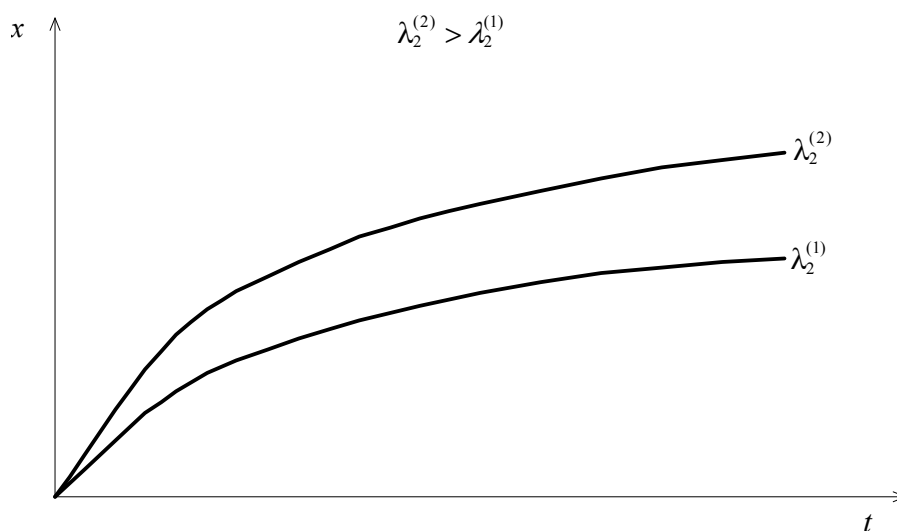


Рис. 3.14. Взаимное расположение графиков кинетических процессов для различных λ_2

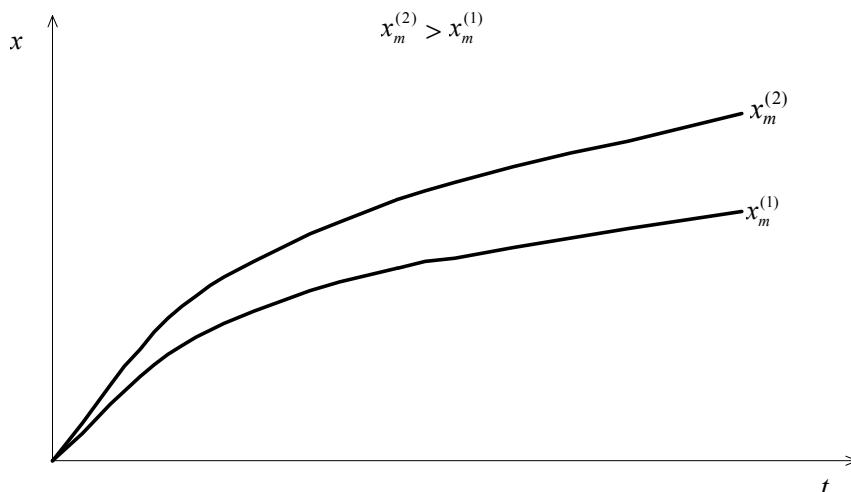


Рис. 3.15. Взаимное расположение графиков кинетических процессов для различных x_m

Из изложенного выше следует, что увеличения эксплуатационного значения прочности можно достичь увеличением λ_2 . При увеличении λ_2 уменьшается r , стало быть уменьшается $\Phi(S)$. То есть качество строительного материала улучшается. При этом пластическая прочность определяется в силу предыдущего значением t_n .

При обработке экспериментальных данных λ_2 определялась по формуле

$$\lambda = \frac{1}{t} \ln \frac{x_m}{x_m - x(t)}, \quad \forall t > 0 \quad (3.3)$$

Действительно,

$$x(t) = x_m (1 - e^{-\lambda t});$$

$$\ln(x_m - x(t)) = \ln x_m - \lambda t;$$

$$\ln \frac{x_m}{x_m - x(t)} = \lambda t.$$

Откуда и следует (3.3).

Из предыдущего следует

$$r = 1,1376 v^{-1,5518};$$

$$\lambda_1 = \lambda_2 r;$$

$$\omega_0 = \lambda_2 \sqrt{r};$$

$$\xi = \sqrt{\left(\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2\omega_0}\right)^2 + 1};$$

$$n = \xi\omega_0;$$

$$\Phi(S) \approx \frac{1}{4}r.$$

Приведенные на рис. 3.13 экспериментальные зависимости подтверждают правильность предложенной методики синтеза на основе областей равных оценок в соответствии с разработанным функционалом качества строительных материалов.

Рассмотрим далее оптимизацию кинетического процесса тепловыделения в эпоксидных композитах.

Процесс полимеризации эпоксидных композитов сопровождается тепловыделением. Кинетический процесс тепловыделения имеет вид, приведенный на рис.3.16 (кривая 2).

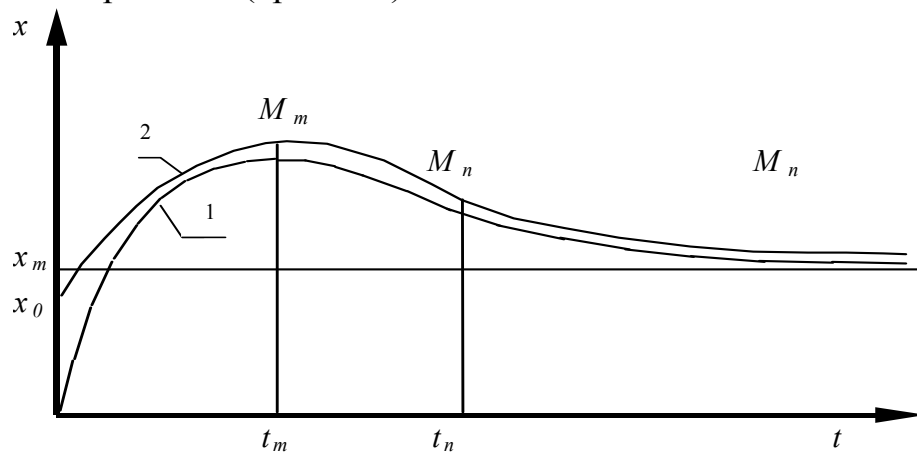


Рис.3.16

Приведем ряд соотношений, существенно облегчающих параметрическую идентификацию. Часть их совпадает с аналогичными соотношениями, для процесса, приведенного на рис. 3.16 (кривая 1).

Кинетический процесс тепловыделения представим в виде:

$$x(t) = c_1 e^{-\lambda_1 t} + c_2 e^{-\lambda_2 t} + x_m,$$

который является решением задачи Коши для дифференциального уравнения второго порядка.

Постоянные интегрирования связаны соотношениями:

$$c_1 + c_2 = x(0) - x_m;$$

$$\lambda_1 c_1 + \lambda_2 c_2 = -\dot{x}(0).$$

Справедливо

$$\dot{x}(t_m) = 0 = -c_1\lambda_1 e^{-\lambda_1 t_m} - c_2\lambda_2 e^{-\lambda_2 t_m};$$

$$-c_1\lambda_1 e^{-\lambda_1 t_m} = c_2\lambda_2 e^{-\lambda_2 t_m};$$

$$-\frac{c_1\lambda_1}{c_2\lambda_2} e^{-\lambda_1 t_m} = e^{-\lambda_2 t_m};$$

$$-\frac{c_1\lambda_1}{c_2\lambda_2} = e^{(\lambda_1 - \lambda_2)t_m};$$

$$(\lambda_1 - \lambda_2)t_m = \ln \left[\left(-\frac{c_1}{c_2} \right) \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right].$$

Откуда

$$t_m = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \left[\left(-\frac{c_1}{c_2} \right) \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right],$$

$$\lambda_1 > \lambda_2, \quad \frac{\lambda_1}{\lambda_2} > 1, \quad \left(-\frac{c_1}{c_2} \right) > 0.$$

Далее

$$\ddot{x}(t_n) = 0 = c_1\lambda_1^2 e^{-\lambda_1 t_n} + c_2\lambda_2^2 e^{-\lambda_2 t_n};$$

$$c_1\lambda_1^2 e^{-\lambda_1 t_n} = -c_2\lambda_2^2 e^{-\lambda_2 t_n};$$

$$-\frac{c_1\lambda_1^2}{c_2\lambda_2^2} = e^{(\lambda_1 - \lambda_2)t_n};$$

$$(\lambda_1 - \lambda_2)t_n = \ln \left[\left(-\frac{c_1}{c_2} \right) \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right] = \ln \left[\left(-\frac{c_1}{c_2} \right) \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right] + \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_2}.$$

Откуда

$$t_n = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \ln \left[\left(-\frac{c_1}{c_2} \right) \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right] + \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_2}.$$

Так что, как и для процесса на рис. 3.16, справедлива следующая связь между t_m и t_n :

$$t_n = t_m + \delta,$$

где

$$\delta = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_2}.$$

Полученное уравнение относительно λ_1 (при заданных λ_2 и δ) имеет решение при $\lambda_2 \cdot \delta < 1$.

Так же справедливо

$$t_m = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \ln \left(-\frac{c_1}{c_2} \right) + \delta,$$

$$t_n = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \ln \left(-\frac{c_1}{c_2} \right) + 2\delta.$$

В конце переходного процесса (рис. 3.17)

$$x(t) \approx c_2 e^{-\lambda_2 t} = y(t).$$

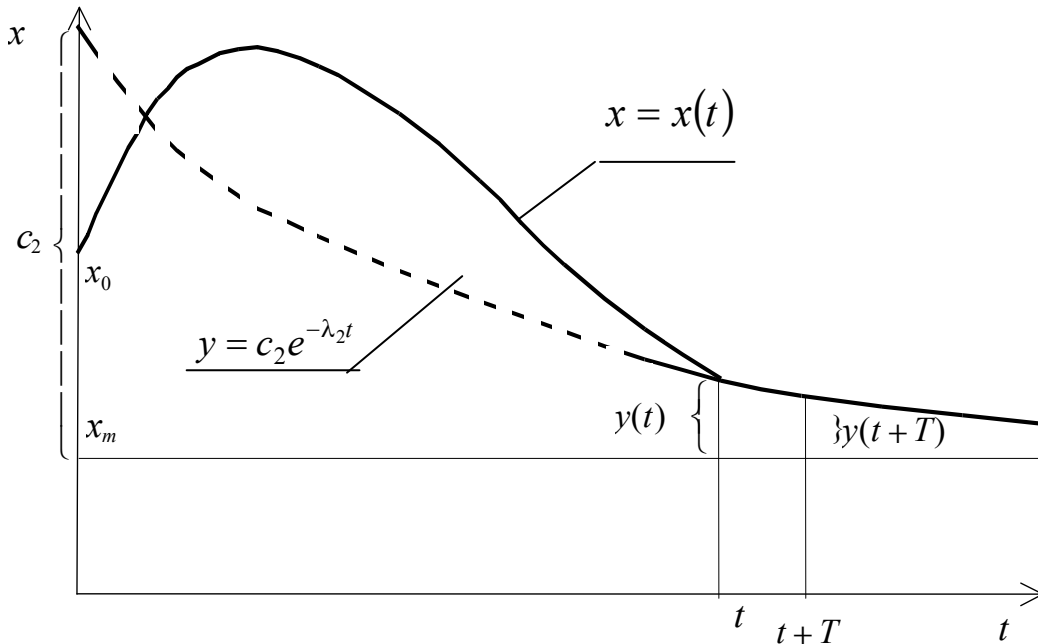


Рис. 3.17. Определение λ_2 по концу кинетического процесса

Имеем

$$\frac{\ln y(t)}{\ln y(t+T)} = \frac{c_2 e^{-\lambda_2 t}}{c_2 e^{-\lambda_2 t - \lambda_2 T}} = e^{\lambda_2 T}.$$

Откуда для приближенного определения λ_2 получим следующую формулу:

$$\lambda_2 = \frac{1}{T} \ln \frac{y(t)}{y(t+T)}.$$

Задавая различные значения T , будем получать соответствующие значения λ_2 . Усреднив, получим более точное значение λ_2 .

Из

$$c_2 e^{\lambda_2 t} = y(t)$$

получим

$$\ln c_2 = \ln y + \lambda_2 t,$$

$$c_2 = e^{\ln y + \lambda_2 t}.$$

Усреднение значений c_2 , вычисленных при различных значениях t , даст возможность определить более точно значение c_2 , $c_2 > 0$, $x(0) - x_m < c_2$.

Тогда значение постоянной c_1 определится в виде

$$c_1 = (x(0) - x_m) - c_2, \quad c_1 < 0,$$

а значение λ_1 определится как корень уравнения

$$\delta = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_2}$$

(δ и λ_2 уже определены).

Из начального условия определится

$$\dot{x}(0) = -c_1 \lambda_1 - c_2 \lambda_2.$$

Вышеприведенное позволяет получить аналитическое выражение кинетического процесса.

На рис. 3.18 (кривая 1) приводится кинетический процесс тепловыделения при полимеризации ненаполненной смолы ЭД-16, отвержденной ПЭПА в количестве 15 % от массы смолы, кривая 2 соответствует саморазогреву смеси при степени наполнения П/Н=1/5 (в качестве наполнителя и заполнителя использовалась двухфракционная смесь стекла ТФ-110).

Здесь определяющими параметрами процесса являются $\lambda_1, \lambda_2, x_0, \dot{x}_0, \dots, x_m$.

Максимальная температура $x(t_m)$ саморазогрева смесей при полимеризации, как следует из предыдущего, равно как и значение $x(t_n)$, в наибольшей степени определяется величинами λ_1 и λ_2 . Это позволяет оптимизацию состава эпоксидных композитов проводить с использованием приведенного ранее функционала качества.

Кривой 2 соответствует значение функционала

$$\Phi(S) = \frac{1}{4} \left(0,0156 + \frac{1}{0,0156} + \frac{0,15}{0,0156} + \frac{0,0156}{0,15} \right) = 18,45.$$

При этом $\omega_0 = 0,0484, \xi = 1,71, n = 0,0828$.

На рис. 3.19 приводятся границы областей равных оценок, соответствующих значениям 18,45 и 18,29.

Как видим, для улучшения кинетического процесса следует уменьшить ξ . Увеличение чувствительности функционала легко осуществляется выбором весовых констант.

В результате использования указанной методики последовательно получены процессы 3, 4, 5 (рис. 3.18).

Кривая 5 соответствует эпоксидному композиту с оптимальными характеристиками.

Параметры, приведенных на рис. 3.18 процессов, приведены в табл. 3.2. Как видно, наибольшие изменения претерпевают в процессе синтеза значения начальных скоростей $\dot{x}_0$ (они то и определяют начальную скорость полимеризации).

Т а б л и ц а 3 . 2

Значения параметров кинетических процессов тепловыделения,
приводимых на рис. 3.18

№ п/п	Кинетические процессы	$\dot{x}_0$	ω_0	n	ξ	$\Phi(S)$	$\Phi_0(S)$
1	$x(t) = -175e^{-0,166t} + 190e^{-0,016t} + 25$	26	0,515	1,81	18,46	18,46	15,21
2	$x(t) = -122e^{-0,15t} + 137e^{-0,0156t} + 25$	16	0,0484	1,71	18,5	18,45	9,32
3	$x(t) = -111e^{-0,038t} + 126e^{-0,015t} + 25$	2,38	0,0239	1,11	17,4	17,4	7,8
4	$x(t) = -83e^{-0,031t} + 98e^{-0,015t} + 25$	1,1	0,0216	1,07	1,11	17,31	7,53
5	$x(t) = -71e^{-0,03t} + 96e^{-0,0149t} + 25$	0,85	0,0212	1,06	1,07	17,29	7,52

Однако использование указанного функционала затрудняется сложностями геометрической иллюстрации областей равных оценок (вместо двух переменных ξ , ω_0 или n_0 , ω_0 будет три – добавится $\dot{x}_0$).

Как известно, решение оптимизационной задачи может основываться на использовании различных моделей, единственным требованием к которым является адекватное описание рассматриваемых процессов. Естественно, чем проще такая модель, тем легче ее использовать. Весьма желательно, чтобы параметры модели имели простой физический смысл, а также обладали простотой прогноза структуры и свойств композиционного материала (при определенных изменениях параметров модели) на основе некоторых количественных критериев.

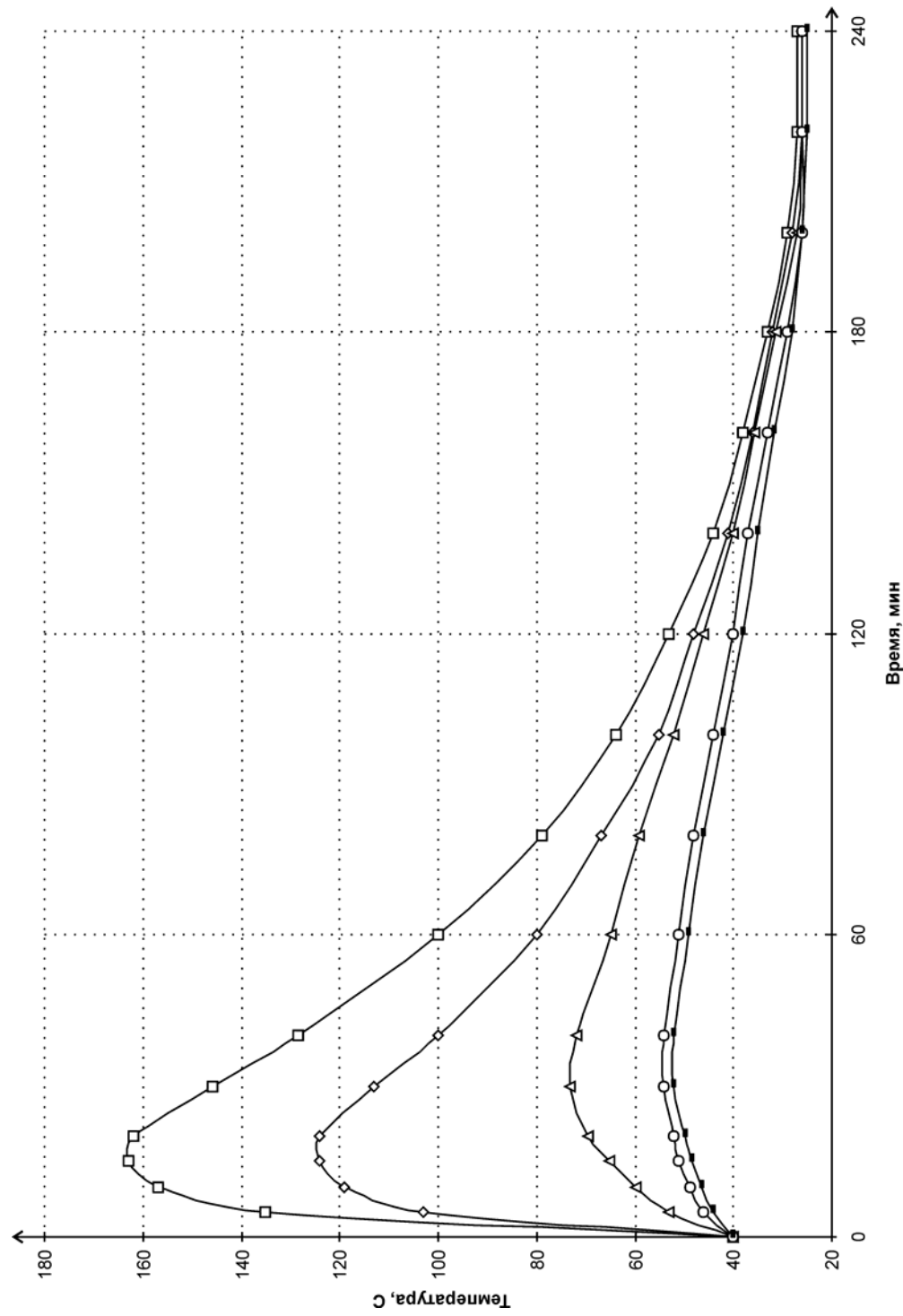


Рис. 3.18. Влияние степени наполнения (П:Н) на температуру саморазогрева смесей при полимеризации немодифицированных ЭК:
 1 – не наполненная смола; 2 – П:Н=1:5; 3 – П:Н=1:10; 4 – П:Н=1:15; 5 – П:Н=1:20

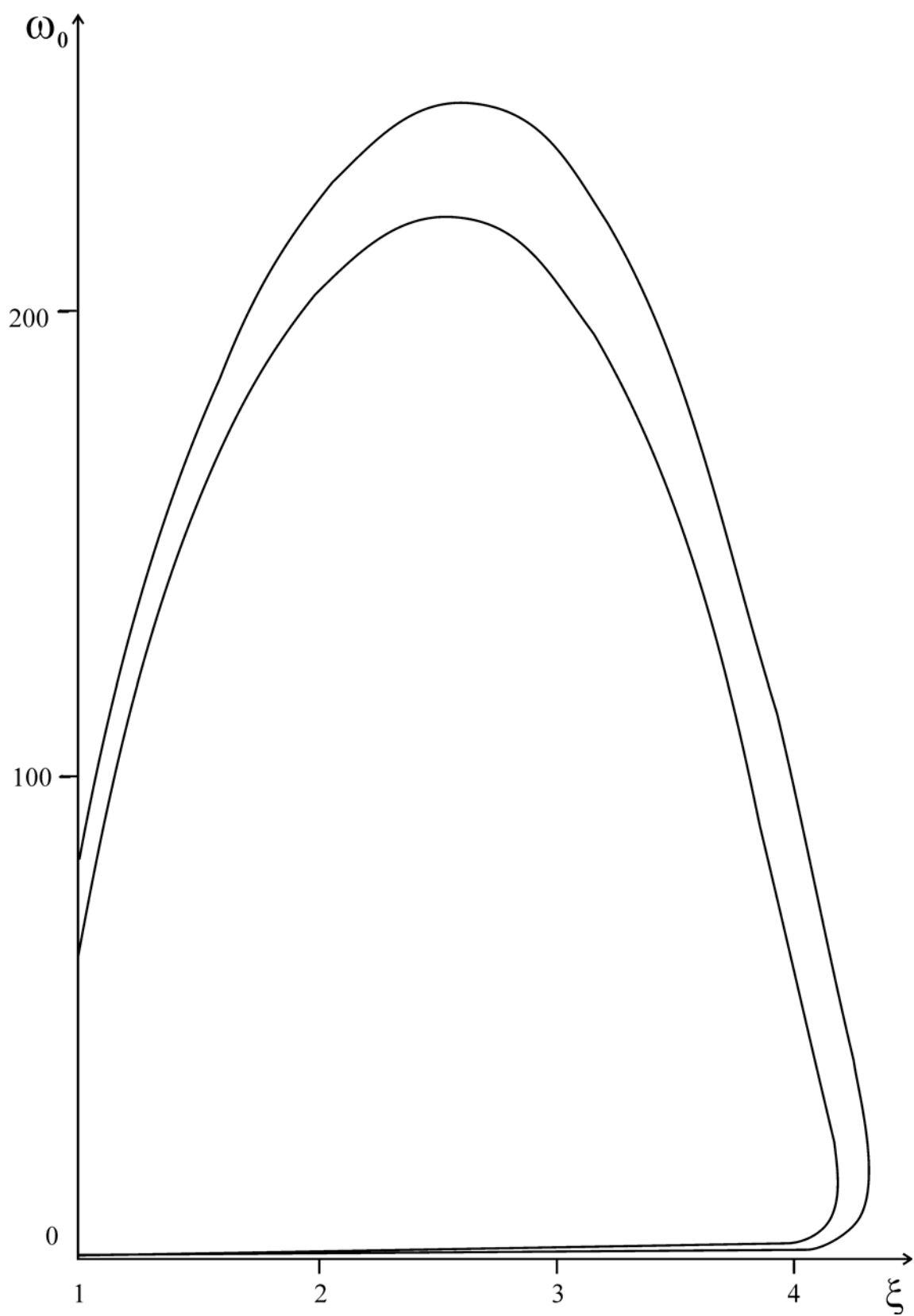


Рис. 3.19

Разработанный метод оптимизации структуры и свойств композиционных материалов на основе областей равных оценок удовлетворяет всем указанным требованиям:

1. Адекватность модели легко проверяется на основе сравнения решений соответствующих задач Коши с реальными кинетическими процессами.

2. Предложенные различные совокупности параметров модели, между которыми имеется взаимно-однозначное соответствие (например, триады (t_n, x_m, λ_2) , $(\lambda_1, \lambda_2, x_m)$, (ω_0, n, x_m) и т.д.), позволяют установить структуру и свойства композиционных материалов.

3. Предложенный функционал качества является количественной характеристикой качества материала с точки зрения получения необходимых параметров кинетического процесса. Отметим, как положительный момент, возможность использования предложенного функционала при сертификации композиционных материалов в указанном выше смысле.

4. Области равных оценок позволяют прогнозировать качество материала при соответствующем изменении параметров модели. При этом антиградиентное направление движения является направлением наискорейшего улучшения качества материала.

3.1.2. Определение весовых констант в функционале качества

Рассмотрим далее решение задачи *определения весовых констант* на примере синтеза экологически чистых радиационно-защитных композиционных материалов нового поколения с регулируемыми параметрами структуры.

Как и в любых задачах оптимизации наиболее трудной задачей является определение весовых констант. Здесь они находятся на основе экспериментально полученных кинетических процессов с *приемлемыми* характеристиками (рис. 3.12) и соответствующими им параметрами (табл. 3.3).

Для рассматриваемых здесь материалов кинетические процессы описываются дифференциальным уравнением второго порядка.

Границы областей D_k определяются как линии уровня $\Phi = \Phi(\xi, \omega_0) = d_k = \text{const}$.

Для процессов с приемлемыми характеристиками (табл. 3.3) должны выполняться условия:

$$\lambda_{2i}f + \frac{1}{\lambda_{2i}}a + r_i b + \frac{1}{r_i}c < d_p, \quad i = \overline{1, 6},$$

что при

$$0,1(f + a + b + c) = 1$$

справедливо при $d_p \geq 8,5$ и значениях весовых констант

$$f = 6, a = 3, b = 0, c = 1.$$

При полученных значениях весовых констант строятся области равных оценок, соответствующие различным классам. А именно, условие $\Phi(S) = d_k$ дает:

$$f\lambda_2 + a\frac{1}{\lambda_2} + br + c\frac{1}{r} - d_k = 0.$$

Т а б л и ц а 3.3

Параметры кинетических процессов набора прочности,
приведенных на рис. 3.12

№ п/п	λ_1	λ_2	ξ	x_m	t_n
1	$2,45 \cdot 10^5$	0,69	295	75	$4,17 \cdot 10^{-4}$
2	$2,5 \cdot 10^5$	0,72	293	103	$4,04 \cdot 10^{-4}$
3	$2,44 \cdot 10^5$	0,73	286	110	$4,08 \cdot 10^{-4}$
4	$2,44 \cdot 10^5$	0,74	285	118	$4,06 \cdot 10^{-4}$
5	$2,46 \cdot 10^5$	0,75	282	128	$3,99 \cdot 10^{-4}$
6	$2,41 \cdot 10^5$	0,75	275	135	$4,00 \cdot 10^{-4}$

Откуда с учетом $\lambda_1 = k_1 \cdot \omega_0$, $\lambda_2 = k_2 \cdot \omega_0$ получим:

$$\omega_0^2 - \left(\frac{d - \frac{ck_2}{k_1}}{fk_2} \right) \cdot \omega_0 + \frac{a}{fk_2^2} = 0.$$

Границы областей определяются кривыми:

$$\omega_{01,k} = \omega_{01,k}(\xi, d_k);$$

$$\omega_{02,k} = \omega_{02,k}(\xi, d_k);$$

$$k = \overline{1, N}.$$

Соответствующие различным классам значения $\omega_{01}(\xi)$ и $\omega_{02}(\xi)$ приводятся в табл. 3.4, 3.5, а построенные по этим значениям области D_k – соответственно на рис. 3.20, 3.21. Значения, выделенные темной заливкой, соответствуют области D_p с приемлемыми характеристиками кинетических процессов; более светлой – с худшими характеристиками в рассматриваемом диапазоне безразмерных коэффициентов демпфирования ξ .

