УДК 539.3

ПРИМЕНЕНИЕ МНОГОМЕРНОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА В ИССЛЕДОВАНИЯХ ДОЛГОВРЕМЕННОЙ ПРОЧНОСТИ ПОЛИМЕРОВ. 1. ТЕОРИЯ

А.А. Валишин, Т.С. Степанова

Многомерный регрессионный анализ используется для статистической обработки экспериментальных данных по длительной прочности полимеров. Сформулированы важнейшие статистические модели температурно-временной зависимости прочности: (модель Журкова и модель Регеля-Ратнера). Получены формулы для нахождения статистических оценок коэффициентов регрессии моделей и физических параметров долговечности. Проведен полный статистический анализ моделей.

1. Долговременная прочность полимеров проявляется на практике как температурно-временная зависимость прочности (ТВЗП). Явление ТВЗП систематически исследуется с 50-х годов прошлого столетия. ТВЗП – важнейшее прочностное свойство полимеров. Оно проявляется у многих материалов самой разной природы, но в первую очередь ТВЗП присуща полимерам.

Для твердых полимеров (кристаллических и аморфных) ТВЗП чаще описывается формулой Журкова [1]:

$$\tau = \tau_0 \exp\left[(U_0 - \gamma\sigma)/(kT)\right] \qquad (1)$$

В этой формуле τ – долговечность при постоянном растягивающем напряжении σ и постоянной температуре T, k - постоянная Больцмана; τ_0, U_0, γ - эмпирические константы, подлежащие определению из экспериментально полученных значений долговечности. В нашу задачу сейчас не входит обсуждение их физического смысла; об этом можно прочитать в монографии [1]. Эти константы определяются, как правило, графически из данных изотермического и изобарического экспериментов по долговечности. Подробно методика графического определения параметров формулы (1) описана в [1].

Однако, не столь редко встречаются и отклонения от формулы Журкова. Самым известным из них является, так называемый, эффект смещения полюса, когда ТВЗП описывается обобщенной формулой Регеля-Ратнера:

$$\tau = \tau_0 \exp\left[(U_0 - \gamma\sigma)\left(\frac{1}{kT} - \frac{1}{kT_n}\right)\right] \qquad (2)$$

В эту формулу добавлена еще одна константа T_n – температура полюса пучка прямых долговечности в координатах $(1/T, \lg\tau)$.

Эффект смещения полюса был впервые обнародован в работах представителя школы академика С.Н. Журкова - В.Р. Регеля и вызвал оживленную дискуссию на научных конференциях и в печати. Высказывались различные мнения о причинах смещения полюса, в тоже время многие исследователи выражали сомнение в реальности этого эффекта, приписывая его погрешностям обработки экспериментальных данных. Горячим сторонником реальности этого эффекта был С.Б. Ратнер. Он не только подтвердил его своими экспериментами, но и обнаружил новый вид ТВЗП, отличной от (1) и (2) [2], который, впрочем, не обсуждается в этой статье.

После смерти С.Б. Ратнера внимание научной общественности к этому вопросу ослабло, и он остался открытым. Мы считаем необходимым вернуться к этой проблеме, так как она естественно вписывается в наши представления о нелинейных эффектах в кинетике разрушения полимеров [3]. С этой точки зрения смещение полюса является просто одним из таких нелинейных эффектов. Кроме того, в этой статье мы покажем, что принципиальный вопрос о наличии или отсутствии смещения полюса естественно решается статистическими методами.

2. Следует заметить, что в практике экспериментальных исследований прочности полимеров совершенно недостаточно применяются статистические методы при обработке экспериментальных данных. Так, из богатого арсенала регрессионного анализа используется лишь простейшая одномерная форма метода наименьших квадратов (м.н.к.), да и то без статистического анализа. Многомерный регрессионный анализ, который позволяет строить и исследовать статистические модели, описываемые функциями многих переменных, практически совсем не известен. В работе [4] мы попытались частично восполнить этот пробел.

