МЕЖГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БЕЛОРУССКО-РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Кафедра «Технология машиностроения»

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ И ПРОЦЕССОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Методические рекомендации к практическим занятиям для студентов специальности 1-36 80 02 «Инновационные технологии в машиностроении» очной и заочной форм обучения

Могилев 2020

УДК 621.01:519.6
ББК 34.5:22.18
М34

Рекомендовано к изданию
учебно-методическим отделом
Белорусско-Российского университета

Одобрено кафедрой «Технология машиностроения» «16» сентября 2020 г., протокол № 2

Составитель д-р техн. наук, проф. В. М. Пашкевич

Рецензент канд. техн. наук, доц. А. П. Прудников

Даны задания для практических занятий по дисциплине «Математическое моделирование технических объектов и процессов с использованием компьютерных технологий», а также приведены методические указания по их выполнению, перечень необходимой литературы.

Учебно-методическое издание

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ
И ПРОЦЕССОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Ответственный за выпуск В. М. Шеменков

Корректор И. В. Голубцова

Компьютерная верстка Н. П. Полевничая

Подписано в печать . Формат 60×84/16. Бумага офсетная. Гарнитура Таймс.
Печать трафаретная. Усл. печ. л. . Уч.-изд. л. . Тираж 26 экз. Заказ №

Издатель и полиграфическое исполнение:
Межгосударственное образовательное учреждение высшего образования
«Белорусско-Российский университет».
Свидетельство о государственной регистрации издателя,
изготовителя, распространителя печатных изданий
№ 1/156 от 07.03.2019.
Пр-т Мира, 43, 212022, Могилев.

Содержание

1 Математическое моделирование технологических объектов и процессов

Полученные при проведении экспериментальных исследований данные часто становятся основой для построения зависимостей вида $y = f(x_1; x_2; ...; x_n)$ между двумя или большим количеством параметров. Такую зависимость называют *эмпирической моделью*, *уравнением регрессии*, а задачу ее нахождения – *задачей аппроксимации экспериментальных данных* (задачей построения зависимости, описывающей данные).

Переменная y, зависящая от других переменных, называется *выходной переменной* или *переменной отклика модели*. В свою очередь переменные $x_1; x_2; ...; x_n$, от которых зависит выходная переменная, называют *входными переменными* или *факторами модели*.

В зависимости от количества факторов различают *одно- и многофакторные модели*. Часто для иллюстрации отношения между входными и выходными переменными модели используют структурные схемы. Так, на рисунке 1, *а* показана схема для однофакторной модели $y = f(x)$, а на рисунке 1, *б* – схема для трехфакторной модели.

Модель на рисунке 1, *б*, например, соответствует эмпирической формуле теории резания, описывающей зависимость допускаемой скорости резания V при точении от стойкости режущего инструмента T, подачи S, глубины резания t с учетом эмпирических коэффициентов C_v, K_v, m, y, x:

$$\hat{V} = \frac{C_v \cdot K_v}{T^m \cdot S^y \cdot t^x}.$$

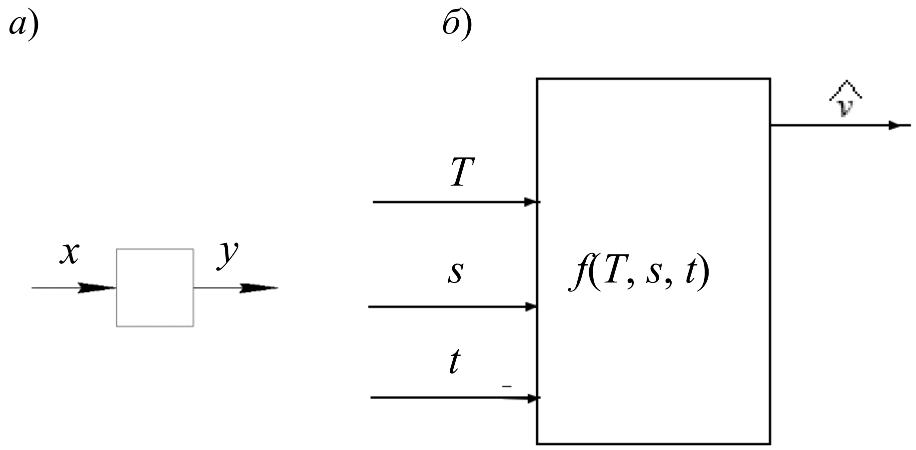


Рисунок 1 – Структурные схемы одно- и трехфакторной моделей

Модели могут иметь различный вид – линейный, полиномиальный, показательный (как в последнем примере).

Экспериментальные данные получают при *реализации экспериментов* при различных сочетаниях факторов модели. Так, на рисунке 2 показана схема реализаций экспериментов для построения однофакторной модели $y = f(x)$. Каждая из таких реализаций представляет собой пару чисел (x_i; y_i), соответствующих некоторой точке в *факторном пространстве* (на рисунке 2 эти точки изображены окружностями).

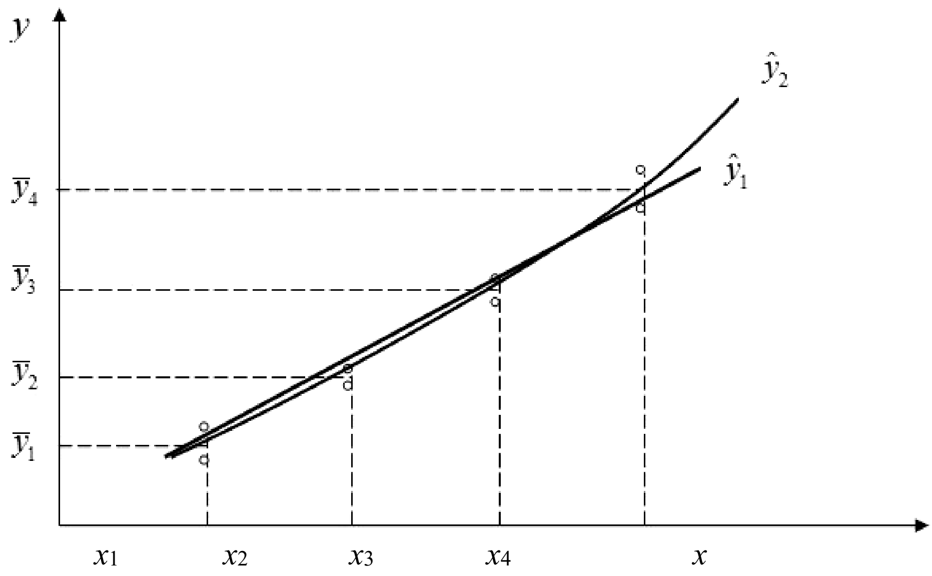


Рисунок 2 – Схема реализаций однофакторного эксперимента

Из схемы видно, что эксперимент был реализован при четырех различных значениях входной переменной – x_1; x_2; x_3; x_4. Такие значения называют *уровнями фактора*.

Так как при постановке эксперимента на его результаты оказывают воздействие погрешности различной природы, повторные реализации экспериментов на любом уровне всякий раз будут отличаться друг от друга даже при стабилизации условий проведения опытов. Чтобы снизить влияние на результаты экспериментов таких погрешностей, на каждом из уровней факторов проводят *дублирующие эксперименты*. Так, например, из рисунка 2 видно, что на каждом из уровней фактора – x_1; x_2; x_3; x_4 – проведено по два дубля.

При дублировании экспериментов в качестве значения выходной переменной на каждом из уровней принимают соответствующие *средние по уровням*. Их величины в наименьшей степени зависят от влияния погрешностей.

Следует обратить внимание на то, что *для одного набора экспериментальных данных* (x_i; y_i) *может быть построено бесконечное количество моделей различного вида*, каждая из которых будет в большей или меньшей степени соответствовать этим данным.

В связи с этим важной задачей моделирования является оценка качества построенной модели – *проверка адекватности модели данным эксперимента*.

Так, например, на рисунке 2 представлены две модели – линейная $\hat{y}_1$ и полиномиальная $\hat{y}_2$. Очевидно, что обе модели описывают общую тенденцию взаимосвязи между выходной переменной y и фактором модели x. Однако вопрос о том, какая из них лучше согласуется с экспериментальными данными, остается открытым.

Задание

По примерам, выданным преподавателем, предложить структурную схему для построения модели, определить факторы и переменную отклика модели, уровни и количество дублирующих экспериментов. Оценить средние по уровням, предложить вид уравнений регрессии.

2 Методология построения математических моделей

При постановке эксперимента заранее прорабатываются вопросы о выборе факторов модели, определении *области ее построения* (т. е. *интервалов варьирования факторов*), выборе количества уровней факторов для реализаций экспериментов, определении числа дублирующих экспериментов. Такая информация называется *планом эксперимента* и во многом определяет качество построенной модели, ее адекватность, объемы ресурсов, требующихся для реализации экспериментов.

Укрупненно процесс моделирования включает следующие *стадии*:

– формирование плана эксперимента;
– физическая реализация экспериментов;
– предварительная обработка данных;
– получение коэффициентов модели;
– оценка качества модели;
– модернизация модели (при необходимости).

Формирование плана эксперимента. На этом этапе выбирают факторы и выходную переменную модели, а также ее предполагаемый вид, т. к. *экспериментальные данные не содержат информации о том, какой вид модель должна иметь*. Помимо этого, необходимо определить соответствующее количество уровней факторов (так, например, для линейной однофакторной модели количество уровней не может быть менее двух, для квадратической – трех и т. д.). Кроме того, минимальное количество уровней не может быть меньше числа коэффициентов модели.

Для обеспечения точности модели количество уровней часто выбирается с некоторым избытком (больше минимально требующегося на один-три).

Для каждого из факторов модели также необходимо определить *интервал варьирования*, т. е. область факторов, в которой строится модель. Следует отметить, что величина такого интервала в значительной степени влияет на вид модели. Так, при небольшой ширине интервала модель может быть линейной, но при значительной его величине модель, как правило, нелинейна, а также может иметь один или более экстремумов. Весьма часто в таком случае модель не является адекватной, а отыскание подходящей зависимости затруднительно. В связи с этим удобнее иногда построить несколько частных моделей, описывающих поведение экспериментальных данных в не слишком широком интервале их изменения, чем пытаться строить универсальную модель для широкого диапазона данных.

Следует, кроме того, определить *количество дублирующих экспериментов* на каждом из уровней. Оно должно быть одинаковым, при этом на практике рекомендуется проводить для каждого уровня не менее трех-пяти дублирующих экспериментов.

Физическая реализация экспериментов. При постановке экспериментов необходимо обеспечить одинаковые условия при их проведении. Несоблюдение этого условия приводит к возникновению значительных погрешностей исходных данных и снижению качества модели.

Предварительная обработка данных. Необходимо проверить экспериментальные данные на нормальность закона распределения погрешностей, если такая гипотеза не принимается по умолчанию. Следует проанализировать данные на отсутствие грубых погрешностей (промахов), а при наличии таковых исключить их из наблюдений и провести дополнительные эксперименты для обеспечения равномерности дублирования.

Получение коэффициентов модели. На практике чаще всего используют метод наименьших квадратов, методику планирования экспериментов, итерационные процедуры обучения.

Оценка качества модели. При отсутствии дублирования проверяется только *значимость уравнения регрессии*, при дублировании экспериментальных данных производится *проверка адекватности модели*.

На практике полезно осуществлять *кросс-проверку модели*. В этом случае построение модели ведется на одной серии экспериментальных данных, а проверка качества модели – на другой. Это позволяет избежать включения в модель случайных погрешностей, имеющих неконтролируемый характер.

Модернизация модели. Модернизацию модели следует проводить, если уравнение регрессии модели оказалось незначимым или модель оказалась неадекватной экспериментальным данным.

В этом случае используются следующие методические приемы:

– повторная реализация экспериментов при сомнении в их достоверности;

– изменение вида модели (усложнение), например, за счет перехода от линейного вида к нелинейному, показательному и т. п.;

– уменьшение интервала построения модели или построение нескольких частных моделей.

Задание

По примерам, выданным преподавателем, определить область построения модели, предложить план эксперимента, установить число уровней i и дублирующих экспериментов u. Определить условия для физической реализации эксперимента, множества для построения модели и ее кросс-проверки. Предложить первичный вид модели, а также меры по обеспечению ее адекватности.

3 Отбор факторов для построения модели

До построения математической модели следует убедиться в целесообразности такого действия, т. е. определить, влияет ли фактор статистически значимо на выходную переменную. Если такая связь не будет обнаружена, то построение модели будет бессмысленным в принципе.

Такая процедура называется *дисперсионным анализом*. Разработана она для одно-, двух- и трехфакторных моделей. Для многофакторных моделей, как правило, реализуют последовательное исследование на наличие статистической взаимосвязи выходной переменной и каждого из факторов в форме *однофакторного дисперсионного* или *парного корреляционного анализа*.

Анализ базируется на вычислении сумм квадратов S_o (общей суммы квадратов отклонений всех наблюдений от их общего генерального среднего); $S_{ош}$ (суммы квадратов, которая характеризует чистую случайную ошибку экспериментальных данных); S_i (суммы квадратов, которая характеризует изменчивость выходной переменной y под действием изменения уровня фактора x_i).

Сравнение дисперсий $S_{ош}$ и S_i ведется на основе критерия Фишера:

$$F_{расч} = \frac{S_i / f_i}{S_{ош} / f_{ош}} > F_{\alpha_i; f_i; f_{ош}}, \tag{1}$$

где $F_{\alpha; f_i; f_{ош}}$ – критическое значение квантиля распределения Фишера, зависящее от заранее принятого уровня значимости α. Его можно найти с помощью функции *MS Excel*

=FРАСП.ОБР(α; f_i; $f_{ош}$);

$f_i, f_{ош}$ – числа степеней свободы дисперсий S_i :

$$f_i = i - 1; \tag{2}$$

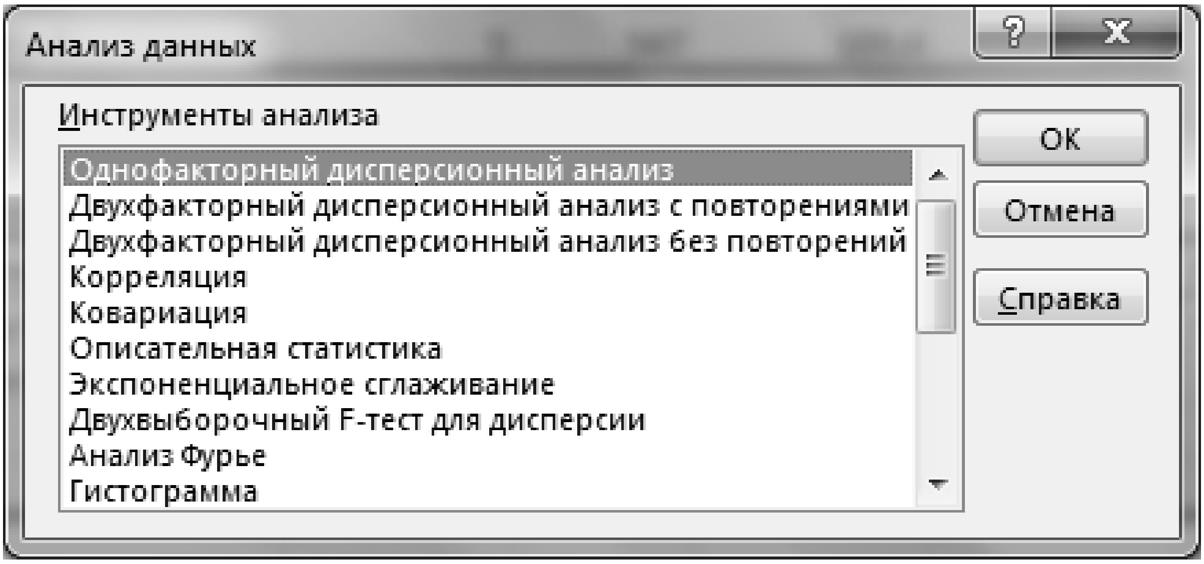
$$f_{ош} = i(u - 1), \tag{3}$$

где i – число уровней фактора;

u – число дублирующих экспериментов на каждом из уровней.

Дисперсионный анализ может быть осуществлен средствами *MS Excel*.

Пример 1 **–** Вызовем надстройку *Анализ данных*, укажем способ размещения данных (в строках/столбцах) и их интервал, уровень значимости и выходной интервал (рисунок 3).



