Министерство сельского хозяйства
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Саратовский государственный аграрный университет имени Н.И. Вавилова»

Построение эксперимента

Краткий курс лекций
для бакалавров 4 курса

Направление подготовки
35.03.06 Агроинженерия

Профиль подготовки
Электрооборудование и электротехнологии

Саратов 2015 г.

УДК 621
ББК 24
Л99

Рецензенты:

Доктор химических наук, профессор кафедры «Инженерная физика, электрооборудование и электротехнологии»
ФГБОУ ВО «Саратовский ГАУ »
Г.П.Ерошенко
Кандидат технических наук, доцент кафедры «Инженерная физика, электрооборудование и электротехнологии»
ФГБОУ ВО «Саратовский ГАУ »
А.В. Волгин

Р99 **Построение эксперимента:** краткий курс лекций для студентов 3 курса направления подготовки 35.03.06 «Агроинженерия» / И.Ю.Лошкарев // ФГБОУ ВО «Саратовский ГАУ». – Саратов, 2015. – 137 с.
ISBN …

Краткий курс лекций по дисциплине «Построение эксперимента» составлен в соответствии с программой дисциплины и предназначен для студентов направления подготовки 35.03.06 «Агроинженерия». Краткий курс лекций содержит теоретический материал по основным вопросам планирования и обработки эксперимента.

УДК 621
ББК 24

ISBN …

Введение.

Получение научного знания является длительным и сложным процессом. Инициирующим началом обычно служит производственная или общественная заинтересованность, либо любознательность в отношении какого-либо объекта или явления. Если интерес к ним сохраняется, то наблюдений оказывается недостаточно и тогда начинается путь научного познания. В этом случае требуется зафиксировать проблемную ситуацию, выделить проблему, составить гипотезу, разработать теорию и т.д. Научное знание признается достоверным, когда теоретические положения подтверждаются экспериментально и, как правило, в независимых лабораториях. Даже этот краткий перечень позволяет сделать вывод, что критерием правильности научных знаний служит эксперимент.

В технических науках теоретические знания проверяются инженерным экспериментом. Организовать и провести такой эксперимент, задача очень сложная, учитывая этот факт, в физике усиленно развивается два направления: теоретическая физика и экспериментальная физика. В других теоретических науках такого деления нет, но в структуре исследования строго выделяется стадия эксперимента, без которой никакое исследование не признается завершенным.

Лекция 1

Построение эксперимента

Классификация экспериментов

Инженерный эксперимент – это метод познания, при котором исследуется объект (процесс) в контролируемых и управляемых условиях. Цель эксперимента – проверить правильность гипотез или предсказаний теорий. В связи с этим эксперимент, как одна из форм практики, выполняет функцию критерия истинности научного знания.

Экспериментальные исследования имеют широкое и разнообразное применение. Их краткая классификация имеет следующее содержание.

1. По объекту изучения:

1.1 инженерный;

1.2 социальный.

Первые из них изучают технические системы, а вторые общественные.

2. По целевой направленности:

2.1 качественный или поисковый;

2.2 измерительный;

2.3 мысленный.

Качественный эксперимент ставит цель - установить есть или нет предполагаемые теорией явления. Такую же цель имеют поисковые эксперименты, которые позволяют проверить правильность выдвигаемых гипотез.

Измерительный (инженерный) эксперимент имеет целью, установить количественную определенность свойства объекта или количественные характеристики явления. Полученные здесь результаты сопоставляются с теоретическими выводами, и делается вывод об истинности научного знания.

Мысленный эксперимент обычно применяют в фундаментальных исследованиях. Он представляет собой систему мысленных, практически не осуществимых процедур, проводимых над идеальными объектами. В конечном итоге он позволяет проверить согласованность принципов рассматриваемых теориях.