Т а б л и ц а 3 . 4

ξ	$d=8,5$		$d=9$		$d=10$	
	ω_{10}	ω_{20}	ω_{10}	ω_{20}	ω_{10}	ω_{20}
1	-	-	-	-	0,5	1
10	13,37006	14,88391	9,983305	19,93315	7,831547	25,40989
20	26,68373	29,94333	19,99166	39,96664	15,68703	50,93377
30	40,01123	44,96238	29,99444	59,97777	23,53718	76,43225
40	53,34172	59,97182	39,99583	79,98333	31,386	101,9244
50	66,67336	74,97747	49,99667	99,98667	39,2343	127,414
60	80,00557	89,98123	59,99722	119,9889	47,08232	152,9024
70	93,3381	104,9839	69,99762	139,9905	54,9302	178,39
80	106,6708	119,9859	79,99792	159,9917	62,77798	203,8772
90	120,0037	134,9875	89,99815	179,9926	70,62569	229,3641
100	133,3367	149,9887	99,99833	199,9933	78,47337	254,8508

Т а б л и ц а 3 . 5

ξ	$d_p = 8,5$		$d_k = 9$		$d_k = 10$	
	ω_{01}	ω_{02}	ω_{01}	ω_{02}	ω_{01}	ω_{02}
1					0,5	1
25	33,34687	37,45479	24,99333	49,97332	19,61237	63,68428
50	66,67336	74,97747	49,99667	99,98667	39,2343	127,414
75	100,0045	112,485	74,99778	149,9911	58,8541	191,1337
100	133,3367	149,9887	99,99833	199,9933	78,47337	254,8508
200	266,6683	299,9944	199,9992	399,9967	156,9491	509,713
250	333,3347	374,9955	249,9993	499,9973	196,1868	637,1429
260	346,6679	389,9957	259,9994	519,9974	204,0343	662,6289
270	360,0012	404,9958	269,9994	539,9975	211,8818	688,1148
280	373,3345	419,996	279,9994	559,9976	219,7293	713,6008
290	386,6678	434,9961	289,9994	579,9977	227,5768	739,0867
300	400,0011	449,9962	299,9994	599,9978	235,4243	764,5726
310	413,3344	464,9964	309,9995	619,9978	243,2719	790,0585
320	426,6677	479,9965	319,9995	639,9979	251,1194	815,5444
330	440,001	494,9966	329,9995	659,998	258,9669	841,0303
340	453,3343	509,9967	339,9995	679,998	266,8144	866,5163
350	466,6676	524,9968	349,9995	699,9981	274,6619	892,0022
360	480,0009	539,9969	359,9995	719,9981	282,5094	917,4881
400	533,3342	599,9972	399,9996	799,9983	313,8994	1019,432
500	666,6673	749,9977	499,9997	999,9987	392,3745	1274,29
600	800,0006	899,9981	599,9997	1199,999	470,8495	1529,149

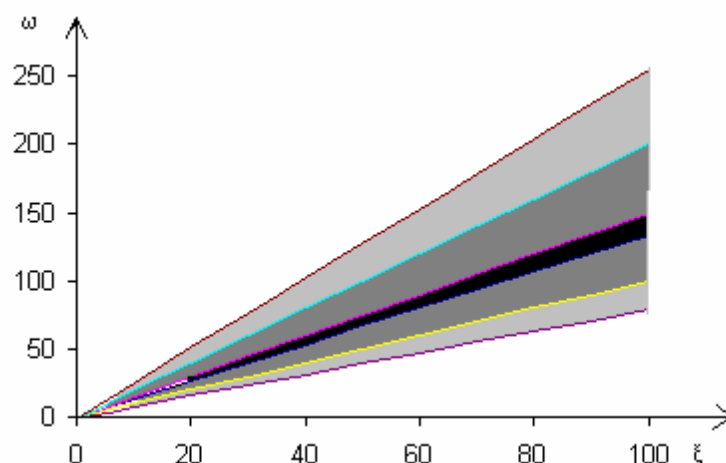


Рис. 3.20. Области равных оценок качества материала при $1 \leq \xi \leq 100$; $d_1 = 8,5$; $d_2 = 9$; $d_3 = 10$ ($f = 6$, $a = 3$, $b = 0$, $c = 1$)

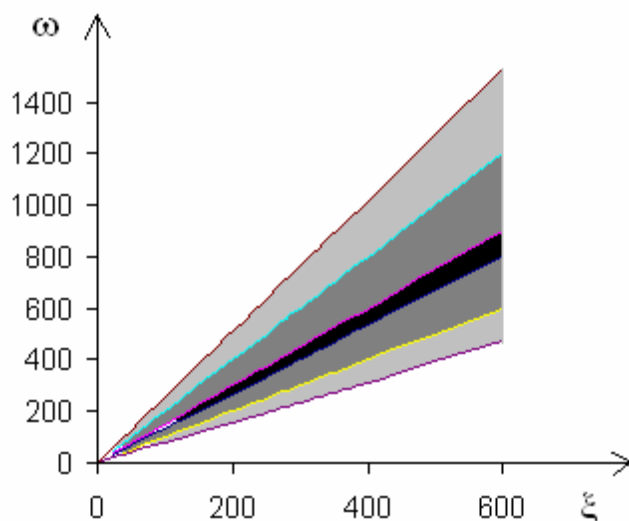


Рис. 3.21. Области равных оценок качества материала при $1 \leq \xi \leq 600$; $d_1 = 8,5$; $d_2 = 9$; $d_3 = 10$ ($f = 6$, $a = 3$, $b = 0$, $c = 1$)

Для областей G_k , ограниченных линиями уровня, справедливо $G_1 \subset G_2 \subset \dots \subset G_N$.

Материал с *оптимальными* параметрами ξ и ω_0 определится на основе решения задачи нелинейного программирования при целевой функции

$$\Phi(\xi, \omega_0) = 6(\xi - \sqrt{\xi^2 - 1}) \cdot \omega_0 + 3 \frac{1}{(\xi - \sqrt{\xi^2 - 1}) \cdot \omega_0} + \frac{\xi - \sqrt{\xi^2 - 1}}{\xi + \sqrt{\xi^2 - 1}}$$

и ограничении

$$\Phi(\xi, \omega_0) \leq 8,5.$$

Решение задачи можно осуществить и с использованием численных градиентных методов: наискорейший переход из класса D_{i-1} в класс D_i (равно как и внутри класса) осуществляется, двигаясь в направлении,

противоположном направлении вектора-градиента (перпендикулярном линии уровня $\Phi(S) = d = \text{const}$, где d соответствует точке $M = M(\xi, \omega_0)$ с параметрами материала ξ и ω_0).

Результаты исследований подтвердили целесообразность и эффективность их использования при синтезе экологически чистых радиационно-защитных композиционных материалов нового поколения с регулируемыми параметрами структуры с плотностью до 4500 кг/м^3 .

3.2. Многокритериальная оптимизация.

Управление качеством

Наибольшая трудность синтеза сложных систем (в том числе композиционных материалов) связана со сложной иерархической структурой их критериев качества, которая приводит к необходимости решения задачи многокритериальной оптимизации для управления характеристиками материала как сложной системы в условиях неопределенностей целей, *знаний об окружающей обстановке* (неопределённость природы) и *действий*. Одним из основных источников системного анализа является исследование операций [6, 7, 18, 19]. Здесь *выбор целевой функции* (формализация цели) всегда или почти всегда – большая проблема. Цели часто оказываются противоречащими друг другу. Заметим, что этот факт нашёл своё выражение в распространённой фразе: добиться максимума производства с минимумом затрат. Она строго научного смысла не имеет, ибо минимум затрат – нуль, а с нулевыми затратами произвести какую-либо полезную работу нельзя. Но, несмотря на кажущуюся бессмысленность, эта фраза правильно отражает тенденции, интересы оперирующей стороны. Рассмотренная ситуация типична: она показывает, что, даже зная цели оперирующей стороны, исследователь операции ещё не может приступить к решению оптимизационной задачи. Формализация – это не менее важная, а часто, и более трудная часть проблемы.

Для того чтобы свести задачу исследования операции к стандартной задаче оптимизации, необходимо сформулировать и дополнительные гипотезы, не вытекающие из постановки задачи.

Не менее важен вопрос: как сформулировать единую цель, если критериев много:

$$q_1(\mathbf{x}) \rightarrow \max, q_2(\mathbf{x}) \rightarrow \max, \dots, q_m(\mathbf{x}) \rightarrow \max,$$

а ресурс для их достижения находится только в «одних руках»? Здесь математика не может дать однозначного ответа на этот вопрос, но может помочь принять решение и сделать правильный выбор. Это и есть проблема неопределённости целей. Это типично для любого крупного технического

и народнохозяйственного проекта. Добиться оптимизации всех критериев одновременно невозможно в принципе. Реально возможно достичь только некоторого компромисса (сочетания требуемых качеств). В этом и заключается основная проблема многокритериальности (неопределённости целей). В связи с важностью проблемы решения задач многокритериальной оптимизации им посвящены многочисленные работы, в частности [20–22].

Приведем ряд замечаний, непосредственно связанных с проблемой многокритериальной оптимизации.

1. Часто при оптимизации структуры и свойств материала, исходя из *«закона створа»*, полагают, что эта задача сводится к однокритериальной. На самом деле этого не будет, стоит хотя бы добавить в число частных критериев, кроме плотности и прочности, также стоимость материала. В этом случае без *расстановки приоритетов* задачу нельзя свести к однокритериальной.

2. Формулировка оптимизационной задачи в значительной степени определяется современной *парадигмой о формировании структуры и свойств* композиционных материалов, а также выбором класса моделей. Нелишне вспомнить А.Г. Бутковского, сформулировавшего два общих принципа в рамках общепhilosophического и методологического осмысления ЕГТУ-ТСУ [5]. Первый из них – *«Принцип (закон) 100 %-й эффективности математики»*: *«Для любой реальности (явления, процесса и т.д.) и любой наперед заданной (но не абсолютной) точности существует математическая структура, которая описывает эту реальность с этой точностью, и обратно, для любой математической структуры и любой точности существует реальность, которая описывается этой структурой с этой точностью»*.

Для полноты приведем и второй (*«Управленческая парадигма Мира»*): *«Все существующие в Море структуры поддерживаются (сохраняются), пока и поскольку их поддерживают (сохраняют) соответствующие им регуляторы обратной связи, при этом наблюдаемые флуктуации (присущие всем величинам) есть не что иное, как ошибки этого регулирования (в смысле теории регулирования)»*.

3. Налицо проблема выбора класса моделей при формулировке оптимизационной задачи. Модель должна иметь необходимую физическую интерпретацию для воздействия на параметры модели в нужном направлении. Так, используемое в полиструктурной теории понятие «структура в структуре» требует разъяснения и выбора класса модели. Без этого структура материала может быть описана лишь на качественном уровне и нельзя говорить о какой-либо оптимизации структуры (требуются количественные оценки!).

4. Критерии качества материала должны давать количественную оценку. Интересующая характеристика материала может определяться раз-

личными способами, как прямыми измерениями, так и на основе косвенных измерений. *Предпочтение, естественно, отдается методу, требующему простых измерений, легкой интерпретации результатов и их формализации.*

5. Требуется разъяснения термин «адекватность модели». Как указать требуемую точность? Так, формирование навыков управления летательным аппаратом возможно лишь в условиях летательного аппарата, но в известной степени можно и на тренажерах (на пилотажном, комплексном и т.д. с разной степенью приближения к реальному летательному аппарату). Стил управления зависит от частоты и коэффициента демпфирования летательного аппарата и от многих других факторов; при длительных тренировках на тренажерах происходит адаптация к тренажерам и формирование ложных навыков управления (обычно после 7 «полетов»).

Аналогичная картина имеет место и в материаловедении. К сожалению, *с ростом уровня качественного описания возрастает сложность модели. Как ее ограничить?*

Количественные показатели критериев качества в рамках выбранного класса модели (параметры $q_j(\mathbf{x})$) определяются на основе экспериментальных данных и всегда лишь приближенно. При формализации оптимизационной задачи предполагается, что известны точные виды функций $q_j(\mathbf{x})$. Естественен вопрос: как будут отличаться решения оптимизационных задач при точном и неточном задании $q_j(\mathbf{x})$? Если некоторый критерий качества $q_j(\mathbf{x})$ носит ярко выраженный экстремальный характер, то при незначительных изменениях факторов $x_1, x_2, \dots, x_n$ происходит значительное изменение $q_j(\mathbf{x})$. Как видим, ошибка в формализации $q_j(\mathbf{x})$ может привести к получению значительной ошибки при определении оптимального решения.

3.2.1. Лексикографическая задача оптимизации

При строго упорядоченных по важности критериях $q_1, q_2, \dots, q_m$ синтез материала сводится к так называемой *лексикографической задаче оптимизации*. Задание набора указанных критериев при строгой их ранжировке по важности позволяет выделить не только некоторые стратегии в качестве оптимальных, но и упорядочить все стратегии по степени их предпочтительности (так располагают слова в словаре). В *детерминированной* (при отсутствии случайных и неопределенных факторов) *лексикографической задаче* каждой стратегии (выбор процентного содержания ингредиентов, гранулометрического состава и т.д.) соответствуют определенные числовые значения частных критериев. Оптимизация структуры и свойств материалов как сложных систем, состоящих из взаимо-

связанных подсистем, относящихся к разным иерархическим уровням, также легко представляется в лексикографической форме.

При сравнении двух стратегий в первую очередь используется первый критерий: лучшей считается та стратегия, для которой значение этого критерия больше. Если значения первого критерия для обеих стратегий равны, то применяется второй критерий и предпочтение отдается той стратегии, для которой его значение больше. Если и второй критерий не позволяет выделить лучшую стратегию, привлекается третий и т.д.

Формально лексикографическое отношение предпочтения задается следующим образом:

• стратегия u предпочтительнее стратегии v (обозначается $u \overset{lex}{\prec} v$), если выполняется одно из m условий:

1. $q_1(u) > q_1(v)$;

2. $q_1(u) = q_1(v), q_2(u) > q_2(v)$;

...

- r . $q_1(u) = q_1(v), q_2(u) = q_2(v), \dots, q_{r-1}(u) = q_{r-1}(v), q_r(u) > q_r(v)$;

...

- m . $q_1(u) = q_1(v), q_2(u) = q_2(v), \dots, q_{m-1}(u) = q_{m-1}(v), q_m(u) > q_m(v)$;

• стратегии u и v эквивалентны ($u \sim v$), если

$$q_1(u) = q_1(v), q_2(u) = q_2(v), \dots, q_m(u) = q_m(v);$$

• стратегия u лексикографически не хуже (не менее предпочтительна), чем стратегия v (обозначается $u \overset{lex}{\succeq} v$), если выполнено одно из приведенных выше $(m + 1)$ условий.

Отметим, любые две стратегии u и v сравнимы по рассматриваемому отношению предпочтения, то есть всегда выполняется одно из условий

$$u \overset{lex}{\succ} v; v \overset{lex}{\succ} u; u \sim v.$$

В общем случае эффективность стратегии u в рамках используемой модели характеризуется множеством чисел $q_1, q_2, \dots, q_m$, отражающим степень достижения цели операции при использовании этой стратегии.

В лексикографической задаче оптимизации добиваются сколь угодно малого приращения более важного критерия за счет любых потерь по остальным менее важным критериям.

Лексикографически оптимальной будет стратегия u^* , которая не хуже любой другой стратегии v , если $u^* \overset{lex}{\succeq} v$.

При наличии лишь одного критерия эффективности оптимальная стратегия u^* определяется из условия

$$q_1(u^*) = \max_{u \in U} q_1(u),$$

где U – множество всех стратегий.

При решении лексикографической задачи оптимизации определяются оптимальные стратегии. Так как все такие стратегии эквивалентны, можно ограничиться отысканием не всего множества U^* , а лишь одной оптимальной стратегии. Каждый последующий частный критерий сужает множество стратегий, получаемых с помощью всех предыдущих частных критериев:

$$U \supseteq U_1^* \supseteq U_2^* \supseteq \dots \supseteq U_m^*; \quad U^* = U_m^*.$$

Отметим, если в исходной задаче оптимизации с одним скалярным критерием имеется несколько решений и для дальнейшего выбора последовательно применяются дополнительные критерии, то полученные в результате стратегии будут оптимальными для соответствующей лексикографической задачи с векторным критерием, состоящим из всех поочередно использовавшихся критериев.

3.2.2. Метод последовательных уступок

Разработка радиационно-защитных сверхтяжелых материалов осуществлялась с учетом противоречивости частных критериев с использованием ранжировки критериев *не столь жесткой, как в лексикографическом случае*. При синтезе материала использовался *метод последовательных уступок*. Процедура включала:

- расположение и нумерацию всех частных критериев в порядке их относительной важности;
- максимизацию *первого*, наиболее важного критерия;
- назначение величины *допустимого снижения (уступки)* значения этого критерия;
- максимизацию *второго* по важности частного критерия при условии, что значение первого критерия не должно отличаться от максимального более чем на величину уступки;
- назначение величины *уступки по второму* критерию;
- максимизацию *третьего* критерия при условии, чтобы значения первых двух критериев не отличались от ранее найденных максимальных значений больше, чем на величины соответствующих уступок, и т.д.

Многокритериальная задача сводилась к поочередной максимизации частных критериев и выбору величин уступок (чем уступки меньше, тем приоритет жестче). В качестве оптимальной принималась любая стратегия,

соответствующая условному максимуму последнего по важности критерия.

При синтезе материалов использовался и другой подход, основанный на его представлении как задачи оптимизации с ограничениями, которые могут оказаться и противоречивыми. В этом случае максимизируется функционал $f_0(u)$ на множестве U при условии выполнения неравенств

$$f_j(u) \geq 0, j = \overline{1, r}.$$

Если ограничения непротиворечивы, то множество $\tilde{U}$ точек из U – непусто. При отсутствии сведений о совместности неравенств множество $\tilde{U}$ может оказаться и пустым. В связи с этим возникает целесообразность видоизменения исходной постановки задачи, чтобы она оставалась содержательной, когда $\tilde{U}$ – пустое множество, а при совместности ограничений – была бы эквивалента обычной задаче максимизации. Это решалось с использованием идей лексикографической оптимизации. Здесь «степень невыполнения» ограничений оценивается с помощью функционала «невязки»

$$\psi(u) = \begin{cases} 0 & \text{при непротиворечивости ограничений,} \\ < 0 & \text{при противоречивости ограничений.} \end{cases}$$

В качестве $\psi(u)$ использовался функционал

$$\min \{ 0, f_1(u), f_2(u), \dots, f_r(u) \},$$

$$(\max \psi(u) = 0).$$

Рассмотрим лексикографическую задачу с двумя критериями $q_1 = \psi(u)$, $q_2 = f_0(u)$.

Если ограничения совместны ($\psi(u) = 0$), q_1 достигает своего максимума на U . При этом множество его точек максимума в точности совпадает с $\tilde{U}$ (решение рассматриваемой лексикографической задачи совпадает с решениями задачи максимизации $f_0(u)$ при ограничениях $f_j(u) \geq 0, j = \overline{1, r}$).

Если же ограничения несовместны, то при максимизации q_1 осуществляется максимизация степени выполнения ограничений, а затем уже на множестве точек, обеспечивающих наибольшую степень выполнения (наименьшая степень невыполнения) этих ограничений, максимизируется критерий q_2 .

Как видим, рассмотренная двухкритериальная лексикографическая задача является обобщением максимизации $f_0(u)$ при заданных ограничениях при отсутствии сведений об их совместности.

При синтезе сверхтяжелых радиационно-защитных материалов в качестве $f_0(u)$ рассматривалась пористость $q_1(x_1, x_2)$; в качестве ограничений – ограничения соответственно на $q_2(x_1, x_2)$ (прочность на сжатие) и на плотность $q_3(x_1, x_2)$. В последующем оказалось возможным исключить из рассмотрения $q_3(x_1, x_2)$.

Здесь и ниже использовались полученные методами математического планирования эксперимента для указанных материалов следующие зависимости пористости q_1 , %, и прочности на сжатие q_2 , МПа, от объемных долей $x_1 \in [0,5; 0,6]$, $x_2 \in [0,35; 0,4]$ заполнителя и наполнителя:

$$q_1(x_1, x_2) = 196,9 - 1217x_1 + 623,6x_2 - 1064x_1x_2 + 1532x_1^2;$$

$$q_2(x_1, x_2) = -305,3 + 1188x_1 + 57,20x_2 - 1148x_1^2.$$

Вид функций q_1 и q_2 , их линии равного уровня и полученная методом последовательных уступок область поиска для решения задачи оптимизации приводятся на рис. 3.22–3.24.

Минимальное значение пористости достигается в точке $M_1(0,519; 0,35)$, для которой $q_1(0,519; 0,35) = 2,735$ %. Максимум прочности соответствует точке $M_2(0,518; 0,4)$, для которой $q_2(0,518; 0,4) = 25,14$ МПа.

В дальнейшем при синтезе материала исходили из условий $q_1 \leq 4\%$, $q_2 \geq 22$ МПа (область D_a , рис. 3.24).

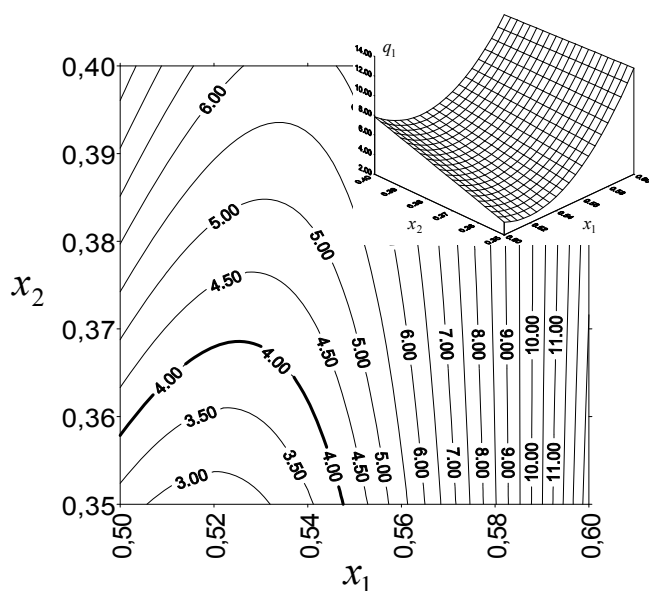


Рис. 3.22. Линии равного уровня для пористости $q_1 = \Pi_6$, %

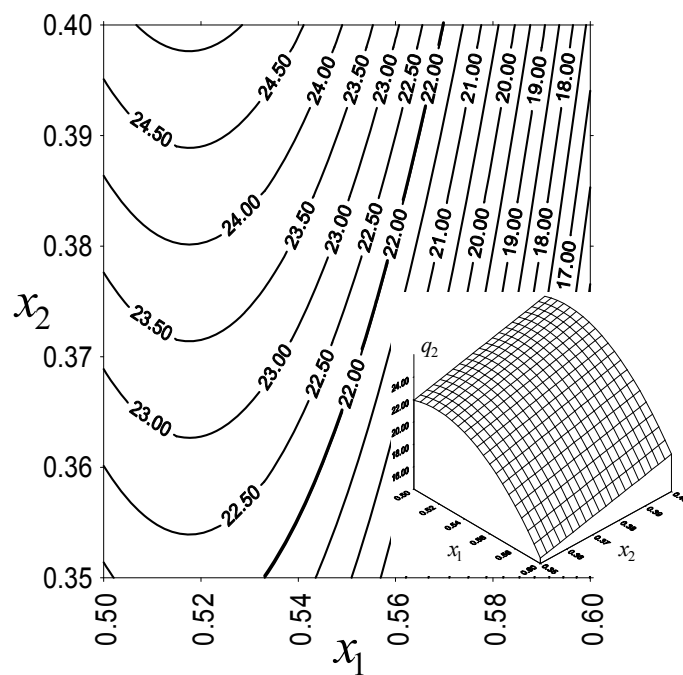


Рис. 3.23. Линии равного уровня для прочности на сжатие $q_2=R_6$, МПа

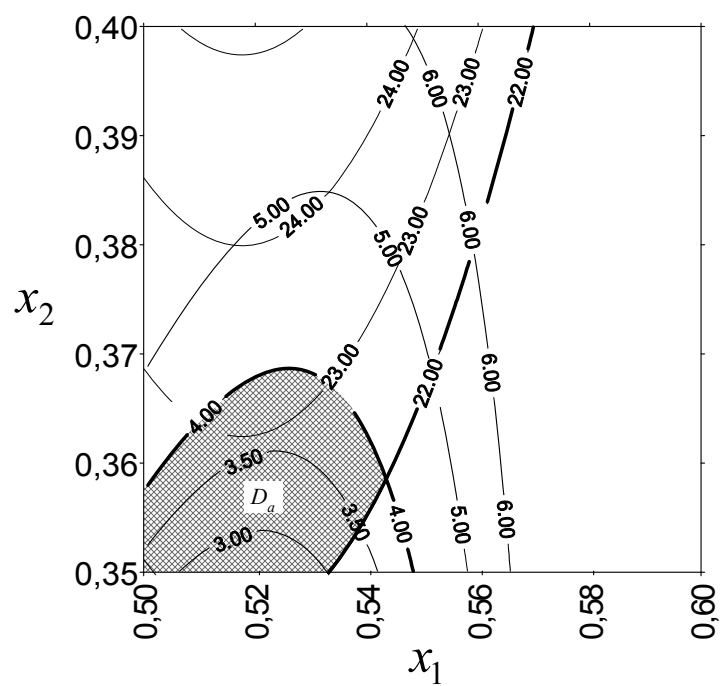


Рис. 3.24. Область поиска

3.2.3. Способы преодоления неопределённостей целей

Сталкиваясь с многокритериальными задачами, естественно попытаться найти способы сведения их к задачам с одним критерием, поскольку для однокритериальных задач существуют хорошо разработанные методы решения. Эти способы носят неформальный характер, ибо они не могут быть получены как результат решения какой-либо математической задачи. Рассмотрим несколько способов, основанных на операции свертывания критериев, позволяющих *свести задачу многокритериальной оптимизации к однокритериальной*. Основное их преимущество состоит в *простоте интерпретации результатов*.

Предположим, что иерархической структуре критериев качества соответствует целевая вектор-функция $\mathbf{q}(\mathbf{x}) = (q_1(\mathbf{x}), q_2(\mathbf{x}), \dots, q_m(\mathbf{x}))$ m -мерной переменной $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$. Здесь $x_i, i = \overline{1, n}$ – управляемые факторы; $q_j, j = \overline{1, m}$ – частные критерии качества.

Простейший способ преодоления неопределённостей целей. Пусть частные критерии качества *упорядочены* с учетом их приоритетов. Для решения задачи с указанными приоритетами должны быть заданы допустимые пределы изменения x_i и соответствующие им значения q_j :

$$q'_j \leq q_j \leq q''_j; j = \overline{1, m},$$

где $q'_j, q''_j, j = \overline{1, m}$ – некоторые постоянные числа, определяемые допустимыми пределами изменения формализованных физико-механических характеристик материала.

В случае выделенного единственного (основного) критерия качества оптимизация структуры и свойств материала в общем случае сведется к решению *задачи нелинейного программирования*: найти значение m -мерной переменной, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, $x_i \geq 0, i = \overline{1, n}$, доставляющей экстремум целевой функции $q_1(\mathbf{x})$ при условиях

$$-q_j(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq q'_j,$$

$$q_j(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq q''_j,$$

$$j = \overline{1, m}$$

(однокритериальная задача $q_1(\mathbf{x}) \rightarrow \max$ при указанных ограничениях).

В случае линейности функций $q_j(\mathbf{x}), j = \overline{1, m}$ искомое решение определится как решение задачи *линейного программирования*.

Такая схема сведения многокритериальной задачи к однокритериальной *представляется* наиболее простой. Однако назначение допустимых

границ частных критериев качества не является тривиальным. Это фактически связано с определением весовых констант, ранжированием и упорядочением частных критериев, во многом определяющих решение задачи оптимизации. Указанная ситуация была камнем преткновения в известной задаче *аналитического конструирования оптимального регулятора* (например, при выборе весовых констант в функционале качества, исходя из требований по углу и угловой скорости к системе гидирования телескопа на подвижном основании для получения прямых снимков небесного светила).

Пусть $\mathbf{q}(x) = (q_1(x), q_2(x))$, x – единственный управляемый фактор (рис. 3.25). Решением оптимизационной задачи $q_1(x) \rightarrow \max$ при ограничении $q_2(x) \geq (q_2^*)_1$ будет $x = a_1$, $(q_{1m})_1 = q_1(a_1)$; а при ограничении $q_2(x) \geq (q_2^*)_2$ будем иметь $x = a_2$, $(q_{1m})_2 = q_1(a_2)$. Решения же при ограничениях $q_1(x) \geq q_1^*$, $q_2(x) \geq (q_2^*)_2$ вовсе нет, так как интервалы $[a_3, b_3]$ и $[a_2, b_2]$ не перекрываются.

