УДК 54:519.242 МРНТИ 31.01.77, 28.29.55

ДЕТЕРМИНАЦИЯ ЭКСТРЕМАЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПРИ АППРОКСИМАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

В. П. Малышев, д.т.н.

ДГП «Химико-металлургический институт им. Ж. Абишева»

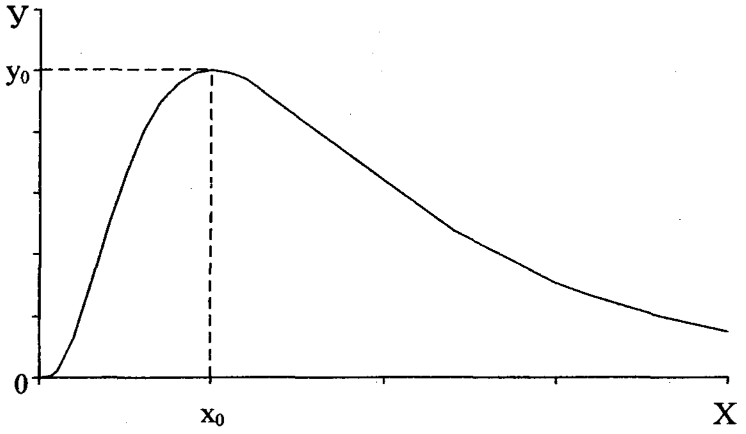
Тұрақты максимумді экстремалды тәжірибелік тәуелділіктердің барынша күрделі формасын математикалық бейнелеудің әдісі ұсынылды.
Түйінді сөздер: айдалынды-күл, көміртек, көміртек алу.

The article suggests the method of mathematical description of the most complex form of extreme experimental dependence with fixed maximum.
Key words: Ashes-ablation, carbon, carbon extraction.

Актуальность данной работы состоит в особой важности строгого описания экстремальных зависимостей, получаемых при проведении лабораторных или промышленных испытаний.

При описании частных функций по методу вероятностно-детерминированного планирования эксперимента [1, 2] рекомендованы простейшие методы аппроксимации экстремальных зависимостей с использованием параболических уравнений. Применение предложенного метода описания экстремальных зависимостей может быть рекомендовано практически для всех случаев появления максимальных значений в опытных данных.

Дело осложняется, если для соблюдения физического смысла требуется, чтобы описывающая зависимость, выходя из нуля и претерпевая максимум в некоторой точке x_0, y_0, далее вновь асимптотически устремлялись к нулю, напоминая известные статистические распределения типа χ^2 и F. При этом положение экстремума $x_0\, y_0$ может диктоваться либо теоретическими соображениями, либо определяться экспериментально, либо находиться предварительным сглаженным графическим описанием опытных данных «от руки». В любом случае эта координата является реперной точкой, которая будет имманентно принадлежать аппроксимирующей зависимости (рисунок).



Типичная форма экстремальных зависимостей
типа χ^2- и F- распределений

Общий вид этой зависимости нами предлагается в форме:

$$y = y_0(x^a e^{-x^в})^n, \tag{1}$$

где a, $в$ и n – аппроксимирующие параметры.

Ядро (core) этой функции

$$y_c = x^a e^{-x^в}, \tag{2}$$

следует выбирать таким, чтобы при $x=x_0$, $y_c=1$. Тогда формулой (1) будет гарантироваться соблюдение условия $x=x_0$, $y=y_0$ при любой вариации n с целью аппроксимации к экспериментальным данным. Вывод выражений для показателей a и $в$ только через x_0 сводится к следующему.

Для зависимости (2) находится максимальное значение $y_{c,max}$ путем дифференцирования и приравнивания к нулю:

$$\frac{dy_c}{dx} = ax^{a-1}e^{-x^{в}} + x^{a}e^{-x^{в}}(-вx^{в-1}) = x^{a-1}e^{-x^{в}}(a - вx^{в}) = 0. \qquad (3)$$

Отсюда по условию

$$a - вx_0^{в} = 0 \qquad (4)$$

определяется показатель a:

$$a = вx_0^{в}. \qquad (5)$$

Подстановка x_0 и a в (2) дает выражение

$$y_{c,max} = x_0^{вx_0^{в}}e^{-x_0^{в}}. \qquad (6)$$

Так как выбор ядра (2) проводится с целью обеспечения $y_{c,max}$=1, то (6) в точке x_0 принимает форму равенства

$$1 = x_0^{вx_0^{в}}e^{-x_0^{в}}. \qquad (7)$$

Логарифмирование его приводит к виду:

$$0 = вx_0^{в}\ln x_0 - x_0^{в} = x_0^{в}(в\ln x_0 - 1), \qquad (8)$$

из которого следует

$$в\ln x_0 - 1 = 0,$$
$$в = 1/\ln x_0. \qquad (9)$$

С учетом (5) и (9) находим

$$a = \frac{1}{\ln x_0}x_0^{1/\ln x_0} = \frac{e}{\ln x_0}. \qquad (10)$$

Таким образом, исходная зависимость (1) принимает форму:

$$y = y_0(x^{e/\ln x_0}e^{-x^{1/\ln x_0}})^n, \qquad (11)$$

в которой остается неизвестным только показатель n.