При испытаниях на долговечность значения напряжения и температуры (аргументов или факторов) фиксируются с ошибкой, много меньшей, чем измеренная долговечность. Поэтому ошибкой в фиксации напряжения и температуры обычно пренебрегают и считают, что они фиксируются точно. Измеренные же значения долговечности фиксируются со значительным разбросом.

Причин такого разброса в основном две: а) влияние на результат измерения случайных инструментальных факторов, не имеющих отношения к физической природе изучаемого явления; б) влияние случайных неоднородностей материала испытываемых образцов.

Последний фактор особенно сильно себя проявляет при испытаниях малых образцов (тонкие волокна и пленки) [5]. Поэтому полученные в эксперименте значения долговечности суть реализации случайной величины, и зависимость долговечности от напряжения и температуры – статистическая. Но зависимость среднего значения нескольких измерений долговечности от тех же аргументов – функциональная. Такая зависимость называется, как известно, корреляционной или регрессией. С этой точки зрения все эмпирические формулы долговечности суть уравнения регрессии.

Задачами регрессионного анализа являются: а) по экспериментальным данным построить регрессионную модель и найти оптимальное уравнение регрессии; б) оценить коэффициенты выбранной модели (коэффициенты регрессии или регрессоры) и найти их статистические характеристики; в) оценить адекватность выбранной модели по имеющимся экспериментальным данным и в случае неадекватности перейти к другой модели.

Путем последовательной «постройки» находится наилучшая регрессионная модель.

Для дальнейшего изложения удобно представить (1) и (2) в несколько ином виде. Формула Журкова (1):

$$\eta = \beta_0 + \beta_2 y + \beta_{12} xy, \qquad (3a)$$

$$\eta = \lg\tau,\ x = \sigma,\ y = \frac{1}{kT},\ \beta_0 = \lg\tau_0,\ \beta_2 = MU_0,\ \beta_{12} = -M\gamma \qquad (3á)$$

$$M = lge \approx 0.434$$

Формула Регеля-Ратнера (2):

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 y + \beta_{12} xy, \qquad (4à)$$

$$\eta = \lg\tau,\ x = \sigma,\ y = \frac{1}{kT},\ \beta_0 = \lg\tau_0 - M\frac{U_0}{kT_n},\ \beta_1 = M\frac{\gamma}{kT_n},\ \beta_2 = MU_0,\ \beta_{12} = -M\gamma \qquad (4á)$$

По терминологии регрессионного анализа x и y называются предикторами; $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_{12}$ - коэффициентами регрессии или регрессорами; η – измеряемым откликом. Формулы (3а) и (4а) назовем регрессионными моделями Журкова и Регеля-Ратнера, соответственно. По имеющимся экспериментальным значениям отклика η необходимо найти оптимальные оценки регрессоров и их точность. Связь коэффициентов регрессии с физическим параметрами долговечности выражается формулами (3б) и (4б).

Поэтому получаем:

Формула Журкова:

$$\lg \tau_0 = \beta_0, U_0 = \frac{\beta_2}{M}, \gamma = -\frac{\beta_{12}}{M} \quad (5)$$

Формула Регеля-Ратнера:

$$\lg \tau_0 = \frac{1}{M}\left(\beta_0 - \frac{\beta_1\beta_2}{\beta_{12}}\right), U_0 = \frac{\beta_2}{M},$$

$$\gamma = -\frac{\beta_{12}}{M}, kT_n = -\frac{\beta_{12}}{\beta_1} \quad (6)$$

По этим формулам, зная оценки регрессоров, можно найти оценки физических параметров долговечности.