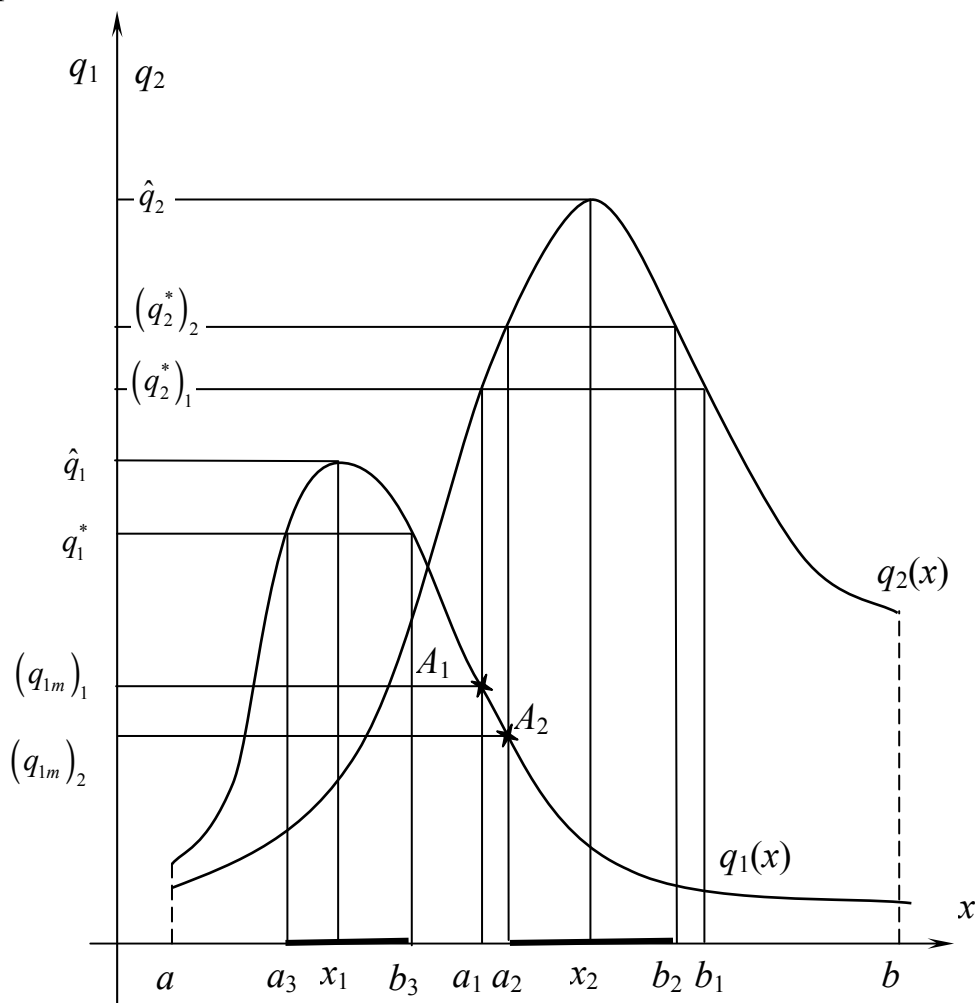


Рис. 3.25. Двухкритериальная задача при одном управляемом факторе

Скаляризация введением метрики в пространстве целевых функций. Пусть в результате решения однокритериальной задачи

$$q_j(\mathbf{x}) \rightarrow \max, \quad j = \overline{1, m},$$

в каждой j -й задаче определен вектор $\mathbf{x} = \mathbf{x}_j$, доставляющий максимальное значение критерию $q_j(\mathbf{x})$:

$$q_j(\mathbf{x}_j) = \hat{q}_j.$$

Совокупность скалярных величин $\hat{q}_j$ в пространстве критериев определяет точку «абсолютного максимума» $(\hat{q}_1, \hat{q}_2, \dots, \hat{q}_m)$. При различных $\mathbf{x}_j, j = \overline{1, m}$ не существует выбора, позволяющего достичь этой точки; $(\hat{q}_1, \hat{q}_2, \dots, \hat{q}_m)$ является недостижимой в пространстве критериев.

Рассмотрим скалярную функцию векторного аргумента

$$h(\mathbf{x}) = \sqrt{\sum_{jk} r_{jk} (q_j(\mathbf{x}) - \hat{q}_j)(q_k(\mathbf{x}) - \hat{q}_k)}, \quad (3.4)$$

где $\mathbf{R} = (r_{ij})$ – положительно определённая матрица.

При $\mathbf{R} = \mathbf{E}$ имеем

$$h(\mathbf{x}) = \sqrt{\sum_j (q_j(\mathbf{x}) - \hat{q}_j)^2}$$

– евклидово расстояние от точки $(q_1(\mathbf{x}), q_2(\mathbf{x}), \dots, q_m(\mathbf{x}))$ до точки $(\hat{q}_1, \hat{q}_2, \dots, \hat{q}_m)$ в пространстве критериев.

Минимизация скалярного критерия качества $h(\mathbf{x})$ позволит определить предельные возможности достижения «абсолютного максимума».

Для предыдущего примера в рассматриваемой области изменения факторов (рис. 3.22, 3.23, 3.24) наименьшее значение q_1 достигается в точке $M_0(0,519; 0,35)$, $\hat{q}_1 = 2,73$; наибольшее значение q_2 достигается в точке $M_1(0,518; 0,4)$, $\hat{q}_2 = 25,1$. Решение задачи $q_1(x_1, x_2) \rightarrow \min$, $q_2(x_1, x_2) \rightarrow \max$ при $R = E$ сводится к определению в области $0,5 \leq x_1 \leq 0,6$; $0,35 \leq x_2 \leq 0,4$ наименьшего значения

$$h_1(x_1, x_2) = \sqrt{(q_1(x_1, x_2) - 2,73)^2 + (q_2(x_1, x_2) - 25,1)^2}, \quad (3.5)$$

где

$$q_1(x_1, x_2) = 196,9 - 1217x_1 + 623,6x_2 - 1064 + 1532x_1^2,$$

$$q_2(x_1, x_2) = -305,3 + 1188x_1 + 57,2x_2 - 1148x_1^2$$

(задача нелинейного программирования $h(x_1, x_2) \rightarrow \min$ при ограничениях $0,5 \leq x_1 \leq 0,6$; $0,35 \leq x_2 \leq 0,4$).

Линии уровня (3.5) приводятся на рис. 3.26.

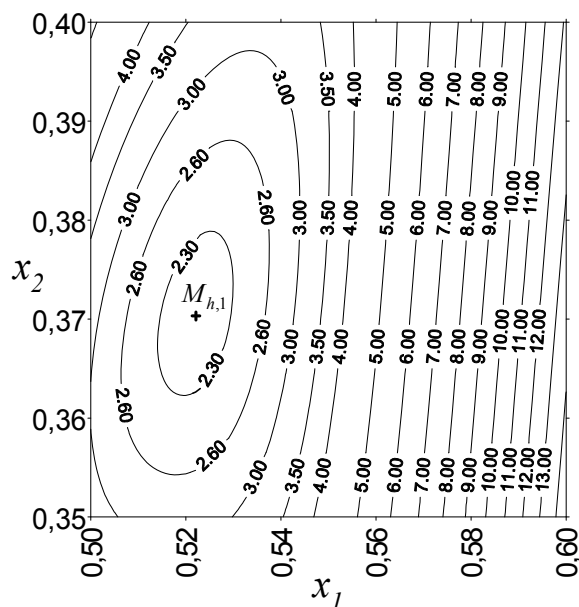


Рис. 3.26. Линии $h_1(x_1, x_2) = \text{const}$

В факторном пространстве минимум (3.5) соответствует точке $M_{h,1}(0,522; 0,370)$. В пространстве критериев он соответствует точке $(q_1(0,522; 0,370), q_2(0,522; 0,370)) = (4,14; 23,4)$, для которой $h_{1,\min} = h_1(0,522; 0,370) = 2,194$.

Отметим, что ограничения $q_1 \leq 4\%$, $q_2 \geq 22$ МПа не входят в (3.5). Поэтому не следует ожидать, что эти ограничения всегда будут выполнены для точки минимума; действительно, в этой точке $q_1 = 4,14\% > 4\%$. Учет ограничений может быть выполнен явно (отбрасывание точек, не принадлежащих области D_a , рис. 3.24), введением штрафной функции (фактически равносильно предыдущему) или же изменением метрики в пространстве критериев качества.

Введение штрафной функции смещает точку (условного) минимума к положению $M_h(0,522; 0,368)$ (для этой точки $q_1 = 4,0\%$, $q_2 = 23,3$ МПа, $h_{\min} = 2,201$).

Изменение метрики сводится к замене единичной матрицы в выражении (3.4) на диагональную матрицу, элементы главной диагонали которой представляют собой весовые коэффициенты, выражающие предпочтения

разработчика. На матрицу $\mathbf{R} = (r_{ij})$ естественно наложить условие $|\mathbf{R}| = 1$, положим:

$$\mathbf{R} = \begin{vmatrix} 6/5 & 0 \\ 0 & 5/6 \end{vmatrix}.$$

При этом (3.4) переходит в

$$h_2(x_1, x_2) = \sqrt{\frac{6}{5}(q_1(x_1, x_2) - 2,73)^2 + \frac{5}{6}(q_2(x_1, x_2) - 25,1)^2}. \quad (3.6)$$

Линии равного уровня (3.6) показаны на рис. 3.27.

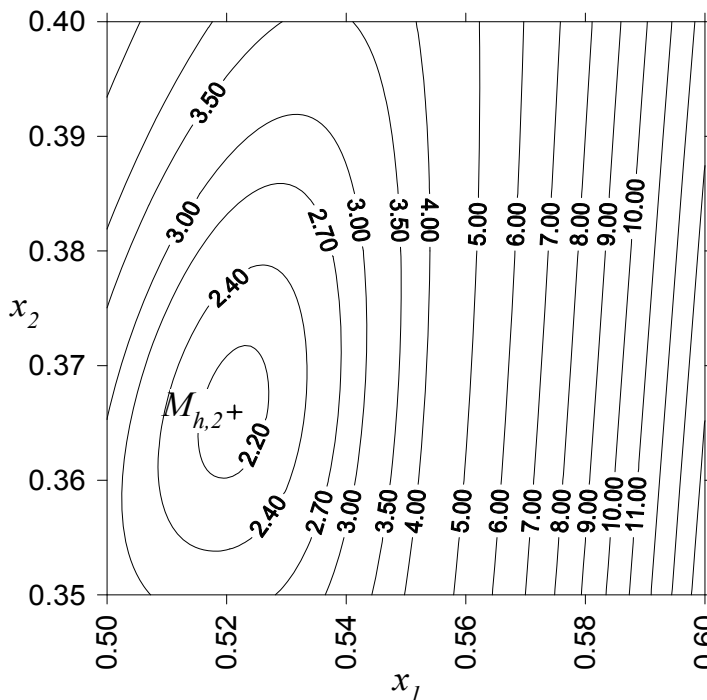


Рис. 3.27. Линии $h_2(x_1, x_2) = \text{const}$

Минимум (3.6) достигается в точке $M_{h,2}(0,521; 0,366)$, для которой

$$q_1 = 3,84 \%, \quad q_2 = 23,2 \text{ МПа}, \quad h_{2,\min} = 2,14.$$

В пространстве входных переменных наибольшее из расстояний между точками $M_{h,1}$, $M_{h,2}$ и M_h не превышает $4,2 \cdot 10^{-3}$. В пространстве критериев качества это расстояние не превышает 0,36.

Построение глобальной целевой функции на основе контрольных показателей. При решении целого ряда задач возникает необходимость выбора параметров $x_1, x_2, \dots, x_n$ системы из условий максимизации функций $q_j(\mathbf{x})$ при ограничениях $q_j(\mathbf{x}) \geq q_j^*$, $j = \overline{1, m}$.

Здесь целевую функцию удобно представить в виде

$$q(\mathbf{x}) = \min_j \left\{ \frac{q_j(\mathbf{x})}{q_j^*} \right\}$$

и искать вектор $\mathbf{x}$, обеспечивающий максимальное значение $q(\mathbf{x})$, то есть определяется точка M_q , в которой обеспечивается $\max \left(\min_j \left\{ \frac{q_j(x_1, x_2)}{q_j^*} \right\} \right)$.

При таком значении вектора $\mathbf{x}$ величина $q(\mathbf{x})$ даёт значение наихудшего из показателей $q_j(\mathbf{x})$, $j = \overline{1, m}$. Таким образом, условие $q(\mathbf{x}) \rightarrow \max$ означает выбор такой системы параметров $(x_1, x_2, \dots, x_n)$, которая максимизирует отношение j -го реально достигнутого значения критерия к его контрольному значению q_j^* . Во многих случаях задание q_j^* , $j = \overline{1, m}$ затруднительно. Тогда они могут определяться на основе экспертного опроса.

В условиях предыдущего примера

$$q_1(x_1, x_2) \leq 4 \%, \quad q_2(x_1, x_2) \geq 22 \text{ МПа};$$

эти значения можно принять в качестве контрольных.

С учетом того, что первый из показателей качества (пористость) минимизируется, в то время как второй (прочность) – максимизируется, будем иметь

$$q(x_1, x_2) = \min \left\{ \frac{4}{q_1(x_1, x_2)}, \frac{q_2(x_1, x_2)}{22} \right\}. \quad (3.7)$$

Линии равного уровня (3.7) показаны на рис. 3.28.

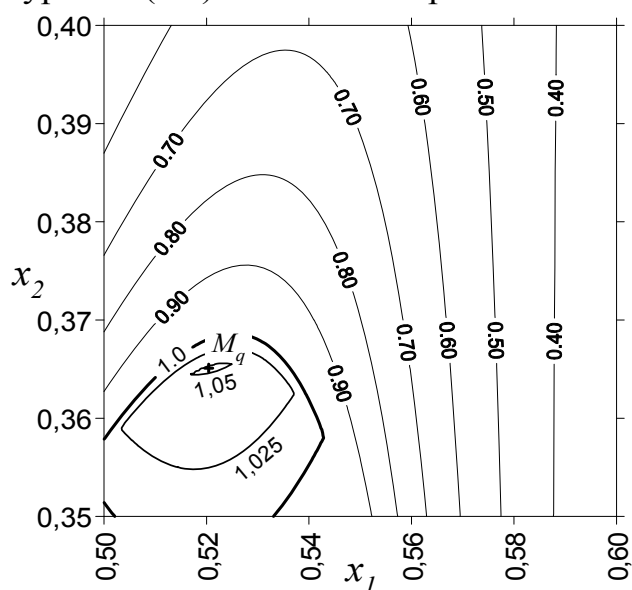


Рис. 3.28. Линии $q(x_1, x_2) = \text{const}$

Как видим, совпадение контрольных показателей со значениями, определяющими границы области поиска (рис. 3.24), приводит к точному соответствию границы и линии $q(x_1, x_2) = 1$. При этом ограничения $q_1 \leq 4\%$, $q_2 \geq 22$ МПа учитываются неявно.

Максимум (3.7) достигается в точке $M_q(0,521; 0,365)$, для которой

$$q_1(0,521; 0,365) = 3,8\%, \quad q_2(0,521; 0,365) = 23,1 \text{ МПа},$$

$$q(0,521; 0,365) = 1,052.$$

Аддитивный глобальный критерий (линейная свертка). Такой критерий имеет вид

$$q(x_1, x_2) = \sum_{j=1}^m c_j q_j(x_1, x_2),$$

где c_j – некоторые *положительные* числа, тем или иным способом

нормированные (например, $\sum_{j=1}^m c_j = 1$).

Величины c_j показывают, насколько изменяется целевая функция $q(x_1, x_2)$ при изменении на единицу критерия $q_j(x_1, x_2)$.

Коэффициенты c_j – результат экспертизы. Они отражают представление оперирующей стороны о содержании принимаемого компромисса. Содержание компромисса состоит в *ранжировании целей*. Вместе с назначением весовых коэффициентов это является той дополнительной гипотезой, которая позволяет свести задачу со многими критериями к задаче с единственным критерием $q(x_1, x_2)$.

К сожалению, указанный критерий обладает рядом недостатков:

- $q(x_1, x_2)$ существенно зависит от размерности частных критериев $q_j(x_1, x_2)$;
- целевая функция $q(x_1, x_2)$ во многом определяется заданием весовых констант ($c_j, j = \overline{1, m}$ либо задаются субъективно, либо их определение требует значительных экспериментальных статистических данных);
- часто вызывает затруднения физическая (или иная) интерпретация глобальной целевой функции $q(x_1, x_2)$ и весовых констант;
- большие сложности возникают при взаимозависимых частных критериях и т.д.

Проиллюстрируем сказанное на предыдущем примере.

Если критерии q_1, q_2 оставить ненормированными и равнозначными ($c_1 = c_2 = 0,5$), то имели бы

$$q(x_1, x_2) = 0,5(q_2 - q_1) = -251,1 + 1203x_1 - 283,2x_2 + 532x_1x_2 - 1340x_1^2$$

(рис. 3.29; поиск минимума q_1 заменили поиском максимума $(-q_2)$).

Линии равного уровня $q(x_1, x_2) = \text{const}$ будут центральными кривыми второго порядка *гиперболического* типа ($\delta = a_{11}a_{22} - a_{12}^2 = -\left(\frac{532}{2}\right)^2 < 0$; координаты центра $x_{10} = \frac{1}{\delta}(a_{12}a_{23} - a_{22}a_{13})$, $x_{20} = \frac{1}{\delta}(a_{13}a_{12} - a_{11}a_{23})$; $2a_{12} = 532$, $2a_{13} = 1203$, $a_{22} = 0$, $a_{11} = -1340$, $2a_{23} = -283,2$).

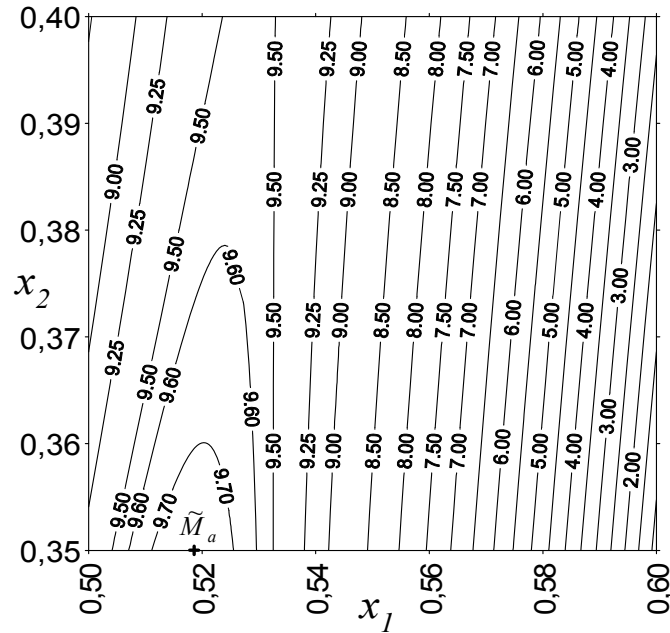


Рис. 3.29. Линии $q(x_1, x_2) = \text{const}$

При игнорировании указанных выше недостатков формирования глобальной целевой функции $q(x_1, x_2)$ ее наибольшее значение в рассматриваемой области достигается в точке $\tilde{M}_a(0,518; 0,35)$, для которой

$$q_1(0,518; 0,35) = 2,74 \text{ \%}; \quad q_2(0,518; 0,35) = 22,3 \text{ МПа}.$$

От ряда недостатков можно избавиться при нормировке частных критериев. Примем

$$q(x_1, x_2) = c_1 \frac{q_1(x_1, x_2) - \bar{q}_1}{S_{q_1}} + c_2 \frac{q_2(x_1, x_2) - \bar{q}_2}{S_{q_2}},$$

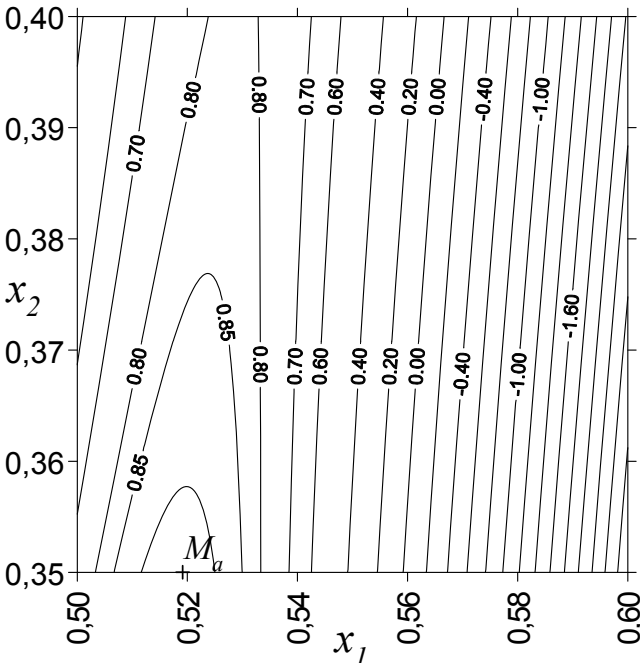
$$\text{где } \bar{q}_1 = \frac{1}{S} \iint_S q_1(x_1, x_2) dx_1 dx_2, \quad \bar{q}_2 = \frac{1}{S} \iint_S q_2(x_1, x_2) dx_1 dx_2$$

– средние значения q_1, q_2 в рассматриваемой области;

$$S_{q_1} = \sqrt{\frac{1}{S} \iint_S (q_1 - \bar{q}_1)^2 dx_1 dx_2}, \quad S_{q_2} = \sqrt{\frac{1}{S} \iint_S (q_2 - \bar{q}_2)^2 dx_1 dx_2}$$

– средние отклонения q_1, q_2 от $\bar{q}_1, \bar{q}_2$; S – площадь рассматриваемой области.

Для данного примера: $\bar{q}_1 = 6,457$, $\bar{q}_2 = 21,54$, $S_{q_1} = 2,398$, $S_{q_2} = 2,455$.

$$q(0,518; 0,35) = 0,925.$$


для двух нормированных равнозначных критериев

Расположение точек M_1, M_2, M_h, M_q и M_a приводится на рис. 3.31.

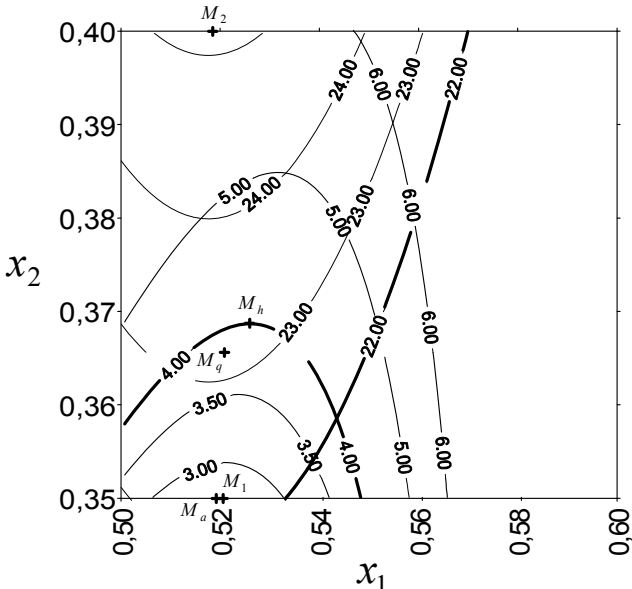


Рис. 3.31. Расположение точек «максимального качества» M_h , M_q и M_a , полученных с использованием различных методик

3.2.4. Определение множеств Парето

Следуя В. Парето [19, 23], исключим из неформального анализа заведомо плохие варианты решений, что позволит сократить множество исходных вариантов. Действительно, пусть сделан некоторый выбор. Обозначим его через $\mathbf{x}^*$ и предположим, что существует некоторый другой выбор $\tilde{\mathbf{x}}$ такой, что для всех критериев $f_i(\mathbf{x})$ имеют место неравенства

$$f_i(\tilde{\mathbf{x}}) \geq f_i(\mathbf{x}^*), \quad i = \overline{1, n},$$

причём хотя бы одно из неравенств – строгое.

Очевидно, что выбор $\tilde{\mathbf{x}}$ предпочтительнее $\mathbf{x}^*$. Поэтому все векторы $\mathbf{x}^*$, удовлетворяющие последнему неравенству, можно сразу исключить из рассмотрения. Имеет смысл заниматься сопоставлением и подвергать неформальному анализу только те векторы $\mathbf{x}^*$, для которых не существует $\tilde{\mathbf{x}}$ такого, что для всех критериев удовлетворяются эти неравенства. Множество всех таких значений $\mathbf{x}^*$ называют *множеством Парето*, а вектор $\mathbf{x}^*$ называют *неулучшаемым вектором результатов* (*вектором Парето*), если из $f_i(\tilde{\mathbf{x}}) \geq f_i(\mathbf{x}^*)$ для любого i следует $f_i(\tilde{\mathbf{x}}) = f_i(\mathbf{x}^*)$.

Если цели являются двумя *однозначными* функциями ($f_1(\mathbf{x}) \rightarrow \max$, $f_2(\mathbf{x}) \rightarrow \max$), то каждому допустимому значению переменной $\mathbf{x}$ отвечает *одна* точка на плоскости (f_1, f_2) (рис. 3.32), и равенства

$$f_1 = f_1(\mathbf{x}), \quad f_2 = f_2(\mathbf{x})$$

определяют параметрическое задание некоторой кривой $abcd$ в этой плоскости. Участок bc , очевидно, не принадлежит множеству Парето, поскольку вместе с ростом f_1 происходит и рост f_2 . Таким образом, на этом участке изменению переменной $\mathbf{x}$ отвечает одновременное увеличение обеих целевых функций и, следовательно, такие варианты решений должны быть сразу исключены из дальнейшего рассмотрения.

Из тех же соображений должен быть исключён и участок $a'b$, поскольку для каждой его точки e найдётся точка, принадлежащая участку cd , в которой значения обеих функций f_1 и f_2 больше, чем в точке e . Так что принадлежать множеству Парето могут только участки aa' и cd , причём точка a' также должна быть исключена.

В теории принятия решений существует термин “принцип Парето”, заключающийся в том, что выбирать в качестве решения следует только тот вектор $\mathbf{x}$, который принадлежит множеству Парето.

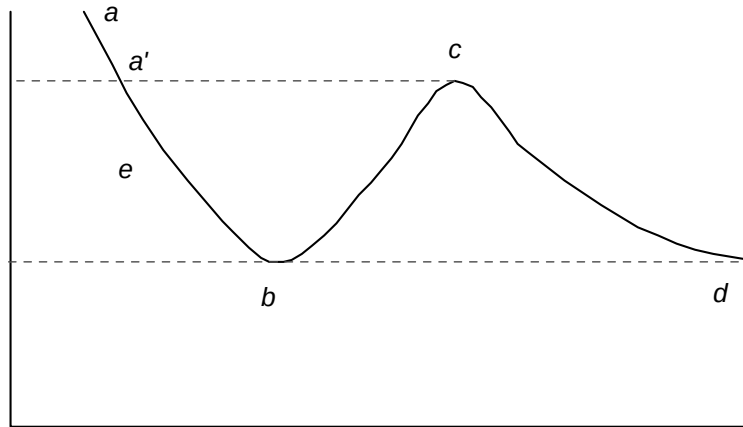


Рис. 3.32

Принцип Парето не выделяет единственного решения, он только сужает множество альтернатив. Окончательный выбор остаётся за лицом, принимающим решение. Построение множества Парето облегчает процедуру выбора решения.

Помимо критериев $f_i(\mathbf{x})$ достаточно часто вводится некоторый общий критерий $F(\mathbf{x})$. Иногда он бывает формализован и записан в явном виде. Таким критерием может быть, например, стоимость проекта. В этом случае исследователю операций представляется возможность решить задачу до конца. Для этого ему достаточно определить вектор $\mathbf{x}$, который дает решение задачи: $F(\mathbf{x}) \rightarrow \max$ при $\mathbf{x} \in P_G(f_1, f_2, \dots, f_n)$, где $P_G(f_1, f_2, \dots, f_n)$ – множество Парето для функций $f_1, f_2, \dots, f_n$ на множестве G допустимых векторов $\mathbf{x}$. Введение «общего» критерия $F(\mathbf{x})$ и максимизация его значений на множестве Парето является некоторой гипотезой, поскольку из совокупности критериев $f_1, f_2, \dots, f_n, F$ один из критериев специальным образом выделяется.