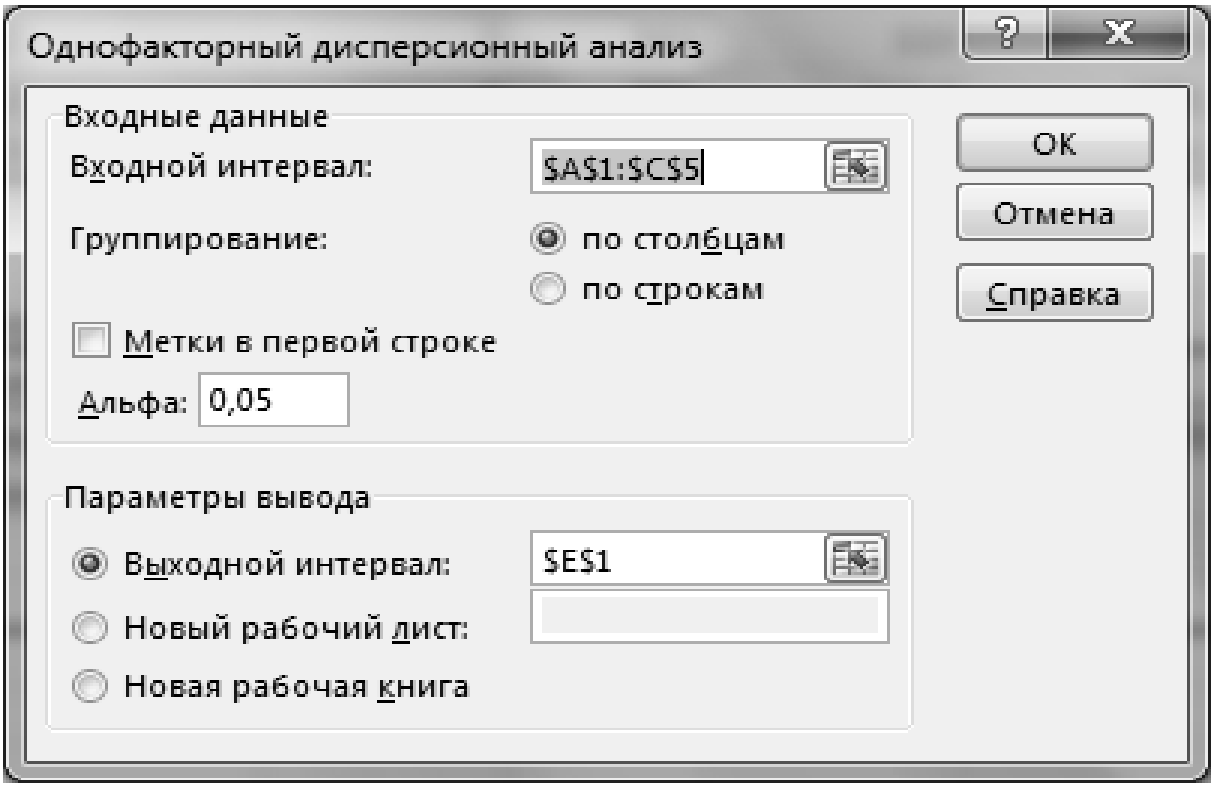


Рисунок 3 – Использование надстройки *Анализ данных* для дисперсионного анализа

Пример дисперсионного анализа данных приведен на рисунке 4.

В сформированном отчете число *Источник вариации между группами* соответствует дисперсии S_i, *Источник вариации внутри групп* – дисперсии $S_{ош}$.

Средства *MS Excel* также поддерживают *двухфакторный дисперсионный анализ* (*с повторениями и без*). Однако в силу необходимости планирования экспериментов по специальной схеме («*латинский квадрат*») он менее популярен, чем однофакторный дисперсионный или корреляционный анализ.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	120	123	110		Однофакторный дисперсионный анализ						
2	108	110	95								
3	110	93	123		ИТОГИ						
4	118	120	118		*Группы*	*Счет*	*Сумма*	*Среднее*	*Дисперсия*		
5	109	115	101		Столбец 1	5	565	113	31		
6					Столбец 2	5	561	112,2	139,7		
7					Столбец 3	5	547	109,4	134,3		
8											
9											
10					Дисперсионный анализ						
11					*Источник вариации*	*SS*	*df*	*MS*	*F*	*P-Значение*	*F критическое*
12					Между группами	35,73333333	2	17,86666667	0,175737705	0,840958274	3,885293835
13					Внутри групп	1220	12	101,6666667			
14											
15					Итого	1255,733333	14				
16											

Рисунок 4 – Результаты дисперсионного анализа средствами *MS Excel*

В случае, если предполагаемых факторов, влияющих на выходную переменную, несколько, для их предварительного отбора для построения модели рекомендуется использовать средство *Корреляция* из пакета *Анализ данных*.

Корреляционный анализ является формой дисперсионного и базируется на вычислении корреляционной матрицы многомерных данных. При этом в такой матрице для каждой пары параметров данных рассчитывается значение *коэффициента парной корреляции Пирсона*:

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})\cdot(y_i - \overline{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2 \sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y})^2}}, \qquad (4)$$

который характеризует тесноту *линейной связи* между парой переменных x и y.

Для включения в модель необходимо обратить внимание на факторы, имеющие наибольший по модулю коэффициент корреляции с выходной переменной. Также следует учитывать тесноту взаимосвязи между самими факторами, чтобы отбирать для включения в модель только независимые из них.

Пример 2 **–** По результатам наблюдений за четырьмя параметрами технологической системы выбрать предполагаемые факторы для построения эмпирической зависимости. Будем использовать средство *Корреляция* со следующими параметрами (рисунок 5) для анализа данных, представленных на рисунке 6.

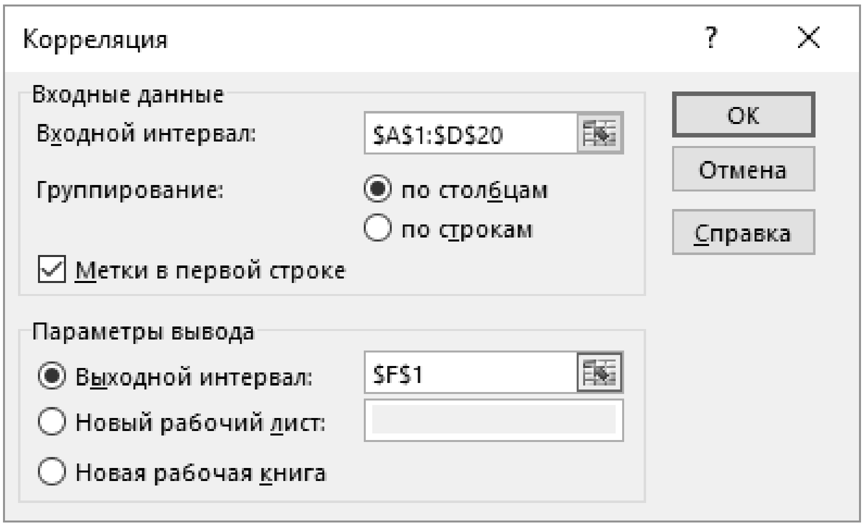


Рисунок 5 – Параметры средства Корреляция

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	x1	x2	x3	y			*x1*	*x2*	*x3*	*y*
2	1,428717	14,40705	0,180363	42,8141		x1	1			
3	3,564066	6,843321	0,45006	27,68664		x2	-0,17734	1		
4	9,780708	12,45481	0,214932	38,90962		x3	0,182086	-0,85624	1	
5	3,526537	0,191578	10,12999	14,38316		y	0,322404	0,984248	-0,78034	1
6	3,924564	14,0538	0,176984	40,1076						
7	1,300686	7,419789	0,392699	27,83958						
8	12,36308	12,42481	0,215561	38,84962						
9	7,484719	10,677	0,266618	36,354						
10	4,203459	13,31877	0,193328	39,63754						
11	11,46642	3,758895	0,817668	18,51779						
12	9,621903	10,25571	0,25662	32,51143						
13	5,666589	12,80138	0,207912	39,60277						
14	15,30054	13,36653	0,187663	38,73307						
15	10,98747	7,595126	0,395124	29,19025						
16	2,185101	0,650485	4,515606	12,30097						
17	10,26093	14,89767	0,173285	43,79535						
18	7,256288	11,7222	0,231346	37,44439						
19	9,836086	2,854231	1,326714	19,70846						
20	14,61558	13,47414	0,190683	39,94829						

Рисунок 6 – Результаты корреляционного анализа

Матрица является симметричной, поэтому в отчете заполняется только ее нижняя половина. Наиболее тесную связь с выходной переменной y (коэффициент корреляции равен 0,98) имеет переменная x_2. Она является первым претендентом для включения в модель. В связи со значительной величиной коэффициента корреляции (–0,78) следовало бы также обратить внимание на переменную x_3. Однако она, в свою очередь, тесно связана с переменной x_2, уже выбранной в качестве претендента на включение в модель, и не является независимой от нее (коэффициент корреляции –0,85), поэтому ее включение не сможет значительно улучшить модель. Переменная x_1 имеет слабую связь с выходной и не может быть рекомендована в качестве фактора модели. Таким образом, при построении модели на первом этапе целесообразно использовать только фактор x_2.

Задание

По примерам, выданным преподавателем, провести корреляционный и дисперсионный анализ, выбрать влияющие факторы, аргументировать выбор.

4 Построение моделей по методу наименьших квадратов

При обработке экспериментальных данных построение эмпирической модели связано с нахождением *статистической зависимости*, когда одному и тому же сочетанию факторов модели соответствуют отличающиеся друг от друга реализации экспериментов. Статистическую связь также называют *регрессионной*, а соответствующее уравнение, связывающее факторы и выходную переменную модели в статистическом смысле, – *уравнением регрессии*.

Из существующих методов построения моделей наиболее популярен *критерий наименьших квадратов*, согласно которому предсказанные моделью значения $\hat{y}_i$ должны быть, по возможности, близки к наблюдаемым значениям y_i в квадратической мере расстояний:

$$S_{ост} = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - y_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 \to \min, \qquad (5)$$

где $S_{ост}$ – сумма квадратов остатков (*остаточная сумма*);

ε_i^2 – квадрат отклонения модельного значения от наблюдаемого (квадрат *невязки*).

Пример 1 – Для определения стойкости режущего инструмента была проведена серия экспериментов, в которых после выполнения резцами однотипной работы измерялось расстояние l_i от их режущей кромки до маркерной отметки на их передней поверхности. По данным эксперимента (таблица 1) построить модель износа резца с помощью средства *Линия тренда*.

Таблица 1 – Результаты исследований износа резца

t, мин	0	5	10	15	20	25
l_1, мм	10,80	10,65	10,60	10,58	10,52	10,48

Построим график данных. Щелчком правой клавиши мыши по набору данных вызовем выпадающее меню, в котором выберем *Добавить линию тренда*. Выберем тип линии *Линейная*, а также опции *Показывать уравнение на диа-*

грамме и *Поместить на диаграмму величину достоверности аппроксимации*.

Результат работы представлен на рисунке 7.

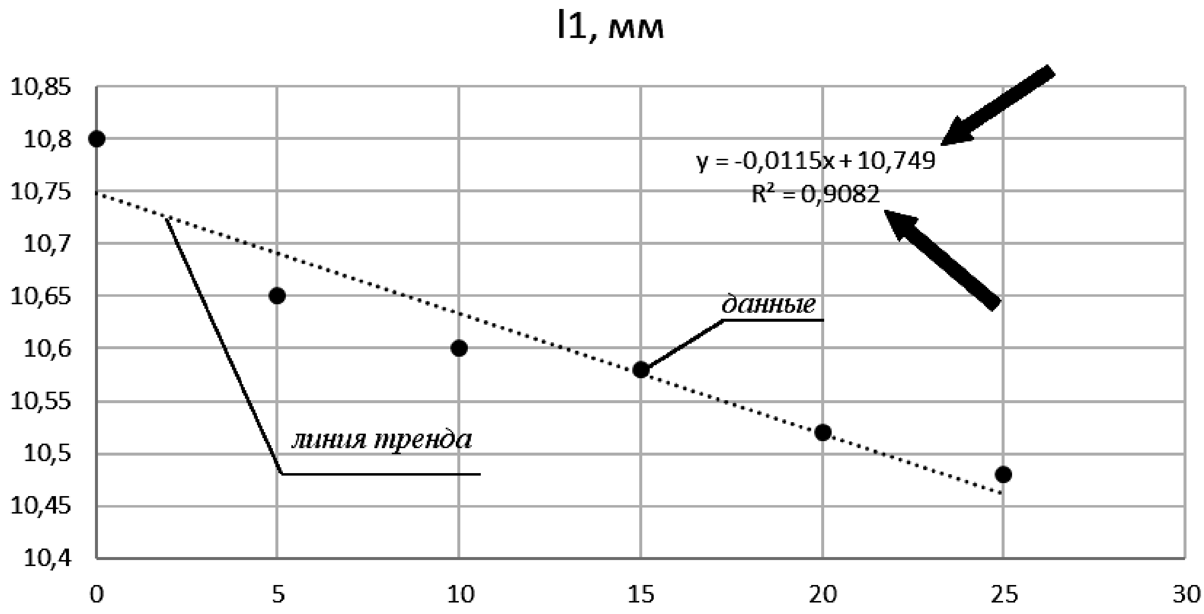


Рисунок 7 – Построение однофакторной модели средством *Линия тренда*

Следует отметить, что описанное в примере средство не позволяет оценить качество построенной модели, если при этом необходимо учитывать результаты экспериментов с повторениями. Однако его использование целесообразно на этапе предварительных исследований экспериментальных данных.

Метод наименьших квадратов может применяться и для построения моделей нелинейного вида, при этом используют *линеаризующие преобразования уравнений регрессии*, которые приводят их к линейному виду и обеспечивают нахождение коэффициентов модели решением линейных уравнений.

Пусть, например, необходимо построить показательную модель в виде

$$y = a_0 \cdot x_1^{a_1} \cdot x_2^{a_2}, \tag{6}$$

для чего прологарифмируем левую и правую части формулы и получим линейное уравнение

$$\ln y = \ln a_0 + a_1 \cdot \ln x_1 + a_2 \cdot \ln x_2;$$

$$Y = A_0 + a_1 X_1 + a_2 X_2, \tag{7}$$

где $Y = \ln y$; $X_1 = \ln x_1$; $X_2 = \ln x_2$; $A_0 = \ln a_0$.

В рассматриваемом случае таблица исходных данных в форме троек чисел (x_1; x_2; y) пересчитывается в таблицу линеаризованных данных в форме ($ln\ x_1$; $ln\ x_2$; $ln\ y$). После вычислений коэффициентов значение a_0 определится по формуле потенцирования

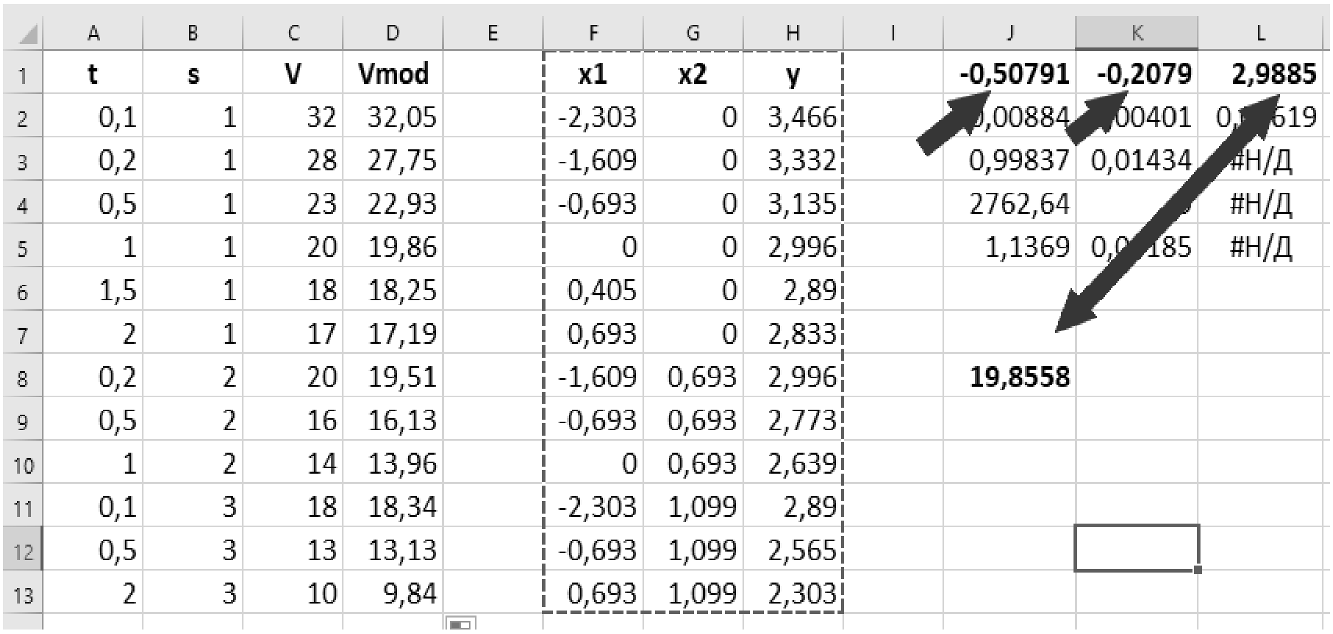
$$a_0 = \exp\,(A_0). \tag{8}$$

Пример 2 **–** Построить показательную модель допускаемой скорости резания фрезы V, м/мин, при постоянной стойкости, различных значениях подачи s, мм/мин, и глубины резания t, мм, в виде $\hat{V} = a_0 \cdot t^{a_1} \cdot s^{a_2}$ по данным, представленным в таблице 2.