Для дальнейшего нам будет удобна геометрическая точка зрения. Совокупность значений предикторов x и y образуют факторную плоскость. Измерение отклика (долговечности) производится при некоторых значениях напряжения и температуры, т.е. на некотором «экспериментальном» множестве точек факторной плоскости. Конфигурация этих точек определяет стратегию или план эксперимента. Пусть всего будет N «экспериментальных» точек и пусть в j-ой из них отклик $\lg\tau$ измеряется p_j раз, $j = 1,2,3,....,N$, то есть в этой точке произведено p_j повторных измерений. Полное число измерений долговечности во всех точках равно $N_0 = \sum_{j=1}^{N} p_j$; ясно, что $N_0 \geq N$. Через $w_{ij}, i = 1,2,3,...., p_j, j = 1,2,3,...., N$ обозначим i-тое измерение отклика в j-той «экспериментальной» точке, а через:

$$\overline{w}_j = \frac{1}{p_j}\sum_{i=1}^{p_j} w_{ij}, j = 1,2,3,....,N \quad (7)$$

обозначим среднее результатов повторных измерений отклика в той же точке.

В основе классического регрессионного анализа лежат следующие предпосылки: а) наблюдаемое значение отклика w_{ij} в каждой «экспериментальной» точке состоит из регулярной части η_j и случайной ошибки ε_{ij}, то есть:

$$w_{ij} = \eta_j + \varepsilon_{ij}, i = 1,2,3,....p_j, j = 1,2,3,....,N \quad (8)$$

Ни то ни другое не известны, измеряется лишь их сумма. Полезную информацию содержит только регулярная компонента, случайная - это шум, создаваемый действием случайных неконтролируемых причин; б) регулярная часть η_j постулируется регрессионной моделью (3а) или (4а); в) случайная компонента ε_{ij} измеренного отклика в каждой «экспериментальной» точке M_j распределена нормально с нулевым математическим ожиданием и дисперсией.

$$D(\varepsilon_{ij}|M_j) = \frac{\sigma^2}{\omega_j}, i = 1,2,3,....p_j, j = 1,2,3,....,N \quad (9)$$

Множитель ω_j называется статистическим весом j-той «экспериментальной» точки и отражает тот факт, что в разных «экспериментальных» точках измерение отклика (долговечности) может быть неравноценно. Дисперсия измерения отклика может зависеть от конкретных значений предикторов. Это явление называется гетероскедактичностью, в противоположность гомоскедактичности, когда дисперсии во всех «экспериментальных» точках одинаковы. Статистически все зависит от свойств измерительной установки и от испытываемых образцов. Испытания на долговечность могут быть проведены на различных установках, различными исследователями, в разное время, в различных лабораториях. Кроме того, образцы имеют присущую им и неустранимую статистичность из-за микронеоднородности их структуры и прочностных свойств, особенно, если они взяты из различных партий материала. Все это аккумулируется в статистическом весе. Если же все измерения в разных «экспериментальных» точках равноценны и равноточны, то есть гомоскедактичны, то можно принять $\omega_j = 1, j = 1,2,3,....,N$.

Явно определить статистические веса можно следующим образом. Из формулы (9) видно, что отношение дисперсий воспроизводимости в двух точках равно отношению их статистических весов, то есть статистический вес – величина относительная. Поэтому выбрав какую-либо контрольную точку (причем эта точка может даже не участвовать в дальнейшей обработке), вычислим оценку дисперсии воспроизводимости в ней по формуле:

$$\widehat{D}_0 = \frac{\sum_{i=1}^{p_j}(w_{ij} - \overline{w}_j)^2}{p_j - 1} \qquad (10)$$

Во всех остальных точках оценки дисперсии воспроиздодимости вычислим по аналогичной формуле. В результате найдем:

$$\omega_j = \frac{\widehat{D}(M_j)}{\widehat{D}_0}, j = 1,2,3,....,N \qquad (11)$$

Найдя статистические веса, тем самым, определим весовую матрицу G :

$$G = \begin{pmatrix} \omega_1 p_1 & 0\cdots & 0 \\ 0 & \omega_2 p_2 \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0\cdots & \omega_N p_N \end{pmatrix} \qquad (12)$$

Это диагональная матрица размером ($N \times N$).

