УДК 519.242.7+ 519.233.4

В.Н. Фомин, А.А. Ковалева, С.К. Алдабергенова

Карагандинский государственный университет им. Е.А. Букетова, Казахстан
(E-mail: vitfomin@mail.ru)

Использование многофакторной переменной в методе вероятностно-детерминированного планирования эксперимента

В статье показано, что в качестве как минимум одного из факторов в плане ВДПЭ может выступать переменная, объединяющая несколько величин путём группировки в гнездовой план. На примере четырёхфакторного плана с тремя уровнями варьирования и «составного фактора», содержащего четыре компонента, показан способ построения математической модели многокомпонентной системы. Оговорены некоторые ограничения предлагаемой методики расчётов. Установлено, что влияние на результат только одного компонента «составного фактора» позволяет использовать метод ВДПЭ без видоизменений. На примере показано, что парное влияние компонентов «составного фактора» может быть обнаружено с помощью перебора вариантов по росту коэффициента нелинейной множественной корреляции. В качестве необходимых условий построения математической модели влияния каждого из компонентов «составного фактора» на результат указано равенство числа уровней компонента общему числу уровней варьирования факторов в плане эксперимента. При тестировании метода использованы «искусственные данные», точные значения которых известны. Для имитации ошибки эксперимента расчётные значения умножались на случайное число, близкое к единице. Оценку точности полученных моделей провели с помощью общепринятого в литературе критерия — средней ошибки, и с помощью принятого в методе ВДПЭ коэффициента нелинейной множественной корреляции. Метод позволяет значительно сократить число опытов, необходимых для изучения сложных систем с применением ВДПЭ. Разработанный в статье подход предлагается, главным образом, для применения в спектральном анализе многокомпонентных систем и в других случаях, когда результат зависит лишь от одного из компонентов «составного фактора».

Ключевые слова: вероятностно-детерминированное планирование эксперимента, факторный эксперимент, искусственные данные, частная зависимость, составной фактор, среднее отклонение, спектральный анализ.

Роль математического планирования эксперимента в различных областях науки и техники непрерывно возрастает. В химии и химической технологии планирование эксперимента широко используется для получения математических моделей сложных многофакторных процессов, оптимизации их параметров и одновременной статистической оценки достоверности получаемых результатов. Удобным методом математического планирования эксперимента является вероятностно-детерминированное планирование (ВДПЭ). Этот метод, появившийся в 1960-х гг. [1], был развит в работах В.П. Малышева, его учеников, сподвижников [2, 3] и последователей.

Ядром метода ВДПЭ является план эксперимента, основанный на использовании латинских квадратов. Применение латинских квадратов позволяет добиться сочетания каждого из уровней каждого из факторов с остальными один и только один раз. Это обеспечивает равноценность вклада всех факторов в получаемую математическую модель, и, как следствие, статистическую достоверность результатов использования плана. Существенное преимущество метода ВДПЭ перед другими разновидностями планирования эксперимента заключается в сравнительно небольшом числе требуемых опытов и получении математической модели в единственной серии экспериментов. Немаловажными являются также простота математической обработки результатов и возможность ее автоматизации.

Изучение многокомпонентных химических систем с помощью ВДПЭ при традиционном подходе начинается с определения факторов и уровней их варьирования. При этом каждый из рассматриваемых компонентов системы назначается отдельным фактором. Предположим, изучается закаливание четырехкомпонентного сплава. Рассматривается влияние количественного соотношения компонентов, температуры и времени нагрева, теплоемкости охлаждающей среды, длительности процесса «отпуска» на твердость получаемого материала. Для уменьшения числа факторов содержание компонентов сплава может быть задано в виде массовых долей в основном компоненте или весовых отношений к одному из компонентов. Тогда 4 компонента сплава дадут всего три фактора. В итоге число рассматриваемых факторов составит 7, с вакантным — 8. Придется планировать эксперимент, состоящий из 49 испытаний. Конечно, это не очень много, особенно, если учесть возможность обойтись без повторных опытов, которую предоставляет метод ВДПЭ, однако уменьшить число опытов без снижения качества получаемой модели представляется весьма заманчивым. А если число компонентов сплава будет не четыре, а больше? Такие случаи нередки, особенно если учесть не только основные компоненты, но и легирующие добавки.

В практике спектрального анализа часто приходится сталкиваться с многокомпонентными системами. При разработке методов анализа этих систем требуется учесть влияние на качество анализа настроек прибора и состава пробы. Минимизация числа опытов в этой области также представляется весьма желательной [4].

Возможность уменьшения числа испытаний в рассматриваемых примерах и в похожих случаях может быть реализована путем включения химического состава системы в план в качестве единого (составного) фактора. Каждый компонент состава (точнее — его концентрация), таким образом, будет и компонентом составного фактора. При этом представляется возможным получить оценки влияния на результат каждого из рассматриваемых компонентов составного фактора и, в перспективе, их комбинаций. Общее число факторов в плане уменьшится на два. Число единичных испытаний составит шестнадцать или двадцать пять с вакантным фактором (вместо сорока девяти!). Проиллюстрируем эти возможности с помощью плана эксперимента с меньшей размерностью. Воспользуемся традиционным планом, состоящим из четырех факторов на трёх уровнях варьирования (табл. 1).