Таблица 2 – Результаты экспериментальных исследований допускаемой скорости резания фрезы

t	0,1	0,2	0,5	1	1,5	2	0,2	0,5	1	0,1	0,5	2
s	1	1	1	1	1	1	2	2	2	3	3	3
V	32	28	23	20	18	17	20	16	14	18	13	10

Преобразуем исходную таблицу с переменными (t; s; V) в таблицу с логарифмированными переменными (X_1; X_2; Y) (рисунок 8).



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	t	s	V	Vmod		x1	x2	y		-0,50791	-0,2079	2,9885
2	0,1	1	32	32,05		-2,303	0	3,466		[illegible],00884	[illegible]00401	0,[illegible]619
3	0,2	1	28	27,75		-1,609	0	3,332		0,99837	0,01434	#Н/Д
4	0,5	1	23	22,93		-0,693	0	3,135		2762,64	[illegible]	#Н/Д
5	1	1	20	19,86		0	0	2,996		1,1369	0,0[illegible]185	#Н/Д
6	1,5	1	18	18,25		0,405	0	2,89				
7	2	1	17	17,19		0,693	0	2,833				
8	0,2	2	20	19,51		-1,609	0,693	2,996		19,8558		
9	0,5	2	16	16,13		-0,693	0,693	2,773				
10	1	2	14	13,96		0	0,693	2,639				
11	0,1	3	18	18,34		-2,303	1,099	2,89				
12	0,5	3	13	13,13		-0,693	1,099	2,565				
13	2	3	10	9,84		0,693	1,099	2,303				

Рисунок 8 – Построение показательной модели с использованием функции ЛИНЕЙН

Применим функцию ЛИНЕЙН для расчета коэффициентов линейной модели. Для этого выделим ячейки J1:L5, в строке формул введем

=ЛИНЕЙН(H2:H13; F2:G13; ИСТИНА; ИСТИНА)

и нажмем *Ctrl* + *Shift* + *Enter*. В соответствующем диапазоне ячеек появляется набор чисел, в котором коэффициентам соответствует первая строка. При этом коэффициенты указываются в порядке от старшего A_2 к младшему A_0 (выделены на рисунке стрелками).

Так как коэффициенты в показательной и линейной моделях равны, кроме коэффициента A_0, преобразуем его в коэффициент a_0 путем потенцирования (8). Таким образом, модель примет следующий вид:

$$\hat{V} = 19{,}9\ t^{-0{,}208} \cdot s^{-0{,}508}.$$

Отметим, что аналогичными функциональными свойствами обладает и средство *Регрессия* из надстройки *Анализ данных*. Данное средство нагляднее в использовании и обладает более широким функционалом.

Пример 3 **–** Для экспериментальных данных из предыдущего примера построить модель с помощью средства *Регрессия* пакета *Анализ данных*.

Прологарифмируем исходные данные и вызовем окно параметров *Регрессия* (рисунок 9).

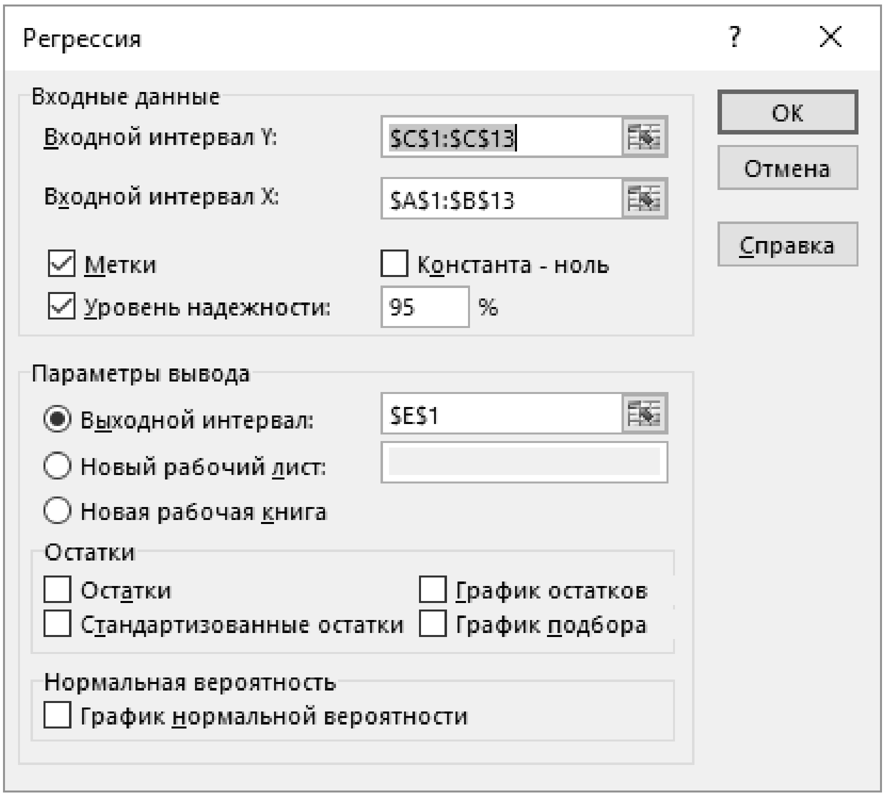


Рисунок 9 – Параметры средства *Регрессия*

Кроме коэффициентов уравнения регрессии (рисунок 10), средство также позволяет проверить значимость этого уровня (при этом сравниваются графы *F* и *Значимость F*). В приведенном примере уравнение регрессии значимо.

Задание

По примерам, выданным преподавателем, провести регрессионный анализ, построить модель заданного вида на основе линеаризующих преобразований.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	x1	x2	y		ВЫВОД ИТОГОВ					
2	-2,30259	0	3,465736							
3	-1,60944	0	3,332205		*Регрессионная статистика*					
4	-0,69315	0	3,135494		Множественный R	0,999186555				
5	0	0	2,995732		R-квадрат	0,998373772				
6	0,405465	0	2,890372		Нормированный R-квадрат	0,998012388				
7	0,693147	0	2,833213		Стандартная ошибка	0,014344454				
8	-1,60944	0,693147	2,995732		Наблюдения	12				
9	-0,69315	0,693147	2,772589							
10	0	0,693147	2,639057		Дисперсионный анализ					
11	-2,30259	1,098612	2,890372			*df*	*SS*	*MS*	*F*	*Значимость F*
12	-0,69315	1,098612	2,564949		Регрессия	2	1,136899811	0,568449906	2762,638	2,82044E-13
13	0,693147	1,098612	2,302585		Остаток	9	0,00185187	0,000205763		
14					Итого	11	1,138751681			
15										
16						*Коэффициенты*	*Стандартная ошибка*	*t-статистика*	*P-Значение*	*Нижние 95%*
17					Y-пересечение	2,988497084	0,006193775	482,5001227	3,59191E-21	2,974485792
18					x1	-0,207876736	0,004013088	-51,79969558	1,87058E-12	-0,216954972
19					x2	-0,50791193	0,008835794	-57,48344942	7,34772E-13	-0,527899886

Рисунок 10 – Результаты работы средства *Регрессия*

5 Полный факторный эксперимент

Метод *полного факторного эксперимента* (ПФЭ) обеспечивает в реализациях экспериментов полный набор возможных комбинаций уровней. Удобным способом представления такого плана является *матрица планирования*. Столбцы матрицы содержат кодированное обозначение уровней. Так, символом «–» обозначается нижний уровень фактора, равный –1, а символом «+» – верхний уровень фактора, равный +1. В столбцах присутствуют все возможные комбинации их уровней.

Пример – Построить линейную модель

$$\hat{y} = A_0 + A_1 z_1 + A_2 z_2 + A_{12} z_1 z_2, \tag{9}$$

связывающую допускаемую скорость резания инструмента V, м/мин, с факторами подачи S, мм/об, и глубины резания t, мм. Областью построения модели выбраны интервалы подачи [0,1; 1] мм/об и глубины резания [0,5; 3] мм. Результаты эксперимента представлены в таблице 3.

В рассматриваемом примере число факторов k = 2, число уровней факторов равно числу N экспериментов матрицы планирования, т. е. i = 4. Кроме того, как видно из матрицы планирования, на каждом уровне проведено u = 2 дублирующих эксперимента.

В столбце $\overline{V}$ указаны средние значения скорости резания по уровням, по ним будут рассчитываться коэффициенты модели.

Таблица 3 – Матрица для исследований допускаемой скорости резания

N	z_0	z_1	z_2	z_{12}	V_1	V_2	$\bar{V}$	$\hat{V}$
1	+	–	–	+	76	78	77	76,25
2	+	+	–	–	55	57	56	56,75
3	+	–	+	–	60	66	63	63,75
4	+	+	+	+	43	47	45	44,25

Фактору подачи будет соответствовать нормированный фактор z_1, а фактору глубины резания – нормированный фактор z_2. Коэффициенты модели (9) могут быть найдены из выражения

$$A_k = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} z_{ki} \cdot y_i, \tag{10}$$

т. е. представляют собой среднее арифметическое от суммы попарных произведений элементов столбца z_k, соответствующего коэффициенту A_k, на элементы столбца y:

$$A_0 = \frac{1}{4}[(+1)\cdot 77 + (+1)\cdot 56 + (+1)\cdot 63 + (+1)\cdot 45] = 60,25;$$

$$A_1 = \frac{1}{4}[(-1)\cdot 77 + (+1)\cdot 56 + (-1)\cdot 63 + (+1)\cdot 45] = -9,75;$$

$$A_2 = \frac{1}{4}[(-1)\cdot 77 + (-1)\cdot 56 + (+1)\cdot 63 + (+1)\cdot 45] = -6,25;$$

$$A_{12} = \frac{1}{4}[(+1)\cdot 77 + (-1)\cdot 56 + (-1)\cdot 63 + (+1)\cdot 45] = 0,75.$$

Таким образом, модель имеет вид:

$$\hat{V} = 60,25 - 9,75z_1 - 6,25z_2 + 0,75z_1z_2.$$

Проверим значимость коэффициентов модели. Вычислим дисперсию случайных ошибок:

$$S_{ош_i} = \sum_{1}^{u}(y_{iu} - \bar{y}_i)^2; \tag{11}$$

$$S_{ош} = \sum_i S_{ошi}; \tag{12}$$

$$f_{ош} = (u-1)i. \tag{13}$$

Считается, что *коэффициент A_k является статистически значимым*, если выполняется условие

$$|A_k| > t_{\alpha; f_{ош}} \cdot S_A, \tag{14}$$

где S_A – ошибка коэффициентов модели, $S_A = \sqrt{\dfrac{S_{ош}}{f_{ош} \cdot N}}$;

$t_{\alpha; f_{ош}}$ – критическое значение критерия Стьюдента, найденное для заранее выбранного уровня значимости α и числа степеней свободы $f_{ош}$.

В данном случае $S_{ош}$ = 30; $f_{ош} = 4$. Значение критерия Стьюдента получим с помощью функции *MS Excel =СТЬЮДРАСПОБР*(0,05; 4). В рассматриваемом примере

$$S_A = 1,369; \quad t_{\alpha; f_{ош}} = 2,776; \qquad |A_k| > 3,800.$$

Очевидно, что коэффициент A_{12} оказывается статистически незначимым. Исключим его из модели, которая в результате приобретет следующий вид:

$$\hat{V} = 60,25 - 9,75 z_1 - 6,25 z_2.$$

Значения, предсказываемые этой моделью, поместим в столбец $\hat{V}$.

Однако использовать полученную модель неудобно, т. к. при вычислении допускаемой скорости резания натуральные значения подачи и глубины резания необходимо будет преобразовывать в нормированные величины. Пусть известны интервалы построения модели по каждому из факторов [$x_{i\min}$; $x_{i\max}$]. При этом значения фактора $x_{i\min}$ и $x_{i\max}$ соответствуют нижнему и верхнему уровням фактора z_i.

Середину указанного интервала

$$x_i^0 = \frac{x_{i\min} + x_{i\max}}{2} \tag{15}$$

называют *основным уровнем фактора*, а ширину этого интервала

$$\Delta x_i = x_{i\max} - x_{i\min} \tag{16}$$

интервалом варьирования i-го фактора.

Нормированные значения фактора связаны с натуральными значениями соотношением

$$z_i = \frac{2(x_i - x_i^0)}{\Delta x_i}. \qquad (17)$$

Найдем основные уровни и интервалы варьирования подачи и глубины резания:

$$s^0 = \frac{0,1+1}{2} = 0,55 \text{ мм/об}; \quad \Delta s = (1-0,1) = 0,9 \text{ мм/об};$$

$$t^0 = \frac{0,5+3}{2} = 1,75 \text{ мм}; \quad \Delta t = (3-0,5) = 2,5\text{мм}.$$

Используя нормирующее преобразование (17), получим

$$\hat{V} = 60,25 - 9,75z_1 - 6,25z_2 = 60,25 - 9,75\frac{2(s-0,55)}{0,9} - 6,25\frac{2(t-1,75)}{2,5} =$$

$$= 80,92 - 20,67s - 5t.$$

На рисунке 11 представлены результат решения задачи в *MS Excel* и расчетные формулы, применявшиеся для поиска решения.

Задание

По примерам, выданным преподавателем, построить модель заданного вида на основе ПФЭ.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	*N*	Z_0	Z_1	Z_2	Z_{12}	V_1	V_2	$\bar{V}$	$\hat{V}$	*S ош i*	*Vm*	*S ад i*
2	1	1	-1	-1	1	76	78	77	77	2	76,25	0,5625
3	2	1	1	-1	-1	55	57	56	56	2	56,75	0,5625
4	3	1	-1	1	-1	60	66	63	63	18	63,75	0,5625
5	4	1	1	1	1	43	47	45	45	8	44,25	0,5625
6												
7		A0	A1	A2	A12			S ош	t	dA	S ад	F кр
8		60,3	-9,75	-6,3	0,75			30	2,78	3,8018	4,5	7,7086
9	Пр	**60,3**	**-9,75**	**-6,3**	**0**							
10												
11				Модель адекватна								

	A	B	C	D
1	*N*	Z_0	Z_1	Z_2
2	1	1	-1	-1
3	2	1	1	-1
4	3	1	-1	1
5	4	1	1	1
6				
7		**A0**	**A1**	**A2**
8		=СУММПРОИЗВ(B2:B5;$H$2:$H$5)/4	=СУММПРОИЗВ(C2:C5;$H$2:$H$5)/4	=СУММПРОИЗВ(D2:D5;$H$2:$H$5)/4
9	Пр	**=ЕСЛИ(ABS(B8)>$J$8;B8;0)**	**=ЕСЛИ(ABS(C8)>$J$8;C8;0)**	**=ЕСЛИ(ABS(D8)>$J$8;D8;0)**
10				
11				=ЕСЛИ(((K8/1)/(H8/4))<L8;"Модель адекватна";"Модель неадекватна")

	H	I	J	K	L
1	$\bar{V}$	$\hat{V}$	*S ош i*	*Vm*	*S ад i*
2	*=СРЗНАЧ(F2:G2)*	*=$B$8+$C$8*C2+$D$8*D2+$E$8*E2*	=(СТАНДОТКЛОН(F2:G2))^2*1	=$B$9+$C$9*C2+$D$9*D2+$E$9*E2	=(H2-K2)^2
3	*=СРЗНАЧ(F3:G3)*	*=$B$8+$C$8*C3+$D$8*D3+$E$8*E3*	=(СТАНДОТКЛОН(F3:G3))^2*1	=$B$9+$C$9*C3+$D$9*D3+$E$9*E3	=(H3-K3)^2
4	*=СРЗНАЧ(F4:G4)*	*=$B$8+$C$8*C4+$D$8*D4+$E$8*E4*	=(СТАНДОТКЛОН(F4:G4))^2*1	=$B$9+$C$9*C4+$D$9*D4+$E$9*E4	=(H4-K4)^2
5	*=СРЗНАЧ(F5:G5)*	*=$B$8+$C$8*C5+$D$8*D5+$E$8*E5*	=(СТАНДОТКЛОН(F5:G5))^2*1	=$B$9+$C$9*C5+$D$9*D5+$E$9*E5	=(H5-K5)^2
6					
7	**S ош**	**t**	**dA**	**S ад**	**F кр**
8	=СУММ(J2:J5)	=СТЬЮДЕНТ.ОБР.2Х(0,05;4)	=I8*КОРЕНЬ(H8/4/4)	=2*СУММ(L2:L5)	=FРАСПОБР(0,05;1;4)

Рисунок 11 – Решение задачи ПФЭ в *MS Excel*

6 Дробный факторный эксперимент

Требующееся для построения модели по методике ПФЭ количество экспериментов резко растет при увеличении числа факторов k (пропорционально 2^k), что приводит к резкому возрастанию ресурсов для моделирования. Так, трехфакторная модель требует не менее 8 экспериментов, четырехфакторная – 16, пятифакторная – 32. Кроме того, в этих числах не учтена необходимость дублирующих экспериментов (не менее двух-трех) для обеспечения возможности проверки адекватности модели. Таким образом, общее количество экспериментов может превышать в данном случае 100, что делает их реализацию затруднительной.