В принципе при n=1 это уравнение приобретает некоторую каноническую форму. Однако она не может быть универсальной для различного распределения экспериментальных данных – плавного - с пологим максимумом при 0< n≤1 и резкого - с острым максимумом при n>>1. Поэтому рекомендуется обработка экспериментальных данных x_i, y_i путем линеаризации зависимости (11) с обозначением

$$X_i = x_i^{e/\ln x_0} e^{-x_i^{1/\ln x_0}} \qquad (12)$$

и ее логарифмированием

$$\ln y_i = \ln y_0 + n \ln X_i, \qquad (13)$$

откуда находятся значения n_i для всех точек, кроме x=0, y=0 и x_0, y_0:

$$n_i = \frac{\ln(y_i / y_0)}{\ln X_i}, \qquad (14)$$

подлежащие усреднению

$$\bar{n} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} n_i. \qquad (15)$$

Здесь m обозначает число учитываемых экспериментальных точек за исключением x=0, y=0 и x_0, y_0, которые гарантированы точным описанием самой формой зависимости (11).

Далее $\bar{n}$ проверяется на однородность множества, например по критерию Налимова [3]:

$$r_{\substack{max\\min}} = \frac{\left|\bar{x} - x_{\substack{max\\min}}\right|}{S(x)\sqrt{(m-1)/m}} \le r_{cr}, \qquad 16)$$

$$S(x) = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{m-1}}, \qquad (17)$$

где: $x_{\substack{max\\min}}$ – минимаксная величина множества;

$\bar{x}$ – среднеквадратическая ошибка;

m – объем множества.

Нормативные табличные значения критерия Налимова для 5 %-ного уровня значимости приведены в [4], которые нами аппроксимированы с точностью до 5 % к уравнению

$$r_{cr} = 1{,}483 f^{0{,}187}, \qquad (18)$$

где $f=m-2$ – число степеней свободы критерия Налимова.

Если неравенство (16) не удовлетворяется, то «выскакивающая» точка исключается из рассмотрения, и процедура определения однородности множества повторяется для уменьшенного числа точек. Затем найденное представительное значение $\bar{n}$ вводится в формулу (11) и она проверяется на адекватность для всех экспериментальных данных, включая x_0, y_0, если эта точка найдена экспериментально. Если же она определена теоретически, то проверке подлежат только опытные значения. Адекватность зависимости (11) рекомендуется проверять по коэффициенту нелинейной множественной корреляции R и его значимости t_R с дальнейшим определением доверительного интервала и степени округления получающихся результатов в соответствии с формулами, приведенными в [5].

В принципе показатель n может быть и нефиксированным, если при определении множества n_i прослеживается какая-либо корреляция с x. Это возможно при резко асимметричном характере зависимости (1) по кривизне левой и правой ветвей относительно вершины x_0, y_0. В этом случае целесообразно построение дополнительной зависимости $n=f(x)$ и введение ее в качестве показателя степени в (11) с дальнейшим определением значимости такой зависимости по критериям R и t_R. В любом варианте детерминация ее по фиксированному максимуму будет гарантирована.

Таким образом, предложена формула для описания экспериментальных данных зависимостью с фиксированным положением максимума в диапазоне от $x=0$, $y=0$, до $x \to \infty$, $y \to 0$.

Литература

1. *Малышев В. П.* Математическое планирование металлургического и химического эксперимента. – Алма-Ата: Наука, 1977. – 37 с.

2. *Малышев В. П.* Вероятностно-детерминированное планирование эксперимента. – Алма-Ата: Наука, 1981. – 116 с.

3. *Налимов В. В.* Теория эксперимента. – М.: Наука, 1971. – 207 с.

4. *Рузинов Л. П.* Статистические методы оптимизации химических процессов. – М.: Химия, 1972. – 486 с.

5. *Малышев В. П.* К определению ошибки эксперимента, адекватности и доверительного интервала аппроксимирующих функций // Вестник НАН РК. – 2000. – № 4. – С. 22-30.