

6. СТОХАСТИЧНІ МОДЕЛІ ДОВКІЛЛЯ

6.1. Види стохастичних моделей і поняття випадкової величини

Стохастичні моделі можна розділити на регресійні, якісні й імітаційні.

Регресійні моделі дозволяють формалізувати залежність між вхідними й вихідними величинами об'єкта під впливом випадкової дії факторів, що збурюють.

Якісні моделі дають в основному якісні, а в деяких випадках напівкількісні характеристики об'єкта.

Імітаційної моделі засновані на імітації, тобто на дублюванні особливостей, характеристик реальної системи і навіть її зовнішнього вигляду. Як правило, такі моделі базуються на відомих залежностях між вхідними й вихідними величинами об'єкта, але припускають імітацію вхідних величин з урахуванням можливих законів розподілів їх ймовірності для наступного прогнозу вихідних величин моделі.

У зазначених моделях доводиться мати справу з випадковими величинами. Дійсно, реальні об'єкти екології завжди піддані дії випадкових факторів, які часто називають впливами або діями, що збурюють, наприклад, кліматичні умови, тепловий режим, а також викиди або вміст забруднюючих речовин в атмосфері, воді й ґрунті. У результаті дії випадкових факторів екологічний стан об'єктів, що характеризується різними показниками, теж будуть змінюватися випадковим чином. Формально такі об'єкти можна представити у вигляді спрощеної схеми, представленої на рис. 6.1.



Рис.6.1. Структурна схема об'єкта при наявності факторів, що збурюють

Як правило, місце або час дії фактору, що збурює, заздалегідь не відомі, тому об'єкт формалізують виразом $B = f(A)$, де вхідні й вихідні змінні представляються як випадкові величини з певною мірою невизначеності: $A \pm a$; $B \pm b$.

6.2. Основні характеристики випадкових величин

Випадковими називають такі величини, які набувають своїх значень з певною ймовірністю. Тому основною характеристикою випадкової величини є її розподіл, тобто закон, що встановлює зв'язок між значеннями випадкової величини – x_i та ймовірністю таких значень – p_i .

Закон розподілу дискретної величини можна задати у вигляді таблиці відповідності x_i й p_i .

Приклад 1. Викид пилу з вентиляційного ствола вугільної шахти із проектним (задекларованим) значенням 1000 кг/добу може бути представлений як випадкова дискретна величина у вигляді таблиці:

x_i , кг/добу	500±125	750±125	1000±125	1250±125	1500±125
p_i	0,05	0,2	0,5	0,2	0,05

Важливою особливістю наведеного розподілу є те, що сума ймовірностей p_i повинна дорівнювати 1, підтверджуючи, що добовий викид є дійсним фактом.

За даними наведеної таблиці нескладно одержати східчасту діаграму зміни ймовірності p_i від значення величини пилового викиду x_i . Якщо згладити цю діаграму плавною лінією, одержимо диференціальну функцію щільності ймовірності $f(x)$ викиду x_i , але вже як безперервної величини.

Для безперервної випадкової величини повний інтеграл диференціальної функції щільності ймовірності $f(x)$ дорівнює 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1. \quad (6.1)$$

Приклад 2. Рівень забруднення води зваженими частинками W , що змінюється в часі відповідно до графіка, наведеного на рис. 6.2 а, можна задати безперервною функцією розподілу рівня забруднення $f(w) = f(W)$, наведеною на рис. 6.2 б.

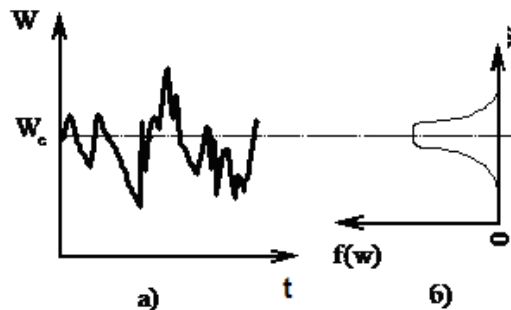


Рис. 6.2. Діаграми опадів і функції їх ймовірності

Функція розподілу випадкової величини є найбільш повною її характеристикою.

На практиці часто випадкові величини достатньо охарактеризувати числовими величинами, такими як:

- математичне сподівання;
- дисперсія;
- середньоквадратичне відхилення;
- варіація.

З них найбільш загальну оцінку дає математичне сподівання $M = \sum_{i=1}^n p_i x_i$.