Приближённое построение множества Парето относится к числу очень важных и трудных задач численного анализа, но, к сожалению, до самого последнего времени обделенных вниманием.

Рассмотрим случай двух критериев. Пусть ищется решение задачи

$$f_1(\mathbf{x}) \rightarrow \max, \quad f_2(\mathbf{x}) \rightarrow \max, \quad \mathbf{x} \in G_x.$$

Каждой точке $\mathbf{x} \in G_x$ соотношения $f_1 = f_1(\mathbf{x}), \quad f_2 = f_2(\mathbf{x})$ ставят в соответствие некоторую точку $\mathbf{f} \in G_f$ в плоскости критериев (рис. 3.33). Последние соотношения определяют отображение множества G_x на G_f . Множество G_f носит название *множества достижимости*, или *множества предельных возможностей*. Множество Парето представляет собой границы G_f . На рис. 3.33 множеством Парето будет дуга $ADCB$.

Приближённое построение множества Парето сводится к последовательному решению задач математического программирования. Опишем одну из возможных схем расчёта. Зафиксируем желательные значения критериев f_1 и f_2 :

$$f_1 = c_1, f_2 = c_2.$$

Значения c_1 и c_2 должны принадлежать множеству достижимости.

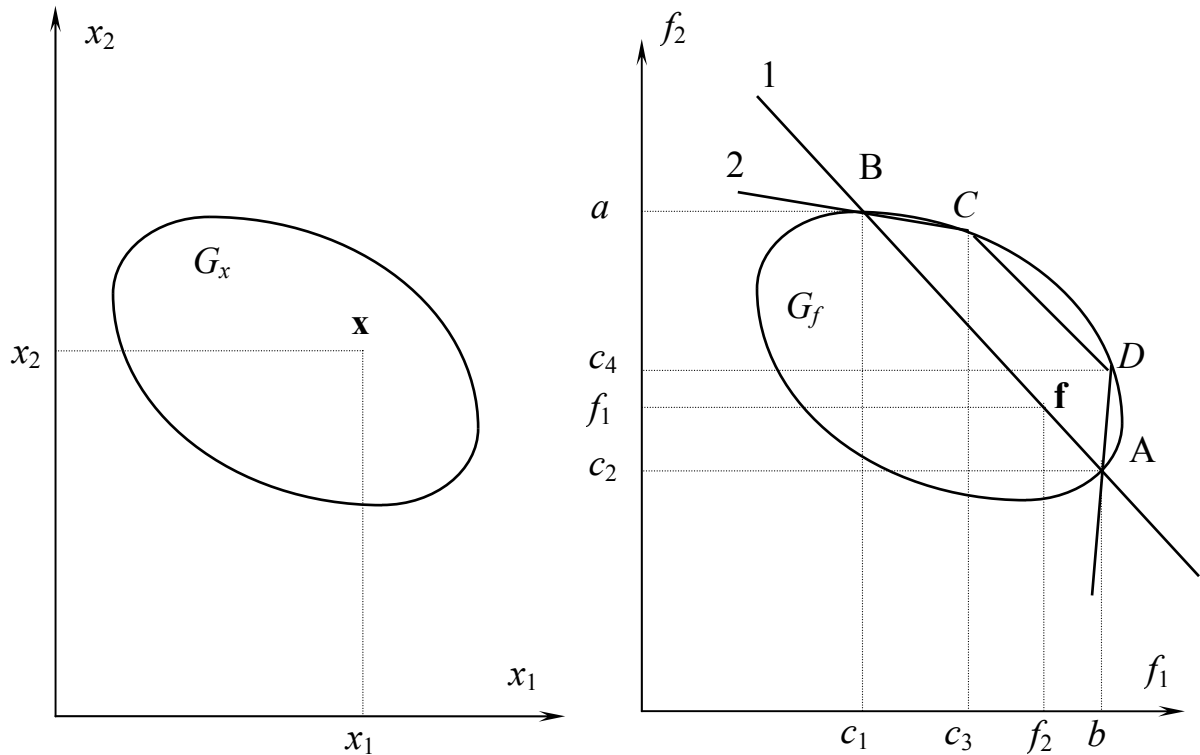


Рис. 3.33

Решив две оптимизационные задачи:

$$\text{I. } f_1(\mathbf{x}) \rightarrow \max, \mathbf{x} \in G_x, \quad f_2(\mathbf{x}) = c_2;$$

$$\text{II. } f_2(\mathbf{x}) \rightarrow \max, \mathbf{x} \in G_x, \quad f_1(\mathbf{x}) = c_1,$$

определим точки A и B (рис. 3.33). Проведя через них прямую 1, получим простейшую аппроксимацию множества Парето. Для уточнения последнего можно определить ещё две точки – C и D , принадлежащие этому множеству и соответствующие решениям нижеследующих задач:

$$\text{III. } f_1(\mathbf{x}) \rightarrow \max, \mathbf{x} \in G_x, \quad f_2(\mathbf{x}) = c_4;$$

$$\text{IV. } f_2(\mathbf{x}) \rightarrow \max, \mathbf{x} \in G_x, \quad f_1(\mathbf{x}) = c_3.$$

Значения c_3 и c_4 также должны принадлежать множеству достижимости. Ломаная $ADCB$ будет следующим приближением множества Парето.

При

$$a \leq x_1 \leq b;$$

$$c \leq x_2 \leq d;$$

$$f_1(x_1, x_2) \approx \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2;$$

$$f_2(x_1, x_2) \approx \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$$

построение множества Парето сводится к последовательному решению следующих двух задач *линейного* программирования:

1. Определить неотрицательные значения x_1, x_2 , доставляющие максимум целевой функции

$$f_1(x_1, x_2) = \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2$$

при ограничениях

$$x_1 \geq a, \quad x_1 \leq b, \quad x_2 \geq c, \quad x_2 \leq d;$$

$$\beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 = c_2.$$

2. Определить неотрицательные значения x_1, x_2 , доставляющие максимум целевой функции

$$f_2(x_1, x_2) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$$

при ограничениях

$$x_1 \geq a, \quad x_1 \leq b, \quad x_2 \geq c, \quad x_2 \leq d;$$

$$\alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 = c_1$$

(рис. 3.34, а, б).

Используем приведенную методику для *многокритериального синтеза эпоксидного композита повышенной плотности для защиты от радиации.*

На основе математических методов планирования эксперимента были получены следующие аналитические зависимости средней плотности ρ , кг/м³, и предела прочности $R_{сж}$, МПа, на сжатие образцов 20×20×20 см:

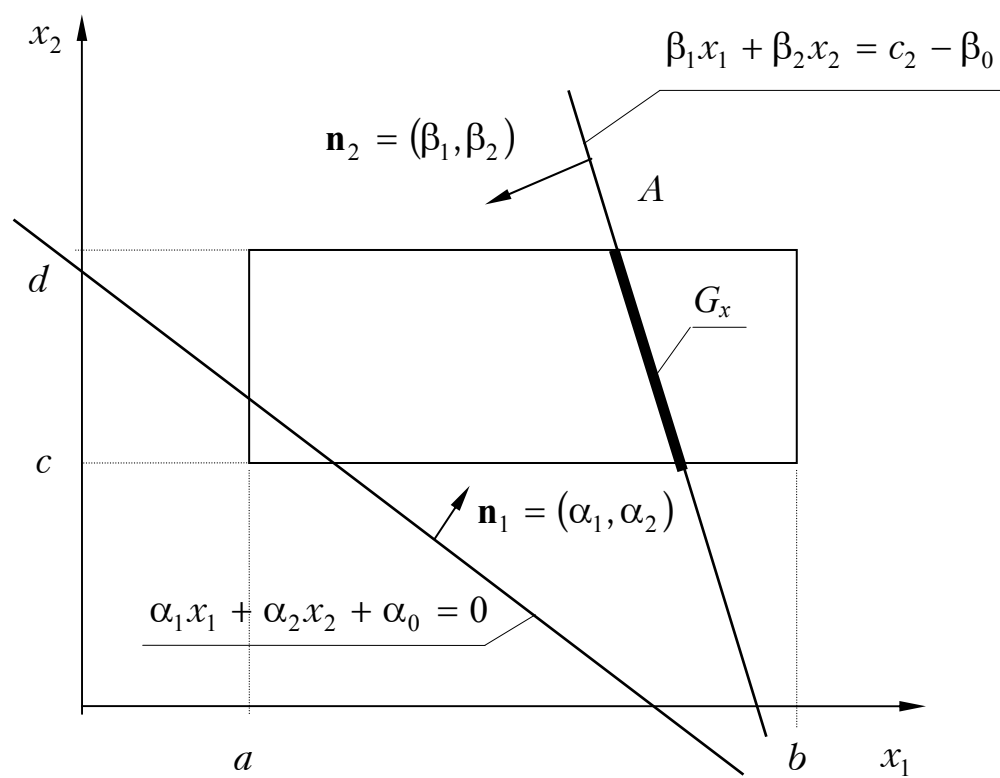
$$\rho(X_1, X_2) = 3642,8 - 129,1X_1 + 668,5X_2 + 53,2X_1X_2 - 513,7X_2^2;$$

$$R_{сж}(X_1, X_2) = 118,5 - 19,5X_1 + 20,9X_2 - 3,2X_2^2,$$

где X_1, X_2 – кодированные значения соответственно концентрации x_1 пластификатора (в % от массы смолы) и степени наполнения x_2 (П:Н по массе);

$$x_{10} = 25, I_1 = 25; x_{20} = 1/7, I_{2H} = 5.$$

a



б

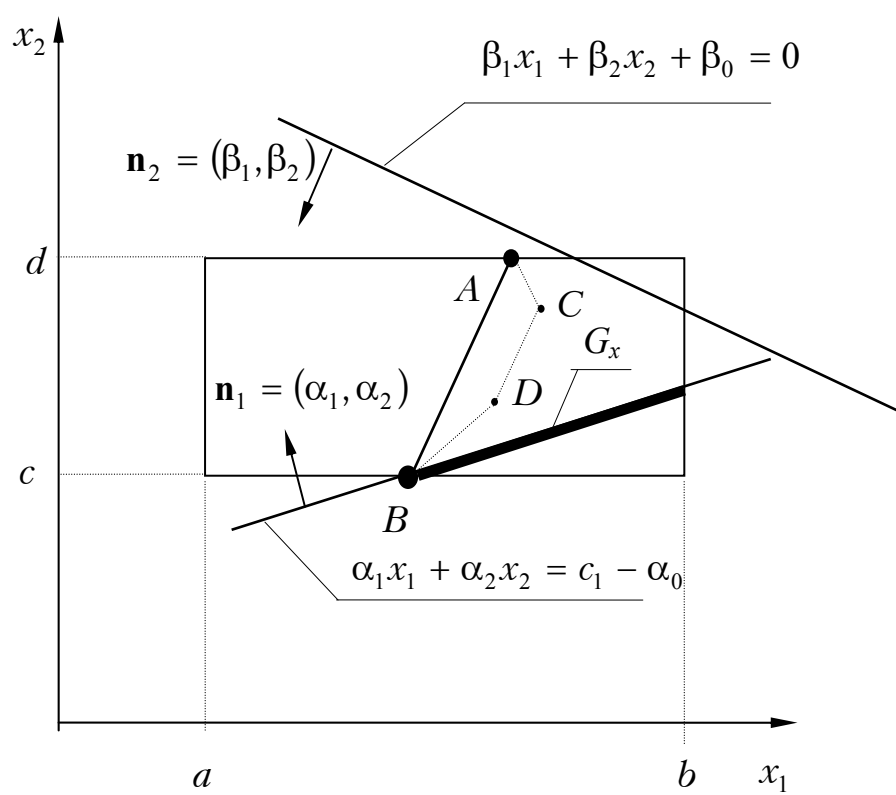


Рис. 3.34. Геометрическое определение множества Парето

В соответствии с предыдущим определением множества Парето сводится к последовательному решению задач *нелинейного* программирования:

$$\text{I. } \rho(x_1, x_2) \rightarrow \max, \mathbf{x} = (x_1, x_2) \in G_X, \rho(x_1, x_2) = \text{const},$$

$$\text{II. } R_{\text{сж}}(x_1, x_2) \rightarrow \max, \mathbf{x} = (x_1, x_2) \in G_X, R_{\text{сж}}(x_1, x_2) = \text{const};$$

где $x_1, x_2 \geq 0$ – натуральные значения факторов.

Решение этих задач производится с использованием метода штрафных функций Эрроу-Гурвица.

На основе экспериментальных данных в качестве области G_X принимается прямоугольник, *соответствующий* $-1 \leq X_1 \leq -0,6$; $0,4 \leq X_2 \leq 0,8$. При этом в области G_f (рис. 3.35):

$$3900 \leq \rho \leq 3950; 140 \leq R_{\text{сж}} \leq 150.$$

На данном рисунке множеству Парето в первом приближении соответствует отрезок AB (принято: $c_1 = 3950$; $c_2 = 142$); второе приближение – ломаная $ADCB$ ($c_3 = 3955$; $c_4 = 144$).

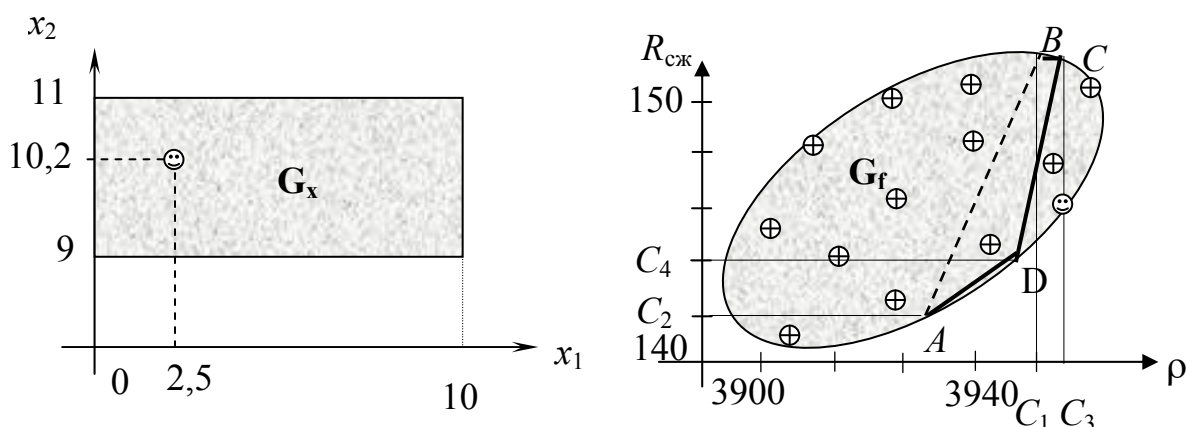


Рис. 3.35. Области G_X и G_f , множество Парето

Эффективность метода подтверждается приводимыми на рис. 3.36 линиями уровня $\rho(X_1, X_2) = \text{const}$ (ветвь гиперболы), $R_{\text{сж}}(X_1, X_2) = \text{const}$ (парабола) квадратичных моделей целевых функций, позволяющими в качестве *оптимальных* принять $x_1 = 2,5$; $x_2 = 10,2$.

Соответствующие им значения плотности и предела прочности: $\rho = 3955$, $R_{\text{сж}} = 145$.

Получение информации о множестве Парето будет достаточным при решении и многих других аналогичных задач материаловедения.

Описанный способ применим и в случае большего числа переменных и частных критериев качества.

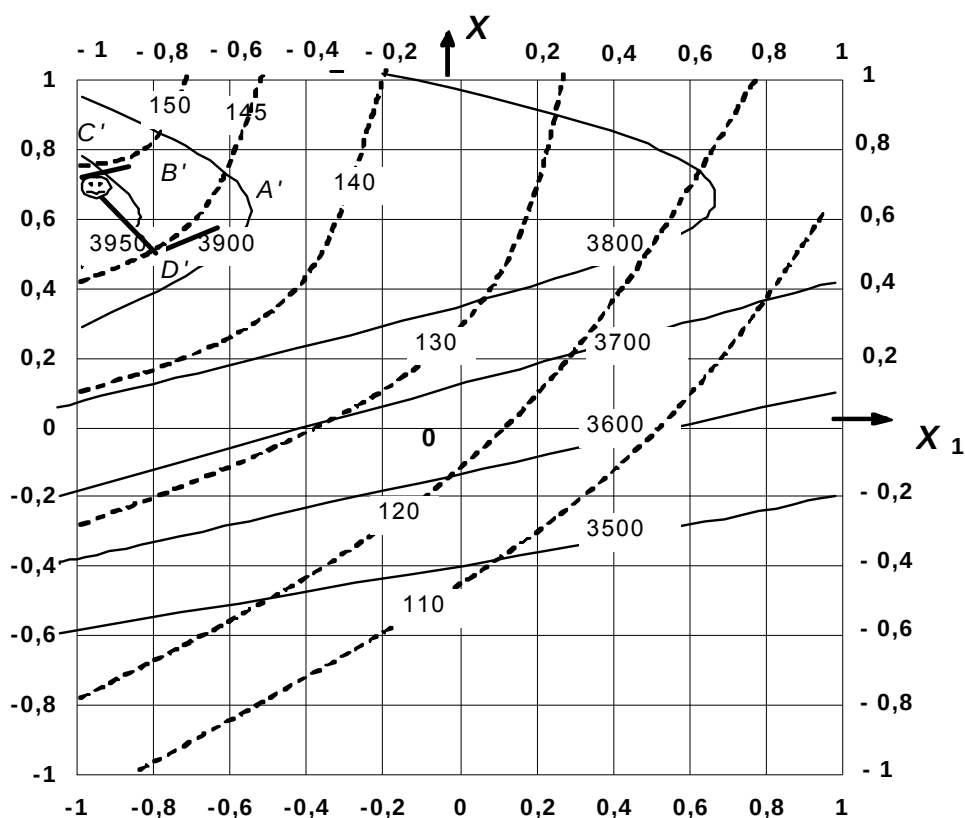


Рис. 3.36. Линии уровня $\rho(X_1, X_2) = \text{const}$, $R_{\text{сж}}(X_1, X_2) = \text{const}$

3.2.5. Метод главных компонент

Управление структурой и свойствами материала осуществляется изменением соответствующих рецептурно-технологических параметров, поэтому естественен подход к синтезу материалов как к задаче управления.

В конечном итоге *управление качеством материала* производится на основе совокупности экспериментально определенных основных свойств. Требуемое число элементов этой совокупности устанавливается исходя из дифференциального порога при выделении классов качества (с обеспечением необходимого уровня соотношения сигнал/шум). Как правило, частные критерии (оценка полноты их множества носит субъективный характер) являются противоречивыми и зависимыми.

Требуются *методы для снижения размерности задач по оценке качества материала с одновременным определением совокупности независимых частных критериев*.

В последнее время при решении самых разнообразных задач получила широкое распространение хеометрика. *Хеометрический подход* основан на применении проекционных математических методов, позволяющих выделять в больших массивах данных латентные переменные и анализировать связи в изучаемой системе. К сожалению, несмотря на простоту и эффективность такого (часто и визуального) подхода к анализу экспери-

ментальных данных, он практически не используется в строительном материаловедении.

Наиболее распространены методы регрессионного анализа, но возможные подходы к понижению размерности задач ими не исчерпываются. Так, эффективным является предложенный К. Пирсоном *метод главных компонент* [24, 25]. Он состоит в отыскании многомерного *эллипсоида рассеяния* эмпирических данных в факторном пространстве, который определяется расположением и длинами полуосей (*главными направлениями* и стандартными отклонениями в пространстве главных направлений).

С использованием метода главных компонент PCA (Principal Component Analysis) в работе производилось ранжирование критериев качества $q_i, i = \overline{1, p}$ по полученным их значениям для n экспериментальных образцов.

Первая главная компонента определялась как направление наибольшего изменения (разброса вдоль некоторой центральной оси – новой переменной) данных $\mathbf{q} = \|q_{ij}\|, i = \overline{1, p}, j = \overline{1, n}$ в декартовой системе координат $Oq_1q_2\dots q_p$ (приближенно – чисто геометрически; уточнение – на основе наилучшей линейной аппроксимации всех исходных точек q_{ij} методом наименьших квадратов). Вторая главная компонента принималась (*по определению!*) ортогональной направлению первой (вдоль нее происходит следующее по величине изменение значений q_{ij}), а третья компонента – перпендикулярной как первой, так и второй (лежит в направлении, в котором происходит третье по величине изменение данных). Аналогично определялись последующие главные направления. Полученная система главных компонент дает совокупность ортогональных осей, каждая из которых лежит в направлении максимального изменения данных *в порядке убывания* этих величин. В силу ортогональности главных компонент в полученном новом наборе переменные – *линейные комбинации исходных переменных* уже не коррелируют друг с другом. Переход от исходной декартовой системы координат к новому набору ортогональных осей позволяет избавиться от зависимости между критериями. Верхний предел числа главных компонент не превышает $\max\{n-1, p\}$. Эффективная размерность пространства главных компонент определяется рангом матрицы $\mathbf{q} = \|q_{ij}\|$. Последняя главная компонента лежит в направлении, в котором разница между образцами будет минимальной (фактически различие образцов здесь невозможно, так как все эти отличия есть лишь случайный шум). Главные компоненты с большими номерами рассматривались как направления, в которых основная составляющая является шумом. Так, метод PCA позволил осуществить декомпозицию исходной матрицы дан-

ных на структурную часть (несколько главных первых компонент, лежащих в направлениях максимальных изменений) и на шум (направления, в которых разница между положением точек мала и ей можно пренебречь).

Каждое из свойств (критериев качества) является интегральной характеристикой материала, зависящей от свойств компонентов, состава, условий приготовления, твердения и т.д. При этом оценка качества композита производится по совокупности как зависимых, так и противоречивых критериев (химическая стойкость, морозо-, термостойкость, сопротивление удару и истиранию, радиационный разогрев, адгезионные свойства, защитные свойства по отношению к стальной арматуре и др.). Методом РСА выделялась совокупность линейных комбинаций исходных критериев (практически независимых), что в последующем с использованием методов планирования эксперимента, многокритериальной оптимизации позволило разработать радиационно-защитные и коррозионно-стойкие материалы, не имеющие мировых аналогов.

Вычислительный аппарат метода допускает компактное представление. Здесь для выборки $\{x_{iu}\}$, $i = \overline{1, k}$, $u = \overline{1, N}$, значений первичных признаков (k – число признаков, N – число измерений) последовательно выполняются указанные ниже процедуры.

1. *Центрирование признаков (частных критериев):*

$$\xi_{ui} = x_{ui} - \bar{x}_i, \quad i = \overline{1, k}, \quad u = \overline{1, N},$$

где $\bar{x}_i = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{ui}$ – выборочное среднее i -го признака.

2. *Определение матрицы ковариаций:*

$$C = (c_{ij}) = \Xi^T \Xi,$$

где $\Xi = (\xi_{ui})$ – матрица центрированных признаков.

3. *Определение собственных значений λ_i и собственных векторов матрицы ковариаций* (всегда имеет k действительных неотрицательных собственных значений, включая кратные).

4. *Сортировка собственных векторов в порядке убывания собственных значений.* Единичные собственные векторы, определяющие главные направления, составляют строки матрицы L k -го порядка. Линейный однородный оператор с матрицей L осуществляет преобразование исходных центрированных данных в некоррелированные и с убывающими дисперсиями.

В отличие от метода наименьших квадратов в методе главных компонент предположение о нормальном распределении эмпирической информации не используется (применим для произвольных данных).

Понижение размерности (разделение исходных данных на содержательную часть и шумы) в рамках метода главных компонент достигается

отбрасыванием направлений, соответствующих малым собственным значениям. По-видимому, общих правил выбора числа значимых главных компонент не существует (определяется величинами собственных значений матрицы ковариаций, задачами исследования (визуализация на плоскости или в пространстве), интуицией исследователя, и т.п.).

Известен и эвристический вероятностный метод оценки необходимого числа главных компонент, а именно, правило сломанной трости [5]. Стоит в сравнении упорядоченных (по убыванию) k собственных значений матрицы ковариаций с длинами l_i «обломков трости» единичной длины, сломанной в $(k-1)$ -й точке (координаты изломов распределены равномерно на отрезке $[0; 1]$).

Очередное i -е главное направление считается значимым, если

$$\frac{\lambda_j}{trC} > l_j, \quad j = \overline{1, i},$$

где trC – матрицы ковариаций.

Приведем результаты практического применения метода главных компонент для оценки качества композиционных материалов со специальными свойствами. В числе приоритетных критериев выделялись: прочность, плотность и пористость материала. Использовались полученные методами математического планирования эксперимента зависимости пористости $q_1(x_1, x_2)$, %, прочности при сжатии $q_2(x_1, x_2)$, МПа и плотности $q_3(x_1, x_2)$, кг/м³ от кодированных объемных долей заполнителя (свинцовая дробь с диаметром 4-5 мм) $x_1 \in [0,5; 0,6]$ и наполнителя (барит, $S_{уд} = 250$ м²/кг) $x_2 \in [0,35; 0,4]$:

$$q_1(x_1, x_2) = 5,18 + 3,44x_1 + 0,96x_2 - 1,33x_1x_2 + 3,83x_1^2;$$

$$q_2(x_1, x_2) = 22,5 - 3,72x_1 + 1,43x_2 - 2,87x_1^2;$$

$$q_3(x_1, x_2) = 7143 - 147x_1 - 181,7x_1^2.$$

Матрица ковариаций, полученная по экспериментальным значениям ξ_{ui} перечисленных показателей, имеет вид:

$$C = \frac{1}{N-1} (\xi_{ui})^T (\xi_{ui}) = \begin{pmatrix} 0,169 & 0,023 & -1,35 \\ 0,023 & 0,220 & 0,149 \\ -1,35 & 0,149 & 21,5 \end{pmatrix}.$$

Собственные значения λ_i и собственные векторы $\mathbf{v}_i$ матрицы ковариаций:

$$\lambda_1 = 0,226, \mathbf{v}_1 = (0,221; 0,975; 0);$$

$$\lambda_2 = 0,077, \mathbf{v}_2 = (0,973; -0,221; 0,063);$$

$$\lambda_3 = 21,6, \mathbf{v}_3 = (-0,063; 0; 0,998).$$

Матрица перехода к главным компонентам $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3$ имеет вид:

$$L = \begin{pmatrix} -0,063 & 0 & 0,998 \\ 0,221 & 0,975 & 0 \\ 0,973 & -0,021 & 0,063 \end{pmatrix};$$

главные компоненты связаны с исходными показателями q_1, q_2, q_3 линейно:

$$\Gamma_1 = -0,063q_1 + 0,990q_3;$$

$$\Gamma_2 = 0,221q_1 - 0,975q_2;$$

$$\Gamma_3 = 0,973q_1 - 0,021q_2 + 0,063q_3.$$

В силу $\lambda_3 \gg \lambda_1$ и $\lambda_3 \gg \lambda_2$ значимая главная компонента единственна и соответствует главному направлению v_3 ; вектор первого главного направления образует малый угол с осью третьей исходной переменной. Доминирующим является третий показатель (средняя плотность).

3.2.6. Принцип Парето

Принцип Парето сформулирован Джураном и состоит в предположении, что большая часть результатов вызывается относительно небольшим числом причин. В основном принцип Парето используется для анализа по специально построенным диаграммам возможных источников брака с целью последующего совершенствования технологии производства (широко применяется в «АвтоВАЗе»). Применительно к технологии по принципу Парето «80 % потерь из-за брака или переделок происходит вследствие 20 % причин». Точно также Парето обнаружил, что 80 % благосостояния контролируется 20 % людей. И вообще, в количественной формулировке 80 % всех возникающих проблем происходит из-за 20 % исходных материалов, уровня подготовки операторов, работы машин и т.д.

Принцип Парето наглядно характеризует взаимоотношения «причины-результаты» в системе и является одним из наиболее используемых инструментов принятия решений.

Ниже приводится пример использования диаграмм и принципа Парето для *управления качеством* по виду кинетических процессов формирования требуемых структуры и свойств эпоксидных композитов (ЭК) повышенной плотности для защиты от радиации с использованием отходов стекольной промышленности. *По Парето начальные 20 % определяют последующие 80 % времени выхода контролируемого параметра на эксплуатационное значение.*

При скалярном управлении $y(t)$ часто оптимизация осуществляется на основе функционала

$$I = \int_0^T [\alpha y^2(t) + \beta \dot{y}^2(t)] dt.$$

В частном случае при $\alpha = 1, \beta = 0$

$$I = I_1 = \int_0^T y^2(t) dt$$

и оптимизация обеспечивает перевод объекта из начального в конечное состояние на промежутке $[0, T]$ с *минимальной энергией* управления.