Среднее измеренных значений отклика во всех «экспериментальных» точках также представляется в виде регулярной и случайной частей:

$$\overline{w}_j = \eta_j + \overline{\varepsilon}_j, j = 1,2,3,....,N \qquad (13)$$

В этой формуле $\overline{\varepsilon}_j$ - среднее от ошибок случайных измерений в той же точке. Величина $\overline{\varepsilon}_j$ также распределена нормально с нулевым математическим ожиданием и дисперсией.

$$D(\overline{\varepsilon}_j | M_j) = \frac{\sigma^2}{\omega_j p_j}, j = 1,2,3,....,N \qquad (14)$$

Регрессионные модели (3а) и (4а) можно объединить в одну обобщенную модель. С учетом (13) это будет:

$$\overline{w}_j = \beta_0 + \beta_1 x_j + \beta_2 y_j + \beta_{12} z_j + \overline{\varepsilon}_j, j = \\ = 1,2,3,....,N \qquad (15)$$

В этой формуле $z = xy$. Модель Журкова получается отсюда, когда отсутствует слагаемое с предиктором x.

Опытные данные о предикторах и об отклике обычно имеют различный физический смысл и различные размерности. Это вызывает вычислительные неудобства, поскольку приходится работать как с очень большими, так и с очень малыми числами, это влечет значительные вычислительные ошибки. Для уменьшения этого нежелательного эффекта предикторы и отклик кодируют. Кодированные переменные для обобщенной модели (15) имеют вид:

$$x_j^k = \frac{x_j - \overline{x}}{s_x}, y_j^k = \frac{y_j - \overline{y}}{s_y}, z_j^k = \frac{z_j - \overline{z}}{s_z}, w_j^k = \frac{w_j - \overline{\overline{w}}}{s_w} \qquad (16\text{ а})$$

$$\overline{x} = \frac{\sum_{j=1}^{N} \omega_j p_j x_j}{\sum_{j=1}^{N} \omega_j p_j}, \overline{y} = \frac{\sum_{j=1}^{N} \omega_j p_j y_j}{\sum_{j=1}^{N} \omega_j p_j}, \overline{z} = \frac{\sum_{j=1}^{N} \omega_j p_j z_j}{\sum_{j=1}^{N} \omega_j p_j}, \overline{\overline{w}} = \frac{\sum_{j=1}^{N} \omega_j p_j \overline{w}_j}{\sum_{j=1}^{N} \omega_j p_j} \qquad (16\text{ б})$$

$$s_x^2 = \sum_{j=1}^{N} \omega_j p_j (x_j - \overline{x})^2, s_y^2 = \sum_{j=1}^{N} \omega_j p_j (y_j - \overline{y})^2,$$

$$s_z^2 = \sum_{j=1}^{N} \omega_j p_j (z_j - \overline{z})^2, s_w^2 = \sum_{j=1}^{N} \omega_j p_j (\overline{w}_j - \overline{\overline{w}})^2 \qquad (16\text{ в})$$

В кодированных переменных регрессионная модель (15) принимает вид:

$$w_j^k = \alpha_1 x_j^k + \alpha_2 y_j^k + \alpha_3 z_j^k + \overline{\varepsilon}_j, j = 1,2,3,....,N \qquad (17)$$

В этой формуле кодированные коэффициенты регрессии $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ связаны с некодированными коэффициентами соотношениями:

$$\alpha_1 = \frac{s_x}{s_w}\beta_1,\ \alpha_2 = \frac{s_y}{s_w}\beta_2,\ \alpha_3 = \frac{s_z}{s_w}\beta_{12}, \tag{18}$$

В кодированной модели (18) отсутствует свободный член. Все переменные кодированной модели – безразмерные. Кодирование постулированной модели является необходимым предварительным этапом. В дальнейшем, если не оговорено специально противное, будем считать, что все данные кодированы, поэтому верхний индекс «к» будем опускать. Физические параметры долговечности связаны с регрессорами кодированной модели следующими формулами:

Модель Журкова:

$$\lg t_0 = \overline{\overline{w}} - \bar{y} - \frac{s_w}{s_y}\alpha_2 - \bar{z}\frac{s_w}{s_z}\alpha_3, U_0 = M^{-1}\frac{s_w}{s_y}\alpha_2,\ \gamma = -M^{-1}\frac{s_w}{s_z}\alpha_3 \tag{19 а}$$