Таблица 1

План эксперимента с участием составного фактора

№	F_1	F_2	F_3	V
1	1	1	1	1
2	1	2	2	2
3	1	3	3	3
4	2	1	2	3
5	2	2	3	1
6	2	3	1	2
7	3	1	3	2
8	3	2	1	3
9	3	3	2	1

Позицию первого фактора (F_1) занимает составной фактор, условно обозначенный как «состав системы». Придерживаясь общей тенденции ВДПЭ, используем в качестве уровней компонентов составного фактора неповторяющиеся значения. Общее число вариаций «состава системы» будем задавать равным числу уровней остальных факторов. Таким образом, один «состав» и будет являться одним уровнем варьирования составного фактора. Значения уровней компонентов составного фактора объединим в таблице 2. Сами значения могут быть произвольными, но не повторяющимися для одного компонента. Забегая вперед, отметим, что если для какого-либо компонента значения уровней будут повторяться, это не помешает вычислениям частных зависимостей, вызванных варьированием уровней остальных компонентов.

Таблица 2

Составной фактор (F_1)

Уровень	K_1	K_2	K_3	K_4
1	4	6	9	12
2	6	9	12	4
3	9	12	4	6

Значения, сгруппированные в таблице 2, выбраны такими исключительно для визуального отличия от цифр 1, 2, 3, из которых сформирован план эксперимента.

Чтобы в полной мере оценить точность получаемой с помощью ВДПЭ модели, воспользуемся «искусственными данными» — данными, сгенерированными по заданной формуле. Чтобы избежать деления на ноль при оценке погрешности модели, а также для имитации 5 %-ной ошибки эксперимента, каждое из рассчитанных значений умножим на случайное число в диапазоне 0,975–1,025. Для генерации данных применим формулы (1–4). Результаты вычислений с поправками на «ошибку эксперимента» сгруппируем в таблице 3. Данные, непосредственно вычисленные по формуле, помечены знаком (ф), а данные с поправками — знаком (э). Результат, рассчитанный по полученной методом ВДПЭ модели, отмечен знаком (в). Для расчётов по методу ВДПЭ использованы цифры, округлённые до второго знака после запятой, поэтому результаты вычислений, кроме КНМК, приведены округлёнными. Все коэффициенты в формулах выбраны наугад и не имеют какого-либо физического смысла. Намеренно значения результатов описаны как сумма, чтобы упростить последующую обработку, можно использовать только среднее арифметическое и не применять другие способы усреднения.

$$Y_1 = 1{,}99 * F_2^{1,7} + \exp(F_3 * 0{,}68)\,; \tag{1}$$

$$Y_2 = K_2 * 8{,}5 + 1{,}5 * F_2^{1,9} + \exp(F_3 * 0{,}8)\,; \tag{2}$$

$$Y_3 = K_4 * 5 + 1{,}5 * F_2^{1,9} + \exp(F_3 * 0{,}8)\,; \tag{3}$$

$$Y_4 = K_1 * K_4 * 0{,}87 + 1{,}5 * F_2^{1,9} + \exp(F_3 * 0{,}8)\,. \tag{4}$$

Точность получаемых методом ВДПЭ математических моделей оценивали как по значению коэффициента нелинейной множественной корреляции (5) и его значимости (6), так и с помощью среднего отклонения (7).

$$R = \sqrt{1 - \frac{(N-1)\sum_{1}^{N}(Y_Э - Y_T)^2}{(N-K-1)\sum_{1}^{N}(Y_Э - Y_{Cp})^2}}\,. \tag{5}$$

$$t_R = \frac{R\sqrt{N-K-1}}{1-R^2}\,. \tag{6}$$

$$\overline{A} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left|\frac{y_{iв.} - y_{iф.}}{y_{iф.}}\right|. \tag{7}$$

Таблица 3

Результаты вычислительного эксперимента

№ п/п	Y_1(ф)	Y_1(э)	Y_1(в)	Y_2(ф)	Y_2(э)	Y_2(в)	Y_3(ф)	Y_3(э)	Y_3(в)	Y_4(ф)	Y_4(э)	Y_4(в)
1	3,96	4,06	4,06	54,73	55,60	56,89	63,73	65,06	64,73	45,49	45,49	43,81
2	10,36	10,48	10,32	61,55	62,41	63,11	70,55	69,21	69,97	52,31	52,63	51,3
3	20,57	20,80	20,72	74,12	75,30	76,54	83,12	81,37	81,82	64,88	64,81	62,5
4	5,89	5,85	6,24	80,23	81,11	82,17	23,73	24,06	25,16	24,61	24,33	23,9
5	14,16	13,97	13,99	87,05	86,53	88,39	30,55	30,73	30,38	31,43	31,43	31,39
6	14,86	14,78	14,87	99,62	98,52	101,82	43,12	43,25	44,55	44,00	44,31	42,59
7	9,68	9,73	9,91	105,73	108,26	107,97	33,73	32,88	33,79	50,71	49,79	48,85
8	8,44	8,28	8,14	112,55	112,78	114,19	40,55	41,32	41,33	57,53	56,38	56,34
9	16,78	16,73	17,05	125,12	127,25	127,62	53,12	54,18	53,2	70,10	68,49	67,54

Результаты вычислений, приведённые в таблице 3, далее обрабатывались способом, принятым в методе ВДПЭ, как результаты обычного лабораторного эксперимента. Обработка и интерпретация результата Y_1, заданного независимым от составного фактора, никак не отличались от принятых в рамках метода, за исключением того, что вместо каких-либо значений использовались порядковые номера уровней.