Дійсно, за даними табличного розподілу викиду пилу шахтою, представленому вище, одержимо проектне (задеклароване) значення викиду:

$$M = \sum_1^n p_i x_i = 25 + 150 + 500 + 250 + 75 = 1000, \text{ кг/добу.}$$

На практиці **математичне сподівання** частіше подають у вигляді середнього арифметичного значення випадкової величини

$$M = \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_1^n x_i, \quad (6.2)$$

де n – число відібраних значень.

Приклад 3. Запиленість повітря на породному відвалі шахти, що вимірювалася щогодини протягом робочої зміни, склала: 10; 250; 300; 240; 270; 40; 15, мг/м³. Визначити середню за зміну запиленість повітря.

За формулою (6.2) обчислюємо:

$$M = \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_1^n x_i = (10 + 250 + 300 + 240 + 270 + 40 + 15) / 7 = 159 \text{ мг/м}^3.$$

Дисперсія – це математичне сподівання квадрата відхилення випадкової величини від її математичного сподівання або середній квадрат відхилення від середнього значення:

$$D_x = \frac{1}{n} \sum_1^n (x_i - \bar{x})^2 = \frac{1}{n} \left[\sum_1^n x_i^2 - \frac{\left(\sum_1^n x_i \right)^2}{n} \right]. \quad (6.3)$$

Дисперсія є високочутливою мірою розкиду випадкової величини навколо її середнього значення, оскільки підсумовуються квадрати відхилень.

Приклад 4. Годинний дебіт води в шахтний ставок-відстійник за 4 години склав послідовно: 5; 3; 6 й 2 т/год. Обчислити дисперсію дебіту води.

Обчислимо спочатку математичне сподівання:

$$M = \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_1^n x_i = (5 + 3 + 6 + 2) / 4 = 4 \text{ т/год.},$$

а потім дисперсію за першою частиною формули (6.3) як

$$D = \frac{1}{n} \sum_1^n (x_i - \bar{x})^2 = ((5-4)^2 + (3-4)^2 + (6-4)^2 + (2-4)^2) / 4 = 2,5 \text{ т}^2/\text{ч}^2.$$

У деяких випадках для обчислення дисперсії зручніше користуватися другою частиною формули (6.3). У цьому випадку

$$D = \frac{1}{n} \left[\sum_1^n x_i^2 - \frac{\left(\sum_1^n x_i \right)^2}{n} \right] = \frac{1}{4} \left[74 - \frac{256}{4} \right] = 2,5 \text{ т}^2/\text{год}^2.$$

Як бачимо, отримані значення дисперсії співпадають.

Корінь квадратний з дисперсії називають **середньоквадратичним відхиленням**:

$$\sigma = \sqrt{D}. \quad (6.4)$$

Ця характеристика більше зручна, ніж дисперсія, оскільки має розмірність випадкової величини. Так, для прикладу, що розглядається

$$\sigma = \sqrt{D} = \sqrt{2,5} \approx 1,6 \text{ т/год.}$$

Таким чином, дебіт води можна задати у вигляді $\bar{x} \pm \sigma = 4 \pm 1,6$ т/год.

Відносний рівень коливань випадкової величини навколо середнього значення називають **варіацією**:

$$V = \frac{\sigma}{\bar{x}} 100, \%. \quad (6.5)$$

Для даних приклада 4 варіація дебіту води у відстійник складе

$$V = \frac{\sigma}{\bar{x}} 100 = (1,6/4) 100 = 40\%.$$

Отримане значення варіації можна використати для обґрунтування граничного об'єму відстійника, який повинний перевищувати середній дебіт води, як мінімум на 40%.

6.3. Побудова регресійної моделі за даними спостережень або статистики

Регресійні моделі – це залежності у вигляді формул (аналітичного оператора), що описують зв'язок різних характеристик об'єкта, не претендуючи на фізичний або екологічний зміст цих залежностей, хоча вдало обрана функція часто дозволяють повніше осмислити процеси, що відбуваються в об'єкті моделювання.

Для побудови регресійної моделі достатньо статистично достовірних даних, що встановлюють зв'язок між змінними або параметрами об'єкта. Дійсно, спостерігаючи в системі екологічного моніторингу за об'єктами, накопичують дані про їх стан. Як правило, дані оформляють у вигляді таблиць відповідності необхідних значень змінних. Такі таблиці називають кореляційними. Заповнюють їх для двох або більше змінних або факторів (часто один фактор – час), наприклад:

- залежність двох змінних x_i, y_i

x_i	500	600	700	800
y_i	140	220	260	300

- залежність однієї змінної y_i від часу t_i

t_i	1	2	3	4	5
y_i	510	497	504	510	509

За даними кореляційної таблиці можна побудувати модель, що характеризує залежність між певними величинами, якщо вона є.