Учитывая, что управление структурой и свойствами материала осуществляется изменением соответствующих рецептурно-технологических параметров, естественен подход к *синтезу материалов* как к задаче управления. Воспользуемся этой аналогией при синтезе материалов.

Обычно структура композита в *большей степени* зависит от скорости расхода энергии, чем от ее величины, сообщенной системе. В связи с этим наряду с I_1 рассмотрим функционал

$$I = I_2 = \int_0^t \dot{x}^2(t) dt$$

и кумулятивную кривую $I_2(t)$.

Как оказалось, для всех основных кинетических процессов $x(t)$, $t \in [0, T]$ выполняется условие

$$I(0, 2T) \geq 0,8 I(T),$$

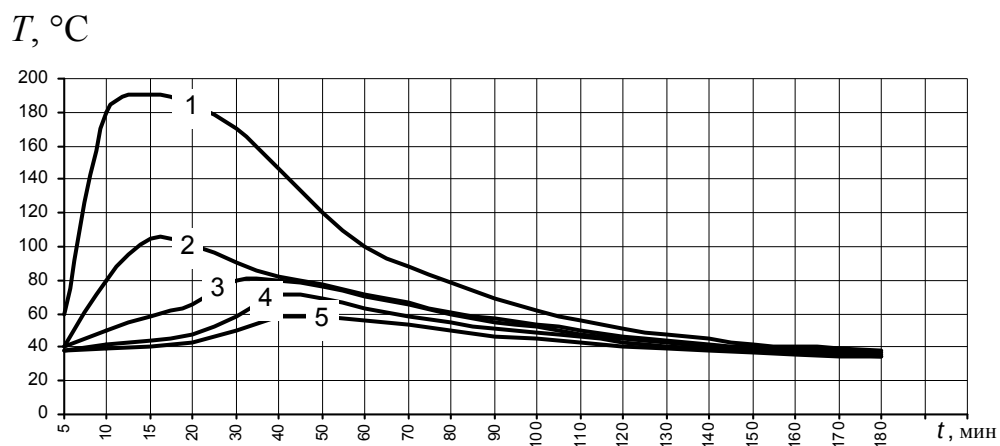
что подтверждает возможность использования принципа Парето при оценке формирования физико-механических характеристик материалов. А именно, *структура и свойства материала на 80 % определяются начальными 20 % длительности выхода контролируемого параметра на эксплуатационное значение.*

На рис. 3.37, 3.38 приводятся кинетические процессы $x(t)$ и соответствующие им кумулятивные кривые тепловыделения и набора прочности для указанных ЭК. Отметим также, что из сравнения кумулятивных кривых $I_1(t)$ и $I_2(t)$ следует, что *при использовании диаграмм Парето необходимо исходить из функционала I_2 .*

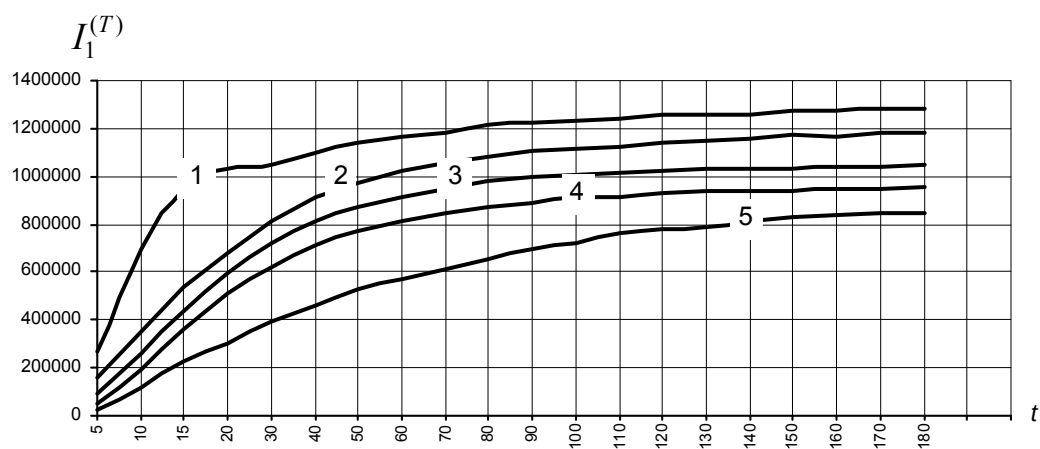
Как подтвердили многочисленные исследования, применение принципа Парето значительно облегчает и разработку рецептуры (содержание ингредиентов, гранулометрический состав и т.д.): позволяет *выделить элементы в рецептуре, определяющие, в основном, эксплуатационные характеристики материала.* Для рассматриваемых ЭК прочность и плотность, в основном, определяются степенью наполнения и видом модификатора.

Принцип Парето использовался и для итеративного способа улучшения качества материала на основе последовательного построения на каждом этапе соответствующих диаграмм Парето.

а



б



в

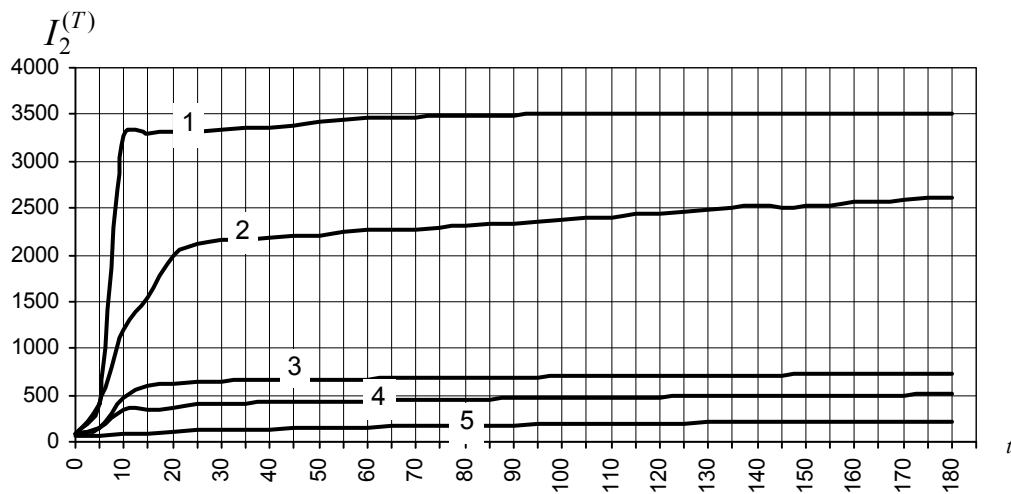
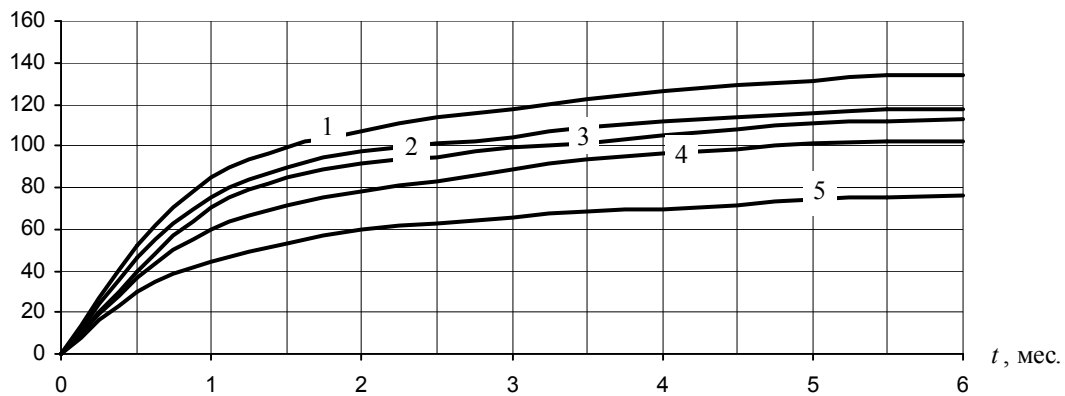


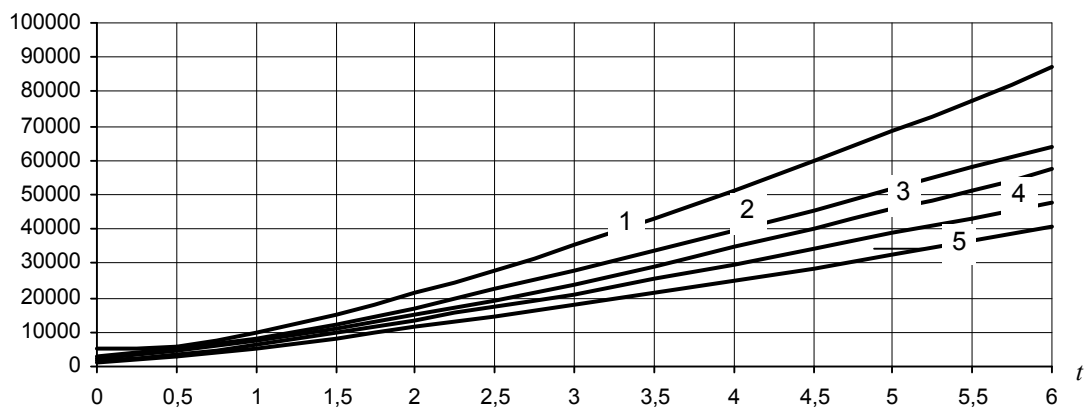
Рис. 3.37. Зависимость температуры саморазогрева при полимеризации
эпоксидного композита, $I_1^{(T)}$ и $I_2^{(T)}$ от t , мин:
1 – не наполненная смола; 2 – П/Н = 1/5; 3 – П/Н = 1/10;
4 – П/Н = 1/15; 5 – П/Н = 1/20

а $R_{сж}$, МПа



б

$I_1^{(R_{сж})}$



в

$I_2^{(R_{сж})}$

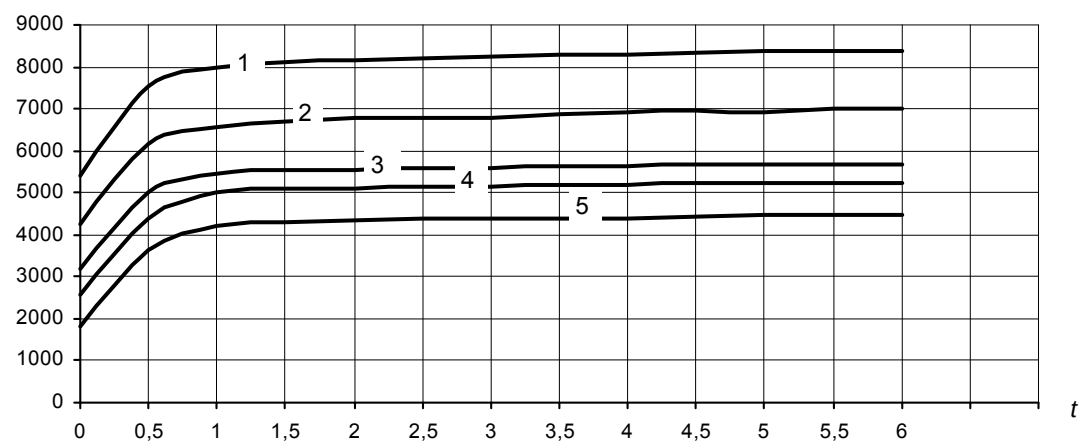


Рис. 3.38. Зависимость $R_{сж}$, $I_1^{(R_{сж})}$ и $I_2^{(R_{сж})}$ от t , мес:
 1 – П/Н = 1/15; 2 – П/Н = 1/10; 3 – П/Н = 1/10 и ММ;
 4 – П/Н = 1/20; 5 – П/Н = 1/5

4. ВЕРОЯТНОСТНЫЕ МЕТОДЫ

При решении прикладных задач наряду с классическими детерминистскими принципами широко используется вероятностный подход [26].

Детерминистскими принципами предполагается, что одно явление (причина) при вполне определённых условиях с необходимостью порождает другое (следствие). Однако как бы искусно и последовательно не использовались эти принципы, оказалось, что они не позволяют описать многие сложные реальные явления. Более глубокое изучение этих явлений потребовало отказа от детерминистских принципов, то есть отказа от однозначного описания явлений.

Это привело к необходимости использования нового математического аппарата – теории вероятностей, в основе которой лежит математическая модель эксперимента (испытания, наблюдения, измерения и т.д.).

А необходимость обработки опытных данных, полученных в результате наблюдений над случайными явлениями, привела к возникновению как науки математической статистики.

В настоящем разделе обсуждаются вопросы приложений вероятностных методов к решению ряда задач практического материаловедения.

4.1. Зависимость событий

Проиллюстрируем на конкретном примере.

Пусть требуется оценить эффективность применения некоторой добавки в композиционном материале.

Обозначим:

A – событие, заключающееся в использовании добавки,

B – факт получения необходимых свойств.

Тогда $P(B|A)$ – вероятность получения необходимых свойств при использовании данной добавки, $P(B|\bar{A})$ – вероятность получения указанных свойств без применения добавки.

Знания этих двух вероятностей вполне достаточно для суждения об эффективности добавки.

Вероятность $P(B|A)$ даёт представление о том, насколько возможно получить необходимые свойства добавлением этой компоненты. Но, не зная о степени невозможности получить указанные свойства без применения данной компоненты ($P(\bar{B}|\bar{A})$), нельзя судить о степени целесообразности применения добавки.

Поскольку применение добавки субъективно, то при характеристике зависимости между A и B с помощью одного коэффициента его следует

выбрать так, чтобы он не изменял своего значения при изменении $P(AB)$ при неизменных значениях $P(B|A)$ и $P(B|\bar{A})$.

Отметим, что нельзя вполне охарактеризовать зависимость между событиями при помощи одного числа. Для полной характеристики надо знать 3 числа, которые позволили бы определить вероятности всех 4 совмещений: AB , $A\bar{B}$, $\bar{A}B$, $\bar{A}\bar{B}$. Их сумма, как вероятность суммы единственно возможных несовместных событий, равна 1.

Известно, для независимых событий A и B

$$P(AB) = P(B)P(A),$$

а для зависимых –

$$P(AB) = P(A)P(B|A).$$

Тогда в известной мере связь между событиями B и A можно охарактеризовать величиной

$$\delta = P(AB) - P(A)P(B), \quad (4.1)$$

называемой связью между A и B .

Однако в рассматриваемом случае δ оказывается мало пригодной для оценки эффективности применения добавки, т.к. она существенно зависит от $P(A)$. Это следует из

$$\delta = P(A)P(\bar{A})[P(B|A) - P(B|\bar{A})]. \quad (4.2)$$

Как видим, значение δ действительно существенно зависит от $P(A)$ и $P(\bar{A})$.

Введём константу

$$\rho_B = \frac{\delta}{P(A)P(\bar{A})} = P(B|A) - P(B|\bar{A}). \quad (4.3)$$

Она часто называется коэффициентом регрессии события B относительно события A .

В рассматриваемом примере ρ_B показывает, насколько увеличивается вероятность получения необходимых свойств, если применяется добавка.

Коэффициент регрессии ρ_B , так же как и связь δ , обращается в нуль тогда и только тогда, если факты A и B независимы (ρ_B имеет знак δ).

Отметим, $\delta > 0$, если вероятность одного факта возрастает после наступления другого; $\delta < 0$, если наступление одного из них уменьшает вероятность другого. Это видно из следующего:

$$\delta = P(AB) - P(A)P(B) = P(A)P(B|A) - P(A)P(B) = P(A)[P(B|A) - P(B)].$$

Откуда

$$P(B|A) = P(B) + \frac{\delta}{P(A)}. \quad (4.4)$$

Из (4.3) следует $|\rho_B| \leq 1$, так как $P(B|A)$ и $P(B|\bar{A})$ положительны и меньше единицы.

Отметим, что для тождественных событий A и $B = A$

$$P(A\bar{B}) = P(\bar{A}B) = 0.$$

Поэтому из (4.3)

$$\delta = P(AB)P(\bar{A}\bar{B}) = P(A)P(\bar{A}) = \delta_{\max}.$$

Для тождественных событий

$$P(B|\bar{A}) = 0,$$

$$P(B|A) = 1.$$

Откуда для них $\rho_B = 1$, $\delta = \delta_{\max} = P(A)P(\bar{A})$.

Если B тождественно с $\bar{A}$, то

$$P(B|\bar{A}) = 1,$$

$$P(B|A) = 0,$$

и

$$\rho_B = -1,$$

$$\delta = -P(A)P(\bar{A}).$$

Аналогично можно ввести коэффициент регрессии ρ_A :

$$\rho_A = P(A|B) - P(A|\bar{B}), \quad (4.5)$$

$$\rho_A = \frac{\delta}{P(B)P(\bar{B})}. \quad (4.6)$$

Имеем

$$\rho_A = \rho_B \frac{\rho_A}{\rho_B}.$$

Откуда

$$\rho_A = \rho_B \frac{P(A)P(\bar{A})}{P(B)P(\bar{B})}. \quad (4.7)$$

Из (4.7) следует, что ρ_A и ρ_B имеют одинаковые знаки, но численные значения могут существенно различаться. Знание обоих коэффициентов позволяет по-существу определить взаимоотношение между A и B , так как каждый из них выражает разность между вероятностями одного из событий в случае наступления или ненаступления другого.

Для того, чтобы $\rho_A = \rho_B$, необходимо и достаточно, чтобы имело место одно из двух условий:

1. $P(A) = P(B)$;
2. $P(\bar{A}) = P(B)$,

что следует из (4.7).

Иногда для характеристики зависимости между A и B ограничиваются указанием средней геометрической из обоих коэффициентов регрессии:

$$\begin{aligned} R = R_{AB} &= \pm \sqrt{\rho_A \rho_B} = \pm \sqrt{\rho_A \rho_B \frac{P(B)P(\bar{B})}{P(A)P(\bar{A})}} = \\ &= \rho_A \sqrt{\frac{P(B)P(\bar{B})}{P(A)P(\bar{A})}} = \rho_B \sqrt{\frac{P(A)P(\bar{A})}{P(B)P(\bar{B})}} \end{aligned} \quad (4.8)$$

(знак R должен совпадать со знаками коэффициентов регрессии ρ_A и ρ_B).

Число R , определяемое по (4.8), называется коэффициентом корреляции между A и B .

Коэффициент корреляции имеет наиболее существенное значение, когда ρ_A и ρ_B равны, то есть когда $P(A) = P(B)$ или $P(\bar{A}) = P(B)$.

Справедливы свойства:

$$1. R_{A\bar{B}} = -R_{AB},$$

$$R_{\bar{A}\bar{B}} = R_{AB}.$$

$$2. R_{AB} = 0 \text{ тогда и только тогда, когда } A \text{ и } B \text{ независимы.}$$

$$3. \text{ Пусть даны } P(A) \text{ и } P(B).$$

Тогда $P(B|A)$ и $P(A|B)$ возрастают вместе с возрастанием R , а $P(B|A)$ уменьшается с возрастанием R .

$$4. |R| \leq 1, \text{ причём } R = 1 \text{ тогда и только тогда, когда } P(A) = P(B) = P(A \cap B); \\ R = -1 \text{ тогда и только тогда, когда } P(A) = P(\bar{B}) = P(A \cap \bar{B}).$$

$$\text{Справедливо:} \quad R \leq \sqrt{\frac{P(\bar{A})P(B)}{P(A)P(\bar{B})}}, \quad (4.9)$$

иначе $P(B|A)$ была бы отрицательной.

Коэффициент корреляции может быть значительно меньше 1 и, несмотря на это, A может быть следствием B .

Коэффициент корреляции даёт весьма неточное представление о характере зависимости между A и B , если кроме R неизвестны индивидуальные вероятности этих событий (или по крайней мере значение $\frac{P(\bar{A})P(B)}{P(A)P(\bar{B})}$, являющееся наибольшим значением R при данных $P(A)$ и $P(B) \leq P(A)$, которое позволяет по (4.8) определить оба коэффициента регрессии).

Наряду с коэффициентами регрессии и корреляции рассматривается ещё коэффициент связи между A и B :

$$Q = \frac{\delta}{P(A|B)P(\bar{A}|\bar{B}) + P(A|\bar{B})P(\bar{A}|B)} = \frac{P(A|B)P(\bar{A}|\bar{B}) - P(A|\bar{B})P(\bar{A}|B)}{P(A|B)P(\bar{A}|\bar{B}) + P(A|\bar{B})P(\bar{A}|B)}. \quad (4.10)$$

Как и коэффициент корреляции, величина Q симметрична по отношению к событиям A и B , но его преимущество перед коэффициентом R заключается в том, что Q подобно ρ_B определяется всецело вероятностями $P(B|A)$ и $P(B|\bar{A})$, но не зависит от $P(A)$ (а также подобно ρ_A обладает аналогичным свойством по отношению к другому событию).

Действительно, справедливо:

$$Q = \frac{\rho_B}{1 - [P(B|A)P(B|\bar{A}) + P(\bar{B}|A)P(\bar{B}|\bar{A})]}. \quad (4.11)$$

Заменяя A и B , получим:

$$Q = \frac{\rho_A}{1 - [P(A|B)P(A|\bar{B}) + P(\bar{A}|B)P(\bar{A}|\bar{B})]}. \quad (4.12)$$

Из (4.10) и (4.11) следует:

- Q имеет знак ρ_A и ρ_B ;
- $|Q| \geq \rho_A$,
- $|Q| \geq \rho_B$,
- $Q = 0$ для независимых событий,
- $Q = \rho_B$ тогда и только тогда, когда

$$P(B|A)P(B|\bar{A}) + P(\bar{B}|A)P(\bar{B}|\bar{A}) = 0,$$

т.е. когда A и B совпадают ($P(B|\bar{A}) = P(\bar{B}|A) = 0$) или противоположны ($P(B|A) = P(\bar{B}|\bar{A}) = 0$).

В этом случае $Q = \rho_A = \rho_B = \pm 1$.

Из $R = \pm \sqrt{\rho_A \rho_B}$ следует $|Q| \geq |R|$.

При $|R| = 1$

$$Q = R = \rho_A = \rho_B = \pm 1,$$

– $|Q| > \rho_A, \rho_B$, если $|R| \neq 0, 1$.

Коэффициент связи Q является более чувствительным показателем связи между A и B , чем коэффициенты регрессии и корреляции.

Из выражения (4.10) следует:

1. Если $Q = 1$, то одно из событий A и B является необходимым следствием другого (именно то, вероятность которого больше) т.е.

$$P(AB) = P(A) \text{ при } P(A) \leq P(B).$$

2. $Q = -1$ означает, что A и B несовместимы, т.е. $P(AB) = 0$; либо их отрицания $\bar{A}$ и $\bar{B}$ несовместимы, т.е. $P(\bar{A}\bar{B}) = 0$.

Из изложенного вытекает справедливость следующих утверждений:

1. Знание ρ_A, ρ_B, Q даёт исчерпывающую характеристику взаимоотношения между A и B , позволяя вычислить вероятности как самих фактов, так и всех совмещений $AB, \bar{A}B, A\bar{B}, \bar{A}\bar{B}$.

2. Если $P(A) = P(B)$, то роль обоих коэффициентов регрессии ρ_A и ρ_B всецело выполняется коэффициентом корреляции R (здесь $R = \rho_A = \rho_B$).

3. В общем случае, когда

$$P(A) \begin{matrix} > \\ < \end{matrix} P(B)$$

и ρ_A и ρ_B не даны индивидуально, а даны только

$$R = \pm \sqrt{\rho_A \rho_B}$$

и коэффициент связи Q , эти числа дают также довольно полную картину взаимоотношения между A и B , так как близость к 1 коэффициента Q свидетельствует о том, что один по крайней мере из фактов приобретает очень большую вероятность при осуществлении другого и, смотря по тому, насколько велик коэффициент корреляции, можно судить о том, в какой мере эта зависимость обратима.

Очевидна возможность использования указанных результатов для решения обратной задачи (задача экспертизы). А именно: определение факта использования добавки при наличии определённых свойств у материала.

Для большей наглядности в дальнейшем примем:

$$P(B|A) = \frac{29}{30}; \quad P(B|\bar{A}) = \frac{26}{30}; \quad P(\bar{B}|A) = \frac{1}{30}; \quad P(\bar{B}|\bar{A}) = \frac{4}{30}.$$

Имеем

$$\delta = 0,1P(A)P(\bar{A}).$$

Как видим, δ существенно зависит от $P(A)$ и $P(\bar{A})$, то есть от вероятности использования и неиспользования добавки, иначе говоря, связь δ плохо характеризует эффективность применения добавки.

По формуле (4.5)

$$\rho_B = 0,1.$$

Отсюда с учётом $\rho_B = P(B|A) - P(B|\bar{A})$, следует, что вероятность получения необходимых свойств при применении добавки больше вероятности получения необходимых свойств без применения добавки на $\rho_B = 0,1$.

Коэффициент регрессии

$$\rho_A = P(A|B) - P(A|\bar{B}),$$

но он менее интересен в рассматриваемом случае, ибо показывает, насколько вероятнее применение добавки в случае получения необходимых свойств, чем вероятность применения добавки при отсутствии необходимых свойств.

Отметим, что в данном случае даже знания индивидуальных вероятностей $P(B|A)$, $P(B|\bar{A})$ недостаточно для определения ρ_A .

Действительно,

$$P(B) = P(A)P(B|A) + P(\bar{A})P(B|\bar{A})$$

(следует из $B = AB + \bar{A}B$).

При этом

$$\rho_A = \rho_B \cdot \frac{P(A)P(\bar{A})}{P(B)P(\bar{B})}.$$

Таким образом, ρ_A зависит не только от $P(B|A)$, $P(B|\bar{A})$, но ещё и от $P(A)$.

Может оказаться ρ_A очень малым, если мала вероятность $P(A)$, и очень большим – при большой вероятности $P(A)$.

Например, при $P(A) = \frac{3}{4}$, $P(\bar{A}) = \frac{1}{4}$ будем иметь:

$$P(B) = \frac{113}{120},$$

$$P(\bar{B}) = \frac{7}{120},$$

$$\rho_A = \rho_B \frac{2700}{791} = \frac{270}{791}.$$

Имеем $R = 0,1848$.

Коэффициент связи

$$Q = 0,634 > \rho_B = 0,1.$$

Если бы применение добавки всегда приводило к получению необходимых свойств, то имели бы $P(B|A) = 1$.

Откуда с очевидностью следует

$$P(\bar{B}|A) = 0;$$

$$P(\bar{B}|\bar{A}) = 1 - P(B|\bar{A}) = 1 - \frac{26}{30} = \frac{4}{30};$$

$$\rho_B = P(B|A) - P(B|\bar{A}) = 1 - \frac{26}{30} = \frac{4}{30};$$

$$P(B|\bar{A}) = P(B|A) - \rho_B = 1 - \frac{4}{30} = \frac{26}{30};$$

$$Q = \frac{1 \cdot \frac{4}{30} - 0 \cdot \frac{26}{30}}{1 \cdot \frac{4}{30} + 0 \cdot \frac{26}{30}} = 1.$$

В общем случае

$$R = \rho_B \sqrt{\frac{P(A)P(\bar{A})}{P(B)P(\bar{B})}} =$$

$$= \rho_B \sqrt{\frac{P(A)(1 - P(A))}{\left[P(A)P(B|A) + P(\bar{A})P(B|\bar{A}) \right] (1 - P(B))}}.$$

При $P(B|A) = 1$, $P(B|\bar{A}) = \frac{26}{30}$

$$R = \frac{4}{30} \sqrt{\frac{P(A)}{\frac{4}{30} \left(\frac{26}{30} + \frac{4}{30} P(A) \right)}}$$

и существенно зависит от того, как часто применяется добавка.

При изменении $P(A)$ от 0 до 1 R меняется от 0 до $\sqrt{\frac{4}{30}}$.

Ниже рассматривается определение параметров зависимостей при различных практических ситуациях.

1. Определение $P(B|A)$ и $P(B|\bar{A})$ по известным ρ_B и Q .