В таблице 4 представлены выборки для построения частных зависимостей Y_1 от рассматриваемых факторов.

Т а б л и ц а 4

Выборки для построения частых зависимостей Y_1

от F_1						от F_2					
№		№		№		№		№		№	
1	3,96	4	5,98	7	9,87	1	3,96	2	10,44	3	20,41
2	10,44	5	14,28	8	8,23	4	5,98	5	14,28	6	14,72
3	20,41	6	14,72	9	17,08	7	9,87	8	8,23	9	17,08
Ср.	11,6		11,66		11,73	Ср.	6,6		10,98		17,4
X_1	1		2		3	X_2	1		2		3
от F_3						от F_4					
№		№		№		№		№		№	
1	3,96	2	10,44	3	20,41	1	3,96	2	10,44	3	20,41
6	14,72	4	5,98	5	14,28	5	14,28	6	14,72	4	5,98
8	8,23	9	17,08	7	9,87	9	17,08	7	9,87	8	8,23
Ср.	8,97		11,17		14,85	Ср.	11,77		11,68		11,54
X_3	1		2		3	X_4	1		2		3

Аппроксимирующая функция для каждой из частных зависимостей выбиралась по максимуму коэффициента нелинейной множественной корреляции (КНМК) из семи часто применяемых формул: $y = a + bx$ (8); $y = a + b/x$ (9); $y = \dfrac{1}{a + bx}$ (10); $y = a + b\ln x$ (11); $y = ax^b$ (12); $y = ab^x$ (13); $y = ae^{bx}$ (14); $y = ae^{bx}x^c$ (15).

Функцию (15) при аппроксимации не применяли, так как она описывает любые три точки со стопроцентной точностью (так же, как полином второго порядка) и является частой причиной ошибочного описания значимости функций при числе экспериментов менее 25.

На рисунке 1 (*а–г*) приведены графики функций, описывающих частные зависимости Y_1 от рассматриваемых факторов. Несложно заметить, что зависимость результата от F_1 описывается прямой, практически совпадающей с линией среднего значения. Следовательно, составной фактор не оказывает влияния на результат. Что и было задано соответствующей функцией генерации данных.

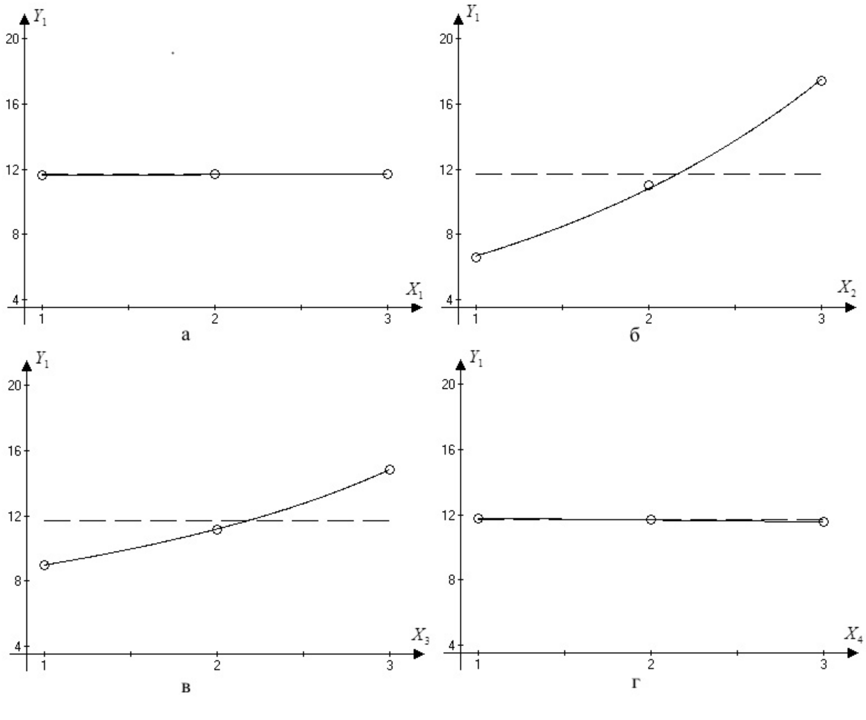

Рисунок 1. Частные зависимости Y_1 от F_1 (*а*), F_2 (*б*), F_3 (*в*) и вакантного фактора (*г*)

Как видно из рисунка 1(*г*) и соответствующей частной функции, вакантный фактор почти идеально описывается прямой, близкой к линии среднего значения. Когда речь идёт о специально сгенерированных данных и правильно подобранном виде среднего, иного ожидать не приходится [5 и др.]. Поэтому на остальных рисунках, иллюстрирующих выборки на частные зависимости, вакантный фактор удалён. Итоговое уравнение, полученное методом ВДПЭ (16), описывает систему (1) с $R = 0,9991$; $t_R = 1360,215$; $\overline{A} = 0,0204$.