Типовий порядок побудови регресійної моделі, що встановлює зв'язок (кореляцію) двох змінних, наведений нижче.

1. Знаходять числові характеристики всіх випадкових величин x_i, y_i , відповідно до формул, наведених вище.

2. Дають оцінку взаємного зв'язку випадкових величин (змінних, що спостерігаються) для підтвердження лінійної залежності між ними за формулою

$$r = \frac{K_{xy}}{\sigma_x \cdot \sigma_y}. \quad (6.6)$$

Цю величину називають **коефіцієнтом парної лінійної кореляції**, де в знаменнику добуток середньоквадратичних відхилень обох змінних, а в чисельнику – **кореляційний момент**, який обчислюють за формулою:

$$K_{xy} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \frac{1}{n} \left[\sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i - \frac{\left(\sum_{i=1}^n x_i \cdot \sum_{i=1}^n y_i \right)}{n} \right]. \quad (6.7)$$

Коефіцієнт парної лінійної кореляції – r може приймати значення від - 1 до 1, указуючи на пряму залежність при позитивних значеннях або зворотну – при негативних. Значення $r=0$ указує на повну відсутність залежності, а якщо $r=1$ маємо точну лінійну функціональну залежність. Значення $r = |0,7 - 1|$ свідчать про сильний зв'язок між двома змінними, при якому доцільно шукати залежність між ними у вигляді наближеної функції, тобто будувати регресійну модель.

3. Будують регресійну модель, що може бути представлена лінійною або нелінійною залежністю (функцією). Вид шуканої функції визначають відповідно до гіпотези, що висувають за характером розташування експериментальних точок або даних статистики, нанесених на поле кореляції. Оскільки точки звичайно розкидані по полю кореляції, то приймають ту гіпотезу щодо виду залежності, яка забезпечує найкраще наближення, наприклад, у вигляді прямої, гіперболи, параболи, експоненти тощо. Часто апроксимацію даних виконують поліномом різного ступеню особливо в тому випадку, коли потрібний найбільш точний опис залежності, а не пошук фізичних закономірностей зв'язку змінних, що спостерігалися.

6.4. Наближення регресійних моделей методом найменших квадратів

Наблизити регресійну модель до експериментальних точок можливо методом середніх або методом найменших квадратів. Останній метод більш універсальний та відносно просто формалізується, тому широко застосовується на практиці.

Розглянемо спочатку випадок лінійної залежності.

Нехай наближене рівняння зв'язку вхідної – x і вихідної – $y(x)$ змінних об'єкта бажано знайти у вигляді прямої

$$y \approx ax + b, \quad (6.8)$$

тоді для ідентифікації цієї моделі необхідно підібрати коефіцієнти a й b , які забезпечать найкраще наближення прямої до наявних статистичних даних з n пар значень x_i й y_i , отриманих у результаті спостережень за об'єктом.

Найкраще наближення отримаємо методом найменших квадратів, відповідно до якого для дискретних значень мінімізується функціонал

$$F = \sum_1^n [y_i - y] \Rightarrow \min. \quad (6.9)$$

Як бачимо, мінімізується квадрат відхилення теоретичної лінії від експериментальних точок.

Для шуканої моделі у вигляді прямої лінії (6.8) цей функціонал прийме вигляд

$$F = \sum_1^n [y_i - (ax_i + b)] \Rightarrow \min.$$

Як відомо, мінімум функції досягається в точці, де її похідна обертається в нуль.

Дорівнюємо нулю частинні похідні від F по шуканим змінним a й b :

$$\frac{\partial F}{\partial b} = 2 \sum_1^n [y_i - ax_i - b] = 0;$$

$$\frac{\partial F}{\partial a} = 2 \sum_1^n [y_i - ax_i - b] x_i = 0.$$

Розкривши суми, для одномірної лінійної моделі одержимо систему двох нормальних рівнянь регресії:

$$bn + a \sum_1^n x_i = \sum_1^n y_i; \quad (6.10)$$

$$b \sum_1^n x_i + a \sum_1^n x_i^2 = \sum_1^n x_i y_i.$$

Загальне рішення цієї системи має вигляд:

$$b = (\sum_1^n y_i - a \sum_1^n x_i) / n; \quad (6.11)$$

$$a = \frac{K_{xy}}{D_x} = (\sum_1^n x_i \sum_1^n y_i - n \sum_1^n x_i y_i) / [(\sum_1^n x_i)^2 - n \sum_1^n x_i^2]. \quad (6.12)$$