Имеем:

$$\rho_B = P(B|A) - P(B|\bar{A});$$

$$\begin{aligned} Q &= \frac{\rho_B}{P(B|A)P(\bar{B}|\bar{A}) + P(\bar{B}|A)P(B|\bar{A})} = \\ &= \frac{\rho_B}{P(B|A)P(B|\bar{A}) - 2P(B|A)P(B|\bar{A})}. \end{aligned}$$

Таким образом, для определения $P(B|A)$ и $P(B|\bar{A})$ имеем два уравнения:

$$\left. \begin{aligned} P(B|A) - P(B|\bar{A}) &= \rho_B; \\ \frac{P(B|A) - P(B|\bar{A})}{P(B|A) + P(B|\bar{A}) - 2P(B|A)P(B|\bar{A})} &= Q \end{aligned} \right\}.$$

Исключая $P(B|\bar{A})$, получим:

$$\left[P(B|A) \right]^2 - (1 + \rho_B)P(B|A) + \frac{\rho_B}{2Q}(1 + Q) = 0.$$

Откуда

$$P(B|A) = \frac{1 + \rho_B \pm \sqrt{1 + \rho_B^2 - \frac{2\rho_B}{Q}}}{2}; \quad (4.13)$$

$$P(B|\bar{A}) = P(B|A) - \rho_B = \frac{1 - \rho_B \pm \sqrt{1 + \rho_B^2 - \frac{2\rho_B}{Q}}}{2}. \quad (4.14)$$

При одинаковых знаках $+$ или $-$ в (4.13) и (4.14) получили две пары решений.

Зная $P(B|A)$, $P(B|\bar{A})$, найдём:

$$P(\bar{B}|A) = 1 - P(B|A); \quad (4.15)$$

$$P(\bar{B}|\bar{A}) = 1 - P(B|\bar{A}). \quad (4.16)$$

2. Определение $P(A|B)$ и $P(\bar{A}|\bar{B})$ по известным ρ_A и Q .

Имеем:

$$\left. \begin{aligned} P(A|B) - P(A|\bar{B}) &= \rho_A \\ \frac{P(A|B) - P(A|\bar{B})}{P(A|B) + P(A|\bar{B}) - 2P(A|B)P(A|\bar{B})} &= Q \end{aligned} \right\}.$$

Откуда

$$P(A|B) = \frac{1 + \rho_A \pm \sqrt{1 + \rho_A^2 - \frac{2\rho_A}{Q}}}{2}; \quad (4.17)$$

$$P(A|\bar{B}) = \frac{1 - \rho_A \pm \sqrt{1 + \rho_A^2 - \frac{2\rho_A}{Q}}}{2}; \quad (4.18)$$

$$P(\bar{A}|B) = 1 - P(A|B); \quad (4.19)$$

$$P(\bar{A}|\bar{B}) = 1 - P(A|\bar{B}). \quad (4.20)$$

3. Определение $P(A)$ и $P(B)$ по известным ρ_A , ρ_B , Q .

Справедливы соотношения:

$$P(A) = P(B)P(A|B) + P(\bar{B})P(A|\bar{B});$$

$$P(B) = P(A)P(B|A) + P(\bar{A})P(B|\bar{A}),$$

которые следуют из

$$A = B A + \bar{B} A;$$

$$B = A B + \bar{A} B.$$

Из этих уравнений следует:

$$P(A) = P(B)[P(A|B) - P(A|\bar{B})] + P(A|\bar{B}) = P(B)\rho_A + P(A|\bar{B});$$

$$P(B) = P(A)[P(B|A) - P(B|\bar{A})] + P(B|\bar{A}) = P(A)\rho_B + P(B|\bar{A})$$

(получаются заменой $P(\bar{B})$, $P(\bar{A})$ на $1 - P(B)$ и $1 - P(A)$).

Тогда

$$P(A) = \frac{P(A|B) + \rho_A P(B|\bar{A})}{1 - R^2}; \quad (4.21)$$

$$P(B) = \frac{P(B|\bar{A}) + \rho_B P(A|\bar{B})}{1 - R^2}. \quad (4.22)$$

4. Определение $P(AB)$, $P(A\bar{B})$, $P(\bar{A}B)$, $P(\bar{A}\bar{B})$ по известным ρ_A , ρ_B , Q .

$$P(AB) = P(A)P(B|A); \quad (4.23)$$

$$P(A\bar{B}) = P(A)P(\bar{B}|A); \quad (4.24)$$

$$P(\bar{A}B) = (1 - P(A))P(B|\bar{A}); \quad (4.25)$$

$$P(\bar{A}\bar{B}) = (1 - P(A))P(\bar{B}|\bar{A}). \quad (4.26)$$

Таким образом, знание ρ_A , ρ_B , Q позволяет определить все требуемые вероятности. Для этого следует воспользоваться формулами (4.13) – (4.26).

Замечания. В формулах (4.13), (4.14), (4.15), (4.16) всегда должны быть соблюдены неравенства

$$1 + \rho_B^2 \geq \frac{2\rho_B}{Q}; \quad (4.27)$$

$$1 + \rho_A^2 \geq \frac{2\rho_A}{Q}. \quad (4.28)$$

Из выражений (4.27), (4.38) следует:

$$|\rho_A| \leq \frac{|Q|}{1 + \sqrt{1 + Q^2}};$$

$$|\rho_B| \leq \frac{|Q|}{1 + \sqrt{1 + Q^2}}.$$

Перемножая эти неравенства, получим:

$$|R| \leq \frac{|Q|}{1 + \sqrt{1 + Q^2}}. \quad (4.29)$$

Откуда

$$|Q| \geq \frac{2|R|}{1 + R^2}. \quad (4.30)$$

4.2. Расчет линейной корреляции

В технике часто сталкиваются с понятием функциональной зависимости, когда какая-либо физическая величина определяется как однозначная функция одной или нескольких переменных. Но функциональная

связь может существовать и между случайными величинами. Кроме того, между случайными величинами может существовать и связь другого рода, проявляющаяся в том, что одна из них реагирует на изменение другой изменениями закона распределения. Такая связь называется стохастической (вероятностной). Стохастическая связь между двумя случайными величинами появляется обычно тогда, когда имеются общие случайные факторы, влияющие как на одну, так и на другую величину наряду с другими неодинаковыми для обеих случайных величин случайными факторами. Так, например, если X представляет некоторую функцию

$$X = f(Z_1, \dots, Z_m, V_1, \dots, V_k)$$

от случайных величин $Z_1, \dots, Z_m, V_1, \dots, V_k$, а Y представляет собой функцию

$$Y = \varphi(Z_1, \dots, Z_m, U_1, \dots, U_e)$$

от тех же случайных величин $Z_1, \dots, Z_m$ и некоторой совокупности других $U_1, \dots, U_e$, то величины X и Y будут между собой стохастически связаны.

Стохастические зависимости изучаются методами теории корреляции.

Основное применение, которое находит теория корреляции, относится к решению задачи обоснованного прогноза, то есть указания пределов, в которых с наперёд заданной надёжностью будет содержаться интересующая величина, если другие связанные с ней величины получают определённые значения. Подобного рода задача обобщает весьма разнообразные вопросы, возникающие на практике. Так, например, может интересоваться влияние на тот или иной количественный признак качества строительной конструкции припусков и допусков на предыдущих операциях или требуется установить влияние процентного содержания компонент на прочность композиционного материала. Часто бывает необходимо установить связь показателей качества между собой или взаимную связь производственных факторов. Все эти и подобные им вопросы могут быть исследованы с помощью приёмов теории корреляции.

Для большей наглядности и простоты рассмотрим лишь систему двух случайных величин X и Y .

Пусть вероятность попадания случайной величины (X, Y) в точку (x_i, y_j) равна P_{ij} , то есть

$$P_{ij} = P(X = x_i; Y = y_j), \quad i = \overline{1, n}, \quad j = \overline{1, m}.$$

Тогда вероятность P_{ij} по правилу умножения вероятностей можно представить в виде

$$P_{ij} = P(X = x_i) P(Y = y_j | X = x_i),$$

где

$$P(X = x_i) = P_{i1} + P_{i2} + \dots + P_{im}.$$

Отсюда находим условные вероятности

$$P(Y = y_j | X = x_i) = \frac{P_{ij}}{P_{i1} + P_{i2} + \dots + P_{im}}, \quad j = \overline{1, m},$$

которые определяют условное распределение вероятностей величины Y при условии $X = x_i$ ($i = 1, 2, \dots, n$).

Стохастическая (корреляционная) зависимость проявляется в том, что при изменении одной из величин X изменяется условное математическое ожидание другой величины Y :

$$M(Y|X=x) = \sum_{j=1}^n y_j P(Y=y_j|X=x) = \sum_{j=1}^n y_j P(y_j|x).$$

Пусть, например, при $X = x_1$ условное математическое ожидание величины Y равно $M(Y|x_1) = M(Y|X=x_1)$. Если x будет изменяться, то, вообще говоря, будет изменяться и условное математическое ожидание $M(Y|x)$. Таким образом, условное математическое ожидание величины Y можно рассматривать как функцию от x :

$$M(Y|x) = \bar{y}(x).$$

Функция $\bar{y}(x)$ называется регрессией Y по X ; уравнение $y = \bar{y}(x)$ – уравнением регрессии Y по X ; линия, определяемая этим уравнением в плоскости XOY , называется линией регрессии Y по X (для рассматриваемых нами дискретных величин “линия” будет состоять из изолированных точек плоскости).

Аналогично определяются регрессия $M(X|y) = \bar{x}(y)$, уравнение регрессии и линия регрессии величины X по Y .

К числу основных задач корреляции относятся:

- установление вида функции регрессии, то есть формы связи между случайными величинами;
- оценка силы (тесноты) этой связи.

Заметим, что если имеется строгая функциональная зависимость, то при данном значении $X = x$ величина Y может принять лишь одно определённое значение, равное $\bar{y}(x)$. Этот случай может рассматриваться как своего рода предельный к случаю стохастической зависимости, когда рассеивание вокруг условного центра $\bar{y}(x)$ равно нулю. Как правило, для данного значения $X = x$ наблюдается более или менее значительное рассеивание около центра $\bar{y}(x)$. Мерой этого рассеивания может служить условная дисперсия Y при данном X , то есть

$$\sigma^2(Y|x) = D(Y|x) = \sum_x (y - \bar{y}(x))^2 P(Y|x).$$

Линия, определяемая этим уравнением, называется скедастической.

Прогноз величины Y по заданному значению x тем точнее, чем меньше в среднем условные дисперсии

$$\sigma^2(Y|x) = \sum_x P(x) \sigma_{Y|x}^2,$$

то есть чем ближе зависимость к строго функциональной.

Наиболее простым случаем является тот, когда обе функции регрессии

$$M(Y|x) = \bar{y}(x), \quad M(X|y) = \bar{x}(y)$$

являются линейными и обе линии регрессии будут прямыми линиями. Эти прямые называются прямыми регрессиями.

Уравнения прямых регрессии, получаемые по эмпирическим данным, имеют вид:

$$y - \bar{y}_0 = r^* \frac{S_y}{S_x} (x - \bar{x}_0); \quad x - \bar{x}_0 = r^* \frac{S_x}{S_y} (y - \bar{y}_0),$$

где $\bar{x}_0 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$, $\bar{y}_0 = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n y_j$ – эмпирические (выборочные) средние;

$S_x^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_0)^2$, $S_y^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_0)^2$ – эмпирические (выборочные) дисперсии;

$$r^* = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_0)(y_i - \bar{y}_0)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_0)^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_0)^2}} \quad \text{– эмпирический (выборочный) коэффициент корреляции.}$$

Напомним, что теоретический коэффициент корреляции случайных величин X, Y определяется как отношение корреляционного момента

$$K_{x,y} = M((X-M(X))(Y-M(Y)))$$

к произведению средних квадратических отклонений этих величин:

$$r_{xy} = \frac{K_{xy}}{\sigma_x \sigma_y}.$$

Как известно:

1. Коэффициент корреляции по абсолютной величине не превышает 1; то есть $|r_{xy}| \leq 1$, причём, чем ближе r_{xy} к 1, тем больше корреляционная зависимость между X и Y приближается к линейной, а при $|r_{xy}| = 1$, случайные величины связаны линейной функциональной зависимостью.

2. Если $r_{xy} = 0$, то X и Y не связаны линейной корреляционной зависимостью, но могут быть связаны нелинейной корреляционной или даже функциональной зависимостью.

Пример. Определить прямую регрессии, определяющую зависимость коэффициента теплопроводности λ , Вт / (м² · °С) жаростойкого бетона с заполнителем из магнезита от средней температуры нагрева t °С по данным эксперимента, приводимым в табл. 4 1(использована [5, табл. 7.1]).

Т а б л и ц а 4 . 1

t °С	100	300	600	700	900	1100
λ	5,90	5,35	4,78	4,20	3,60	3,00
m	2	3	3	4	4	2

1. Составим корреляционную таблицу

$t = x$	$\lambda = y$						n_t
	3,00	3,60	4,20	4,78	5,35	5,90	
100						2	2
300					3		3
600				3			3
700			4				4
900		4					4
1100	2						2
n_λ	2	4	4	3	3	2	18

2. Определим оценки математических ожиданий x и y :

$$\bar{x}_0 = \frac{1}{18} \sum_{i=1}^{18} x_i = \frac{1}{18} 11500 = 638,9;$$

$$\bar{y}_0 = \frac{1}{18} \sum_{i=1}^{18} y_i = \frac{1}{18} 79,39 = 4,41.$$

3. Составим корреляционную таблицу для системы центрированных случайных величин $\overset{0}{x}$ и $\overset{0}{y}$:

$\overset{0}{t}$	$\overset{0}{\lambda}$						n_t
	-1,41	-0,81	-0,21	0,37	0,94	1,49	
-538,9						2	2
-338,9					3		3
-38,9				3			3
61,1			4				4
261,1		4					4
461,1	2						2
n_λ	2	4	4	3	3	2	18

4. Определим оценки дисперсий D_x и D_y :

$$\bar{D}_x = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n x_i^2 = \frac{1}{17} \cdot 1642\,774 = 96\,633,7;$$

$$\bar{D}_y = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n y_i^2 = \frac{1}{17} \cdot 14,5986 = 0,8574.$$

5. Определим оценки среднеквадратических отклонений:

$$\bar{\sigma}_x = S_x = \sqrt{\bar{D}_x} = 311, \quad \bar{\sigma}_y = S_y = \sqrt{\bar{D}_y} = 0,93.$$

6. Определим оценку корреляционного момента:

$$\bar{K}_{xy} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \dot{x}_i \dot{y}_i = \frac{1}{17} (-4803) = -282,5.$$

7. Определим оценку коэффициента корреляции:

$$\bar{r}_{xy} = r^* = \frac{K_{xy}}{\bar{\sigma}_x \bar{\sigma}_y} = \frac{-282,5}{311 \cdot 0,93} = -0,977.$$

Таким образом, корреляционная зависимость между X и Y близка к линейной.

Определим эмпирические прямые регрессии:

$$y - \bar{y}_0 = \bar{r}_{xy} \frac{\bar{\sigma}_y}{\bar{\sigma}_x} (x - \bar{x}_0);$$

$$x - \bar{x}_0 = \bar{r}_{xy} \frac{\bar{\sigma}_x}{\bar{\sigma}_y} (y - \bar{y}_0).$$

Откуда

$$y = -0,0028 x + 6,2;$$

$$x = -326,7 y + 2080$$

(см. рис. 4.1).

Для оценки точности выборочного значения r^* удобно использовать некоторую функцию от r^* :

$$W = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{1+r^*}{1-r^*} \right]. \quad (4.31)$$

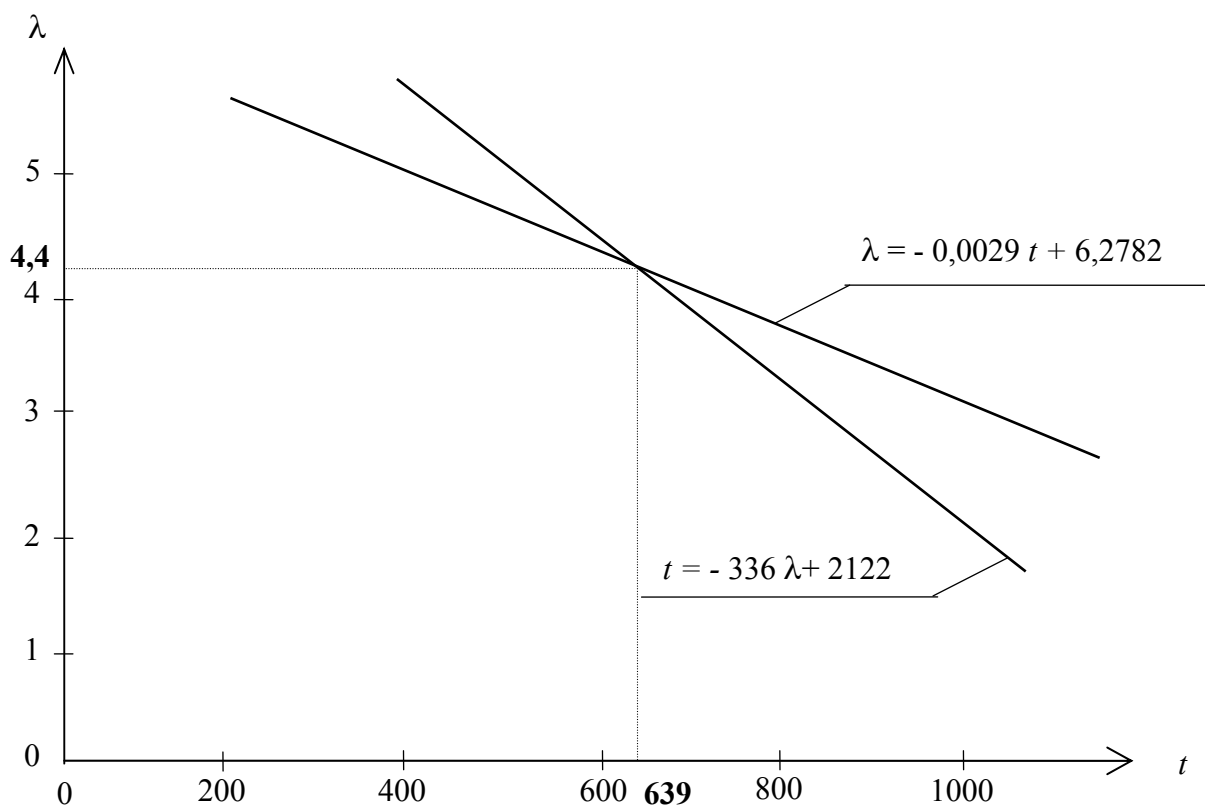


Рис. 4.1

Известно, что распределение случайной величины W можно аппроксимировать нормальным распределением со средним значением и дисперсией вида

$$M[W] = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{1+r_{xy}}{1-r_{xy}} \right], \quad (4.32)$$

$$\sigma^2[W] = \frac{1}{n-3}. \quad (4.33)$$

На основе этих соотношений легко построить доверительные интервалы для r_{xy} по выборочной оценке r^* .

Из-за выборочной изменчивости оценок корреляции обычно приходится проверять, свидетельствует ли ненулевое значение выборочного коэффициента корреляции о существовании статистически значимой корреляции между изучаемыми величинами. Сделать это можно, проверив гипотезу $r_{xy} = 0$, причём отклонение гипотезы будет говорить о значимости корреляции. Из формул (4.32) и (4.33) следует, что при $r_{xy} = 0$ выборочное распределение W будет нормальным с средним $M[W] = 0$ и дисперсией

$\sigma^2[W] = \frac{1}{n-3}$. Поэтому область принятия гипотезы о нулевой корреляции будет иметь вид:

$$-z_{\frac{\alpha}{2}} \leq \frac{n-3}{2} \ln \left[\frac{1+r^*}{1-r^*} \right] < z_{\frac{\alpha}{2}},$$

где z – стандартная, нормально распределённая случайная величина. Если значение окажется вне этого интервала, то это будет признаком наличия статистической корреляции с уровнем значимости α .

Для приведённого выше примера в соответствии с выражением (4.31)

$$W = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{1-0,977}{1+0,977} \right] = -2,23.$$

При этом

$$W\sqrt{n-3} = -2,23\sqrt{18-3} = -8,64.$$

Гипотеза r_{xy} должна быть отвергнута с уровнем значимости 5 %, поскольку $W\sqrt{n-3} = -8,64$ не попадает в область принятия гипотезы, ограниченную величинами $\pm z_{\frac{\alpha}{2}} = \pm 1,96$. Следовательно, есть основания считать, что между коэффициентом теплопроводности и средней t° нагрева существует значимая связь.

4.3. Ранговая корреляция

Пусть требуется установить связь между двумя качественными признаками изделия, когда каждый из этих признаков допускает лишь относительное сравнение различных изделий (“лучше” – “хуже”) без указания численных значений признаков [15,27]. Пусть, например, выборка изделий $O(i)$, $i = \overline{1, n}$, сравнивается по каждому из $p + 1$ признаков $y = x_0; x_1, x_2, \dots, x_p$ (порядковых переменных). Результатом измерения каждой из порядковых переменных является приписывание каждому из обследованных объектов некоторой условной числовой метки, обозначающей место объекта в ряду из всех n анализируемых объектов, упорядоченном по убыванию степени проявления в них k -го, $k = \overline{0, p}$, изучаемого свойства. Число $x_k(i)$, определяющее место $O(i)$ по k -му признаку, называется рангом i -го объекта по k -му признаку (табл. 4.2).

Т а б л и ц а 4.2

Порядковый номер объекта	Порядковый номер исследуемой переменной (“Свойства”)						
	0	1	2	...	k	...	p
1	$x_0^{(1)} = y^{(1)}$	$x_1^{(1)}$	$x_2^{(1)}$	...	$x_k^{(1)}$	...	$x_p^{(1)}$
2	$x_0^{(2)} = y^{(2)}$	$x_1^{(2)}$	$x_2^{(2)}$	...	$x_k^{(2)}$	...	$x_p^{(2)}$
$\vdots$				...		...	
i	$x_0^{(i)} = y^{(i)}$	$x_1^{(i)}$	$x_2^{(i)}$	...	$x_k^{(i)}$	...	$x_p^{(i)}$
$\vdots$				...		...	
n	$x_0^{(n)} = y^{(n)}$	$x_1^{(n)}$	$x_2^{(n)}$	...	$x_k^{(n)}$	...	$x_p^{(n)}$

Столбец с номером k , $k = \overline{0, p}$, указанной таблицы представляет собой перестановку из n натуральных чисел $1, 2, \dots, n$, определяющую порядковые места объектов $O^{(1)}, O^{(2)}, \dots, O^{(n)}$ в ряду, упорядоченном по свойству x_k . Ниже в качестве примера приводятся результаты исследований деформативных свойств 10 видов эпоксидных композитов (объекты) с указанием значений 14 различных показателей (“свойств”). В клетках табл. 4.3 в правом верхнем углу указаны соответствующие ранги [12].

В известном примере М. Кендалла рассматривается ранжировка группы из 10 учеников в соответствии с их математическими и музыкальными способностями. Ученикам присваиваются номера от 1 до 10 (объекты $O^{(1)}, O^{(2)}, \dots, O^{(10)}$). Ранги этих учеников по их математическим способностям $x_1^{(i)}$, $i = \overline{1, 10}$, могут быть, например, соответственно равны

$$7 \quad 4 \quad 3 \quad 10 \quad 6 \quad 2 \quad 9 \quad 8 \quad 1 \quad 5,$$

а ранги тех же учеников по их музыкальным способностям $x_2^{(i)}$ –

$$5 \quad 7 \quad 3 \quad 10 \quad 1 \quad 9 \quad 6 \quad 2 \quad 8 \quad 4.$$

Возникает вопрос, есть ли хоть какая-то согласованность (или связь) между упорядочением анализируемых объектов по свойствам x_k и x_j , $k \neq j$; $k, j = \overline{0, p}$ (например, связь между математическими и музыкальными способностями учеников)? Это приводит к разработке системы понятий и методов, позволяющих измерять и анализировать статистическую связь, существующую между несколькими ранжировками одного и того же конечного множества объектов $O^{(1)}, O^{(2)}, \dots, O^{(n)}$.

Система этих понятий и методов составляет раздел математической статистики, называемый анализом ранговых корреляций.

Методы ранговых корреляций используются при организации и статистической обработке различного рода систем методом экспертных исследований. Они находят широкое поле приложений как в материаловедении, так и в психологии, социально-психологических исследованиях, в медицине и т.д.

Таблица 4.3

Деформативные свойства эпоксидных композитов

Показатели	Составы (объекты)									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1. Предел прочности при сжатии $R_{сж}$, МПа	117	2	4	10	5	3	7	9	8	6
2. Твёрдость T , МПа	6,01	2	5	10	4	3	7	9	8	6
3. Модуль деформации материала $E_{д15}$, МПа	3,62·10 ⁴	9	6	10	7	8	4	2	3	5
4. Условно-мгновенный модуль упругости E_0 , МПа	6,07·10 ⁴	9	7	10	6	5	3	1	2	4
5. Равновесный модуль упругости $E_{ув}$, МПа	4,41·10 ⁴	9	7	10	8	4	3	2	1	5
6. Модуль высокоэластичности $E_{вэ}$, МПа	18,1·10 ⁴	3	5	10	7	8	2	4	1	9
7. Доля упругой составляющей ϵ_y	0,398	10	4	1	3	6	8	7	5	9
8. Доля высокоэластической составляющей $\epsilon_{вэ}$	0,125	10	7	3	2	8	6	9	4	1
9. Доля пластической составляющей $\epsilon_{пл}$	0,299	1	2	6	8	5	3	9	7	10
10. Коэффициент пластической вязкости $\gamma_{пл}$, МПа·с	2,72·10 ⁵	1	3	2	8	5	7	6	4	10
11. Коэффициент высокоэластической вязкости $\gamma_{вэ}$, МПа·с	2,88·10 ⁷	9	7	10	8	5	3	2	6	1
12. Коэффициент пластичности $k_{пл}$	1,4	1	3	4	9	6	7	8	2	10
13. Коэффициент структуры $k_{стр}$	5,4	10	4	9	8	7	5,5	3	2	1
14. Коэффициент энергоёмкости $k_{эн}$	0,5	10	3	6,5	6,5	9	4	5	8	1

Прежде чем перейти к рассмотрению задач статистического анализа связей между ранжировками, отметим, что при упорядочении объектов по некоторому признаку x_k одновременно несколько объектов могут оказаться неразличимыми по степени проявления в них свойства x_k . Тогда каждому из объектов этой группы приписывается ранг, равный среднему арифметическому значению рангов указанных объектов.

Полученные при этом ранги называются объединёнными, или связанными. Наличие объединённых рангов, вообще говоря дробных, конечно, усложняет вычисления, связанные со статистическим анализом.

Ниже приводятся три основные задачи статистического анализа связей между ранжировками.

1. Анализ структуры совокупности упорядочений

$$X_k = (x_k^{(1)}, x_k^{(2)}, \dots, x_k^{(n)})^T, \quad k = \overline{0, p}.$$

Если точки x_k разбросаны равномерно по всей области их возможных значений

$$1 \leq x_k^{(i)} \leq n, \quad i = \overline{1, n},$$

то можно говорить об отсутствии связи или согласованности между ранжировками.

При наличии сгустка (ядра) близко лежащих друг от друга точек можно говорить о согласованности переменных.

При наличии нескольких ядер можно говорить о наличии нескольких подмножеств переменных с высокой степенью взаимосвязей между входящими в ядра переменными.

2. Анализ интегральной (совокупной) согласованности переменных и их условная ранжировка по критерию степени тесноты связи каждой из них с остальными переменными.

Например, такая задача возникает при исследовании степени согласованности мнений группы экспертов и условном упорядочении экспертов по их компетентности. В основе этого анализа лежит определение коэффициента совокупной согласованности – коэффициента конкордации для различных комбинаций переменных.

3. Наилучшее (в определённом смысле) восстановление ранжировки $X_0 = (x_0^{(1)}, x_0^{(2)}, \dots, x_0^{(n)})^T$, связанной с результирующей переменной $y \stackrel{\Delta}{=} x_0$, по ранжировкам $X_1, X_2, \dots, X_p$, соответствующим объясняющим переменным $x_1, x_2, \dots, x_p$ (задача регрессии на порядковых (ординальных) переменных).