Модель Регеля-Ратнера:

$$\lg t_0 = \overline{\overline{w}} - \bar{x}\frac{s_w}{s_x}\alpha_1 - \bar{y}\frac{s_w}{s_y}\alpha_2 - \bar{z}\frac{s_w}{s_z}\alpha_3 - \frac{s_w s_z}{s_x s_y}\frac{\alpha_1\alpha_2}{\alpha_3}, U_0 = M^{-1}\frac{s_w}{s_y}\alpha_2,$$

$$\gamma = -M^{-1}\frac{s_w}{s_z}\alpha_3, \frac{1}{kT_n} = -\frac{s_z}{s_x}\frac{\alpha_1}{\alpha_3} \tag{19 б}$$

3. В дальнейшем будет удобно представить все в матричном виде. С этой целью введем следующие векторы и матрицы: вектор наблюдений (матрица – столбец) размером $(N \times 1)$ $\vec{w}^T = (\overline{w}_1,....,\overline{w}_N)$, символ «т» означает операцию транспонирования; вектор наблюдений $\vec{w}$ состоит из кодированных значений измеренного отклика; вектор эмпирической регрессии $\hat{\vec{w}}^T = (\hat{w}_1,....,\hat{w}_N)$, состоящий из предсказанных по принятой модели значений отклика; вектор ошибок $\vec{\varepsilon}^T = (\overline{\varepsilon}_1,....,\overline{\varepsilon}_N)$, все это матрицы – столбцы размером $(N \times 1)$; вектор регрессоров $\vec{\alpha}^T = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ и вектор их статистических оценок $\hat{\vec{\alpha}} = (\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3)$ - это матрицы-столбцы размером (3×1). Наконец, введем матрицу F, размер которой для обобщенной модели и модели Регеля-Ратнера равен $(N \times 3)$, состоящую из кодированных значений предикторов во всех «экспериментальных» точках:

$$F = \begin{pmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_N & y_N & z_N \end{pmatrix} \tag{20}$$

Для модели Журкова в матрице плана отсутствует первый столбец. Взвешенная с весами $\omega_j p_j$ сумма элементов каждого столбца матрицы плана равна нулю, а взвешенная с тем же весом сумма их квадратов равна единице. Случайный вектор ошибок $\vec{\varepsilon}$ имеет нулевое математическое ожидание и диагональную дисперсионную матрицу

$$C(\vec{\varepsilon}) = \sigma^2 G^{-1} \tag{21}$$

В этой формуле G^{-1} - матрица, обратная к весовой матрице G (12), σ^2 - дисперсия воспроизводимости гомоскедактичных повторных измерений отклика $\lg\tau$ в «экспериментальных» точках.

Постулированная кодированная регрессионная модель (17) в матричном виде записывается так:

$$\vec{\eta} = F\vec{\alpha} \tag{22 а}$$

$$\vec{w} = F\vec{\alpha} + \vec{\varepsilon} \tag{22 б}$$

На основе экспериментальных данных по долговечности можно найти статистическую оценку вектора регрессоров $\hat{\vec{\alpha}}$. С помощью этой оценки вычисляется вектор эмпирической регрессии $\hat{\vec{w}}$, то есть предсказанные по модели значения отклика:

$$\hat{\vec{w}} = F\hat{\vec{a}} \qquad (23)$$

Формула (22 б) представляет собой систему линейных уравнений относительно вектора регрессоров $\vec{\alpha}$. Решая ее методом наименьших квадратов, получаем оценку:

$$\hat{\vec{a}} = B^{-1}F^{T}G\vec{w} \qquad (24)$$

В этой формуле матрица В размером (3×3) для модели Регеля-Ратнера и (2×2) для модели Журкова называется информационной матрицей и равна