Як бачимо, для ідентифікації коефіцієнтів одномірної лінійної моделі необхідно, користуючись поточними даними кореляційної таблиці, накопичити

відповідні суми: $\sum_1^n x_i$; $\sum_1^n y_i$; $\sum_1^n x_i^2$; $\sum_1^n x_i y_i$,

а далі обчислити необхідні для побудови моделі у вигляді лінійної залежності відповідні значення коефіцієнтів a й b .

Якщо наближене теоретичне рівняння зв'язку двох змінних бажано знайти у вигляді нелінійної залежності, наприклад, поліному другого порядку, тобто параболи загального виду

$$y = c_0 + c_1 x + c_2 x^2, \quad (6.13)$$

тоді для її ідентифікації необхідно підібрати коефіцієнти c_0 , c_1 і c_2 , які забезпечили б найкраще наближення статистичних даних з n пар значень x_i і y_i до параболи.

Підставимо рівняння параболи загального виду в наведений вище функціонал для методу найменших квадратів. Візьмемо частинні похідні відповідно за змінними c_0 , c_1 і c_2 та дорівняємо їх нулю. Одержимо систему із трьох нормальних рівнянь регресії:

$$\begin{aligned} n c_0 + \left(\sum_1^n x_i\right) c_1 + \left(\sum_1^n x_i^2\right) c_2 &= \sum_1^n y_i; \\ \left(\sum_1^n x_i\right) c_0 + \left(\sum_1^n x_i^2\right) c_1 + \left(\sum_1^n x_i^3\right) c_2 &= \sum_1^n x_i y_i; \\ \left(\sum_1^n x_i^2\right) c_0 + \left(\sum_1^n x_i^3\right) c_1 + \left(\sum_1^n x_i^4\right) c_2 &= \sum_1^n x_i^2 y_i. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Очевидно, що для побудови цієї системи рівнянь необхідно накопичити за даними кореляційної таблиці наступні суми:

$$\sum_1^n x_i; \sum_1^n y_i; \sum_1^n x_i^2; \sum_1^n x_i^3; \sum_1^n x_i^4; \sum_1^n x_i y_i; \sum_1^n x_i^2 y_i.$$

Вирішувати отриману систему вручну зручно табличним методом Гауса або на ЕОМ з використанням стандартного пакета програм.

Аналогічним шляхом можна обчислити коефіцієнти поліному більш високого ступеня, при цьому кількість нормальних рівнянь регресії складатиме на одиницю більше показника поліному. Стандартна комп'ютерна програма Excel забезпечує отримання коефіцієнтів поліному до шостого порядку та дозволяють ідентифікувати коефіцієнти інших відомих аналітичних функцій, зокрема, степеневої, логарифмічної або експонентної, тобто такої, котра краще відбиває характер взаємного зв'язку двох змінних. Причому достовірність апроксимації визначає показник R^2 , що може бути виведений на графік разом з певним рівнянням регресії.

При побудові математичних моделей з декількома вхідними змінними (багатофакторної моделі), як моделюючи функцію, обирають переважно поліном, що містить лінійні або квадратичні елементи змінних або елементи їх взаємного зв'язку. Причому на кінцевих стадіях моделювання малозначимі елементи (компоненти формул), як правило, виключають.

Як приклад лінійної двохфакторної моделі регресії може служити залежність капітальних витрат K на провітрювання вугільної шахти, залежно від кількості повітря Q , що подається, та величини загальшахтної депресії H :

$$K = -12600 + 913 Q + 522 H.$$

Наступним прикладом є залежність продуктивності біомаси на ґрунтовій ділянці від потужності гумусового шару x_1 і кількості внесеного добрива x_2 :

$$y = 14 + 2x_1 + 12x_2.$$

У загальному випадку модель подається функцією двох змінних з постійними коефіцієнтами

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2. \quad (6.15)$$

Розглянемо порядок побудови такої моделі за статистичними або експериментальними даними, які представляють у вигляді кореляційної таблиці відповідності значень вихідної величини y і двох вхідних змінних x_1 й x_2 :

y_i	y_1	y_2	\dots	y_n
x_{1i}	x_{11}	x_{12}	\dots	x_{1n}
x_{2i}	x_{21}	x_{22}	\dots	x_{2n}