Дробный факторный эксперимент (ДФЭ) позволяет существенно снизить количество требуемых опытов *за счет включения новых факторов в столбцы матрицы планирования, соответствующие взаимодействиям.*

Так, например, трехфакторную модель можно представить в виде

$$\hat{y} = A_0 + A_1 z_1 + A_2 z_2 + A_3 z_3 + A_{12} z_1 z_2 + A_{13} z_1 z_3 + A_{23} z_2 z_3 + A_{123} z_1 z_2 z_3. \qquad (18)$$

Матрица планирования в этом случае будет иметь вид, представленный в таблице 4.

Таблица 4 – Матрица планирования для трехфакторного ПФЭ

N	z_0	z_1	z_2	z_3	z_{12}	z_{13}	z_{23}	z_{123}	y
1	+	–	–	–	+	+	+	–	
2	+	+	–	–	–	–	+	+	
3	+	–	+	–	–	+	–	+	
4	+	+	+	–	+	–	–	–	
5	+	–	–	+	+	–	–	+	
6	+	+	–	+	–	+	–	–	
7	+	–	+	+	–	–	+	–	
8	+	+	+	+	+	+	+	+	

Слагаемые модели (18), соответствующие взаимодействиям, будут значимыми только в том случае, если статистически значимыми будут соответствующие им коэффициенты, что возможно лишь в том случае, если *факторы моделей являются зависимыми друг от друга*. Однако на практике *для включения в модель рекомендуется выбирать независимые факторы*.

Так, например, подача на токарном станке не может влиять на скорость резания, т. к. эти движения обеспечиваются различными приводными механизмами (подачи и главного движения), в связи с чем слагаемое, соответствующее парному взаимодействию подачи и скорости резания, будет статистически незначимым, а значение соответствующего коэффициента – близким к нулю.

Практика подтверждает, что только в редких случаях бывают значимыми парные взаимодействия и фактически никогда – тройные и более высоких порядков.

Таким образом, *в силу свойств симметричности и ортогональности матрицы планирования вместо статистически незначимых взаимодействий в нее можно включить новые факторы*.

Так, например, столбцы матрицы ПФЭ с взаимодействиями (см. таблицу 4) могут быть использованы для введения новых факторов: вместо взаимодействия z_1z_2 – фактор z_4; $z_1z_3 \to z_5$; $z_2z_3 \to z_6$; $z_1z_2z_3 \to z_7$.

Описанная методика называется *дробным факторным экспериментом.*

Матрица ПФЭ, которая используется для включения новых факторов, называется *репликой* (*опорной матрицей*). Так, например, для построения на основе методики ДФЭ трехфакторной модели может использоваться матрица двухфакторного ПФЭ, для построения трех-…семифакторных моделей – матрица трехфакторного, для трех-…пятифакторных моделей – матрица четырехфакторного ПФЭ и т. д.

Очевидно, если общее количество экспериментов (и, следовательно, общее количество слагаемых модели) $N = 2^k$, то в соответствующую реплику можно ввести до $2^k - k - 1$ новых факторов.

Пример **–** Используя матрицу двухфакторного ПФЭ, построить на основе методики ДФЭ трехфакторную модель. Исходные данные приведены в таблице 5.

Таблица 5 – Данные для построения модели ДФЭ

Номер эксперимента	z_0	z_1	z_2	z_3	y
1	+	–	–	+	81
2	+	+	–	–	11
3	+	–	+	–	31
4	+	+	+	+	121

Вместо взаимодействия z_1z_2 в реплику включен фактор z_3. Таким образом, вместо восьми экспериментов, требующихся для построения трехфакторной модели по методике ПФЭ, будет достаточно четырех экспериментов по методике ДФЭ.

Будем искать модель в виде

$$\hat{y} = A_0 + A_1z_1 + A_2z_2 + A_3z_3.$$

Вычислим значения коэффициентов:

$$A_0 = (81 + 11 + 31 + 121)/4 = 61;$$

$$A_1 = (-81 + 11 - 31 + 121) / 4 = 5;$$

$$A_2 = (-81 - 11 + 31 + 121) / 4 = 15;$$

$$A_3 = (81 - 11 - 31 + 121) / 4 = 40.$$

Таким образом, модель имеет следующий вид:

$$\hat{y} = 61 + 5z_1 + 15z_2 + 40z_3.$$

Вычисленные по модели значения

$$\hat{y}_1 = 61 - 5 - 15 + 40 = 81;$$

$$\hat{y}_2 = 61 + 5 - 15 - 40 = 11;$$

$$\hat{y}_3 = 61 - 5 + 15 - 40 = 31;$$

$$\hat{y}_4 = 61 + 5 + 15 + 40 = 121.$$

Таким образом, модель точно описывает экспериментальные данные.

Задание

По примерам, выданным преподавателем, построить модель заданного вида на основе ДФЭ.

7 Оценка качества моделей

После построения модели требуется оценить соответствие наблюдаемого значения выходной переменной y и предсказанных моделью значений $\hat{y}$. В этом случае говорят, что осуществляют *проверку качества построенной модели*. Она базируется на принципах дисперсионного анализа.

Методы определения значимости уравнения регрессии и *адекватности модели* построены на статистической оценке составляющих общей дисперсии наблюдений:

$$S_o = S_{рег} + S_{ад} + S_{ош}, \tag{19}$$

где S_o – общая дисперсия наблюдений;

$S_{рег}$ – регрессионная дисперсия, характеризующая наличие связи регрессионного характера между фактором и выходной переменной модели;

$S_{ад}$ – дисперсия неадекватности модели экспериментальным данным;

$S_{ош}$ – дисперсия случайных ошибок наблюдений.

Дисперсия $S_о$ характеризует общую изменчивость (вариацию) данных и состоит из регрессионной дисперсии $S_{рег}$, отвечающей за закономерную (детерминированную) изменчивость данных, дисперсии неадекватности $S_{ад}$, отвечающей за систематическую ошибку модели, а также дисперсии случайных ошибок данных $S_{ош}$.

Указанные суммы квадратов и соответствующие им числа степеней свободы могут быть найдены по следующим формулам:

$$S_о = \sum_i \sum_u (y_{iu} - \overline{\overline{y}})^2; \tag{20}$$

$$f_о = iu - 1; \tag{21}$$

$$S_{рег} = u \sum_i (\hat{y}_i - \overline{\overline{y}})^2; \tag{22}$$

$$f_{рег} = k, \tag{23}$$

где k – число коэффициентов модели при ее факторах (за исключением постоянного коэффициента a_0);

$$S_{ош} = \sum_i \left[\sum_u (y_{iu} - \overline{y}_i)^2 \right]; \tag{24}$$

$$f_{ош} = (u-1)i; \tag{25}$$

$$S_{ад} = u \sum_i (\hat{y}_i - \overline{y}_i)^2; \tag{26}$$

$$f_{ад} = i - 1 - k. \tag{27}$$

Заметим, что описанные отношения в форме сумм дисперсий справедливы и в отношении их чисел степеней свободы.

После того как значения дисперсий получены, переходят к проверке качества модели. На практике такая проверка ведется по двум критериям: *значимости уравнения регрессии* и *адекватности модели экспериментальным данным.*

Проверка значимости уравнения регрессии позволяет проверить условие того, что изменчивость данных в силу наличия взаимосвязи между переменными модели статистически значимо превосходит их изменчивость под действием ошибок любого рода.

Указанная проверка может вестись двумя способами.

Первый, менее строгий способ связан с вычислением коэффициента детерминации

$$r^2 = \frac{S_{рег}}{S_o}. \tag{28}$$

Так как дисперсия $S_{рег}$ характеризует детерминированную взаимосвязь переменных модели и, кроме того, в соответствии с формулой (19) дисперсия $S_{рег}$ является частью общей дисперсии S_o, значение коэффициента детерминации характеризует тесноту связи между фактором и выходной переменной модели.

Обычно считают, что при значениях r^2 = 0,8...1 статистическая связь между x и y тесная, при r^2 = 0,6...0,8 – удовлетворительная, при r^2 = 0,4...0,6 – слабая. При r^2 < 0,4 связь, как правило, отсутствует (является статистически незначимой). Такая оценка степени значимости модели по величине коэффициента детерминации является менее строгой и поэтому может быть лишь предварительной.

Второй, более строгий способ проверки значимости уравнения регрессии (модели) осуществляется следующим образом. Очевидно, что если в статистическом смысле $S_{рег} > S_{ост}$, то регрессионная связь между перемен-ными x и y сильнее, чем вариации переменной y, вызванные случайными и систематическими погрешностями, что эквивалентно различию дисперсий $S_{рег}$ и $S_{ост}$ на основе критерия Фишера:

$$F_{рег} = \frac{S_{рег} / f_{рег}}{S_{ост} / f_{ост}} > F_{\alpha; f_{рег}; f_{ост}}, \tag{29}$$

где $F_{\alpha; f_{рег}; f_{ост}}$ – критическое значение квантиля распределения Фишера, зависящее от заранее установленного уровня значимости α и чисел степеней свободы $f_{рег}$ и $f_{ост}$.

Если условие (29) выполняется, то *уравнение регрессии считается значимым* (*на уровне значимости* α).

Проверка адекватности модели заключается в сравнении степеней влияния на изменчивость переменных модели двух источников ошибок: систематической погрешности модели и случайной погрешности данных. *Модель считается адекватной в том случае, если вносимая ею систематическая погрешность не превышает случайной погрешности данных.*

Указанный критерий эквивалентен выполнению условия

$$F_{ад} = \frac{S_{ад} / f_{ад}}{S_{ош} / f_{ош}} < F_{\alpha; f_{ад}; f_{ош}}. \qquad (30)$$

Если условие (30) истинно, то *модель считается адекватной экспериментальным данным* (*на уровне значимости* α).

Пример 1 **–** Для наблюдений за износом резцов (таблица 6) проверить значимость уравнения регрессии и адекватность построенной модели износа резца:

$$l = 10{,}788 - 0{,}01371\, t.$$

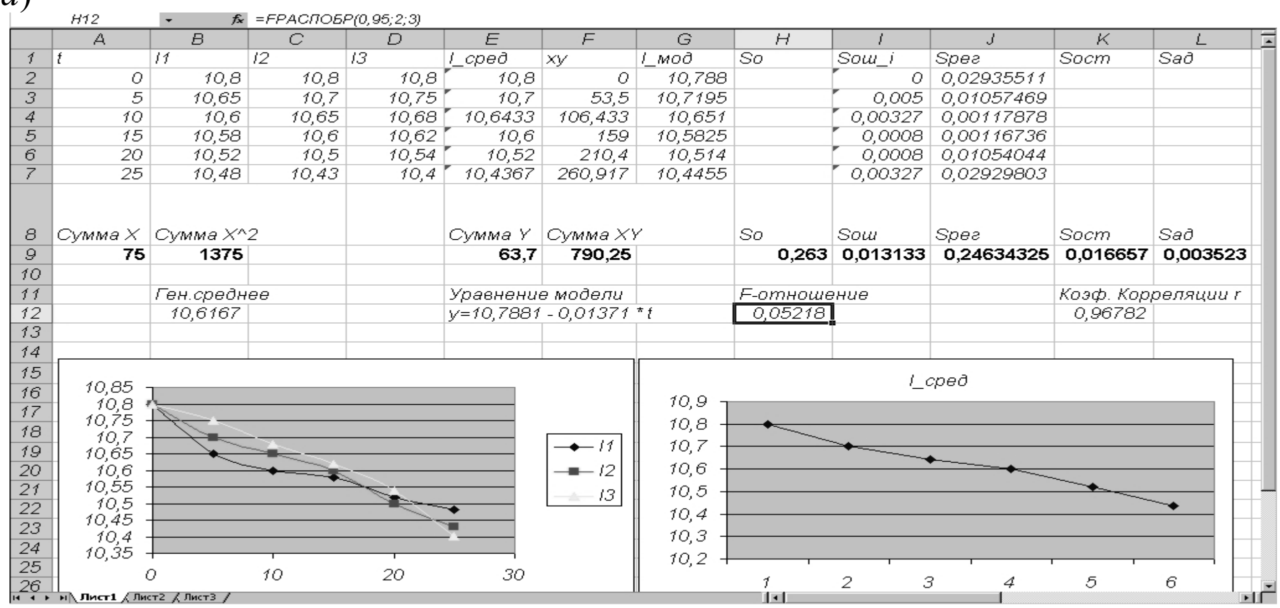
Таблица 6 – Результаты, полученные при исследованиях трех резцов

t, мин	0	5	10	15	20	25
l_1, мм	10,80	10,65	10,60	10,58	10,52	10,48
l_2, мм	10,80	10,70	10,65	10,60	10,50	10,43
l_3, мм	10,80	10,75	10,68	10,62	10,54	10,40
$\bar{l}_i$, мм	10,80	10,70	10,643	10,60	10,52	10,437
$\hat{l}_i$, мм	10,788	10,720	10,651	10,583	10,514	10,456

Весьма удобным для построения моделей методом наименьших квадратов и проверки их качества является использование табличного процессора *MS Excel*.

На рисунке 12, *а* представлен результат решения задачи с использованием *MS Excel*, а на рисунке 12, *б*, *в* – формулы, вводимые в ячейки таблиц для расчета. Значения критерия Фишера также получены в данной среде.