3. По форме организации эксперимента могут быть:

3.1 пассивные

3.2 активные

Пассивный инженерный эксперимент предполагает изучение явлений во всем диапазоне изучаемых факторов. Устанавливают наибольшее и наименьшее значения факторов и затем выбирают шаг его измерения, так чтобы было не меньше пяти значений фактора. Для каждого значения проводят опыт и записывают все изучаемые величины. По результатам опытов обычно строят графические изображение результатов, которые дают наглядное представление о ходе изучаемого явления (линейные, нелинейные, экстремальные и т.д.).

Активный эксперимент предполагает изучение явлений во всем диапазоне факторов, но не плавно, а лишь в актуальных точках (минимум, середина, максимум). Кроме того находят промежуточные значения, которые определяются расчетным путем, чтобы получить аналитическое описание функции отклика. Такая организация эксперимента имеет много преимуществ и широко применяется в инженерной практике.

И наконец, к особому типу относится эксперимент, проводимый по программе испытаний. Они проводятся для новых образцов техники (контрольные испытания), для серийно выпускаемых массовых изделий (типовые выборочные испытания), для контроля состояния эксплуатируемых объектов, для прогнозирования состояния техники и т.п.

Большая часть техники создается по традиционной схеме: научная разработка, конструкторская разработка, изготовление опытных образцов и серийное производство. Но отдельные виды техники, в первую очередь сельскохозяйственные, эксплуатируются в специфических условиях. Поэтому для них производят эксперименты в лабораторных и в полевых условиях. Последние эксперименты иногда называют производственной проверкой техники или всей системой её эксплуатации.

Программа и методика эксперимента

В специализированных научных учреждениях экспериментальные исследования выполняют, как правило, выделенные подразделения. В них отработано рациональные распределения и организация работ исполнителей, которое гарантирует проведение экспериментов в соответствии с нормативными требованиями.

В работе соискателей (магистров, аспирантов, докторантов) экспериментальные исследования встречают много затруднений. Они должны самостоятельно не только выполнить теоретические исследования, но и организовать эффективный эксперимент. Для этого необходимо уметь подготовиться к нему, создать экспериментальную установку, провести опыты и обработать полученные результаты.

Программы эксперимента – это документ исследования, в котором содержатся:

1. цель практических работ, т.е. какой результат необходимо получить;
2. объект изучения или описание экспериментальной установки;
3. особые требования к эксперименту.

Программа сопровождается перечнем необходимого оборудования и калькуляцией затрат.

Цель должна содержать не только перечень ожидаемых результатов, но и требования к их точности. К форме оформления результатов (табличные или графические данные).

Объект изучения вытекает из предшествующего теоретического исследования, но на практике он может отличаться, в связи с необходимостью придать объекту теоретического изучения конструктивное оформление. Обычно в программе приводят описание экспериментальной установки, её электрическую, кинематическую, конструктивную и другие схемы. Такого рода установкам уделяют особое внимание техническим параметрам: мощность, частота вращения, диапазон развиваемых усилий, диапазон скоростей и т.п.

Особые требования отражают те условия, которые гарантируют получение достоверного результата (температура, влажность и т.п.). В качестве примера приведем фрагменты программы экспериментального изучения надёжности изделий:

1. установить признак отказа объекта. Например, для электродвигателя – перегорание обмотки или заклинивание ротора и т.п.;

2. выбрать определяющий показатель надежности – вероятность безотказной работы или интенсивность отказов, или другие;

3. указать условия испытаний по режимам работы, окружающей среды и т.п.;

4. установить способ контроля работоспособности: обычный, непрерывный, периодический;

5. определить количество изучаемых объектов N;

6. выбрать способ замены отказавшего оборудования: U – не заменяются; R – заменяются немедленно; M – восстанавливаются в ходе испытаний;

7. выбрать правило окончания испытаний: T – после истечения заданного времени; T_{Σ} – после заданной наработки и др. по ГОСТ 27.002-83.

План испытаний на надежность обозначают: [NUT], [NUR], [NRT] и т.д.