$$B = F^{T}GF \qquad (25)$$

Компоненты вектора $\hat{\vec{\alpha}}$, определяемого формулой (24), являются статистическими оценками регрессоров кодированной модели. Так как в основе этих оценок лежат наблюдаемые значения отклика, содержащие случайную составляющую, то и сами оценки являются случайными величинами со своими статистическими свойствами. Если постулированная регрессионная модель адекватна экспериментальным данным, то оценки (24) не смещены, то есть

$$M[\hat{\vec{a}}] = \vec{a} \qquad (26)$$

Дисперсионная матрица вектора оценок $\hat{\vec{\alpha}}$ равна:

$$V(\hat{\vec{a}}) = \sigma^{2}B^{-1} \qquad (27)$$

Это симметричная квадратная матрица размером (3×3) для модели Регеля-Ратнера и (2×2) для модели Журкова. Ее диагональные элементы равны дисперсиям оценок регрессоров $\hat{\alpha}_i$, а внедиагональные элементы равны ковариациям оценок $\hat{\alpha}_i$. Отличие от нуля внедиагональных элементов свидетельствует о коррелированности оценок. Если постулированная регрессионная модель адекватна, то оценки $\hat{\alpha}_i$ помимо несмещенности еще эффективны и состоятельны.

Предсказываемые с помощью выбранной модели значения отклика определяют вектор эмпирической регрессии, определяемый формулой (23). Он является статистической оценкой вектора теоретической регрессии $\vec{\eta}$. Если модель адекватна, то оценка (23) – несмещенная, то есть:

$$M[\hat{\vec{w}}] = \vec{\eta} \qquad (28)$$

В формулу (27) входит неизвестная величина σ^2, появившаяся в формуле (9) и определяющая дисперсию воспроизводимости отдельных измерений долговечности. По экспериментальным данным можно построить две ее статистические оценки:

$$S_l^2 = \frac{1}{N_0 - N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{p_j}\omega_j(w_{ij} - \overline{w}_j)^2 \qquad (29\ а)$$

$$S_r^2 = \frac{1}{N - q}\sum_{j=1}^{N}\omega_j p_j(\overline{w}_j - \hat{w}_j)^2 \qquad (29\ б)$$

В этой формуле $q = 2$ для модели Журкова и $q = 3$ для модели Регеля-Ратнера. Выборочная дисперсия S_l^2 определяется отклонениями отдельных измеренных значений отклика от их среднего значения в каждой «экспериментальной» точке; она обусловлена только ошибками воспроизводимости измерений долговечности и не зависит от выбранной модели. Вторая выборочная дисперсия S_r^2 определяется отклонениями измеренных значений отклика в каждой экспериментальной точке от предсказанных по постулированной модели; она обусловлена выбранной моделью и называется остаточной дисперсией. Обе дисперсии вычисляются для кодированных данных. Выборочная дисперсия S_l^2 является несмещенной оценкой при условии, что регрессионная модель выбрана правильно, то есть адекватна экспериментальным данным. Процедура проверки модели на адекватность будет описана ниже. Если модель признана адекватной, то обе выборочные дисперсии S_l^2 и S_r^2 являются несмещенными оценками дисперсии σ^2. Тогда из них можно построить объединенную оценку:

$$S^2 = \frac{\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{p_j} \omega_j (w_{ij} - \widehat{w}_j)^2}{N - q} \qquad (30)$$

Заметим, что если измерения долговечности в каждой «экспериментальной» точке однократные, то есть без повторных измерений, то выборочная дисперсия S_l^2 не имеет смысла. В этом случае объединенная оценка (30) не существует и дисперсию σ^2 приходится оценивать лишь по S_r^2. Оценка дисперсии σ^2 по повторным измерениям более надежна, чем оценки, получаемые из любых других источников. Поэтому при планировании эксперимента необходимо стараться ставить эксперименты с повторениями. Найдя оценку дисперсии σ^2, можно по формуле (27) вычислить оценки дисперсий и ковариаций регрессоров и самой регрессии.

Проверка адекватности постулированной модели является важнейшим элементом регрессионного анализа. Постулированная регрессионная модель является адекватной, если предсказанный с ее помощью вектор эмпирической регрессии $\widehat{\widehat{w}}$ является несмещенной оценкой значений отклика, определяемых истинной моделью, то есть если выбранная модель – несмещенная оценка истинной. Обычно постепенно «настраивают» модель, каждый раз проверяя адекватность.