Анализ парных ранговых статистических связей. Для определения тесноты связи между ранжировками X_k, X_j используется коэффициент

корреляции Спирмена (введён К. Спирменом в 1904 г. при исследованиях в области психологии)

$$\hat{\tau}_{kj}^{(s)} = 1 - \frac{6}{n^3 - n} \sum_{i=1}^n \left(x_k^{(i)} - x_j^{(i)} \right)^2. \quad (4.34)$$

При совпадающих ранжировках $(1, 2, \dots, n)^T, (1, 2, \dots, n)^T$, то есть при $x_k^{(i)} = x_j^{(i)} \forall i = \overline{1, n}$, получим

$$\hat{\tau}_{kj}^{(s)} = 1.$$

При противоположных ранжировках $(1, 2, \dots, n)^T, (n, (n-1), \dots, 1)^T$, то есть при

$$x_k^{(i)} = (n+1) - x_j^{(i)} \forall i = \overline{1, n},$$

получим

$$\hat{\tau}_{kj}^{(s)} = -1.$$

Формула (4.34) пригодна лишь в случае отсутствия объединённых рангов в ранжировках X_k, X_j .

Рассмотрим общий случай.

Пусть при ранжировке по признаку x_k имеется m_k групп с неразличимыми рангами, и пусть далее n_q^k — число элементов в q -й группе, $q = \overline{1, m_k}$.

Введём для ранжировки по признаку x_k величину

$$T_k = \frac{1}{12} \sum_{q=1}^{m_k} \left[\left(n_q^k \right)^3 - n_q^k \right]. \quad (4.35)$$

Если q -я группа состоит лишь из одного элемента ($n_q^k = 1$), то $\left(n_q^k \right)^3 - n_q^k = 0$, и эти элементы в расчёте величины T_k фактически не участвуют.

При отсутствии объединённых рангов при ранжировке по признаку x_k будем иметь

$$m_k = n; n_1^k = n_2^k = \dots = n_n^k = 1,$$

и соответственно $T_k = 0$.

В общем случае для анализа парных ранговых статистических связей используется ранговый коэффициент корреляции Спирмена, вычисляемый по формуле

$$\hat{\tau}_{kj}^{(s)} = \frac{\frac{1}{6} \left(n^3 - n \right) - \sum_{i=1}^n \left(x_k^{(i)} - x_j^{(i)} \right)^2 - (T_k + T_j)}{\sqrt{\left[\frac{1}{6} \left(n^3 - n \right) - 2T_k \right] \left[\frac{1}{6} \left(n^3 - n \right) - 2T_j \right]}}. \quad (4.36)$$

Если T_k и T_j малы по сравнению с $\frac{1}{6}(n^3 - n)$, то можно воспользоваться приближённой формулой

$$\hat{\tau}_{kj}^{(s)} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (x_k^{(i)} - x_j^{(i)})^2}{\frac{1}{6}(n^3 - n) - (T_k + T_j)} \quad (4.37)$$

(формула точна при $T_k = T_j$).

Пример 1. Вычислить коэффициент ранговой корреляции Спирмена по указанным в табл. 4.4 рангам прочности при сжатии и твёрдости эпоксидных композитов.

Т а б л и ц а 4 . 4

Свойства	Ранги									
	Порядковый номер состава ЭК									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Прочность при сжатии	2	4	1	10	5	3	7	9	8	6
Твёрдость	2	5	1	10	4	3	7	9	8	6

Решение. В связи с отсутствием объединённых рангов в соответствии с формулой (4.34) имеем

$$\hat{\tau}_{12}^{(s)} = \hat{\tau}_{R_c T}^{(s)} = 1 - \frac{6}{10^3 - 10} (0 + 1 + 0 + 0 + 1 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0) = 1 - \frac{6 \cdot 2}{990} \approx 0,988.$$

Как видим, имеется существенная связь между пределом прочности при сжатии и твёрдостью для эпоксидных композитов. Это подтверждается и полученным ранее уравнением $R_{сж} = 20 T - 2,3$. Из указанного следует принципиальная возможность исключить определение одного из этих показателей по экспериментальным данным.

Пример 2. Определить связь между коэффициентом структуры и коэффициентом энергоёмкости ЭК по данным табл. 4.5.

Т а б л и ц а 4 . 5

Свойства	Ранги									
	Порядковый номер состава ЭК									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
x_{13} ($k_{стр}$)	10	4	5,5	9	8	7	5,5	3	2	1
x_{14} ($k_{эн}$)	10	3	2	6,5	6,5	9	4	5	8	1

Решение. При ранжировке по признаку x_{13} имеется одна группа с неразличимыми рангами 5,5; число элементов в группе $m_{13} = 1$. В соответствии с формулой (4.35):

$$T_{13} = \frac{1}{12}(2^3 - 2) = 0,5.$$

Аналогично для x_{14} имеем:

$$T_{14} = 0,5.$$

Откуда по выражению (84) имеем $(T_{13} - T_{14})$:

$$\hat{\tau}_{13,14}^{(s)} = 1 - \frac{(0 + 1 + 3,5^2 + 2,5^2 + 1,5^2 + 4 + 1,5^2 + 4 + 36)}{\frac{1}{6}(10^3 - 10) - 1} = 1 - \frac{\frac{68}{990} - 1}{\frac{6}{6} - 1} = 0,59.$$

Отсюда следует, что коэффициенты структуры и энергоёмкости должны определяться по экспериментальным данным самостоятельно.

При анализе парных ранговых статистических связей между ранжировками часто пользуются ранговым коэффициентом корреляции Кендалла.

Введём несколько вспомогательных определений, необходимых для его вычисления.

Всякое расположение чисел $1, 2, \dots, n$ в некотором определённом порядке называется перестановкой из чисел (или из n символов).

Если в некоторой перестановке поменять местами какие-либо два символа (необязательно стоящие рядом), а все остальные символы оставить на месте, то получится новая перестановка. Такое преобразование перестановки называется транспозицией.

Легко заметить, что от любой перестановки из n символов можно перейти к любой другой перестановке из тех же символов при помощи нескольких транспозиций.

Говорят, что в данной перестановке числа i и j составляют инверсию, если $i > j$, но i стоит в этой перестановке раньше j .

Если X_k и X_j — две ранжировки, то им соответствуют две перестановки

$$x_k^{(1)}, x_k^{(2)}, \dots, x_k^{(n)} \text{ и } x_j^{(1)}, x_j^{(2)}, \dots, x_j^{(n)}.$$

Естественной мерой нарушения порядка символов в одной перестановке от другой будет число s расположенных в неодинаковом порядке пар элементов в X_k и X_j .

Если $X_k = (1, 2, \dots, n)$, то указанная мера будет совпадать с числом инверсий в перестановке:

$$x_j^{(1)}, x_j^{(2)}, \dots, x_j^{(n)}$$

и определяет минимальное число s транспозиций в этой перестановке, необходимых для приведения её к виду

$$1, 2, \dots, n.$$

Например, рассмотрим две перестановки

1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 и
2, 3, 1, 4, 6, 5, 9, 7, 8, 10.

Число инверсий во второй перестановке равно:

$$2 + 0 + 0 + 0 + 1 + 0 + 1 + 1 + 0 = 5; S = 5.$$

Ранговый коэффициент корреляции Кендалла определяется в виде

$$\hat{\tau}_{kj}^{(s)} = 1 - \frac{2S}{\frac{1}{2}n(n-1)}. \quad (4.38)$$

При совпадающих ранжировках $S = 0$ и $\hat{\tau}_{kj}^{(k)} = 1$, а при противоположных — $\hat{\tau}_{kj}^{(k)} = -1$, так как в этом случае

$$S = \frac{1}{2}n(n-1).$$

Можно доказать, что во всех остальных случаях

$$-1 < \hat{\tau}_{kj}^{(k)} < 1.$$

В соответствии с приведённым выше при условиях примера 1 имеем:

X_1 : 2, 4, 1, 10, 5, 3, 7, 9, 8, 6

X_2 : 2, 5, 1, 10, 4, 3, 7, 9, 8, 6

Число S расположенных в неодинаковом порядке пар элементов в X_1 и X_2 равно 2, так что в соответствии с формулой (4.38)

$$\hat{\tau}_{1,2}^{(k)} = 1 - \frac{2 \cdot 2}{\frac{1}{2} \cdot 90} = 0,911.$$

Вычисление $\hat{\tau}_{k,j}^{(k)}$ связано с трудоёмким вычислением S . Однако коэффициент Кендалла обладает некоторыми преимуществами по сравнению с коэффициентом Спирмена. А именно:

– при добавлении к n исследованным объектам новых значений коэффициент Кендалла можно вычислить как сумму старого его значения и некоторой добавки (то есть рекуррентным способом), что упрощает перерасчёт $\hat{\tau}_{k,j}^{(k)}$, а при вычислении $\hat{\tau}_{k,j}^{(s)}$ требуется перерасчёт разностей $x_k^{(i)} - x_j^{(i)}$;

– значительно лучше исследованы статистические свойства, в частности, выборочное распределение коэффициента Кендалла;

– $\hat{\tau}_{k,j}^{(k)}$ обладает большими возможностями при исследовании частной корреляции рангов.

Указанная формула для вычисления $\hat{\tau}_{k,j}^{(k)}$ пригодна лишь в случае отсутствия объединённых рангов в ранжировках x_k, x_j .

В общем случае ранговый коэффициент Кендалла определяется по формуле

$$\hat{\tau}_{k,j}^{(k)} = \frac{\hat{\tau}_{k,j}^{(k)} - \frac{2(u_k + u_j)}{n(n-1)}}{\sqrt{\left(1 - \frac{2u_k}{n(n-1)}\right)\left(1 - \frac{2u_j}{n(n-1)}\right)}}, \quad (4.39)$$

в которой $\hat{\tau}_{k,j}^{(k)}$ вычисляется по (4.39), а

$$u_k = \frac{1}{2} \sum_{q=1}^{m_k} n_q^k (n_q^k - 1);$$

$$u_j = \frac{1}{2} \sum_{q=1}^{m_j} n_q^j (n_q^j - 1).$$

Для иллюстрации определим $\hat{\tau}_{k,j}^{(k)}$ при условиях примера 2 (при отсутствии объединённых рангов).

Имеем:

$$X_{13}: 10, 4, 5, 9, 8, 7, 6, 3, 2, 1$$

$$X_{14}: 10, 3, 2, 6, 7, 9, 4, 3, 8, 1.$$

Отсюда

$$\hat{\tau}_{13,14}^{(k)} = 1 - \frac{2 \cdot 8}{\frac{1}{2} \cdot 90} = 0,64$$

(для сравнения: по (4.36) $\hat{\tau}_{13,14}^{(s)} = 0,59$).

При наличии объединённых рангов, например, при

$$X_{13}: 10, 4, 5,5, 9, 8, 7, 5,5, 3, 2, 1$$

$$X_{14}: 10, 3, 2, 6,5, 6,5, 9, 4, 5, 8, 1$$

будем иметь

$$u_{13} = \frac{1}{2} 2(2-1) = 1;$$

$$u_{14} = \frac{1}{2} 2(2-1) = 1;$$

$$\hat{\tau}_{13,14}^{(k)} = \frac{0,64 - \frac{2 \cdot 2}{90}}{\sqrt{\left(1 - \frac{2}{90}\right)^2}} = 0,609.$$

Коэффициенты ранговой корреляции Спирмена и Кендалла связаны между собой. Это является следствием того, что оба коэффициента – линейные функции от числа инверсий в перестановке. А именно:

$$\hat{\tau}_{k,j}^{(s)} \approx 1,5 \hat{\tau}_{k,j}^{(k)} \quad (4.40)$$

при условии, что абсолютные величины их значений не слишком близки к 1 и $n \geq 10$.

При указанных условиях $\hat{\tau}^{(k)}$ распределяется нормально со средним значением

$$M[\hat{\tau}^{(k)}] \approx \tau^{(k)}$$

и с дисперсией

$$D[\hat{\tau}^{(k)}] \leq \frac{2}{n} \left[1 - \left(\hat{\tau}^{(k)} \right)^2 \right].$$

Отметим, что пространство элементарных исходов $\Omega = \{\omega_i\}, i = \overline{1, n!}$, состоит из $N = n !$ всевозможных перестановок и не зависит от x_k .

Поскольку множество элементарных исходов Ω дискретно и конечно, то любое его подмножество измеримо и, следовательно, может интерпретироваться как случайное событие. При определении коэффициентов Спирмена и Кендалла речь, таким образом, шла о выборочных характеристиках ранговой связи.

Возникает вопрос, как точно выборочные характеристики, определённые по формулам (4.34) – (4.39), оценивают истинные теоретические значения.

Под теоретическими значениями коэффициентов $\tau_{k,j}^{(s)}, \tau_{k,j}^{(k)}$ понимаются значения, вычисленные по формулам (4.34) – (4.39) с заменой объёма выборки n объёмом N генеральной совокупности.

Объём N можно представить также из следующих соображений.

Рассмотрим взаимно-однозначное отображение множества первых натуральных чисел на себя – подстановку n -й степени. Тогда всякая подстановка может быть записана при помощи перестановок, подписанных одна под другой:

$$\begin{pmatrix} x_k^{(1)} & x_k^{(2)} & \dots & x_k^{(n)} \\ x_j^{(1)} & x_j^{(2)} & \dots & x_j^{(n)} \end{pmatrix} \triangleq \begin{pmatrix} X_k^T \\ X_j^T \end{pmatrix}.$$

От такой записи подстановки можно перейти к виду

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix}, \quad \alpha_i = \overline{1, n},$$

транспозицией столбцов.

Легко показать, что число подстановок n -й степени равно числу перестановок из n символов, то есть равно $n!$.

Присвоим каждой подстановке номер и получим в качестве элементов генеральной совокупности $N = n!$ объектов $O_1, O_2, \dots, O_N$ — N подстано-

вок $\begin{pmatrix} X_k^T \\ X_k^T \end{pmatrix}$.

Тогда статистически обследованное множество объектов

$$O_{i_1}, O_{i_2}, \dots, O_{i_n} \quad (i_1, i_2, \dots, i_n = \overline{1, N}, i_v \neq i_\mu)$$

даёт случайную выборку объёма n , взятую из совокупности всех подстановок $O_1, O_2, \dots, O_N$.

Займёмся определением доверительного интервала для нормально-распределённой случайной величины $\tau^{(k)}$ с дисперсией, равной

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{2}{n} \left[1 - \left(\hat{\tau}^{(k)} \right)^2 \right].$$

Тогда доверительный интервал для $\tau^{(k)}$ есть интервал

$$\left(\hat{\tau}^{(k)} - t_\beta \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{n}}; \hat{\tau}^{(k)} + t_\beta \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{n}} \right), \quad (4.41)$$

где t_β определяется из условия $\beta = 2 \Phi(t_\beta)$, а

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^x e^{-\frac{t^2}{2}} dt$$

(при $\beta = 0,95$ будем иметь $t_\beta = 1,96$).

Возникает вопрос: с какой степенью надёжности можно сделать заключение о том, что в совокупности, из которой произведён отбор, существует корреляция, если получен некоторый выборочный коэффициент корреляции рангов? Иначе говоря, как проверить **существенность** наблюдавшихся корреляций в свете статистической теории выборки?

Оказывается, что для $n > 10$ при выполнении неравенства

$$\left| \hat{\tau}^{(k)} \right| > u_{\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{2(2n+5)}{9n(n-1)}},$$

где $u_{\frac{\alpha}{2}} - 100 \frac{\alpha}{2} \%$ -ная точка стандартного нормального распределения

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{t^2}{2}} dt.$$

При заданном уровне значимости α следует признать наличие статистически значимой ранговой корреляционной связи.

При использовании коэффициента Спирмена проверка значимости осуществляется по неравенству

$$|\hat{\tau}^{(s)}| > t_{\frac{\alpha}{2}}(n-2) \sqrt{\frac{1-\tau^{(s)^2}}{n-2}},$$

где $t_{\frac{\alpha}{2}} - 100 \frac{\alpha}{2} \%$ -ная точка распределения Стьюдента.

Пример 3. В условиях примера 1 дисперсия для $\tau^{(k)}$ равна:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{2}{10} [1 - 0,911^2] = 0,034.$$

По формуле (89) доверительный интервал:

$$\left(0,911 - t_{\beta} \frac{\sqrt{0,034}}{\sqrt{10}}; 0,911 + t_{\beta} \frac{\sqrt{0,034}}{\sqrt{10}} \right).$$

При $\beta = 0,95$ соответственно $t_{\beta} = 1,96$ и доверительный интервал – (0,797; 1,025).

Так как $-1 < \tau^{(k)} < 1$, то доверительный интервал (0,797; 1).

4.4. Множественная корреляция

Рассмотрим случай m последовательностей с числом n рангов в каждой из них.

Пример 4. Четыре эксперта упорядочили 6 объектов следующим образом:

Эксперт	Объект					
	1	2	3	4	5	6
1	5	4	1	6	3	2
2	2	3	1	5	6	4
3	4	1	6	3	2	5
4	4	3	2	5	1	6
Сумма рангов $\sum_{i=1}^4 x_{ij}$	15	11	10	19	12	17

Воспользовавшись рассмотренными ранее методами, можно рассчитать коэффициенты корреляции между рангами каждой двух экспертов. При этом можно получить

$$C_4^2 = \left| C_n^m = \frac{n!}{(n-m)!m!} \right| = \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4}{1 \cdot 2 \cdot 1 \cdot 2} = 6$$

коэффициентов корреляции. Однако нас интересуют не эти коэффициенты, а общая мера согласованности мнений внутри группы экспертов.

Такой мерой согласованности мнений экспертов является коэффициент согласованности или коэффициент конкордации

$$W = \frac{12 \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^m x_{ij} - \bar{x}_\Sigma \right)^2}{m^2 (n^3 - n)},$$

где x_{ij} – ранг i -го объекта, установленный j -м экспертом;

$\bar{x}_\Sigma$ – средняя сумма рангов каждого объекта $\bar{x}_\Sigma = \frac{m(n+1)}{2}$;

n – число объектов;

m – число экспертов.

Для рассматриваемого примера

$$\bar{x}_\Sigma = \frac{1}{2} 4(6+1) = 14.$$

Среднюю сумму рангов каждого объекта можно определить также по формуле

$$\bar{x}_\Sigma = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m x_{ij}.$$

Для данных примера 4

$$\bar{x}_\Sigma = \frac{1}{6} (15 + 11 + 10 + 19 + 12 + 17) = 14.$$

Определим W :

$$W = \frac{12 \left[(15-14)^2 + (11-14)^2 + (10-14)^2 + (19-14)^2 + (12-14)^2 + (17-14)^2 \right]}{4^2 (6^3 - 6)} = 0,229.$$

Таким образом, можно считать, что мнения экспертов не являются согласованными, так как W существенно отличается от 1. Если мнения всех экспертов совпадают, то $W = 1$.

Если некоторые последовательности рангов содержат связи, то

$$W = \frac{\sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^m x_{ij} - \bar{x}_{\Sigma} \right)^2}{\frac{1}{12} m^2 (n^3 - n) - m \sum_{k=1}^n T_k},$$

где

$$T_k = \frac{1}{12} \sum_{q=1}^{m_k} \left[\left(n_q^k \right)^3 - n_q \right].$$

Пример 5. В соответствии с табл. 4.3 коэффициент конкордации, определяющий согласованность свойств 1... 14,

$$W = \frac{12[81 + 100 + 72,25 + 240,25 + 156,25 + 25 + 56,25 + 1 + 256 + 1]}{14^2(10^3 - 10)} = 0,006$$

(средняя сумма рангов каждого объекта $\bar{x}_{\Sigma} = \frac{14}{2}(10 + 1) = 77$).

Как видим, нет согласованности между всей совокупностью показателей, хотя налицо парная согласованность между отдельными из них (например, между прочностью при сжатии и твёрдостью).

Пример 6. Рассмотрим 3 последовательности рангов:

Эксперты	Объекты									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	1	4,5	2	4,5	3	7,5	6	9	7,5	10
2	2,5	1	2,5	4,5	4,5	8	9	6,5	10	6,5
3	2	1	4,5	4,5	4,5	4,5	8	8	8	10
$\sum_{j=1}^3 x_{ij}$	5,5	6,5	9	13,5	12	20	23	23,5	25,5	26,5
$\sum_{j=1}^3 x_{ij} - \bar{x}_{\Sigma}$ ($\bar{x}_{\Sigma} = 16,5$)	- 11	- 10	- 7,5	- 3	- 4,5	3,5	6,5	7	9	10

Имеем:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{10} \left(\sum_{j=1}^3 x_{ij} - \bar{x}_{\Sigma} \right)^2 &= [(-11)^2 + (-10)^2 + (-7,5)^2 + (-3)^2 + (-4,5)^2 + \\ &+ 3,5^2 + 6,5^2 + 7^2 + 9^2 + 10^2] = 591; \end{aligned}$$

$$T_1 = \frac{1}{12}[(2^3 - 2) + (2^3 - 2)] = \frac{1}{12}(6 + 6) = 1;$$

$$T_2 = \frac{1}{12}[(2^3 - 2) + (2^3 - 2) + (2^3 - 2)] = 1,5;$$

$$T_3 = \frac{1}{12}[(4^3 - 4) + (3^3 - 3)] = \frac{1}{12}(60 + 24) = 7.$$

Вычислим коэффициент конкордации

$$W = \frac{591}{\frac{1}{12}3^2(10^3 - 10) - 3(1 + 1,5 + 7)} = \frac{591}{742,5 - 28,5} = 0,828$$

(как видим, поправка на наличие связей равна 28,5 и несущественна).

Последовательно вычисленный коэффициент конкордации обладает статистической существенностью (т.е. близок к 1). Поэтому можно полагать, что между оценками экспертов существует некоторая согласованность. Как установить действительную последовательность объектов ?

Рассмотрим на примере.

Пример 7. Предположим, что имеется три последовательности, каждая из которых содержит 8 рангов:

Эксперт	Объект							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	4	2	1	7	6	3	5	8
2	7	2	1	6	4	5	3	8
3	7	4	2	6	5	3	1	8
$\sum_{j=1}^3 x_{ij}$	18	8	4	19	15	11	9	24

Попробуем упорядочить объекты, исходя из числа “первых” мест, “вторых” мест и т.д., занимаемых каждым объектом в последовательностях различных экспертов. Получим ряд

3 7 2 6 5 1 4 8.

Если бы мы производили упорядочение с другого конца, т.е. исходя из числа последних мест, то получили бы другой ряд:

3 2 7 6 5 4 1 8.

Поэтому от такого подхода приходится отказаться. Более эффективным оказывается метод упорядочения, основанный на использовании сумм рангов, приписываемых каждому объекту. В итоге получим последовательность

3 2 7 6 5 1 4 8,

которая отличается от обеих предыдущих.

Неполные последовательности рангов. При планировании эксперимента часто используются неполные последовательности рангов.

Пример. Рассмотрим стратегию предприятия, выпускающего цемент семи сортов с учётом предпочтения покупателей и исходя из упорядочений суждений нескольких покупателей. При этом предприятием для предварительной оценки представляется покупателям не все сорта цемента (например, с целью экономии времени и средств).

Пусть образованы следующие группы, каждая из которых включают по 3 сорта цемента:

Эксперты	Сорт цемента						
	1	2	3	4	5	6	7
1	+	+		+			
2		+	+		+		
3			+	+		+	
4				+	+		+
5	+				+	+	
6		+				+	+
7	+		+				+

Пусть каждый вид подвергается экспериментальной оценке одинаковое число раз, а каждая пара объектов – по одному разу. Таким образом, все элементы охвачены сопоставлением одинаковое число раз. Указанную систему можно рассматривать как смесь последовательностей рангов семи видов, но при этом в каждой последовательности отсутствуют оценки 4-х элементов.

Предположим, что покупатели расположили свои оценки следующим образом:

Эксперты	Сорт цемента						
	1	2	3	4	5	6	7
1	2	1		3			
2		2	3		1		
3			1	2		3	
4				1	3		2
5	1				2	3	
6		1				2	3
7	1		2				3
$\sum_{j=1}^3 x_{ij}$	4	4	6	6	6	8	8

Для получения результатов также можно вычислить коэффициент конкордации путём деления суммы квадратов разностей отклонений от их среднего значения на максимальное значение этой суммы (которое достигается при строгом упорядочении системы: 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9).

Таким образом,

$$W = \frac{(4-6)^2 + (4-6)^2 + (6-6)^2 + (6-6)^2 + (8-6)^2 + (8-6)^2}{(3-6)^2 + (4-6)^2 + (5-6)^2 + (6-6)^2 + (7-6)^2 + (8-6)^2 + (9-6)^2} =$$

$$= \frac{4 \cdot 2^2}{2(1^2 + 2^2 + 3^2)} = \frac{4 \cdot 4}{2 \cdot 14} = \frac{16}{28} = 0,571.$$

Такие планы эксперимента называют неполным латинским квадратом, или квадратом Юдена. Если из общего числа n объектов в эксперименте каждый раз представлено k объектов и при этом каждый из объектов участвует в эксперименте в общей сложности m раз, то всего потребуется образовать $\frac{mn}{k}$ групп. При этом в каждой группе будет сопоставляться между собой $\frac{1}{2}k(k-1)$ пар. Следовательно, общее число сопоставлений составит

$$\frac{1}{2}mn(k-1).$$

Пусть λ – общее число групп, в которых встречается заданная пара элементов. Тогда

$$\lambda = \frac{m(k-1)}{n-1}.$$

Но λ – целое число. Поэтому $m(k-1)$ должно делиться на $(n-1)$ без остатка. Кроме того, m n должно делиться на k без остатка. Эти условия накладывают ограничения на числа, используемые при составлении такого рода планов экспериментов. В рассмотренном примере $n = 7$, $k = 3$. Так что m должно делиться на 3. При этом $\lambda = 1$.

В общем случае

$$W = \frac{12 \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^m x_{ij} - \bar{x}_{\Sigma} \right)^2}{\lambda^2 n (n^2 - 1)}.$$

Для рассмотренного примера

$$W = \frac{12 \cdot 16}{1^2 \cdot 7(7^2 - 1)} = \frac{12 \cdot 16}{7 \cdot 48} = \frac{16}{28} = 0,571.$$

Парные сравнения. До сих пор предполагалось, что последовательности рангов известны. Однако во многих случаях возникают сомнения относительно правомерности такой постановки вопроса.

Допустим, мы попросили эксперта ранжировать 10 объектов по определённым свойствам. Предположим даже, что эксперт смог справиться с этой задачей (хотя мы не можем быть уверенными в самой возможности такого адекватного упорядочения). При этом мы допускаем произвольность в рассуждениях, предполагая, что переменная, характеризующая объект, линейна.

Предположим, что имеется n объектов и эксперту поочерёдно представляют каждую из $0,5 n (n - 1)$ пар объектов. Эксперт сопоставляет между собой представленные объекты и записывает свои предпочтения в каждой паре.

Пример. В экспериментальных целях подготовлено 6 видов теплоизоляционного материала. Эксплуатирующей организации поочерёдно предлагалась каждая из

$$C_6^2 = \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 1 \cdot 2} = 15$$

возможных пар, составленных из этих видов материала. При этом каждый раз фиксировалось, какой материал потребитель использует в первую очередь. Полученные результаты сведены в табл. 4.6.

Т а б л и ц а 4 . 6

Вид материала	Вид материала					
	1	2	3	4	5	6
1	-	1	1	0	1	1
2	0	-	0	1	1	0
3	0	1	-	1	1	1
4	1	0	0	-	0	0
5	0	0	0	1	-	1
6	0	1	0	1	0	-

Запись 1 в клетке, находящейся на пересечении столбца 2 и строки 1, означает, что материал 1 предпочтительнее 2, а запись 0 в клетке, находящейся на пересечении столбца 4 и строки 1, означает, что материал 4 предпочтительнее материала 1.

Всю систему предпочтений можно охарактеризовать с помощью диаграммы. Для этого расположим 6 объектов от 1 до 6 по вершинам правильного многоугольника. Проведём все возможные линии, соединяющие вершины этого многоугольника. Если 1 предпочтительнее 2, то направим стрелку от 1 к 2 вдоль линии 1 – 2 (рис. 4.1).

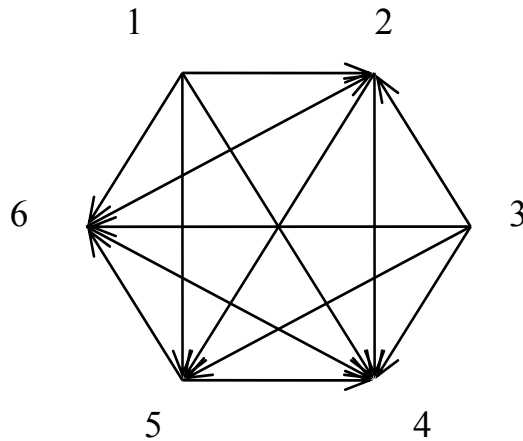


Рис. 4.1

На этой диаграмме можно обнаружить 5 циклов предпочтения по трём объектам:

$$\begin{aligned} 1 &\rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 1 \\ 1 &\rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 1 \\ 2 &\rightarrow 5 \rightarrow 6 \rightarrow 2 \\ 1 &\rightarrow 6 \rightarrow 4 \rightarrow 1 \\ 1 &\rightarrow 5 \rightarrow 4 \rightarrow 1 \end{aligned}$$

Таким образом, мы имеем 5 несовместимых ситуаций, так как обычно, если $1 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 4$, то $1 \rightarrow 4$, а мы имеем $4 \rightarrow 1$.