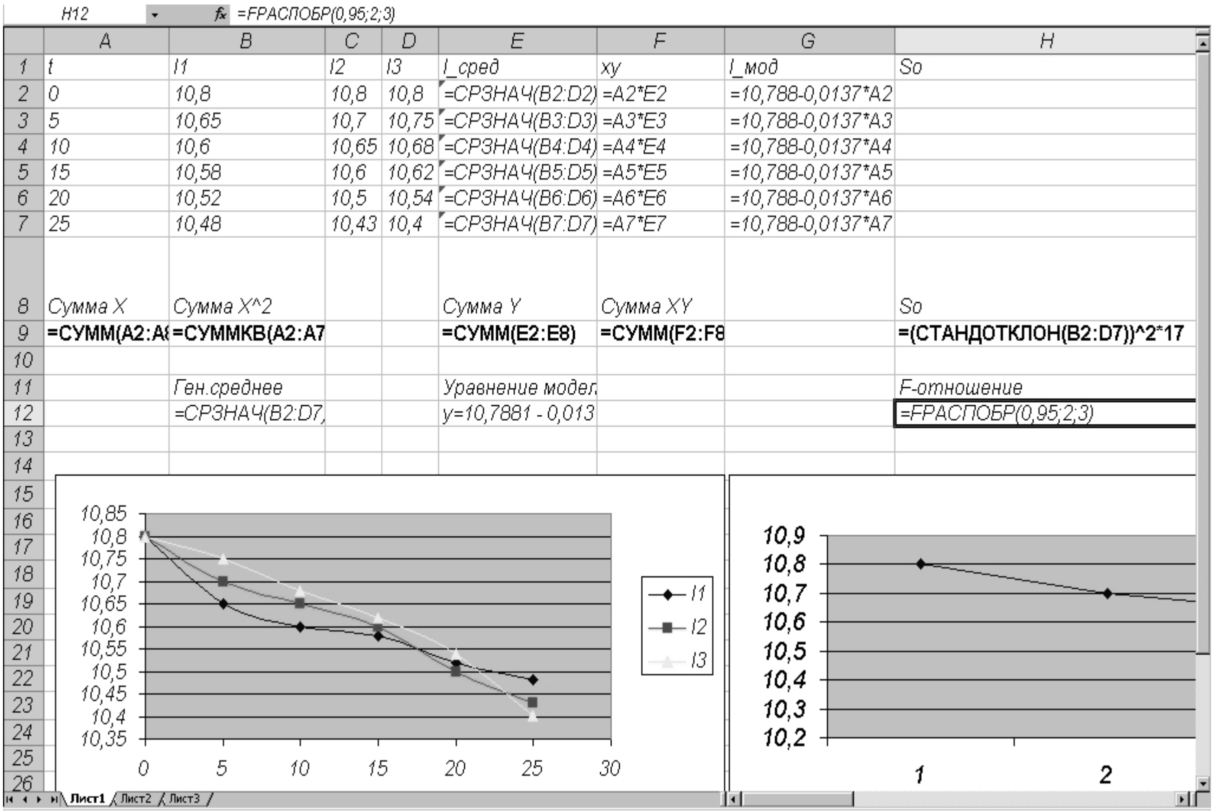
а)



H12 =FРАСПОБР(0,95;2;3)

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	t	l1	l2	l3	l_сред	xy	l_мод	So	Sош_i	Sрег	Sост	Sад
2	0	10,8	10,8	10,8	10,8	0	10,788		0	0,02935511		
3	5	10,65	10,7	10,75	10,7	53,5	10,7195		0,005	0,01057469		
4	10	10,6	10,65	10,68	10,6433	106,433	10,651		0,00327	0,00117878		
5	15	10,58	10,6	10,62	10,6	159	10,5825		0,0008	0,00116736		
6	20	10,52	10,5	10,54	10,52	210,4	10,514		0,0008	0,01054044		
7	25	10,48	10,43	10,4	10,4367	260,917	10,4455		0,00327	0,02929803		
8	Сумма X	Сумма X^2			Сумма Y	Сумма XY		So	Sош	Sрег	Sост	Sад
9	**75**	**1375**			**63,7**	**790,25**		**0,263**	**0,013133**	**0,24634325**	**0,016657**	**0,003523**
10												
11		Ген.среднее			Уравнение модели			F-отношение			Коэф. Корреляции r	
12		10,6167			y=10,7881 - 0,01371 *t			0,05218			0,96782	

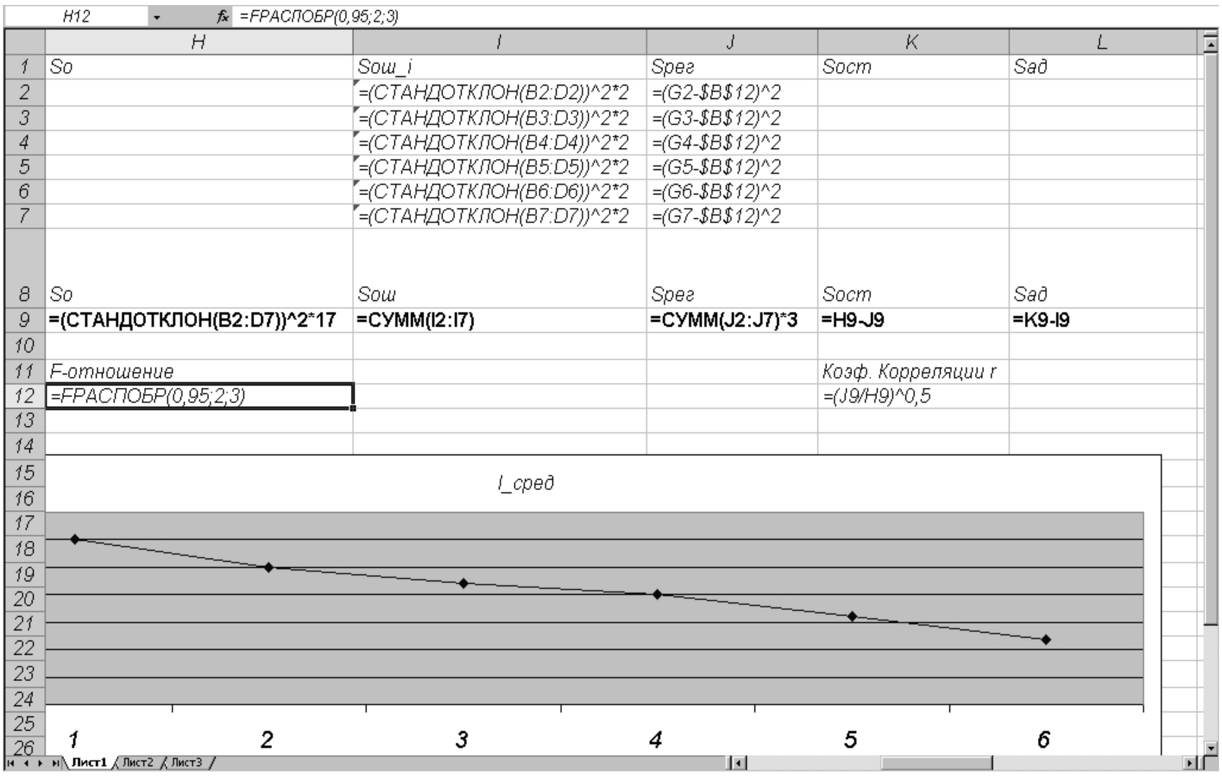
Рисунок 12 – Построение модели и проверка ее качества в среде *MS Excel* *б*)



H12 =FРАСПОБР(0,95;2;3)

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	t	I1	I2	I3	I_сред	xy	I_мод	So
2	0	10,8	10,8	10,8	=СРЗНАЧ(B2:D2)	=A2*E2	=10,788-0,0137*A2	
3	5	10,65	10,7	10,75	=СРЗНАЧ(B3:D3)	=A3*E3	=10,788-0,0137*A3	
4	10	10,6	10,65	10,68	=СРЗНАЧ(B4:D4)	=A4*E4	=10,788-0,0137*A4	
5	15	10,58	10,6	10,62	=СРЗНАЧ(B5:D5)	=A5*E5	=10,788-0,0137*A5	
6	20	10,52	10,5	10,54	=СРЗНАЧ(B6:D6)	=A6*E6	=10,788-0,0137*A6	
7	25	10,48	10,43	10,4	=СРЗНАЧ(B7:D7)	=A7*E7	=10,788-0,0137*A7	
8	Сумма X	Сумма X^2			Сумма Y	Сумма XY		So
9	=СУММ(A2:A(	=СУММКВ(A2:A7			=СУММ(E2:E8)	=СУММ(F2:F8		=(СТАНДОТКЛОН(B2:D7))^2*17
10								
11		Ген.среднее			Уравнение модел.			F-отношение
12		=СРЗНАЧ(B2:D7,			y=10,7881 - 0,013			=FРАСПОБР(0,95;2;3)

в)



H12 =FРАСПОБР(0,95;2;3)

	H	I	J	K	L
1	So	Sош_i	Sрег	Sост	Sад
2		=(СТАНДОТКЛОН(B2:D2))^2*2	=(G2-$B$12)^2		
3		=(СТАНДОТКЛОН(B3:D3))^2*2	=(G3-$B$12)^2		
4		=(СТАНДОТКЛОН(B4:D4))^2*2	=(G4-$B$12)^2		
5		=(СТАНДОТКЛОН(B5:D5))^2*2	=(G5-$B$12)^2		
6		=(СТАНДОТКЛОН(B6:D6))^2*2	=(G6-$B$12)^2		
7		=(СТАНДОТКЛОН(B7:D7))^2*2	=(G7-$B$12)^2		
8	So	Sош	Sрег	Sост	Sад
9	=(СТАНДОТКЛОН(B2:D7))^2*17	=СУММ(I2:I7)	=СУММ(J2:J7)*3	=H9-J9	=K9-I9
10					
11	F-отношение			Коэф. Корреляции r	
12	=FРАСПОБР(0,95;2;3)			=(J9/H9)^0,5	

Окончание рисунка 12

Для расчета сумм квадратов удобно использовать встроенные функции программы. Так, например, для нахождения дисперсии S_o^2 можно применить функцию для расчета среднеквадратического отклонения СТАНДОТКЛОН(…). Так как среднеквадратическое отклонение

$$S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2}{n-1}},$$

то сумму квадратов отклонений от генерального среднего можно рассчитать как

$$\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2 = S^2(n-1),$$

а соответствующая формула в *Excel* будет иметь следующий вид:

=(СТАНДОТКЛОН(B2:D7))^2*17.

Аналогичным образом можно найти дисперсию $S_{ош}$. Сначала определяются ошибки для каждого уровня, например, для первого

=(СТАНДОТКЛОН(B2:D2))^2*2,

а затем суммируются по всем уровням.

Пример 2 **–** Построение линейных моделей можно вести и в автоматическом режиме, с помощью встроенных средств *MS Excel*. С этой целью используется надстройка *Анализ данных*, в которой затем выбирается процедура *Регрессия*.

На рисунке 13 показан пример заполнения окна с параметрами для построения модели.

На рисунке 14 демонстрируется решение приведенной задачи с помощью средства *Регрессия*. В ячейках B28 и B29 находятся величины коэффициентов модели.

Для решения рассматриваемой задачи можно использовать также встроенные функции *MS Excel*. Данный материал менее нагляден и может быть рекомендован освоившим основы вышеприведенного дисперсионного анализа. Покажем, каким образом с помощью встроенных функций *MS Excel* можно вычислить указанные дисперсии, а затем проверить модель.

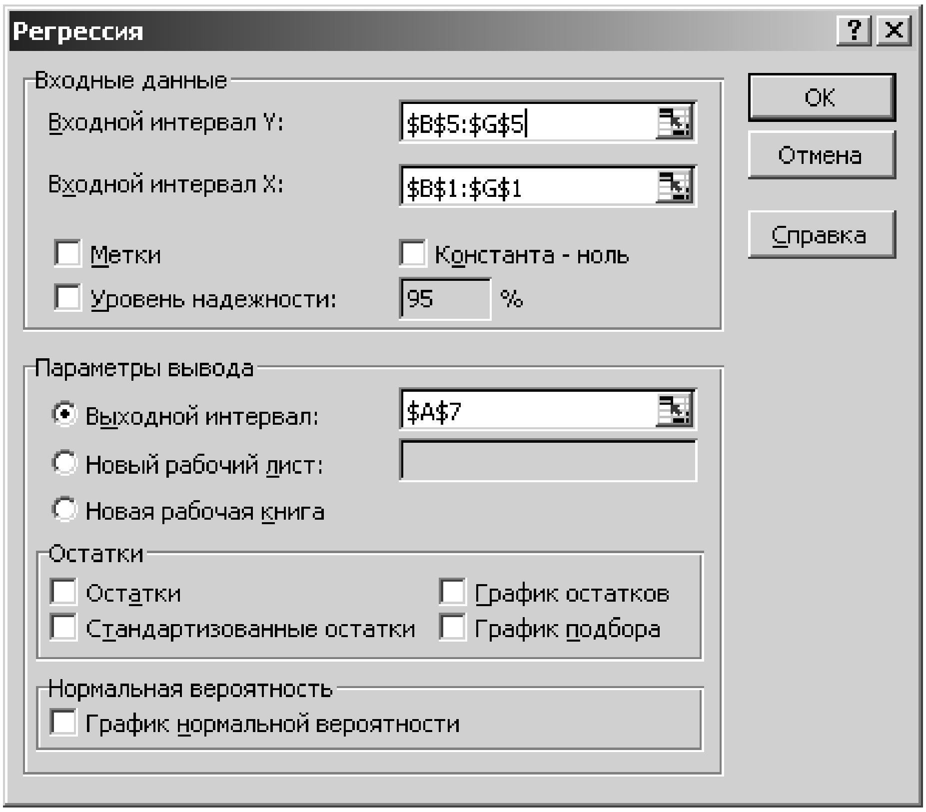
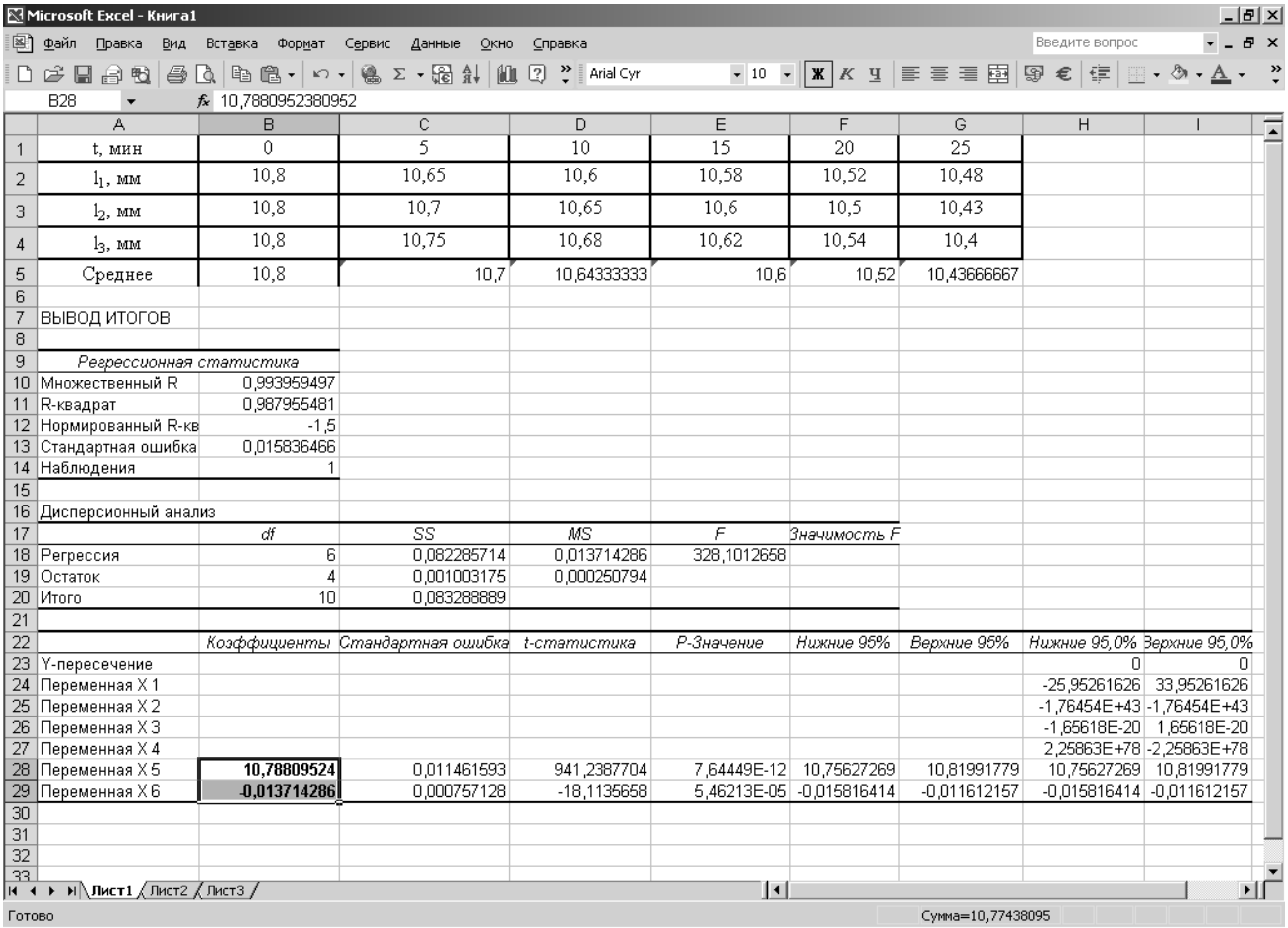


Рисунок 13 – Ввод параметров для построения модели средством *Регрессия*



	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	t, мин	0	5	10	15	20	25		
2	l_1, мм	10,8	10,65	10,6	10,58	10,52	10,48		
3	l_2, мм	10,8	10,7	10,65	10,6	10,5	10,43		
4	l_3, мм	10,8	10,75	10,68	10,62	10,54	10,4		
5	Среднее	10,8	10,7	10,64333333	10,6	10,52	10,43666667		
6									
7	ВЫВОД ИТОГОВ								
8									
9	*Регрессионная статистика*								
10	Множественный R	0,993959497							
11	R-квадрат	0,987955481							
12	Нормированный R-кв	-1,5							
13	Стандартная ошибка	0,015836466							
14	Наблюдения	1							
15									
16	Дисперсионный анализ								
17		*df*	*SS*	*MS*	*F*	*Значимость F*			
18	Регрессия	6	0,082285714	0,013714286	328,1012658				
19	Остаток	4	0,001003175	0,000250794					
20	Итого	10	0,083288889						
21									
22		*Коэффициенты*	*Стандартная ошибка*	*t-статистика*	*P-Значение*	*Нижние 95%*	*Верхние 95%*	*Нижние 95,0%*	*Верхние 95,0%*
23	Y-пересечение							0	0
24	Переменная X 1							-25,95261626	33,95261626
25	Переменная X 2							-1,76454E+43	-1,76454E+43
26	Переменная X 3							-1,65618E-20	1,65618E-20
27	Переменная X 4							2,25863E+78	-2,25863E+78
28	Переменная X 5	**10,78809524**	0,011461593	941,2387704	7,64449E-12	10,75627269	10,81991779	10,75627269	10,81991779
29	Переменная X 6	**-0,013714286**	0,000757128	-18,1135658	5,46213E-05	-0,015816414	-0,011612157	-0,015816414	-0,011612157
30									
31									
32									

Рисунок 14 – Использование средства *Регрессия* для построения модели

Пример 3 **–** На первом этапе для экспериментальных данных рассчитаем средние по уровням с помощью функции СРЗНАЧ(…), а затем модельные значения для всех t с помощью функции, имеющей следующий синтаксис:

=ПРЕДСКАЗ(x; массивYCp; массивX),

где x – значение аргумента, для которого предсказывается значение по автоматически строящейся модели;

массив X – строка со значениями аргумента;

массив YCp – строка со средними по уровню.