Спочатку підставимо шукане рівняння до відповідного функціонала методу найменших квадратів. Одержимо:

$$F = \sum_1^n (y_i - b_0 + b_1x_1 + b_2x_2)^2 \Rightarrow \min.$$

Візьмемо від цього функціонала частинні похідні по змінним $b_0; b_1; b_2$ і дорівнюємо їх нулю. Одержимо:

$$\frac{\partial F}{\partial b_0} = 2 \sum_1^n (y_i - b_0 - b_1x_{1i} - b_2x_{2i}) = 0;$$

$$\frac{\partial F}{\partial b_1} = 2 \sum_1^n (y_i - b_0 - b_1x_{1i} - b_2x_{2i}) x_{1i} = 0;$$

$$\frac{\partial F}{\partial b_2} = 2 \sum_1^n (y_i - b_0 - b_1x_{1i} - b_2x_{2i}) x_{2i} = 0.$$

Розкривши суми, одержимо систему нормальних рівнянь регресії:

$$n b_0 + \left(\sum_1^n x_{1i} \right) b_1 + \left(\sum_1^n x_{2i} \right) b_2 = \sum_1^n y_i;$$

$$\left(\sum_1^n x_{1i} \right) b_0 + \left(\sum_1^n x_{1i}^2 \right) b_1 + \left(\sum_1^n x_{1i}x_{2i} \right) b_2 = \sum_1^n x_{1i}y_i; \quad (6.16)$$

$$\left(\sum_1^n x_{2i} \right) b_0 + \left(\sum_1^n x_{1i}x_{2i} \right) b_1 + \left(\sum_1^n x_{2i}^2 \right) b_2 = \sum_1^n x_{2i}y_i.$$

Очевидно, що для ідентифікації цієї системи необхідно визначити коефіцієнти рівнянь, накопичивши наступні суми:

$$\sum_1^n x_{1i}; \sum_1^n x_{2i}; \sum_1^n y_i; \sum_1^n x_{1i}^2; \sum_1^n x_{1i}x_{2i}; \sum_1^n x_{2i}^2; \sum_1^n x_{1i}y_i; \sum_1^n x_{2i}y_i.$$

Підставивши накопичені суми в систему нормальних рівнянь, вирішуємо її відносно шуканих коефіцієнтів відомими чисельними методами на ЕОМ. Далі підставляємо знайдені коефіцієнти до рівняння регресійної моделі (6.15).

Адекватність отриманого рівняння регресії оцінюють за критерієм Фішера, а значимість коефіцієнтів регресії по t-критерію Ст'юдента.

Прикладом більш складної багатofакторної моделі може служити, залежність, що моделює швидкість поглинання кисню опалим з дерев листям. (Із книги: Д. Джеферс "Введеение в системний анализ: применение в экологии", М., 1981.):

$$\lg(Y + 1) = 0,561 - 8,701 D 10^{-4} + 3,935 D^2 10^{-7} + 7,187 B 10^{-4} + 0,03998 T,$$

де Y – поглинання кисню в мкл.г⁻¹ч⁻¹; D – число днів, протягом яких витримувались зразки листя; B – процентний вміст вологи в зразках; T – температура в °С.

Ця формула дає оцінки швидкості поглинання кисню у всьому діапазоні днів, температур і вологості, які спостерігалися в експерименті, із певним середньоквадратичним відхиленням у поглинанні кисню.

Як бачимо, регресійна модель ураховує дію трьох різних факторів, причому по фактору D значимим є й квадратичний елемент(D^2).

6.5. Побудова моделей багатofакторних об'єктів на основі планованого експерименту

Об'єкти, що мають більше одного вхідного фактора називають багатofакторними. При цьому вихідних змінних може бути одна й більше. В останньому випадку залежності вихідних змінних від вхідних визначатимуться комунікативною матрицею моделі. Для побудови такої матриці дають прирости факторам на вході й визначають значення необхідного вихідного. Визначають шукані коефіцієнти матриці моделі.

Зміни факторів (вхідних змінних) здійснюють з використанням **класичного** або **факторного** планів.

Класичний план передбачає фіксацію на постійному рівні всіх змінних, крім однієї (x_i) і по черзі одержують значення вихідної змінної $y = f(x_i)$, тобто проводять послідовність традиційних однофакторних експериментів. Отримані результати використовують для побудови регресійної моделі.