Введём коэффициент совместности

$$\begin{aligned} S &= 1 - \frac{24d}{n^3 - n}, \text{ если } n - \text{нечётно;} \\ S &= 1 - \frac{24d}{n^3 - 4n}, \text{ если } n - \text{чётно,} \end{aligned}$$

где d – число обнаружившихся циклов предпочтений по трём объектам.

Оценки, приведённые в рассмотренном примере, содержат 5 циклов предпочтения по трём объектам. Для этого случая

$$S = 1 - \frac{24 \cdot 5}{6^3 - 4 \cdot 6} = 1 - \frac{20}{36 \cdot 4} = \frac{3}{8} = 0,375.$$

Циклы предпочтений по всем объектам отсутствуют, и ранговые оценки удаётся упорядочить тогда и только тогда, когда $S = 1$!

Для вычисления d можно использовать следующую формулу:

$$d = \frac{1}{12}n(n-1)(2n-1) - \frac{1}{2}\sum_{j=1}^n\left(\sum_{i=1}^n x_{ij}\right)^2,$$

где $\sum_{i=1}^n x_{ij}$ – сумма чисел по строкам.

Для рассматриваемого примера

$$\begin{aligned} d &= \frac{1}{12}6(6-1)(2 \cdot 6-1) - \frac{1}{2}(4^2 + 2^2 + 4^2 + 1 + 2^2 + 2^2) = \\ &= \frac{1}{2} \cdot 5 \cdot 11 - \frac{1}{2}(16 + 4 + 16 + 1 + 4 + 4) = \frac{10}{2} = 5. \end{aligned}$$

Коэффициент согласия. Предположим, что в опыте участвуют m экспертов, каждый из которых рассмотрел все возможные пары из n объектов и высказал C_n^2 предпочтения. Построим таблицу, подобную указанной выше. При $x \rightarrow y$ будем вписывать 1 в клетку, расположенную на пересечении строки с номером x и столбца с номером y . Затем подсчитаем количество единиц в каждой клетке. В каждой из них может оказаться любое число единиц – от 0 до m . Если эксперты единодушны, то C_n^2 клеток будут содержать по m единиц, а остальные клетки – нули.

Предположим, что в клетке, находящейся на пересечении строки с номером x и столбца с номером y , вписано число γ_{ij} . Тогда

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n C_{\gamma_{ij}}^2$$

будет представлять общее число случаев, в которых пара экспертов согласна между собой.

Введём коэффициент согласия

$$U = \frac{2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n C_{\gamma_{ij}}^2}{C_m^2 C_n^2} - 1 = \frac{2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n C_{\gamma_{ij}}^2}{m(m-1)n(n-1)} - 1.$$

При этом $U = 1$ в том и только в том случае, когда имеет место полная согласованность в предпочтениях экспертов.

Пример. Результаты опроса с указанием предпочтений относительно использования 5 видов кровли, высказанные 21 экспертом, приведены в таблице.

Вид кровли	1	2	3	4	5	Σ
1	-	14	11	14	24	53
2	7	-	14	13	15	49
3	10	7	-	11	13	41
4	7	8	10	-	13	38
5	7	6	8	8	-	29
					Итого:	210

Вычислим:

$$C_6^2 = \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 1 \cdot 2} = 15;$$

$$C_{11}^2 = \frac{10 \cdot 11}{2} = 55;$$

$$C_7^2 = \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6 \cdot 7}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 1 \cdot 2} = 21;$$

$$C_{13}^2 = \frac{12 \cdot 13}{2} = 78;$$

$$C_8^2 = \frac{7 \cdot 8}{2} = 28;$$

$$C_{14}^2 = \frac{13 \cdot 14}{2} = 91;$$

$$C_{10}^2 = \frac{9 \cdot 10}{2} = 45;$$

$$C_{15}^2 = \frac{14 \cdot 15}{2} = 105;$$

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n C_{\gamma_{ij}}^2 = C_6^2 + 4C_7^2 + 3C_8^2 + 2C_{10}^2 + 2C_{11}^2 + 3C_{13}^2 + 4C_{14}^2 + C_{15}^2 =$$

$$= 15 + 4 \cdot 21 + 3 \cdot 28 + 2 \cdot 45 + 2 \cdot 55 + 3 \cdot 78 + 4 \cdot 91 + 105 = 1086.$$

Коэффициент согласия

$$U = \frac{8 \cdot 1086}{21 \cdot 20 \cdot 5 \cdot 4} - 1 = 1,034 - 1 = 0,034$$

(характеризует степень согласованности между предпочтениями экспертов).

4.5. Метод экспертных оценок

Если в оценке коэффициентов α_i принимают участие r экспертов, то можно составить матрицу экспертных оценок

$$A = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1r} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2r} \\ & & \dots & \\ \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \dots & \alpha_{mr} \end{bmatrix},$$

где α_{ij} – оценка, данная коэффициенту α_i j -м экспертом.

Если усреднить оценки экспертов, то получим m средних весовых коэффициентов $\alpha_i^{(1)}$:

$$\alpha_i^{(1)} = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r \alpha_{ij}, \quad i = \overline{1, m}.$$

На первой итерации считаем, что “степень доверия” ко всем экспертам одинакова. Поэтому при усреднении их высказывания принимаем с одинаковым коэффициентом $k_j^{(0)} = 1$.

На второй итерации весовые коэффициенты определяем с учётом разнородности экспертов и их различной компетентности, т.е. коэффициенты $k_j^{(1)}$ отличаются друг от друга. Поэтому на второй итерации весовые коэффициенты будем искать по формуле

$$\alpha_i^{(r)} = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r k_j^{(1)} \alpha_{ij}, \quad i = \overline{1, m}.$$

Для вычисления коэффициентов $k_j^{(1)}$ введём меру

$$\delta_j^{(1)} = \sum_{i=1}^m \left| \alpha_i^{(1)} - \alpha_{ij} \right|, \quad j = \overline{1, r}.$$

При этом коэффициенты $k_j^{(1)}$ зададим в виде

$$\begin{cases} k_j^{(1)} = \frac{\alpha}{1 + \delta_j^{(1)}}, & j = \overline{1, r}; \\ \sum_{j=1}^r k_j^{(1)} = r. \end{cases}$$

При указанных условиях

$$k_j^{(1)} = \frac{r \prod_{\omega=1}^r (1 + \delta_{\omega}^{(1)})}{(1 + \delta_j^{(1)}) \sum_{\mu=1}^r \left[\prod_{\omega=1}^r (1 + \delta_{\omega}^{(1)}) \cdot \frac{1}{1 + \delta_{\mu}^{(1)}} \right]}, \quad i = \overline{1, r}.$$

Комплексные показатели. В ряде случаев возникает задача определения более предпочтительного объекта на основании некоторых сведений о его свойствах (единичных показателях).

Для решения этой задачи следует найти какой-либо комплексный (или обобщённый) показатель, учитывающий влияние перечисленных факторов (единичных показателей):

$$Y = f(y_1, y_2, \dots, y_m).$$

При этом рассмотренную ранее модель объекта можно представить в виде, приведённом на рис. 4.2.

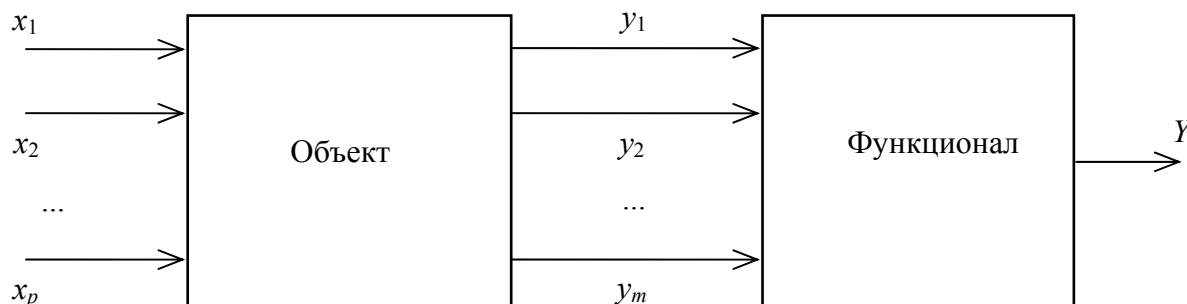


Рис. 4.2

Одним из путей решения задачи нахождения функционала является аппроксимация функции отклика некоторой приближающей функцией. Например, можно представить комплексный показатель в виде линейной или квадратичной функции единичных или частных критериев (показателей). Коэффициенты этой функции будем называть весовыми коэффициентами соответствующих частных критериев.

В случае линейной функции

$$Y = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i, \quad \sum_{i=1}^m \alpha_i = 1.$$

Коэффициенты α_i подлежат определению.

Итерационная процедура поиска α_i продолжается до тех пор, пока не будет достигнуто условие

$$\left| \alpha_i^{(h)} - \alpha_i^{(h-1)} \right| < \varepsilon, \quad i = \overline{1, m},$$

где ε – заданная малая величина.

Результатом описанной итерационной процедуры является получение матрицы весовых коэффициентов

$$A^h = \left[\alpha_1^{(h)}, \alpha_2^{(h)}, \dots, \alpha_m^{(h)} \right]^T = \left[\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m \right]^T.$$

Пример. Эксперты определили весовые коэффициенты следующим образом:

Факторы	Эксперты					$\alpha_i^{(1)}$
	1	2	3	4	5	
1	0,2	0,3	0,1	0,3	0,1	0,2
2	0,3	0,3	0,3	0,4	0,2	0,3
3	0,5	0,4	0,6	0,3	0,7	0,5

Определим $\alpha_i^{(1)}$:

$$\alpha_1^{(1)} = 0,2 (0,2 + 0,3 + 0,1 + 0,3 + 0,1) = 0,2;$$

$$\alpha_2^{(1)} = 0,2 (0,3 + 0,3 + 0,3 + 0,4 + 0,2) = 0,3;$$

$$\alpha_3^{(1)} = 0,2 (0,5 + 0,4 + 0,6 + 0,3 + 0,7) = 0,5.$$

Для определения $\alpha_i^{(2)}$ требуется вычислить $k_j^{(1)}$, для нахождения которых необходимо найти

$$\delta_j^{(1)} = \sum_{i=1}^3 |\alpha_i^{(1)} - \alpha_{ij}|, \quad j = \overline{1, r}.$$

В соответствии с этой формулой

$$\delta_1^{(1)} = |0,2 - 0,2| + |0,3 - 0,3| + |0,5 - 0,5| = 0;$$

$$\delta_2^{(1)} = |0,2 - 0,3| + |0,3 - 0,3| + |0,5 - 0,4| = 0,2;$$

$$\delta_3^{(1)} = |0,2 - 0,1| + |0,3 - 0,3| + |0,5 - 0,6| = 0,2;$$

$$\delta_4^{(1)} = |0,2 - 0,3| + |0,3 - 0,4| + |0,5 - 0,3| = 0,4;$$

$$\delta_5^{(1)} = |0,2 - 0,1| + |0,3 - 0,2| + |0,5 - 0,7| = 0,4.$$

Для удобства вычисления $k_j^{(1)}$ найдём

$$\prod_{\omega=1}^r (1 + \delta_{\omega}^{(1)}) = 1 \cdot 1,2 \cdot 1,2 \cdot 1,4 \cdot 1,4 = 2,82;$$

$$\sum_{\mu=1}^r \left(\prod_{\omega=1}^r (1 + \delta_{\omega}^{(1)}) \cdot \frac{1}{1 + \delta_{\mu}^{(1)}} \right) = \frac{2,82}{1} + \frac{2,82}{1,2} + \frac{2,82}{1,2} + \frac{2,82}{1,4} + \frac{2,82}{1,4} = 11,55.$$

Вычислим коэффициенты $k_j^{(1)}$:

$$k_1^{(1)} = \frac{5 \cdot 2,82}{1 \cdot 11,55} = 1,22;$$

$$k_2^{(1)} = k_3^{(1)} = \frac{5 \cdot 2,82}{1,2 \cdot 11,55} = 1,02;$$

$$k_4^{(1)} = k_5^{(1)} = \frac{5 \cdot 2,82}{1,4 \cdot 11,55} = 0,87.$$

Весовые коэффициенты $\alpha_i^{(2)}$ вычислим по формуле

$$\alpha_i^{(2)} = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r k_j^{(1)} \alpha_{ij}.$$

В результате получим

$$\alpha_1^{(2)} = 0,2 \cdot [1,22 \cdot 0,2 + 1,02 \cdot (0,3 + 0,1) + 0,87 \cdot (0,3 + 0,1)] = 0,2;$$

$$\alpha_2^{(2)} = 0,2 \cdot [1,22 \cdot 0,3 + 1,02 \cdot 2 \cdot 0,3 + 0,87 \cdot (0,4 + 0,2)] = 0,3;$$

$$\alpha_3^{(2)} = 0,2 \cdot [1,22 \cdot 0,5 + 1,02 \cdot 2 \cdot 0,5 + 0,87 \cdot 2 \cdot 0,5] = 0,5.$$

Таким образом, комплексный показатель является линейной функцией единичных (частных) показателей (критериев), т.е.

$$Y = 0,2 y_1 + 0,3 y_2 + 0,5 y_3.$$

Определение весовых коэффициентов методом попарного сопоставления. Исходно предполагается линейная зависимость комплексного показателя от единичных показателей, т.е.

$$Y_i = \sum_{j=1}^m \alpha_i y_{ij}, \quad \sum_{j=1}^m \alpha_i = 1.$$

На первом этапе задаются значения весовых коэффициентов

$$\alpha_1^{(0)} = \alpha_2^{(0)} = \dots = \alpha_m^{(0)} = \frac{1}{m}$$

и вычисляется комплексный показатель

$$Y_i = \sum_{j=1}^m \alpha_i^{(0)} y_{ij} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m y_{ij}.$$

Затем вычисляются коэффициенты корреляции оценок y_i с оценкой Y :

$$\rho_i = \frac{\sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_i)(y_j - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_i)^2} \sqrt{\sum_{j=1}^n (y_j - \bar{y})^2}}$$

и определяется уточнённое значение весовых коэффициентов

$$\alpha_i^{(1)} = \frac{\rho_i}{\sum_{i=1}^m \rho_i}.$$

После этого определяется уточнённое значение оценки

$$Y_j = \sum_{i=1}^m \alpha_i^{(1)} y_{ij}.$$

Итерационная процедура поиска α_i^ℓ повторяется до выполнения условия

$$\left| \alpha_i^{(\ell)} - \alpha_i^{(\ell-1)} \right| < \varepsilon.$$

Достоинством этого метода является произвольный выбор начальных значений весовых коэффициентов.

Пример. Для решения задачи определения лучшего объекта были приглашены 5 экспертов для попарного сопоставления единичных показателей. Результаты сравнения приведены в табл. 4.7.

Т а б л и ц а 4.7

Единичные показатели	1	2	3	Σ баллов	
1	-	2	1	3	0,2
2	3	-	2	5	0,33
3	4	3	-	7	0,47

Примем

$$\alpha_i^{(0)} = \frac{1}{m};$$

получим оценки комплексных показателей:

$$Y_1 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m y_{i1} = \frac{1}{3} (0,43 + 0,23 + 0,1) = 0,253;$$

$$Y_2 = \frac{1}{3} (0,27 + 0,17 + 0,4) = 0,280;$$

$$Y_3 = \frac{1}{3} (0,2 + 0,33 + 0,2) = 0,243;$$

$$Y_4 = \frac{1}{3} (0,1 + 0,27 + 0,3) = 0,223.$$

Вычислим

$$\bar{Y} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n y_j = \frac{1}{4} (0,253 + 0,280 + 0,243 + 0,223) = 0,250;$$

$$\bar{y}_1 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_{1i} = \frac{1}{4} (0,43 + 0,27 + 0,2 + 0,1) = 0,25.$$

Аналогично

$$\bar{y}_2 = \bar{y}_3 = 0,25.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n (y_{1j} - \bar{y}_1)(y_j - \bar{y}) &= (0,43 - 0,25) \cdot (0,253 - 0,250) + \\ &+ (0,270 - 0,250) \cdot (0,280 - 0,250) + (0,200 - 0,250) \cdot (0,243 - 0,250) + \\ &+ (0,100 - 0,250) \cdot (0,223 - 0,250) = 0,18 \cdot 0,003 + 0,02 \cdot 0,03 + \\ &+ 0,05 \cdot 0,007 + 0,15 \cdot 0,027 = 0,005540; \\ \sum_{j=1}^n (y_{1j} - \bar{y}_1)^2 &= 0,18^2 + 0,02^2 + 0,05^2 + 0,15^2 = 0,0578; \end{aligned}$$

$$\sqrt{\sum_{j=1}^n (y_{1j} - \bar{y}_1)^2} = \sqrt{0,0578} = 0,24;$$

$$\sum_{j=1}^n (y_j - \bar{y}) = 0,003^2 + 0,03^2 + 0,007^2 + 0,027^2 = 0,001687;$$

$$\sqrt{\sum_{j=1}^n (y_j - \bar{y})^2} = \sqrt{0,001687} = 0,04.$$

Коэффициент корреляции оценок y_{1j} с оценками Y_j

$$\rho_1 = \frac{0,005540}{0,24 \cdot 0,04} = 0,58.$$

Аналогично

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n (y_{2j} - \bar{y}_2) (y_j - \bar{y}) &= (0,23 - 0,25) \cdot (0,253 - 0,25) + \\ &+ (0,17 - 0,25) \cdot (0,28 - 0,25) + (0,33 - 0,25) \cdot (0,243 - 0,25) \times \\ &\times (0,243 - 0,25) + (0,27 - 0,25) \cdot (0,223 - 0,25) = \\ &= -0,02 \cdot 0,003 - 0,08 \cdot 0,03 - 0,08 \cdot 0,007 - 0,02 \cdot 0,027 = -0,003560; \end{aligned}$$

$$\sum_{j=1}^n (y_{2j} - \bar{y}_2)^2 = 0,02^2 + 0,08^2 + 0,08^2 + 0,02^2 = 0,136;$$

$$\sqrt{\sum_{j=1}^n (y_{2j} - \bar{y}_2)^2} = \sqrt{0,136} = 0,117;$$

$$\rho_2 = \frac{0,003560}{0,117 \cdot 0,04} = 0,76.$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n (y_{3j} - \bar{y}_3) (y_j - \bar{y}) &= (0,1 - 0,25) \cdot (0,253 - 0,25) + \\ &+ (0,4 - 0,25) \cdot (0,28 - 0,25) + (0,2 - 0,25) \cdot (0,243 - 0,25) + \\ &+ (0,3 - 0,25) \cdot (0,223 - 0,25) = -0,15 \cdot 0,003 + 0,15 \cdot 0,03 + 0,05 \cdot 0,007 - \\ &- 0,05 \cdot 0,027 = 0,15 \cdot 0,027 - 0,5 \cdot 0,02 = 0,00305; \end{aligned}$$

$$\sum_{j=1}^n (y_{3j} - \bar{y}_3)^2 = 0,15^2 + 0,15^2 + 0,05^2 + 0,05^2 = 0,05;$$

$$\sqrt{\sum_{j=1}^n (y_{3j} - \bar{y}_3)^2} = \sqrt{0,05} = 0,22;$$

$$\rho_3 = \frac{0,00305}{0,22 \cdot 0,04} = 0,35.$$

$$\sum_{i=1}^m \rho_i = 0,58 - 0,76 + 0,35 = 0,17.$$

Тогда

$$\alpha_1^{(1)} = \frac{0,58}{0,17} = 3,41;$$

$$\alpha_2^{(1)} = \frac{0,76}{0,17} = -4,47;$$

$$\alpha_3^{(1)} = \frac{0,35}{0,17} = 2,06.$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассматриваются методы как однокритериальной, так и многокритериальной оптимизации с использованием формализованных моделей систем различной природы, полученных на основе интерполяции и аппроксимации экспериментальных зависимостей.

Для качественного анализа систем приводятся известные методы ранговой корреляции.

Изложение материала сопровождается многочисленными примерами, многие из которых являются результатом исследований авторов и имеют оригинальный характер.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Айвазян, С.А. Прикладная статистика. Исследование зависимостей [Текст] / С.А. Айвазян, И.С. Енюков Л.Д. Мешалкин; под ред. С.А. Айвазяна. – М.: Финансы и статистика, 1985. – 487 с.
2. Планирование эксперимента. Обработка опытных данных [Текст]: моногр. / И.А. Гарькина [и др.]; под ред. проф. А.М. Данилова. – М.: Палеотип, 2005. – 272 с.
3. Налимов, В.В. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов [Текст]: моногр. / В.В. Налимов, Н.А. Чернова. – М.: Наука, 1965. – 340 с.
4. Математические методы в строительном материаловедении [Текст]: моногр. / И.А. Гарькина [и др.]; под ред. академика РААСН В.И. Соломатова. – Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 2001. – 188 с.
5. Сложные системы: идентификация, синтез, управление [Текст]: моногр. / А.М. Данилов, И.А. Гарькина. – Пенза: ПГУАС, 2011. – 308 с.
6. Исследование операций: Модели и применения [Текст]: моногр. / под ред. Дж. Моудера, С. Элмаграби. – М.: Мир, 1981. – 678 с.
7. Исследование операций: Методологические основы и математические методы [Текст]: в 2 т. / под ред. Дж. Моудера, С. Элмаграби. – М.: Мир, 1981. – Т.2. – 712 с.
8. Теория систем: математические методы строительного материаловедения [Текст]: моногр. / А.М. Данилов, И.А. Гарькина. – Пенза: ПГУАС, 2008. – 239 с.
9. Баженов, Ю.М. Компьютерное материаловедение строительных композиционных материалов [Текст]: учеб. пособие / Ю.М. Баженов [и др.]. – М.: Изд-во Российской инженерной академии. – 2006. – 256 с.
10. Бусленко, Н.П. Моделирование сложных систем [Текст]: моногр. / Н.П. Бусленко. – М.: Наука, 1968. – 355 с.
11. Системный подход к разработке и управлению качеством строительных материалов [Текст]: моногр. / Ю.М. Баженов [и др.]; под ред. академика РААСН Ю.М. Баженова. – М.: Палеотип, 2006. – 186 с.
12. Баженов, Ю.М. Системный анализ в строительном материаловедении [Текст]: моногр. / Ю.М. Баженов, И.А. Гарькина, А.М. Данилов, Е.В. Королев. – М.: МГСУ: Библиотека научных разработок и проектов. – 2012. – 432 с.
13. Бокс, Дж. Анализ временных рядов. Прогноз и управление [Текст]: моногр. / Дж. Бокс, Г. Дженкинс. – М., 1974.
14. Отнес, Р. Прикладной анализ временных рядов [Текст]: моногр. / Р. Отнес, Л. Эноксон. – М., 1982.
15. Кендэл, М.Дж. Статистические выводы и связи [Текст]: моногр. / М.Дж. Кендэл, А. Стюарт. – М.: Наука, 1973.

16. Гарькина, И.А. Управление качеством материалов со специальными свойствами [Текст] / И.А. Гарькина, А.М. Данилов // Проблемы управления. – 2008. – № 6. – С. 67-74.
17. Авиационные тренажеры модульной архитектуры [Текст]: моногр. / А.М. Данилов [и др.]; под ред. Э.В. Лапшина, проф. А.М. Данилова – Пенза: ИИЦ ПГУ, 2005. – 146 с.
18. Борисов, В.И. Проблемы векторной оптимизации [Текст] / В.И. Борисов // Исследование операций: сб. – М.: Наука, 1972. – С.7–9.
19. Моисеев, Н.Н. Математические задачи системного анализа [Текст]: учебное пособие / Н.Н. Моисеев. – М.: Наука, 1981. – 488 с.
20. Подиновский, В.В. Двухкритериальные задачи с неравноценными критериями [Текст] / В.В. Подиновский // Известия Академии наук СССР. «Техническая кибернетика». – 1977. – №5. – С.51–55.
21. Подиновский, В.В. Применение процедуры максимизации основного локального критерия для решения задачи теории векторной оптимизации [Текст] / В.В. Подиновский // Управляемые системы: сб. – М., 1970. – Вып. 6. – С.26–31.
22. Подиновский, В.В. Оптимизация по последовательно применяемым критериям [Текст] / В.В. Подиновский, В.М. Гаврилов. – М.: Советское радио, 1975. – 192 с.
23. Подиновский, В.В. Парето-оптимальные решения многокритериальных задач [Текст]: моногр. / В.В. Подиновский, В.Д. Ногин. – М.: Наука, 1982. – 256 с.
24. Айвазян, С.А. Прикладная статистика. Классификация и снижение размерности [Текст] / С.А. Айвазян, В.М. Бухштабер, И.С. Енюков, Л.Д. Мешалкин. – М.: Финансы и статистика, 1989. – 607 с.
25. Эсбенсен, К. Анализ многомерных данных. Избранные главы [Текст] / К. Эсбенсен; пер. с англ. С.В. Кучерявского; под ред. О.Е. Родионовой. – Казань: изд-во КазАСУ, 2008. – 158 с.
26. Данилов, А.М. Теория вероятностей и математическая статистика с инженерными приложениями [Текст] / А.М. Данилов, И.А. Гарькина. – Пенза: ПГУАС, 2010. – 228 с.
27. Кендэл, М.Дж. Ранговые корреляции [Текст]: моногр. / М.Дж. Кендэл. – М.: Статистика, 1975.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	3
ВВЕДЕНИЕ	5
1. ИНТЕРПОЛЯЦИЯ	7
2. АППРОКСИМАЦИЯ.....	10
2.1. Метод наименьших квадратов	10
2.1.1. Сглаживание экспериментальных зависимостей по методу наименьших квадратов	12
2.1.2. Сглаживание полиномами	13
2.1.3. Сглаживание функцией вида $y = \sum_{s=0}^m a_s \varphi_s(x)$	17
2.1.4. Приближение аналитически заданной функции полиномом.....	18
2.1.5. Приближение ортогональными полиномами Чебышева	19
2.1.6. Определение эмпирических формул	21
2.2. Аппроксимация функций многих переменных.....	25
2.3. Идентификация временных рядов.....	29
2.4. Регрессионные методы идентификации	48
2.4.1. Система с одним выходом. Статическая задача.....	48
2.4.2. Система с несколькими входами и выходами. Статическая задача	50
2.4.3. Регрессионная идентификация динамических процессов	52
3. ОПТИМИЗАЦИЯ.....	56
3.1. Однокритериальная оптимизация. Функционалы качества.....	56
3.1.1. Оптимизация структуры и свойств эпоксидных композитов повышенной плотности	70
3.1.2. Определение весовых констант в функционале качества	84
3.2. Многокритериальная оптимизация. Управление качеством	88
3.2.1. Лексикографическая задача оптимизации	90
3.2.2. Метод последовательных уступок.....	92
3.2.3. Способы преодоления неопределённостей целей.....	96
3.2.4. Определение множеств Парето.....	105
3.2.5. Метод главных компонент	111
3.2.6. Принцип Парето	115

4. ВЕРОЯТНОСТНЫЕ МЕТОДЫ.....	119
4.1. Зависимость событий.....	119
4.2. Расчет линейной корреляции.....	129
4.3. Ранговая корреляция.....	136
4.4. Множественная корреляция.....	147
4.5. Метод экспертных оценок.....	156
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	164
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК.....	165

Научное издание

Данилов Александр Максимович
Гарькина Ирина Александровна

ИНТЕРПОЛЯЦИЯ, АППРОКСИМАЦИЯ, ОПТИМИЗАЦИЯ:
АНАЛИЗ И СИНТЕЗ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ
Монография

В авторской редакции
Верстка Н.А. Сазонова

Подписано в печать 26.04.2014. Формат 60×84/16.
Бумага офисная «Снегурочка». Печать на ризографе.
Усл. печ. л. 9,76. Уч.-изд. л. 10,5. Тираж 500 экз. 1-й завод 100 экз.
Заказ №79.

Издательство ПГУАС.
440028, г.Пенза, ул. Германа Титова, 28.