Например, для данных, приведенных на рисунке 14, результат расчетов представлен в соответствующих ячейках на рисунке 15, а расчетные формулы и их синтаксис – на рисунке 16.

	A	B	C	D	E	F	G
1	t, мин	0	5	10	15	20	25
2	l_1, мм	10,8	10,65	10,6	10,58	10,52	10,48
3	l_2, мм	10,8	10,7	10,65	10,6	10,5	10,43
4	l_3, мм	10,8	10,75	10,68	10,62	10,54	10,4
5	*l ср, мм*	10,8	10,7	10,64	10,6	10,52	10,44
6	*l мод, мм*	10,788	10,72	10,65	10,58	10,51	10,45
7							
8							
9	10,7881	**a0**					
10	-0,01371	**a1**					
11	0,263	**s o**					
12	0,246857	**s рег**					
13	0,016143	**s ост**					
14	0,00301	**s ад**					
15	0,013133	**s ош**					
16	0,93862	**r2**					

Рисунок 15 – Результаты расчета параметров модели и ее дисперсионного анализа с помощью встроенных фукций *Excel*

Например, функция

=ОТРЕЗОК(массивYCp; массивX)

находит значение свободного коэффициента линейной модели; функция

=НАКЛОН(массивYCp; массивX)

возвращает значения ее углового коэффициента. Функция

=СТАНДОТКЛОН(массив*Y*)^2*(*ui* – 1)

определяет величину общей дисперсии данных. Функция со сложным синтаксисом

=(СТАНДОТКЛОН(массив*YCp*)^2*(*i*–1) –

– СТОШYX(массив*YCp*; массив*X)*^2*(*i* – 2))**u*

обеспечит нахождение регрессионной дисперсии.

	A	B	C
1	t, мин	0	5
2	l_1, мм	10,8	10,65
3	l_2, мм	10,8	10,7
4	l_3, мм	10,8	10,75
5	*l ср, мм*	=СРЗНАЧ(B2:B4)	=СРЗНАЧ(C2:C4)
6	*l мод, мм*	=ПРЕДСКАЗ(B1;$B$5:$G$5;$B$1:$G$1)	=ПРЕДСКАЗ(C1;B!
7			
8			
9	=ОТРЕЗОК(B5:G5;B1:G1)	**a0**	
10	=НАКЛОН(B5:G5;B1:G1)	**a1**	
11	=СТАНДОТКЛОН(B2:G4)^2*(18-1)	**s o**	
12	=(СТАНДОТКЛОН(B5:G5)^2*(6-1)-СТОШYX(B5:G5;B1:G1)^2*(6-2))*3	**s рег**	
13	=A11-A12	**s ост**	
14	=СУММКВРАЗН(B5:G5;B6:G6)*3	**s ад**	
15	=A13-A14	**s ош**	
16	=A12/A11	**r2**	

Рисунок 16 – Синтаксис функций для расчета параметров модели

Остаточная сумма квадратов находится как разница между общей и регрессионной дисперсиями.

Дисперсия неадекватности определяется с помощью функции

=СУММКВРАЗН(массив*YCp*; массив*YМод*)**u.*

Дисперсия случайных ошибок может быть найдена как разность между остаточной суммой квадратов и дисперсией неадекватности.

Задание

По примерам, выданным преподавателем, построить модель заданного вида и проверить ее качество одним из описанных методов.

8 Построение моделей на основе алгоритма обучения

Описанные ранее методы построения эмпирических моделей хорошо разработаны, традиционно применяются на практике, однако зачастую требуют относительно сложных расчетов производных, решения систем уравнений, а также ограничены видом модели. Построение моделей на базе алгоритма машинного обучения не связано такими ограничениями, т. к. представляет собой простой численный метод обработки эмпирических данных, основанный на алгоритмах случайного поиска. Однако следует отметить, что, несмотря на простоту реализации процедур обучения, реализовать их без компьютерной техники невозможно, а полученные с их помощью результаты будут всегда приближенными в отличие от результатов, полученных с помощью описанных аналитических методов.

С другой стороны, алгоритм обучения может использоваться *для отыскания моделей произвольной формы*, когда получить решение аналитическим методом невозможно. При этом сложность алгоритма почти не зависит от сложности отыскиваемой зависимости: изменяется в этом случае только время поиска решения.

Сущность алгоритма обучения достаточно проста. Она заключается в изменении параметров вычислительной системы таким образом, чтобы *скомпенсировать ошибку ее предсказания относительно обучающего множества*.

Так, применительно к задаче моделирования под *обучающим множеством следует понимать экспериментальные данные*, которые предъявляются компьютерной программе исследователем и предсказывать которые программа должна научиться. Под *ошибкой предсказания* понимают невязку (разницу) между экспериментальными данными и модельными (предсказанными программой).

Опишем основную идею машинного обучения на примере *случайного поиска с возвратом.*

Пусть необходимо построить линейную модель данных с использованием случайного алгоритма поиска. Линейная модель полностью определяется коэффициентами уравнения a_0 и a_1, поэтому алгоритм обучения будет направлен на отыскание их значений. Мера близости (невязки) данных и модели вычисляется на основе критерия наименьших квадратов.

Зададимся случайными величинами коэффициентов a_0 и a_1 (на первом этапе они могут быть положены равными нулю) и рассчитаем по уравнению

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

модельные значения. Далее найдем величину невязки модели и экспериментальных данных по уравнению (5). Эта величина будет использоваться в качестве критерия эффективности поиска.

На следующем этапе зададим случайные приращения коэффициентам модели a_0 и a_1. Рассчитаем величину новой невязки. В случае, если новая невязка станет меньше по сравнению с прежней, описанные изменения коэффициентов привели к улучшению параметров модели и указанные изменения принимаются. В случае, если изменения коэффициентов ухудшили невязку, осуществляется возврат к их прежним значениям. На последующих этапах описанная последовательность действий повторяется.

Таким образом, поиск значений коэффициентов модели для последующих этапов ведется по следующим формулам:

$$a_0(n+1) = a_0(n) + \varepsilon \cdot Rnd(-1;\ +1); \tag{31}$$

$$a_1(n+1) = a_1(n) + \varepsilon \cdot Rnd(-1;\ +1), \tag{32}$$

где $a_0(n)$ и $a_1(n)$ – значения коэффициентов модели на n-м шаге вычислений;

$a_0(n+1)$ и $a_1(n+1)$ – значения коэффициентов модели на (n + 1)-м шаге вычислений;

ε – небольшое положительное число (шаг поиска);

$Rnd(-1;\ +1)$ – случайное число, распределенное по закону равной вероятности в интервале от -1 до $+1$.

Изменения коэффициентов принимаются, если выполняются условия

$$a_0 = \begin{cases} a_0(n+1) \Leftrightarrow S_{ост}(n+1) < S_{ост}(n); \\ a_0(n) \Leftrightarrow S_{ост}(n+1) \geq S_{ост}(n); \end{cases} \tag{33}$$

$$a_1 = \begin{cases} a_1(n+1) \Leftrightarrow S_{ост}(n+1) < S_{ост}(n); \\ a_1(n) \Leftrightarrow S_{ост}(n+1) \geq S_{ост}(n), \end{cases} \tag{34}$$

где $S_{ост}(n)$ и $S_{ост}(n+1)$ – значения критерия близости (невязки) данных на n-м и (n+1)-м шагах вычислений.

Эффективность обучения в значительной степени зависит от правильного выбора параметров поиска, к которым относятся *начальные условия*, *шаг поиска* и *условия останова*.

Начальные условия (начальные значения коэффициентов a_0 и a_1) определяют сходимость процедуры поиска и ее скорость. Так, ни один из существующих алгоритмов поиска не является абсолютно устойчивым в отношении проблемы «застревания» в области локальных экстремумов. В меньшей степени зависим от них случайный поиск, но и он не всегда позволяет обеспечить эффективность решения. Зачастую начальный выбор значений параметров вблизи области локальных экстремумов затрудняет или даже делает невозможным поиск решения. Поэтому на практике часто используют *эвристику перезапуска*, когда решение пытаются получить несколько раз, изменяя при этом случайным образом начальные условия поиска. Это позволяет надеяться на то, что при выборе «удачных» начальных условий решение будет найдено и не произойдет «зависание» алгоритма в локальных экстремумах.

Шаг поиска ε является определяющим в части качества полученного решения. Так, малые значения шага приводят к тому, что значения коэффициентов будут найдены достаточно точно. Однако объем вычислений и, следовательно, время поиска этих значений могут оказаться слишком большими, что сделает процедуру поиска неприменимой на практике, и наоборот, большие значения шага приводят к тому, что решение будет найдено быстро, но его точность может оказаться низкой. В связи с этим обычно пытаются получить решение с различными величинами шагов, чтобы исследовать сходимость метода. Иногда на практике используют также *эвристику «моделирования отжига»* (*алгоритм Метрополиса*), в соответствии с которой на первом этапе выбирается большой шаг поиска для получения грубого приближения решения, а затем шаг экспоненциально уменьшается для получения более точных приближений.

Условия останова поиска являются важными для уменьшения его трудоемкости. Это связано с тем, что может быть затрачено большое количество времени, пока исследователь не убедится в неэффективности поиска или в том, что решение уже найдено. Наиболее простым условием останова является ограничение числа попыток изменения параметров или времени поиска. Такой подход часто применяется при предварительном исследовании пространства задачи, для получения начальных приближений решения, а также при использовании эвристики перезапуска. Другим условием останова может быть достижение коэффициентом детерминации некоторого наперед заданного значения (например, 0,9), которое обеспечит удовлетворительный результат поиска. Недостатком такого подхода является то, что при неверном выборе вида модели или слишком высокого значения коэффициента оно не может быть достигнуто в принципе. На практике используют также условие, когда критерий близости модели и данных достигает предельного значения (перестает заметно изменяться в течение нескольких последних попыток). Это может свидетельствовать о том, что алгоритм вышел в область, в которой находится решение или, наоборот, «застрял» в области локального экстремума. Кроме того, часто описанные критерии различным образом комбинируют.

Следует также отметить важную особенность описанных процедур в отношении отыскания сложных нелинейных моделей. Отыскание коэффициентов модели должно вестись *последовательно*, т. е. за один цикл работы программы изменяется только один коэффициент. Это связано с тем, что при параллельном (одновременном) изменении нескольких коэффициентов верные изменения одного из них могут быть нивелированы неправильными изменениями другого. В связи с этим попытка решения может быть воспринята как безуспешная, несмотря на наличие верных элементов решения. Процедура поиска при параллельном решении может стать поэтому заметно более долгой.

Пример – Реализовать процедуру случайного поиска с возвратом для линейной модели в среде *VBA*. Данные представлены в таблице 7.

Требуется определить коэффициенты линейной модели и оценить точность решения при различных параметрах поиска.

Таблица 7 – Данные для построения линейной модели

x	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
y	1	3	5	7	9	11	13	15	17	19

Текст программы приведен далее. В качестве критерия эффективности поиска принято вычисление близости экспериментальных и модельных данных – остаточной суммы, в качестве критерия останова – количество попыток поиска. С апострофов начинаются комментарии к программе.

Для формирования случайного шага коэффициента используется функция *VBA Rnd*(). Эта функция генерирует псевдослучайные числа, распределенные по закону равной вероятности в пределах от 0 до 1. Таким образом, выражение «2*(*Rnd*() – 0.5)» генерирует случайные числа, располагающиеся в интервале [–0,5; +0,5], а выражение «*Eps* *2*(*Rnd*() – 0.5)» – случайный шаг для коэффициентов в интервале [–*Eps*; +*Eps*].

```
Sub Main()

' 1) Инициализация коэффициентов

   Eps = 0.1          ' шаг поиска

   a0 = 2*(Rnd() - 0.5)  ' первоначальное значение a0
   a1 = 2*(Rnd() - 0.5)  ' первоначальное значение a1
   Range("f1") = a0
   Range("f2") = a1

   Sost = 0              ' найдем первоначальное значение критерия близости
   For i = 1 To 10
      x = Range("a1").Offset(i, 0)   ' исходные данные
      y = Range("b1").Offset(i, 0)
      ymod = a0 + a1 * x             ' модельные данные
      Sost = Sost + (y - ymod) ^ 2
   Next i
   Range("f9") = Sost                ' первоначальное значение Sost

' 2) Поисковый цикл

   For j = 1 To 1000                 ' число попыток поиска

   ' 2.1) изменение a0

      a0_old = Range("f1")           ' предыдущее значение a0
      a1_old = Range("f2")           ' предыдущее значение a1
```

```
    Sost_old = Range("f9")          ' предыдущее значение Sost

    a0_new = a0_old + Eps * 2*(Rnd() - 0.5)      ' новое значение a0
    Sost_new = 0                                 ' вычисление нового Sost
    For i = 1 To 10
      x = Range("a1").Offset(i, 0)
      y = Range("b1").Offset(i, 0)
      ymod = a0_new + a1_old * x

      Sost_new = Sost_new + (y - ymod) ^ 2
    Next i

    If Sost_new < Sost_old Then   ' если значение за счет a0 улучшилось
      Range("f1") = a0_new        ' принять новый a0
      Range("f9") = Sost_new      ' установить новое значение критерия
      Else
      Range("f1") = a0_old        ' иначе вернуть старый a0
      Range("f9") = Sost_old      ' и вернуть старое значение критерия
    End If

' 2.2) изменение a1

    a0_old = Range("f1")
    a1_old = Range("f2")
    Sost_old = Range("f9")

    a1_new = a1_old + Eps * 2*(Rnd() - 0.5)      ' новое значение a1
    Sost_new = 0                                 ' вычисление нового Sost
    For i = 1 To 10
      x = Range("a1").Offset(i, 0)
      y = Range("b1").Offset(i, 0)
      ymod = a0_old + a1_new * x
      Sost_new = Sost_new + (y - ymod) ^ 2
    Next i

    If Sost_new < Sost_old Then   ' если значение за счет a1 улучшилось
      Range("f2") = a1_new        ' принять новый a1
      Range("f9") = Sost_new      ' установить новое значение критерия
      Else
      Range("f2") = a1_old        ' иначе вернуть старый a1
      Range("f9") = Sost_old      ' и вернуть старое значение критерия
    End If

    Range("f7") = j       ' счетчик попыток
  Next j
```

```
' 3) Вывод модельных данных

   a0 = Range("f1")
   a1 = Range("f2")

   For i = 1 To 10
      x = Range("a1").Offset(i, 0)
      ymod = a0 + a1 * x
      Range("c1").Offset(i, 0) = ymod
   Next i

End Sub
```

Пример рабочего листа после 1000 шагов поиска с шагом ε = 0,1 приведен на рисунке 17.

	A	B	C	D	E	F
1	x	y	y mod		a0	1,006025064
2	0	1	1,006025		a1	1,998630559
3	1	3	3,004656			
4	2	5	5,003286			
5	3	7	7,001917			
6	4	9	9,000547			
7	5	11	10,99918		N	1000
8	6	13	12,99781			
9	7	15	14,99644		Sost	0,000154907
10	8	17	16,99507			
11	9	19	18,9937			
12						

Рисунок 17 – Результаты построения линейной модели на основе алгоритма обучения

Для контроля. Представленные данные описывали зависимость $\hat{y} = 1 + 2x$.

Таким образом, после 1000 случайных шагов относительные погрешности определения коэффициентов составили 0,6 и 0,1 % и могли быть снижены еще в большей мере в случае продолжения поиска.

Задание

По примерам, выданным преподавателем, построить модель заданного вида и оценить влияние параметров поиска (шага, условий останова) на ее точность.