$$Y_1 = 4,101*1,623^{X_2} + \frac{1}{0,1336 - 0,02209X_3} - 11,6633. \quad (16)$$

Y_2 и Y_3 заданы заведомо зависимыми от компонентов составного фактора K_2 и K_4. Наличие зависимости можно наблюдать уже при использовании порядковых номеров, однако описать такую зависимость функциями 5–11 оказывается невозможным из-за ярко выраженного экстремума. При замене номеров на значения уровней обнаруживается закономерность, близкая к зависимости, заданной формулой синтеза данных. В таблицах 5 и 6 приведены выборки для аппроксимации функций, описывающих частные зависимости Y_2 и Y_3 от рассматриваемых факторов (рис. 2, 3).

Таблица 5

Выборки для построения частых зависимостей Y_2

От F_1(K$_2$)						От F_2					
№		№		№		№		№		№	
1	55,6	4	81,11	7	108,26	1	55,6	2	62,41	3	75,3
2	62,41	5	86,53	8	112,78	4	81,11	5	86,53	6	98,52
3	75,3	6	98,52	9	127,25	7	108,26	8	112,78	9	127,25
Ср.	64,4367		88,72		116,0967	Ср.	81,6567		87,24		100,3567
$X_1(K_2)$	1(6)		2(9)		3(12)	X_2	1		2		3
От F_3						От F_4					
№		№		№		№		№		№	
1	55,6	2	62,41	3	75,3	1	55,6	2	62,41	3	75,3
6	98,52	4	81,11	5	86,53	5	86,53	6	98,52	4	81,11
8	112,78	9	127,25	7	108,26	9	127,25	7	108,26	8	112,78
Ср.	88,9667		90,2567		90,03	Ср.	89,7933		89,73		89,73
X_3	1		2		3	X_4	1		2		3

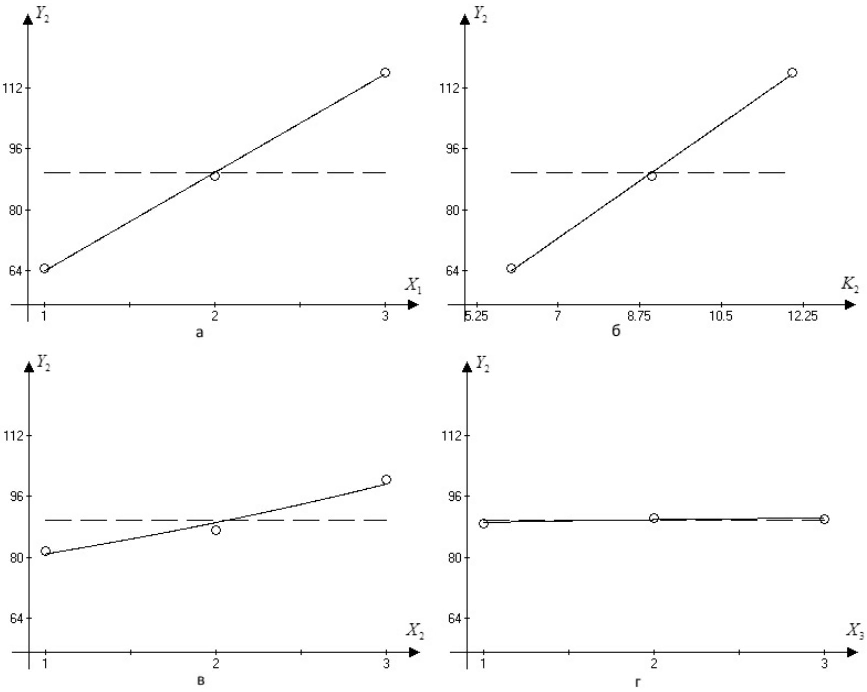

Рисунок 2. Частные зависимости Y_2 от F_1 (*а*), K_2 (*б*), F_2 (*в*) и F_3 (*г*)

Формула (17) отображает описание системы (2), полученное с помощью ВДПЭ. $R = 0{,}9964$; $t_R = 310{,}005$; $\overline{A} = 0{,}0239$.

$$Y_2 = 12{,}26 + 8{,}61K_2 + \frac{1}{0{,}01351 - 0{,}001143X_2} + 89{,}11X_3^{0.01189} - 179{,}5022\,. \qquad (17)$$

При использовании X_1, заданного порядковым номером, точность уравнения не изменяется, поскольку закономерность изменения порядкового номера совпадает с таковой для K_2.