Зі зростанням числа факторів на вході об'єкта класичний експеримент утруднений і часто не можливий на реальному об'єкті через велику кількість точкових експериментів. У цьому випадку для їх проведення складають **факторний** план.

У широкому смислі – це такий план проведення експериментів на об'єкті, при якому робота виконується поетапно з визначенням подальшої стратегії завдання вхідних змінних для наступних етапів. Такий план використовують, як для побудови регресійної моделі об'єкта (ідентифікації її параметрів), так і для цілей керування об'єктом, або пошуків оптимальних (екстремальних) значень моделі.

У вузькому смислі факторний план передбачає зміну факторів відповідно до заздалегідь обраної стратегії, що залежить від конкретних цілей і задач

моделювання або керування. Достоїнство факторного планування полягає в значному скороченні числа експериментів.

Відомий ряд методів багатфакторного планування експериментів. Це повний факторний експеримент (ПФЕ), центральне композиційне рототабельне планування (ЦКРП), а для цілей управління чи пошуку екстремумів моделей використовують градієнтні методи, симплекс-метод й ін.

Зупинимось на ПФЕ, як найпоширенішому.

Сутність повного факторного експерименту (ПФЕ).

ПФЕ використовується для побудови статичних характеристик (функцій відгуків тобто для отримання описових моделей) багатомірних об'єктів. Метод реалізує всі можливі не повторювані комбінації двох обраних рівнів кожного незалежного фактору. При цьому до факторів пред'являються наступні вимоги:

- сумісність, тобто можливість сполучення при будь-яких рівнях, зокрема, коли один фактор малий, інший великий;
- незалежність, тобто зміна одного фактору не викликає зміни іншого.

При ПФЕ кожен фактор може приймати тільки два значення, що охоплюють діапазон його можливої зміни. Тому при двох факторах необхідно лише чотири точкові проби (експеримента) на реальному об'єкті; при трьох – вісім точкових проб і т.д. (рис. 6.3)

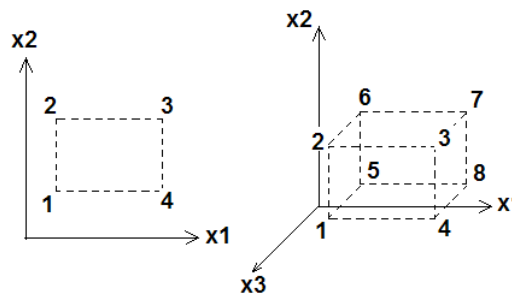


Рис. 6.3. Точки експериментів (проб) при двухфакторному і трьохфакторному планах ПФЕ

У загальному випадку число експериментів дорівнює числу можливих комбінацій, тобто $N = 2^k$, де k – число факторів.

Вихідна змінна або функція відгуку об'єкта при ПФЕ представляється поліномом на основі того, що досліджувану безперервну функцію $y = f(x_1; x_2; x_3 \dots x_n)$, що має всі похідні, можна розкласти в ряд Тейлора виду

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_n x_n + b_{12} x_1 x_2 + \dots + b_{(n-1)n} x_{(n-1)} x_n + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + \dots + b_{nn} x_n^2.$$

Цей ряд аналогічний рівнянню регресії, де

$$b_i = \frac{\partial y}{\partial x_i}; \quad b_{ij} = \frac{\partial^2 y}{\partial x_i \partial x_j}; \quad b_{ii} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 y}{\partial x_i^2} \quad - \text{коєфіцієнти ряду Тейлора, які стають}$$

коєфіцієнтами регресії.

Для побудови математичної моделі у вигляді площини достатньо чотири експерименти ($N = 2^k = 2^2 = 4$)

Оскільки доводиться оперувати із двома рівнями для кожної змінної, можна фактичній величині кожного фактору привласнити – на нижньому рівні «- 1», а на

верхньому «+1». У цьому випадку пробні точки розмістяться у вершинах одиничного квадрата (рис. 6.4). Для трьох факторів у вершинах одиничного куба із центром у точці 0.

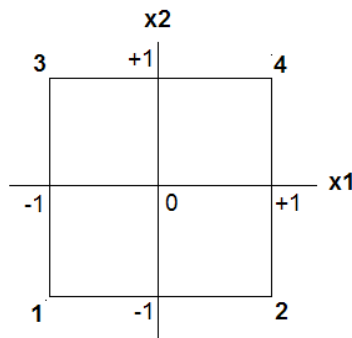


Рис. 6.4. Точки експериментів при двухфакторному плані після кодування факторів

Матриця експериментів при двухфакторному плані буде мати вигляд:

№ експерименту	Фактори		Функція відгуку y_j
	x_1	x_2	
1	-	-	y_1
2	+	-	y_2
3	-	+	y_3
4	+	+	y_4

Примітка. Одиниця в матрицях опущена.