9 Поиск оптимальных решений на эмпирических моделях

Построение моделей экспериментальных наблюдений не является конечным этапом обработки опытных данных. Полученные модели служат лишь инструментом для описания этих наблюдений, при использовании которого далее могут быть выбраны сочетания параметров, обеспечивающие некоторые характеристики изучаемого объекта или явления. При этом требования к таким характеристикам часто являются экстремальными, т. е. требуется их максимизация или минимизация.

Так, например, стандартной задачей механообработки является выбор оптимальных режимов резания (скорости и глубины резания, подачи), при которых будет обеспечена минимизация затрат времени (максимизация производительности) или минимизация технологической себестоимости. При этом одновременно должен выполняться ряд ограничений на область поиска. Как правило, в их числе – ограничения по точности и шероховатости обработанных поверхностей, ограничения по мощности резания и жесткости технологический системы, ограничения по стойкости инструмента и др.

Таким образом, в общем случае *под задачей оптимизации понимают задачу нахождения экстремума* (*минимума или максимума*) *целевой функции в некоторой конечной области факторного пространства при заданных ограничениях* в форме равенств (неравенств).

Классические методы поиска оптимальных решений в зависимости от предметной области задач делятся на *три группы*: *градиентные*, *безградиентные*, *случайного поиска*.

Градиентные методы построены по принципу пошагового приближения к оптимуму, при этом направление поиска выбирается по *градиенту функции*, *т. е. по вектору*, *в направлении которого функция изменяется наиболее быстро*.

К классу градиентных методов относятся метод наискорейшего спуска, обобщенный метод Ньютона (в том числе учитывающий при аппроксимации вторую производную и производные более высоких порядков), метод покоординатного спуска, метод ε-возмущений и др.

Главным недостатком градиентных методов является то, что они *работают только на унимодальных функциях*, т. е. функциях, имеющих один экстремум в области поиска. Говорят, что градиентные методы склонны к «застреванию» в областях локальных экстремумов.

Безградиентные методы поиска (метод штрафных функций, симплекс-метод для линейного программирования, метод ветвей и границ на дискретных множествах, метод отсечений для целочисленного программирования и др.) применяются к решению задач для специфических предметных областей и поэтому относительно редко используются при исследованиях эмпирических моделей. В связи с этим дополнительно на этих методах останавливаться не будем.

Методы случайного поиска применяются как на унимодальных, так и на полимодальных целевых функциях, часто позволяют выйти из локального экстремума. В наиболее простых реализациях этих методов из начальной точки начинают движение в случайном направлении. При этом, если после такого перемещения решение ухудшилось, возвращаются в исходную точку, если же улучшилось, то перемещение принимается.

Нестабильность сходимости является характерным свойством случайного поиска. Поэтому *перезапуск алгоритма* часто используется на практике с целью обеспечить удачную начальную позицию относительно области оптимума.

Описанные методы поиска оптимальных решений являются классическими и, как уже отмечалось, имеют собственные достоинства и недостатки. В настоящее время «чистым» градиентным и случайным методам составляют конкуренцию *комбинированные методы поиска*.

Комбинированные методы основаны на использовании положительных сторон обоих классов – быстроты сходимости градиентных и устойчивости к локальным экстремумам случайных – и поэтому имеют высокую эффективность.

Среди таких методов следует отметить *многолучевой поиск*, имитирующий поиск решения по несколькими независимым путям (потокам), при котором отдельные потоки обмениваются информацией о его результатах между собой.

Еще одним популярным классом таких методов являются *генетические алгоритмы*, имитирующие процессы эволюции живых организмов. Заметим, что генетические алгоритмы имеют большое количество настроечных параметров и сложны в реализации. Поэтому на практике часто используются комбинированные методы, получившие собирательное название *эволюционных методов*.

MS Excel содержит надстройку *Поиск решения*, которая позволяет решать многие задачи оптимизации с использованием как градиентного, так и эволюционного поиска. В надстройке представлено три метода:

1) *метод ОПГ* (*обобщенного понижающего градиента*) – один из представителей градиентных методов, рекомендуемый для решения нелинейных задач на гладких целевых функциях;

2) *симплекс-метод* для решения задач линейного программирования (безградиентный метод для задач с линейной целевой функцией и линейными ограничениями);

3) *эволюционный поиск решения*, используемый для решения задач на негладких и разрывных функциях.

Пример 1 **–** Найти оптимальное решение $y = x_1^2 + x_2^2 + 1,2x_1x_2 \to \min$ *с использованием метода ОПГ* в надстройке *Поиск решения*.

После запуска надстройки *Поиск решения* появится окно с настройками поиска (рисунок 18).

В первоначальных настройках указываются ячейки с переменными и ячейка с формулой для целевой функции. Будем вводить значения переменных x_1 и x_2 в ячейки A2 и B2. Результаты поиска будут выводиться также в эти же ячейки.

Введем формулу целевой функции в ячейку D2:

=A2^2+B2^2+1,2*A2*B2.

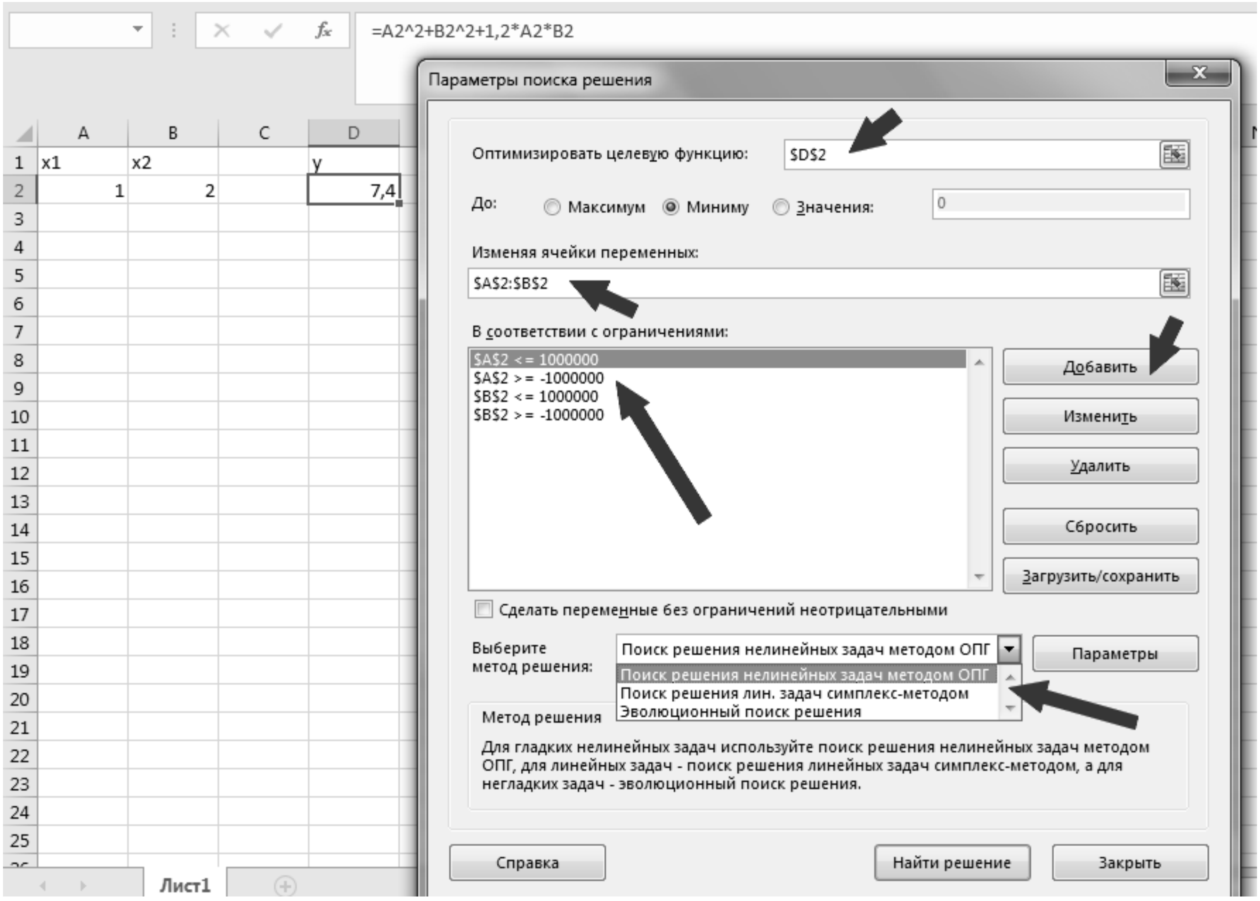


Рисунок 18 – Первоначальные настройки поиска

Далее добавляются ограничения на значения переменных путем нажатия кнопки *Добавить* (рисунок 19). Они записываются в соответствующее поле главной формы (см. рисунок 18).

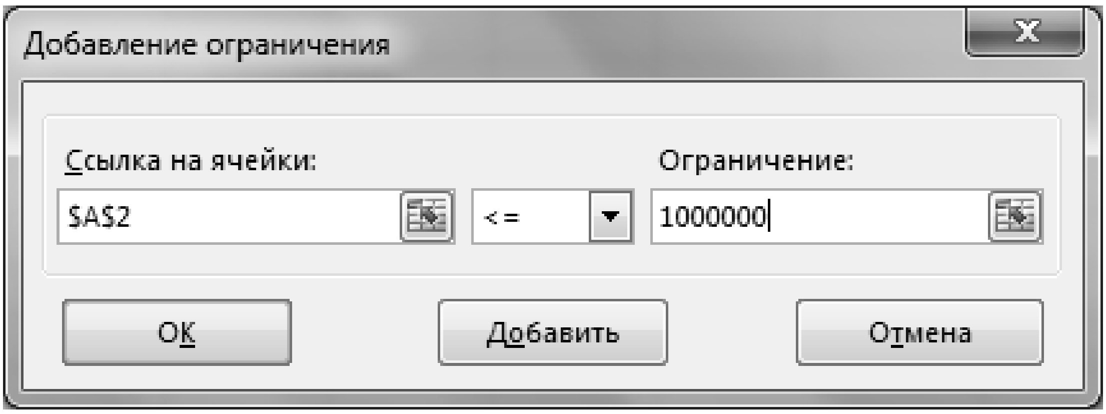


Рисунок 19 – Добавление ограничений переменных

Несмотря на то, что каких-либо ограничений на значения переменных задачей не установлено, надстройка *Поиск решения* не сможет работать без них. В качестве наиболее простых ограничений можно задать достаточно большие числа как границы интервала варьирования переменной, например,

$$\$A\$2 >= -1000\,000;$$

$$\$A\$2 <= 1000\,000,$$

или, например, пределы области построения модели.

Для переменных, которые отражают свойства реальных физических объектов, указать такие границы обычно не очень сложно. Так, многие характеристики физических объектов неотрицательны (например, частота вращения шпинделя, подача, глубина резания). Поэтому в качестве нижней границы этих переменных можно задать нулевое значение. Верхняя граница может соответствовать пределу наблюдаемой величины (например, ограничения за счет кинематики станка).

Затем из выпадающего списка *Выберите метод решения* выбирается метод поиска – *Поиск решения нелинейных задач методом ОПГ*.

Параметры поиска должны быть предварительно настроены. После нажатия на кнопку *Параметры* следует заполнить свойства поисковых процедур в закладке *Все методы* (рисунок 20) и закладке, соответствующей выбранному методу, – *Поиск решения нелинейных задач методом ОПГ* (рисунок 21).

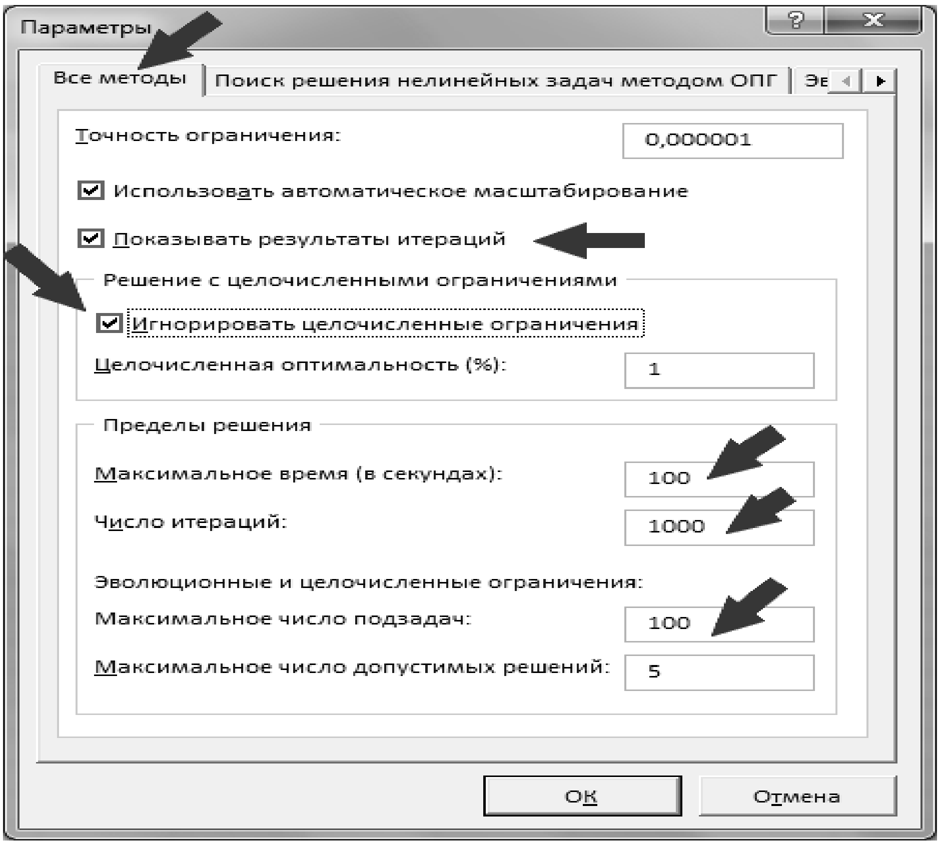


Рисунок 20 – Предварительная настройка поиска

Опция *Использовать автоматическое масштабирование* обеспечивает следующее условие: разность между наибольшими и наименьшими числами в модели должна быть, по возможности, меньше с целью снижения влияния погрешностей округления на результат.

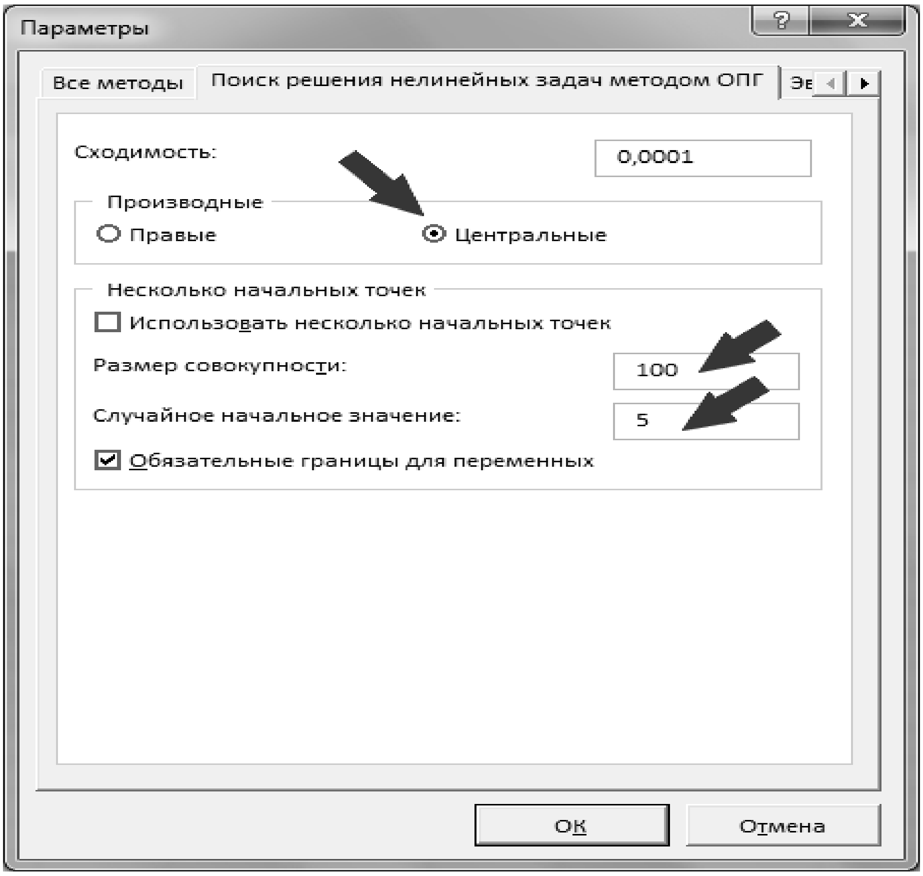


Рисунок 21 – Настройки метода ОПГ

Важным параметром является *Точность ограничения*. Его величина не только устанавливает допустимую погрешность поиска, но и определяет его время: при очень малых значениях этого параметра время может стать очень большим.