Т а б л и ц а 6

Выборки для построения частых зависимостей Y_3

От $F_1(K_4)$						От F_2					
№		№		№		№		№		№	
1	65,06	4	24,06	7	32,88	1	65,06	2	69,21	3	81,37
2	69,21	5	30,73	8	41,32	4	24,06	5	30,73	6	43,25
3	81,37	6	43,25	9	54,18	7	32,88	8	41,32	9	54,18
Ср.	71,88		32,68		42,7933	Ср.	40,6667		47,0867		59,6
$X_1(K_4)$	1(12)		2(4)		3(6)	X_2	1		2		3
От F_3						От F_4					
№		№		№		№		№		№	
1	65,06	2	69,21	3	81,37	1	65,06	2	69,21	3	81,37
6	43,25	4	24,06	5	30,73	5	30,73	6	43,25	4	24,06
8	41,32	9	54,18	7	32,88	9	54,18	7	32,88	8	41,32
Ср.	49,8767		49,15		48,3267	Ср.	49,99		48,4467		48,9167
X_3	1		2		3	X_4	1		2		3

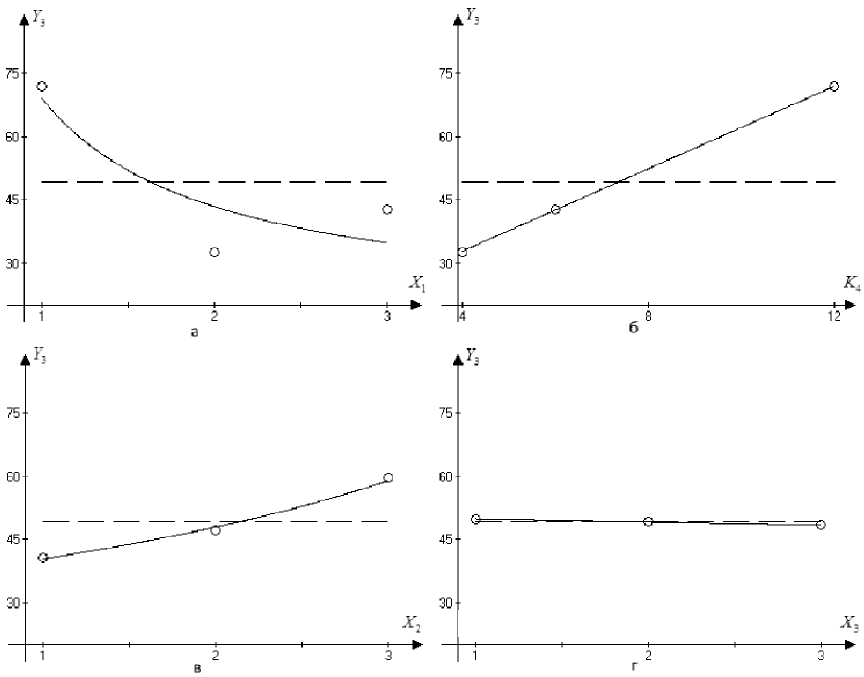

Рисунок 3. Частные зависимости Y_3 от F_1 (*а*), K_4 (*б*), F_2 (*в*) и F_3 (*г*)

Уравнение (18) учитывает зависимость Y_3 от K_4 и имеет $R = 0{,}9979$; $t_R = 531{,}8375$; $\overline{A} = 0{,}0179$. Если вместо значений K_4 использовать их порядковые номера, точность уравнения резко падает ($R = 0{,}8326$; $t_R = 6{,}0687$).

$$Y_3 = 13{,}27 + 4{,}888K_4 + \frac{1}{0{,}02868 - 0{,}003905X_2} + 50{,}67 - 0{,}775X_3 - 98{,}2356\,. \qquad (18)$$

Результат Y_4 получен при использовании в качестве действующей переменной произведения значений K_1 и K_4. Поскольку значения произведения не повторяются, оно полностью подходит по требованиям и может рассматриваться как отдельный компонент составного фактора. Выборки на частные зависимости представлены в таблице 7. Рисунок 4 описывает полученные частные функции графически.

Таблица 7

Выборки для построения частых зависимостей Y_4

От $F_1(K_1*K_4)$						От F_2					
№		№		№		№		№		№	
1	45,49	4	24,33	7	49,79	1	45,49	2	52,63	3	64,81
2	52,63	5	31,43	8	56,38	4	24,33	5	31,43	6	44,31
3	64,81	6	44,31	9	68,49	7	49,79	8	56,38	9	68,49
Ср.	54,31		33,3567		58,22	Ср.	39,87		46,8133		59,2033
$X_1(K_1K_4)$	1(48)		2(24)		3(54)	X_2	1		2		3
От F_3						От F_4					
№		№		№		№		№		№	
1	45,49	2	52,63	3	64,81	1	45,49	2	52,63	3	64,81
6	44,31	4	24,33	5	31,43	5	31,43	6	44,31	4	24,33
8	56,38	9	68,49	7	49,79	9	68,49	7	49,79	8	56,38
Ср.	48,7267		48,4833		48,6767	Ср.	48,47		48,91		48,5067
X_3	1		2		3	X_4	1		2		3

