МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

ВОСПРОИЗВОДИМОСТЬ

ВОСПРОИЗВОДИМОСТЬ ОПЫТОВ

Прежде чем приступить к планированию эксперимента, необходимо убедиться в воспроизводимости опытов. Для этого производят несколько серий параллельных опытов в рассматриваемой области изменения влияющих факторов [2]. Для удобства обработки данные заносят в табл:

Номер серии опытов	Результаты параллельных опытов				Средне–арифметическое	Дисперсия
1	y_{11}	y_{12}	…	y_{1k}	$\hat{y}_1$	S^2_1
2	y_{21}	y_{22}	…	y_{2k}	$\hat{y}_2$	S^2_2
…						
N	y_{N1}	y_{N2}	…	y_{Nk}	$\hat{y}_N$	S^2_N

ВОСПРОИЗВОДИМОСТЬ И РАНДОМИЗАЦИЯ ОПЫТОВ

Для каждой серии параллельных опытов вычисляют среднее арифметическое значение функции отклика

$$\hat{y}_j = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} y_{ji}$$

где k – число параллельных опытов, проведенных при одинаковых условиях. Обычно N и k принимают от 2 до 4.

Вычисляют оценку дисперсии для каждой серии параллельных опытов

$$S_j^2 = \frac{1}{k-1}\sum_{i=1}^{k}(y_{ji} - \hat{y}_j)^2$$

ВОСПРОИЗВОДИМОСТЬ И РАНДОМИЗАЦИЯ ОПЫТОВ

Для проверки воспроизводимости опытов находят отношение наибольшей из оценок дисперсий к сумме всех оценок дисперсий

$$G_p = \frac{\max S_j^2}{\sum_{j=1}^{N} S_j^2}$$

Эта величина называется расчетным значением критерия Кохрена.

Если выполняется условие $G_p \leq G$, то опыты считаются воспроизводимыми, а оценки дисперсий – однородными.

ВОСПРОИЗВОДИМОСТЬ И РАНДОМИЗАЦИЯ ОПЫТОВ

Если проверка на воспроизводимость дала отрицательный результат, то остается признать либо невоспроизводимость эксперимента относительно управляемых переменных вследствие наличия флуктуаций неуправляемых и неконтролируемых переменных, создающих на выходе большой уровень «шума», либо наличие грубого промаха в строке, откуда взята дисперсия . В первом случае следует увеличить число параллельных опытов, во втором – найти грубый промах и заменить его результатом доброкачественного измерения при соответствующей комбинации факторов. Если это по каким-то причинам невозможно, то, чтобы не нарушать предпосылки использования критерия Кохрена, на место грубого промаха следует поместить среднюю арифметическую величину $\hat{y}_j$ данной строки.

ВЫЧИСЛЕНИЕ ПОГРЕШНОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТА

Оценки однородных дисперсий нескольких серий параллельных опытов можно усреднить и найти величину

$$S_y^2 = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} S_j^2$$

называемую оценкой дисперсии воспроизводимости. С ней связано число степеней свободы $f = N(k - 1)$.

Оценку дисперсии среднего значения рассчитывают по формуле $S_{\bar{y}}^2 = \frac{S_y^2}{k}$

с числом степеней свободы $f = N(k - 1)$.

В тех случаях, когда из-за недостатка времени, трудоемкости или высокой стоимости эксперимента опыты не дублируются, при обработке экспериментальных данных используют S_y^2

ПРИМЕР

В эксперименте измерялся выход продукта реакции y в зависимости от температуры x_1 и концентрации вещества x_2 (табл)

Номер серии опытов	Условия опытов		Результаты измерений		Средне–арифметическое $\hat{y}_j$	Дисперсия S_j^2
	x_1, ^{0}C	x_2, %	y_{j1}, %	y_{j2}, %		
1	24	45	35,0	36,0	35,5	0,50
2	24	55	39,3	38,1	38,7	0,72
3	26	45	31,8	33,4	32,6	1,28

Расчетное значение критерия Кохрена находим по формуле

$$G_p = \frac{1{,}28}{0{,}5 + 0{,}72 + 1{,}28} = 0{,}51$$

ПРИМЕР

Соответствующее значение критерия Кохрена G = 0,967 берем из таблицы. Оно найдено для следующих параметров: P = 0,95; N = 3; f = k–1 = 2–1 = 1.

Условие $G_p \leq G$ выполнено, следовательно, опыты можно считать воспроизводимыми.

В рассматриваемом примере

S_y^2 = 1/3(0,5 + 0,72 + 1,28) = 0,83

$f = N(k - 1) = 3(2 - 1) = 3$.

$S_{\bar{y}}^2$= 0,83/2~0,42.

ИСПОЛЬЗУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Основы научных исследований. Курс лекций (для студентов инженерных специальностей) / Сост. Н. Г. Бойко, О. В. Федоров – Донецк: ДонНТУ, 2007. – 76 с.
2. Саутин С.Н. Планирование эксперимента в химии и химической технологии / С.Н. Саутин. Л. : Химия, 1975