Чтобы этого не произошло, устанавливают также ограничение (параметр *Максимальное время* (*в секундах*)) на время поиска. По истечении заданного этой опцией времени поиск автоматически останавливается.

Опция *Показывать результаты итераций* является весьма полезной, т. к. позволяет контролировать результаты поиска, полученные после выполнения заданного количества шагов (параметр *Число итераций*). Результаты при этом отображаются в строке состояния *MS Excel* в реальном масштабе времени.

Опция *Максимальное число подзадач* характеризует количество потоков решения (объем «популяции» решений) при использовании эволюционных алгоритмов.

Опция *Максимальное число допустимых решений* исходит из предположения, что на негладкой многомодовой поверхности целевой функции может быть обнаружено не одно, а несколько решений (при многолучевом поиске в несколько потоков).

Заметим, что поиск может останавливаться, а затем снова запускаться из последней точки, при этом параметры поиска могут корректироваться исходя из результатов поиска, достигнутых на предыдущих итерациях.

Первоначальные настройки метода ОПГ приведены на рисунке 21.

Для повышения скорости сходимости метода, а также точности вычислений рекомендуется для параметра *Производные* выбрать опцию *Центральные* (вычислять производную по центральной формуле).

Если имеется риск «застревания» в локальных экстремумах пространства поиска, рекомендуется выбрать опцию *Использовать несколько начальных точек*, которая реализует эвристику поиска с перезапуском. Однако время поиска в этом случае может заметно увеличиться. Число начальных точек задается параметром *Размер совокупности*.

Опция *Обязательные границы для переменных* задает границы области поиска (в противном случае алгоритм допускает при поиске решения выход за пределы области ограничений).

Поиск решения запускается нажатием на кнопку *Найти решение* на главной форме. Нажатие на клавишу *Esc* в процессе выполнения программы приводит к остановке поиска – такое действие удобно для контроля сходимости результата при длительных вычислениях (рисунок 22).

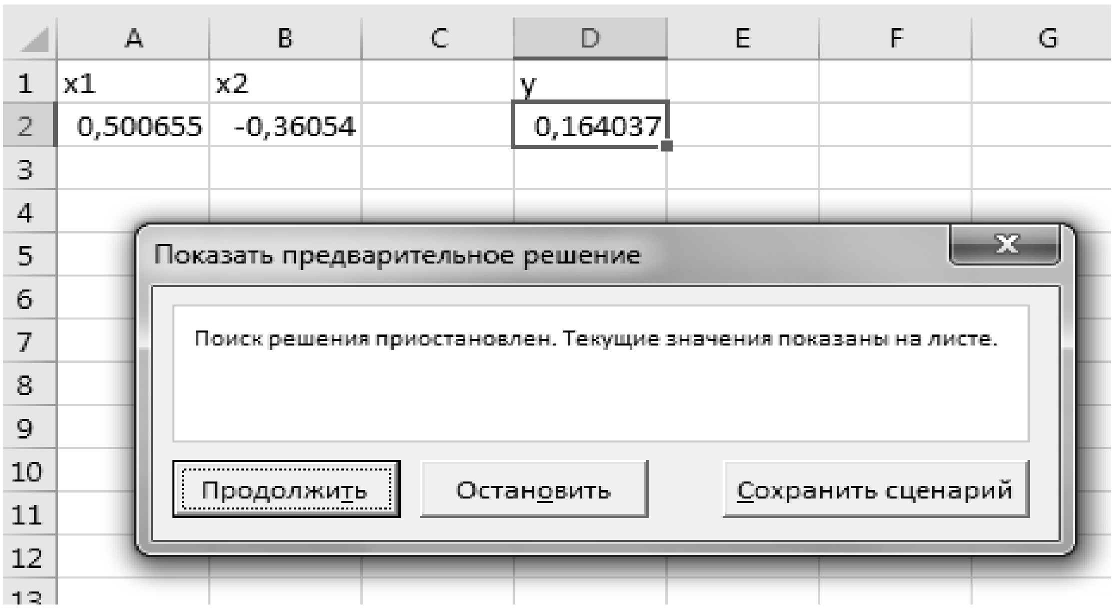


Рисунок 22 – Остановка поиска

Применительно к рассматриваемой задаче в силу гладкости пространства целевой функции поиск решения происходит почти мгновенно, результаты выводятся в соответствующем сообщении (рисунок 23).

Значения переменных, а также целевой функции записываются в первоначально выбранные ячейки.

Заметим, что при негладких многомодовых пространствах поиска метод ОПГ может оказаться неэффективным. В этом случае используют метод эволюционного поиска решений.

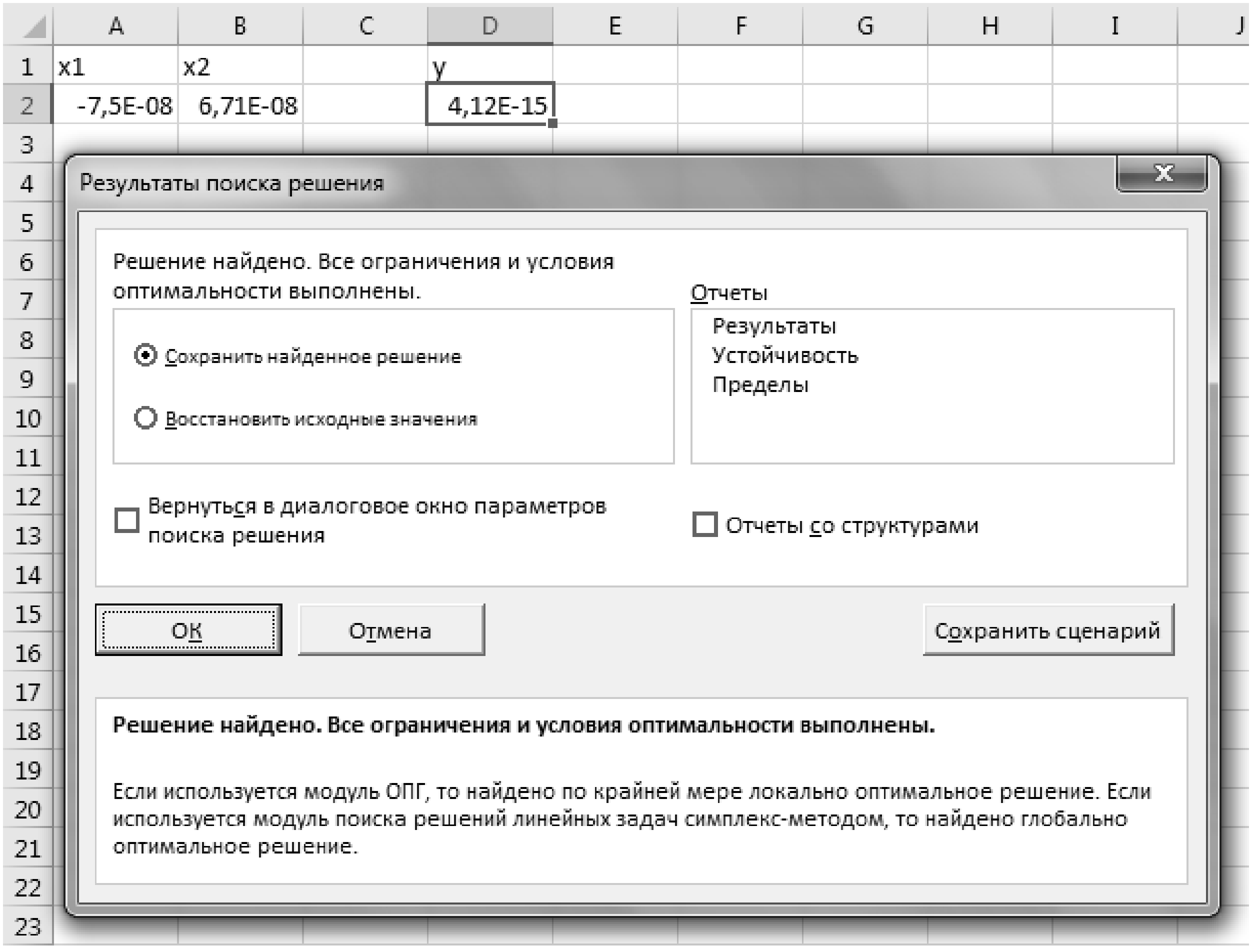


Рисунок 23 – Результаты поиска методом ОПГ

Пример 2 – Найти оптимальное решение $y = x_1^2 + x_2^2 + 1,2x_1x_2 \to \min$ *с использованием метода эволюционного поиска решений* в надстройке *Поиск решения*.

После запуска надстройки *Поиск решения* введем первоначальные параметры так, как это было показано в предыдущем примере.

Кроме того, следует настроить параметры метода эволюционного поиска решений (рисунок 24).

Опция *Сходимость* определяет критерий останова, если значение целевой функции в течение нескольких последних циклов не обеспечивает улучшение решения на величину, меньшую параметра, заданного этой опцией.

Опция *Скорость изменения* задает меру обучения.

Параметр *Размер совокупности* определяет объем «популяции решений» (потоков для поиска решений).

Параметр *Максимальное время без улучшения* задает еще один критерий останова поиска.

Заметим, что в отличие от метода ОПГ данный метод независимо от типа пространства поиска работает медленно. Так, решение задачи потребовало около 80 с (время сильно зависит от выбора начальной точки поиска). От выбора этого параметра может зависеть и точность решения (рисунок 25).

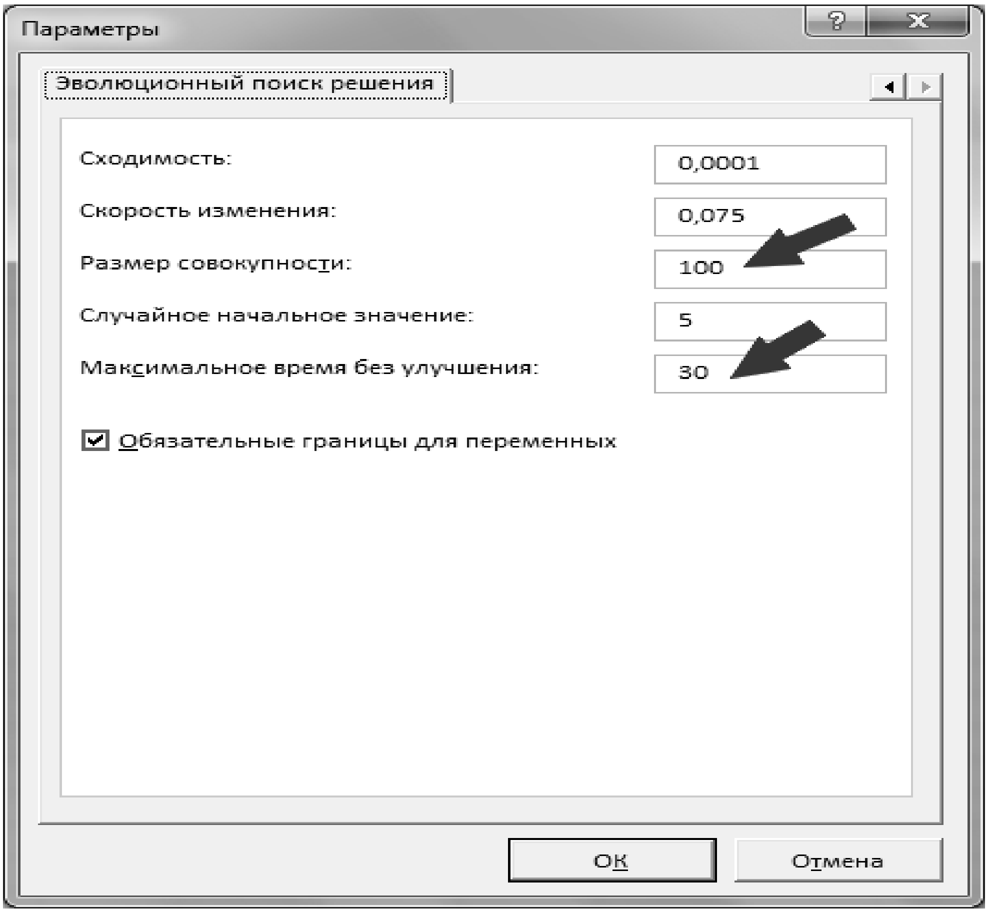


Рисунок 24 – Настройки метода эволюционного поиска решений

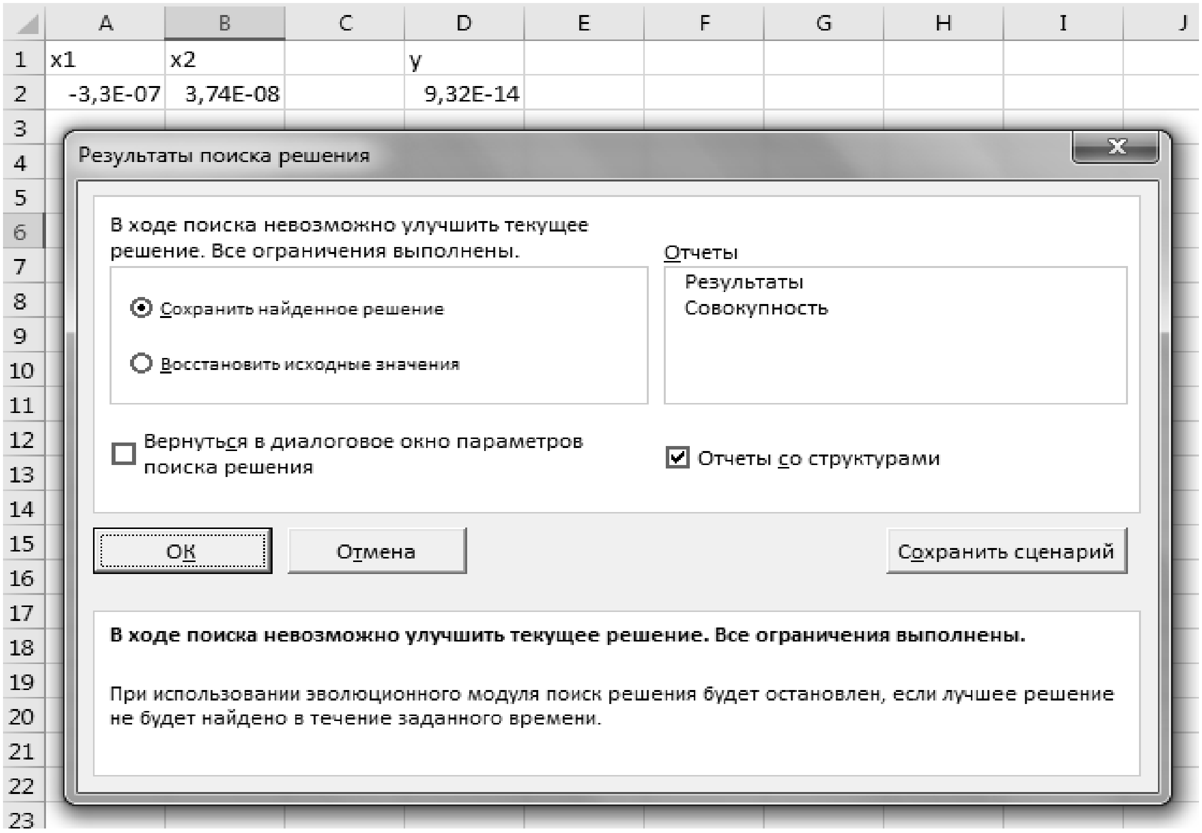


Рисунок 25 – Результаты поиска эволюционным методом

В связи с этим при использовании эволюционного поиска рекомендуется использовать эвристику перезапуска.

Задание

По примерам, выданным преподавателем, произвести поиск оптимальных значений описанными методами, сравнить их точность и эффективность.

Список литературы

1 **Пашкевич, В. М.** Научные основы технологии машиностроения. Обработка и анализ экспериментальных данных / В. М. Пашкевич. – Могилев: Белорус.-Рос. ун-т, 2019. – 236 с.

2 **Рыжов, Э. В.** Математические методы в технологических исследованиях / Э. В. Рыжов, О. А. Горленко. – Киев: Наукова думка, 1990. – 182 с.

3 **Зарубин, В. С.** Математическое моделирование в технике: учебник для вузов / В. С. Зарубин. – Москва: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2001. – 496 с.