Проверка адекватности модели осуществляется путем сравнения двух выборочных дисперсий S_l^2 и S_r^2. Остаточная дисперсия S_r^2 образуется по двум причинам: а) влияние случайных ошибок воспроизводимости при измерениях отклика; б) влияние неадекватности модели. Неадекватность модели проявляется в смещенности оценок регрессоров и вектора эмпирической регрессии. В противоположность этому выборочная дисперсия воспроизводимости S_l^2 не зависит от вида модели и представляет «чистую» ошибку воспроизводимости. Если дисперсии S_l^2 и S_r^2 оказываются близки, то влияние неадекватности можно считать незначимым и признать модель адекватной. Если же S_r^2 значительно больше S_l^2, то влиянием неадекватности пренебречь нельзя и модель нужно пересмотреть.

Сравнение выборочных дисперсий S_l^2 и S_r^2 осуществляется с помощью критерия Фишера следующим образом. Составляется отношение:

$$F = \frac{S_r^2}{S_l^2} \qquad (31)$$

Статистика F имеет распределение Фишера со степенями свободы $\nu_r = N - q, \nu_l = N_0 - N$. Далее нужно задаться уровнем значимости γ и для этих чисел степеней свободы по таблицам распределения Фишера найти квантиль $F_T = F(1-\gamma, \nu_r, \nu_l)$. Затем вычисленное по формуле (31) наблюдаемое (то есть фактическое) значение статистики F сравнить с табличным F_T. Если $F_T < F$, то дисперсия S_r^2 значимо отличается от S_l^2 и модель неадекватна; если же $F < F_T$, то различие дисперсий незначимо и с надежностью $1-\gamma$ модель признается адекватной.

В качестве дополнительной меры, характеризующей качество выбранной модели регрессии, используется коэффициент множественной корреляции, а в отсутствие повторных измерений отклика этот коэффициент является единственным средством, позволяющим оценить пригодность модели. Коэффициент множественной корреляции определяет долю общего разброса экспериментальных значений отклика (логарифма долговечности), объясняемую выбранной моделью регрессии. Чем ближе этот коэффициент к своему предельному значению – единице, тем лучше выбранная модель описывает экспериментальные данные.

$$R^2 = \frac{Q_R}{Q} \qquad (32)$$

Сумма квадратов регрессии:

$$Q_R = \sum_{j=1}^{N} \omega_j p_j (\hat{w}_j - \overline{\overline{w}})^2 \qquad (33)$$

Она обусловлена отклонением предсказанных по модели значений отклика $\hat{w}_j$ от среднего значения по всем измерениям $\overline{\overline{w}}$ из-за регрессии, то есть зависимости отклика от выбранных предикторов (зависимости $\lg\tau$ от напряжения σ и температуры T).

Общая сумма квадратов равна:

$$Q = \sum_{j=1}^{N} \omega_j p_j (\overline{w}_j - \overline{\overline{w}})^2 \qquad (34)$$

Она определяет отклонение измеренного отклика $\overline{w}_j$ от общего среднего $\overline{\overline{w}}$, возникающее по двум причинам: во-первых, из-за влияния на результаты измерений изменения предикторов (напряжения и температуры), то есть из-за регрессии, и, во-вторых, из-за влияния случайных инструментальных ошибок измерений.

Необходимо выяснить, не является ли отличие R^2 от нуля следствием случайных возмущений, иначе говоря, необходимо выяснить значим ли этот коэффициент. Для этого вычисляем отношение:

$$F = \frac{R^2}{1 - R^2} \frac{N - q}{q} \qquad (35)$$

Далее сравниваем F с $F_T = F(1-\gamma, \nu_r, \nu_l)$ и, если $F_T < F$, то коэффициент множественной корреляции значим и значима регрессия, модель признается адекватной, если $F < F_T$, то модель признается неадекватной.