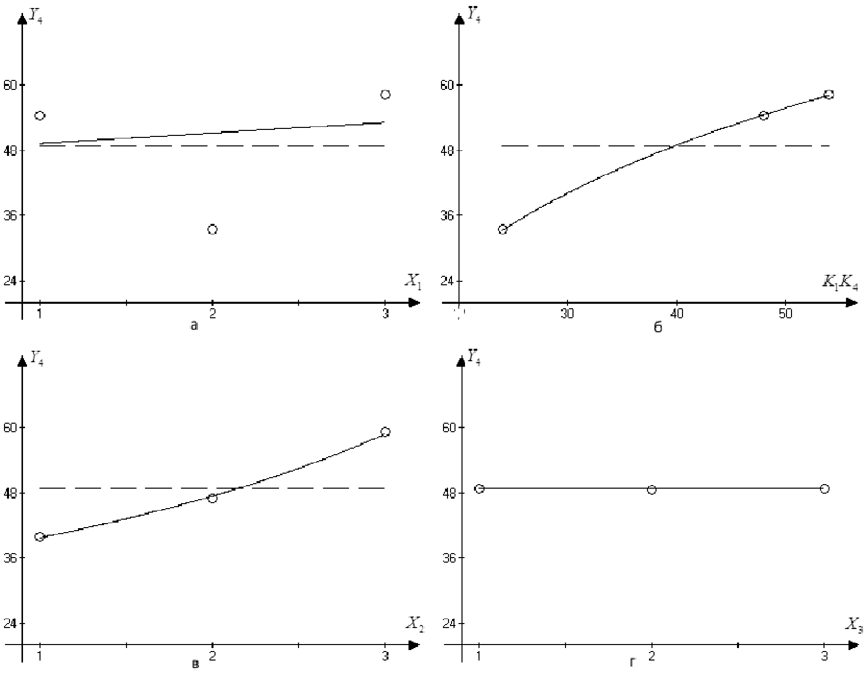

Рисунок 4. Частные зависимости Y_4 от F_1 (*а*), K_1*K_4 (*б*), F_2 (*в*) и F_3 (*г*)

Уравнение (19) отлично описывает Y_4, если учитывать значения произведения K_1*K_4 ($R = 0,9988$; $t_R = 931,1356$; $\overline{A} = 0,0277$). При использовании номеров фактора картина существенно ухудшается ($R = 0,5051$; $t_R = 1,7941$).

$$Y_4 = -63,64 + 30.51\ln(K_1K_4) + \frac{1}{0,0293 - 0,004095X_2} + 48,68 - 0,025X_3 - 97,2578. \qquad (19)$$

При анализе приведённых рассуждений и данных возникает вопрос: как поведут себя частные зависимости от двух и более компонентов составного фактора в случае, если их уровни зависят от номеров сходным образом: например, возрастают или убывают от первого к последнему? Действительно, только математическими приёмами ВДПЭ различить, какой из факторов вызывает наблюдаемый результат, не получится. Рассмотрим частные зависимости Y_2 от K_1 и K_3 (табл. 8, рис. 5 *а*, *б*).

Т а б л и ц а 8

Выборки для построения частной зависимости Y_2 от K_1 и K_3

От $F_1(K_1)$						От $F_1(K_3)$					
№		№		№		№		№		№	
1	55,6	4	81,11	7	108,26	1	55,6	4	81,11	7	108,26
2	62,41	5	86,53	8	112,78	2	62,41	5	86,53	8	112,78
3	75,3	6	98,52	9	127,25	3	75,3	6	98,52	9	127,25
1	64,4367		88,72		116,0967	Ср.	64,4367		88,72		116,0967
X_1	1(4)		2(6)		3(9)	X_2	1(9)		2(12)		3(4)

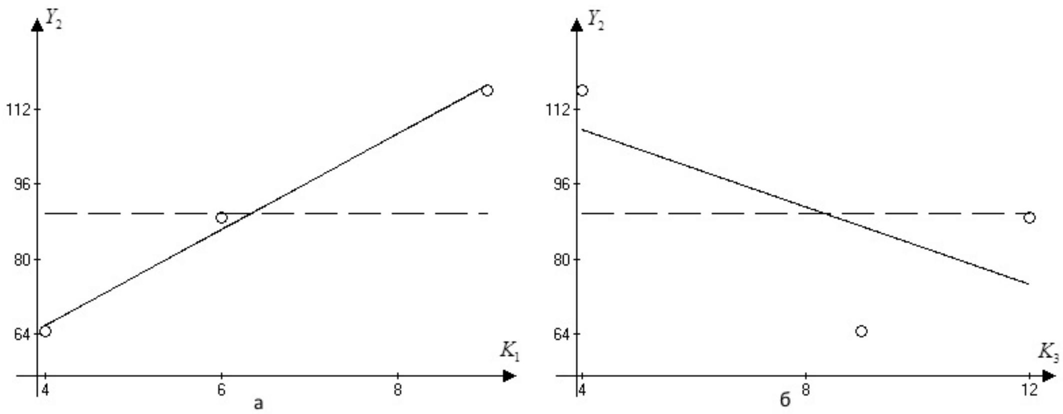

Рисунок 5. Частные зависимости Y_2 от K_1 (*а*), K_3 (*б*)

В целом возрастающая зависимость Y_2 от K_1 похожа на зависимость Y_2 от K_2. Показатели точности для такой модели довольно высоки: $R = 0{,}9916$; $t_R = 132{,}5379$. В то же время для остальных компонентов составного фактора значимую зависимость по формулам (5–11) подобрать не удаётся. Например, при попытке использовать значение K_3 модель получается полностью неадекватной ($R = 0{,}2873$; $t_R = 0{,}7671$).

Резюмируя изложенное выше, можно заключить, что составной фактор может быть использован в планировании эксперимента с применением ВДПЭ. Для успеха расчётов необходимо соблюдение ряда условий.