Як бачимо, частота варіювання наступних факторів знижується у два рази порівняно з попереднім, при цьому останній фактор варіюють один раз.

Матриця ПФЕ є ортогональною, тобто забезпечується умова, що мінімізує дисперсію.

Для матриці із чотирьох експериментів $|4 \times 3|$ коефіцієнти регресії лінійного полінома обчислюють із виразів:

$$b_0 = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m y_j; \quad b_i = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m x_{ji} y_j; \quad b_{iu} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m x_{ji} x_{ju} y_j \quad \text{при } m=4 \quad j=1,2..m \quad i=1;2$$

або за розкритими формулами:

$$b_0 = (y_1 + y_2 + y_3 + y_4)/4 - \text{середнє значення третього стовпця матриці};$$

$b_1 = (x_{11}y_1 + x_{21}y_2 + x_{31}y_3 + x_{41}y_4)/4 - \text{середнє значення добутку першого стовпця матриці на третій};$

$b_2 = (x_{12}y_1 + x_{22}y_2 + x_{32}y_3 + x_{42}y_4)/4 - \text{середнє значення добутку другого стовпця матриці на третій};$

$b_{12} = (x_{11}x_{12}y_1 + x_{21}x_{22}y_2 + x_{31}x_{32}y_3 + x_{41}x_{42}y_4)/4 - \text{середнє значення добутків чотирьох рядків матриці}.$

Далі будують математичну модель у вигляді рівняння регресії з урахуванням ефекту взаємодії факторів:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2. \quad (6.17)$$

Останній член служить для оцінки можливої нелінійності моделі. Якщо він значимий, то модель краще представити рівнянням другого порядку із квадратичними елементами.

Порядок побудови моделі ПФЕ.

1. Кодування факторів (перехід від розмірних одиниць до відносних значень двох рівнів).
2. Проведення експериментів відповідно до матриці ПФЕ.
3. Рандомізація (повторення експериментів у різній послідовності для виключення впливу фактору часу й зменшення дисперсії).
4. Перевірка значимості коефіцієнтів рівняння регресії, оцінка погрішності моделювання або перевірка адекватності моделі в цілому, за критерієм Фішера.

6.6. Імітаційні моделі (simulation)

Суть імітаційного моделювання полягає в дослідженні складної математичної моделі за допомогою обчислювальних експериментів на ЕОМ й обробки результатів цих експериментів. При цьому, як правило, творці імітаційної моделі намагаються максимально використати всю наявну інформацію про об'єкт моделювання, як кількісну, так і якісну. Імітаційні моделі варто віднести до класу стохастичних моделей, незважаючи навіть на те, що вони можуть бути побудовані на основі цілком детермінованих алгебраїчних або диференціальних рівнянь. Це обумовлено тим, що в обчислювальному експерименті на такій моделі вхідні величини, як відзначено на початку розділу, змінюють випадковим чином, з урахуванням імовірності їхнього розподілу (рис. 6.5).

Процес побудови й дослідження на імітаційній моделі можна представити в такий спосіб. Записують у формалізованому виді (у вигляді аналітичних операторів, графіків, логічних співвідношень, імовірнісних законів) усе, що знаємо про систему, а потім проводимо на комп'ютері обчислювальні експерименти за варіантами того, що може дати сукупність уведеної інформації при тих або інших значеннях зовнішніх і внутрішніх параметрів системи.

Особливо привабливе застосування імітаційних моделей для опису екологічних систем, що включають множину біологічних, геологічних, метеорологічних й інших факторів. Завдяки можливості реалізації різних "сценаріїв" поведінки об'єкта та керування ним, імітаційна модель може використовуватися для вибору стратегії експлуатації природної екосистеми або раціонального способу створення штучної екосистеми, наприклад, після завершення гірничих робіт з видобутку корисної копалини.