При ошибочной выборе модели типа (15) (17) возможны два случая: а) выбранная модель содержит меньше предикторов и регрессоров, чем действительная; б) модель содержит больше предикторов и регрессоров, чем действительная. В первом случае ошибочный выбор модели приводит к смещению всех оценок, то есть к неадекватности. Если, например, выбрана модель Журкова (3 а), в то время как для исследуемого полимера справедлива модель Регеля-Ратнера (4 а) со смещением полюса, то полученные по модели Журкова оценки физических параметров долговечности будут содержать систематическую ошибку смещения и приведут к неправильным выводам. Включение же в модель предикторов не искажает оценки коэффициентов регрессии действительной модели, но увеличивает дисперсию оценок, то есть снижает их эффективность. При сравнении двух случаев неправильного выбора регрессионной модели ясно, что первый из них приводит к более серьезным последствиям. Поэтому при выборе модели основное внимание должно быть направлено на недопущение модели с меньшим числом коэффициентов, чем требуется.

В некоторых случаях полезно проверить значимость полученных коэффициентов регрессии. Это особенно полезно в связи с проблемой выбора между двумя регрессионными моделями Журкова и Регеля-Ратнера. Модель Регеля-Ратнера в кодированном виде представлена формулой (17). Модель Журкова отличается тем, что в ней отсутствует слагаемое $\alpha_1 x$, характеризующее смещение полюса. Если оценка $\hat{\alpha}_1$ в модели Регеля-Ратнера получилась малой по абсолютной величине, то необходимо проверить, не отличается ли полученная оценка от нуля только за счет случайных возмущений, а в действительности коэффициент α_1 равен нулю. Если проверка покажет незначимость оценки $\hat{\alpha}_1$, то этот коэффициент можно изъять из модели, и тогда данные экспериментальные результаты описываются формулой Журкова. Если же будет установлена значимость оценки $\widehat{\alpha}_1$, то пренебрегать этим коэффициентом нельзя и тогда для исследуемого полимера смещение полюса – реальность.

Проверка коэффициента α_1 осуществляется с помощью статистики:

$$t = \frac{\widehat{\alpha}}{s_l\sqrt{c_{11}}} \tag{36}$$

В этой формуле c_{11} - первый элемент матрицы B^{-1}, обратной к информационной матрице B, а s_l - выборочная дисперсия воспроизводимости, согласно формуле (29 а). Статистика t имеет распределение Стьюдента с числом свободы, равным числу степеней свободы дисперсии S_l^2, то есть $v_S = N_0 - N$. Задаемся уровнем значимости γ и по таблицам распределения Стьюдента находим квантиль

$$t_T\left(1 - \frac{\gamma}{2}, v_{s_l}\right).$$

Если окажется, что вычисленное значении статистики (32) $\left|t_{iàáë.}\right| > t_T$, то коэффициент значим в модели, если же $\left|t_{iàáë.}\right| < t_T$, то α_1 незначим и с надежностью $1-\gamma$ его можно изъять. В этом случае модель Регеля-Ратнера превращается в модель Журкова и все расчеты нужно произвести заново.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Регель, В.Р. Кинетическая природа прочности твердых тел / В.Р. Регель, А.И. Слункер, Э.Е. Томашевский. - М.: Наука, 1974. - 450 с.
2. Ратнер, С.Б. Физическая механика пластмасс / С.Б. Ратнер, В.П. Ярцев - М.: Химия, 1992. - 320 с.
3. Валишин, А.А. Нелинейные эффекты в кинетике разрушения полимеров / А.А. Валишин, Э.М. Карташов // Проблема прочности. - 1993. - № 6. – С. 13-16.
4. Валишин, А.А. Применение математической статистики в исследованиях долговечной прочности полимеров / Валишин А.А., Карташов Э.М. // Высокомолекулярные соединения. – 1989. - Т. А 31. - С. 877-882.
5. Разрушение тонких полимерных пленок и волокон / Б. Цой [и др.] - М.: Химия, 1997. - 175 с.