1. Число уровней варьирования исследуемых компонентов фактора должно быть равно числу уровней факторов в плане ВДПЭ. Это требование соблюдается путём добавления вакантных факторов в основной план или же, наоборот, добавлением «вакантного компонента» в составной фактор.

2. Зависимость значения уровня от его номера должна быть различной для всех изучаемых компонентов составного фактора. Это требование легко соблюдается при использовании латинского квадрата, получаемого сдвигом строки на одну позицию и добавлением «выпавшей цифры» в начало строки.

3. Сведения о возможности или невозможности зависимости результата от данного компонента составного фактора, полученные из других источников, могут быть использованы для выбора итогового уравнения. При этом соблюдение пункта 2 становится необязательным.

4. Поиск парных, тройных и т.д. зависимостей от компонентов составного фактора может быть осуществлен путем перебора возможных вариантов.

Метод предлагается использовать для калибровки спектральных приборов с применением специально составленных смесей. Модификации методов калибровки, в которых предполагается использовать данную методику, не сложнее других современных методов калибровки атомно-эмиссионных спектрометров, для которых настоятельно рекомендуется использовать планирование эксперимента [6] и часто применяются «изощрённые методы статистической обработки спектров» [7, 8]. Применение методики представляется возможным и в других областях науки и техники.

Идея метода возникла при обработке экспериментальных данных, полученных в рамках работы по теме «4371/ГФ4 — Изучение совместного осаждения солей дикарбоновых кислот элементов, образующих многоэлементные оксиды с высокотемпературной сверхпроводимостью».

Список литературы

1 Протодьяконов М.М. Методика рационального планирования экспериментов / М.М. Протодьяконов, Р.И. Тедер. — М.: Наука, 1970. — 76 с.

2 Малышев В.П. Вероятностно-детерминированное отображение / В.П. Малышев. — Караганда: Ғылым, 1994. — 374 с.

3 Беляев С.В. Пути развития вероятностно-детерминированного планирования эксперимента / С.В. Беляев, В.П. Малышев // Комплексная переработка минерального сырья Казахстана. Состояние. Проблемы. Решения. — Алматы, 2008. — Т. 9. — С. 599–633.

4 Фомин В.Н. Калибровка спектрометра «ЛАЭС Матрикс Континуум» для анализа смеси оксалатов / В.Н. Фомин, Х.Б. Омаров, А.Т. Дюсекеева и др. // Наука вчера, сегодня, завтра: сб. ст. по матер. XXXIX Междунар. науч.-практ. конф. — Новосибирск: СибАК, 2016. — № 10(32). — С. 98–105.

5 Fomin V.N. Using one-way analysis of variance in the stochastic determinated design of experiment / V.N.Fomin, A.V. Dik // Bulletin of Karaganda University. Ser. Chemistry. — 2015. — № 1(58). — P. 17–20.

6 Новый справочник химика и технолога: в 7 т. — Т. 4. Аналитическая химия (в 3 кн.). — СПб.: АНО НПО «Мир и семья», 2002. — Ч. 1. — 954 с.; 2003. — Ч. 2. — 984 с.; 2007. — Ч. 3. — 692 с.

7 Кремерс Д. Лазерно-искровая эмиссионная спектроскопия / Д. Кремерс, Л. Радзиемски. — М.: Техносфера, 2009. — 360 с.

8 Мешкова О.Б. Способ построения устойчивой градуировочной зависимости при определении количественного состава элементов в цинковых сплавах / О.Б. Мешкова и др. // Свид. на изобретение № 2462701 (РФ) МПК G01N 21/67 (2006.01).

В.Н. Фомин, А.А. Ковалева, С.К. Алдабергенова

Тәжірибені ықтималды-детерминді жоспарлау әдісінде көпфакторлы айнамалыны қолдану

Мақалада тәжірибені ықтималды-детерминді жоспарында (ТЫДЖ) бірнеше мәндерді ұялы жоспарға топтау арқылы біріктіретін бір ғана айнымалы шама бола алатындығы көрсетілді. Үш деңгейдегі түрлендірудің төрт факторлы жоспарлау мен «құрамды фактор» мысалында көпкомпонентті жүйенің математикалық үлгісін құру әдісі көрсетілді. Ұсынылатын есептеу әдістемесінің кейбір шектеулері ескерілген. «Құрамды фактордың» бір ғана компонентінің нәтижеге әсер беруі ТЫДЖ әдісін түр өзгерісінсіз қолдануға мүмкіндік беретіндігі көрсетілген. «Құрамды фактордың» компоненттерінің жұпты әсері сызықты көптік корреляция коэффициенттерінің өсуі бойынша нұсқаларды іріктеу көмегімен анықталатындығы мысал ретінде көрсетілген. Математикалық үлгіні құрудың қажетті жағдайы — «құрамды фактордың» әрбір компонентінің әсері тәжірибе жоспарындағы факторлардың түрлену деңгейлер санының компонент деңгейінің санына тепе-тең болады. Әдісті сынамалау барысында нақты мәндері белгілі болатын «жасанды мәліметтер» пайдаланылды. Тәжірибе қателігін ұқсату үшін есептік мәндер бір санына жақын кез келген санға көбейтілді. Алынған үлгінің дәлділігін бағалау — әдебиеттерде жалпы мақұлданған критерийлер — орташа мән және ТЫДЖ әдісінде қабылданған сызықты көптік корреляция коэффиценті көмегімен жүргізілді. Әдіс ТЫДЖ пайдалану арқылы күрделі жүйелерді зерттеуге қажетті тәжірибелер санын қысқартуға мүмкіндік берді. Авторлардың ойынша ұсынылған тәсілдемені көпкомпонентті жүйенің және «құрамды факторлардың» бір ғана компонентіне тәуелді болатын спектралды талдауға қолдануға мүмкіндік туады.