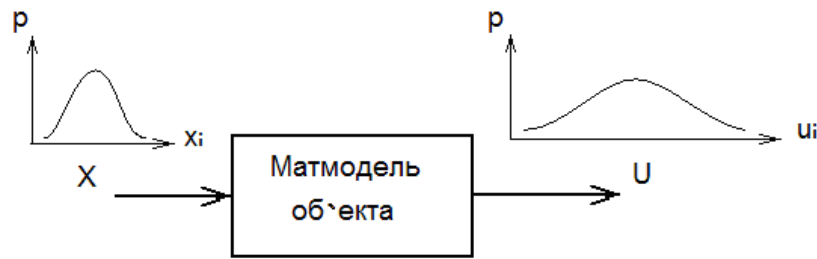


Рис. 6.5. Імітація вектору змінних на вході з урахуванням можливих законів щільності їх імовірності для наступного прогнозу зміни величин на виході об'єкта (після відповідного перетворення кожної вхідної величини моделлю)

Результати машинних експериментів залежатимуть не тільки від закладених у моделі співвідношень, але й від організації комплексу реалізуючих програм, від механізму проведення експериментів. При цьому важливою стає система людина-машина, що забезпечує діалог між особою, що проводить експеримент, і машинним комплексом програм.

Основні етапи побудови імітаційної моделі наступні.

Формулюються основні задачі поведінки складної системи. Відповідно до мети й задач моделювання, задається вектор стану системи. Уводиться масштаб часу, що моделює хід часу в реальній системі, а також часовий крок моделі, для якого проводяться проміжні обчислення.

Виконується декомпозиція (розбивка) системи на окремі відносно незалежні блоки, зв'язані один з одним. Для кожного блоку визначають компоненти вектора стану, що перетворюються в процесі функціонування кожного блоку системи.

Формулюють закони й гіпотези, що визначають поведінку окремих блоків і зв'язок цих блоків один з одним, доповнюючи їх логічними операторами, які формалізують досвід спостереження за динамікою процесів у реальній системі. Якщо в блоці використовуються випадкові параметри, задаються правила визначення їх певних реалізацій на кожному кроці. Розробляються програми функціонування окремих блоків.

Кожен блок окремо перевіряється на адекватність, шляхом порівняння розрахункових даних з фактичними.

Проводиться об'єднання розроблених блоків імітаційної моделі на базі стандартного або спеціально створеного математичного забезпечення. Апробуються й опрацьовуються різні схеми взаємодії блоків. На цьому етапі робота з інтегрованою моделлю являє собою вивчення колективної поведінки окремих блоків у випадковому або детермінованому навколишньому середовищі.

Перевіряється адекватність імітаційної моделі в цілому. У порівнянні з верифікацією окремих блоків, тут вирішальними виявляються знання експертів – фахівців, що добре знають реальну систему.

Плануються обчислювальні експерименти на моделі. При аналізі їх результатів використовують статистичну обробку інформації, графічні форми видачі даних й ін. Результати експериментів поповнюють інформаційний фонд (банк даних) і використовуються при подальшій роботі з моделлю.

На кожному з етапів повинна бути можливість перебудови моделі, розширення списку змінних стану системи, уточнення виду їх взаємодії.

Створення імітаційної моделі являє собою процес послідовного підвищення адекватності моделі реальному об'єкту, при якому добувається нова інформація про об'єкт, удосконалюється система спостережень, перевіряються гіпотези про механізми тих або інших процесів у рамках загальної імітаційної системи. Загалом він укладається в типову схему моделювання, що наведений у розділі 2.

Як основні задачі імітаційного моделювання можна виділити наступні:

- перевірка гіпотез про взаємодію окремих елементів і підсистем;
- прогноз поведінки об'єкта при зміні внутрішніх характеристик і зовнішніх умов;
- оптимізація керування реальним об'єктом.

Очевидно, що розробка імітаційної моделі складної системи й робота із цією моделлю вимагають зусиль колективу фахівців, як у предметній області, так й в області обчислювальної математики, включаючи розділ прогностики й автоматизованого керування.

Питання для самоконтролю.

1. Наведіть й поясніть загальну структурну схему об'єкта при наявності впливів, що збурюють.
2. Поясніть суть закону розподілу випадкової величини.
3. Охарактеризуйте основні числові характеристики випадкових величин.
2. Приведіть типовий порядок побудови регресійної моделі.
3. Викладіть сутність методу найменших квадратів, що використовується при побудові регресійних моделей.
4. Викладіть послідовність побудови регресійної моделі у вигляді лінійного рівняння.
5. Викладіть послідовність побудови регресійної моделі у вигляді рівняння параболи загального виду.
6. Проаналізуйте регресійну модель споживання кисню опалим листям у вигляді полінома із трьома змінними.
7. Викладіть сутність повного факторного експерименту.
8. Коротко викладіть сутність імітаційної моделі й послідовність її побудови.