Кілт сөздер: тәжірибені ықтималды-детерминді жоспарлау, факторлы тәжірибе, спектралды талдау.

V.N. Fomin, A.A. Kovaleva, S.K. Aldabergenova

Use of a multifactorial variable in the method of the stochastic-determinated design of experiment

The article shows that, as at least one of the factors in the SDDE plan, a variable that unites several quantities by grouping into a nesting design can act. An example of a four-factorial plan with three levels of variation and a «composite factor» containing four components shows the way to construct a mathematical model of a multicomponent system. Some limitations of the proposed calculation methodology are stipulated. It is shown that the influence on the result of only one component of the «composite factor» makes it possible to use the SDDE method without modifications. The example shows that the pair effect of the components of the «composite factor» can be detected by looking through the options for increasing the coefficient of nonlinear multiple correlation. As necessary conditions for constructing a mathematical model of the influence of each of the components of the «composite factor» on the result, the equality of the number of levels of the component to the total number of levels of factor variation in the experimental plan is indicated. When testing the method, «artificial data» is used, the exact values of which are known. To simulate the experimental error, the calculated values were multiplied by a random number close to unity. Estimation of the accuracy of the obtained models was carried out with the help of the commonly accepted criterion in the literature — the mean error, and using the coefficient of nonlinear multiple correlation adopted in the SDDE method. The method makes it possible to significantly reduce the number of experiments needed to study complex systems using the SDDE. The approach developed in the article is proposed mainly for application in the spectral analysis of multicomponent systems and in other cases when the result depends only on one of the components of the «composite factor».

Keywords: stochastic-determinated design of experiment, factor experiment, synthetic data, partial dependence, combined factor, mean deviation, spectral analysis.

References

1 Protodiakonov, M.M., & Teder, R.I. (1970). *Metodika ratsionalnoho planirovaniia eksperimentov [Methodology of the rational planning of experiments]*. Moscow: Nauka [in Russian].

2 Malyishev, V.P. (1994). *Veroiatnostno-determinirovannoe otobrazhenie [Probabilistic-determined reflection]*. Karaganda: Hylym [in Russian].

3 Beliaev, S.V., & Malyishev, V.P. (2008). Puti razvitiia veroiatnostno-determinirovannoho planirovaniia eksperimenta [Ways of development of the probabilistic-determined planning of experiment]. *Kompleksnaia pererabotka mineralnoho syria Kazahstana. Sostoyanie. Problemy. Resheniia. — Complex processing of mineral raw material of Kazakhstan. State. Problems. Decisions, 9,* 599–633 [in Russian].

4 Fomin, V.N., Omarov, H.B., & Dyusekeeva, A.T. et al. (2016). Kalibrovka spektrometra «LAES Matrix Kontinuum» dlia analiza smesi oksalatov [Calibration of spectrometer of «ЛАЭС Matrice Continuum» for the analysis of mixture of oxalates]. Proceedings from Nauka vchera, segodnya, zavtra '16: *XXXIX Mezhdunarodnaia nauchno-prakticheskaia konferentsiia. # 10(32). — XXXIX international research and practice conference* (pp. 98–105). Novosibirsk: SibAK [in Russian].

5 Fomin, V.N., & Dik, A.V. (2015). Using one-way analysis of variance in the stochastic determinated design of experiment. *Bulletin of Karaganda University. Ser. Chemistry, 1(58),* 17–20.

6 *Novyi spravochnik himika i tehnoloha*. (2002). *[New reference book of the chemist and technologist]* (Vol. 1–7; Vol. 4) Analiticheskaia himiia (In 3 books). *[Analytical chemistry]*. SPb: ANO NPO «Mir i semya», Pt. 1. 954 p.; 2003. Pt. 2. 984 p.; 2007. Pt. 3. 692 p. [in Russian].

7 Kremers, D., & Radziemski, L. (2009). *Lazerno-iskrovaia emissionnaia spektroskopiia [Laser-spark emission spectroscopy]*. Moscow: Tekhnosfera [in Russian].

8 Meshkova, O.B., et al. (2006). Sposob postroeniia ustoychivoi hraduirovochnoi zavisimosti pri opredelenii kolichestvennoho sostava elementov v tsinkovyh splavakh [Way of creation of steady calibration dependence when determining quantitative structure of elements in zinc alloys]. *Svidetelstvo na izobretenie # 2462701 (RF) MPK G01N 21/67 [Certificate for invention № 2462701 (RF) IPC G01N 21/67]* [in Russian].