Первая - позиция обозначает объём выборки, вторая – способ замены отказавших объектов, третья – правило окончания эксперимента.

Составление программы эксперимента – это многоэтажный процесс. Вначале она содержит полные требования – «идеализированная программа». Затем выясняют имеющиеся возможности и ресурсы. Если их недостаточно, то составляют второй вариант программы и определяют необходимое дополнительное финансирование. Когда получают сведения о выделенных ресурсах – составляют третий вариант программы и т.д.

Программа содержит ссылки на методики исследования или их текстов в виде приложения.

Методика экспериментального исследования – это подробное описание, в какой последовательности действовать и какие средства (приёмы) применять, чтобы получить требуемые результаты. В методику входят схемы проведенных опытов, таблицы для записи результатов, характеристики приборов и оборудования, повторность опытов и т.д.

Различают общие и частные методики. В общей методике дается краткое обоснование выбора необходимого метода исследования и его описание. Приводятся положения, которые надо выполнять при экспериментальном исследовании.

В частной методике четко и подробно излагают, какие показатели и параметры измеряют, и какими способами их измеряют. Здесь же описывают экспериментальную установку, испытываемые изделия или процессы, применяемую аппаратуру или приборы. Приводят схемы опытов, число повторностей измерений опытов и измерений. Устанавливают последовательность опытов, точность измерений и способы обработки опытных данных.

Активное планирование эксперимента. Сущность активного планирования

При теоретическом и экспериментальном исследовании часто используют понятие «чёрный ящик». «Чёрный ящик» представляет собой обобщенную модель изучаемого объекта или явления. Это достигается за счет использования понятий факторов и процесса. Любой объект представляется схемой, показанной на рис. 1.

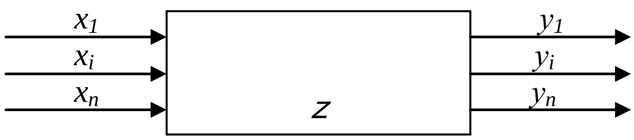


Рисунок 1 «Чёрный ящик»

Он содержит входящие факторы x выходные факторы y и факторы процесса z. Полагают, что содержание или количественное описание функционирования процесса неизвестно. Исследование выполняют путём изучения зависимости выходных факторов от входных $y=f(x)$. Например, при изучении электрического генератора в качестве выходного фактора можно принять напряжение на его зажимах U, а входным – ток возбуждения $I_в$. Тогда модель отображает зависимость $U=f(I_в)$, т.е. регулировочную характеристику.

Обычно число изучаемых факторов значительно больше единицы. В рассматриваемом примере выходными факторами могут быть: мощность, отдаваемая в сеть; стабильность напряжения; температура нагрева обмотки и т.д. А входными факторами: частота вращения; тип генератора и т.д.

Теоретические исследования по методу «чёрного ящика» выполняют разнообразными способами. В итоге получают теоретическую зависимость $y=f(x)$ в общем виде или при каких либо ограничениях. Чтобы проверить истинность теоретических знаний их надо проверить экспериментально. Такой опыт можно провести традиционным путём или способом активного планирования эксперимента.

Традиционный эксперимент предполагает создание экспериментальной установки, выбор изучаемых выходных и входных факторов, разработка схемы и проведение испытаний. В рассмотренным ранее примере выходным фактом служит напряжение, а входным – ток возбуждения. Затем фиксируют независимые факторы или ограничения: частота вращения, электрическая нагрузка и т.д. После этого запускают экспериментальную установку, обеспечивают соблюдение ограничений и изменяют ток возбуждения от $0{,}2I_{вн}$ до $1{,}2I_{вн}$, где $I_{вн}$ – номинальный ток возбуждения. При этом записывают значения напряжения генератора и получают опытную зависимость $U=f(I_в)$. Такую зависимость повторяют для разных значений тока нагрузки, для разных значений частоты вращения и т.д. В результате получают семейство функций (см. рис.2).

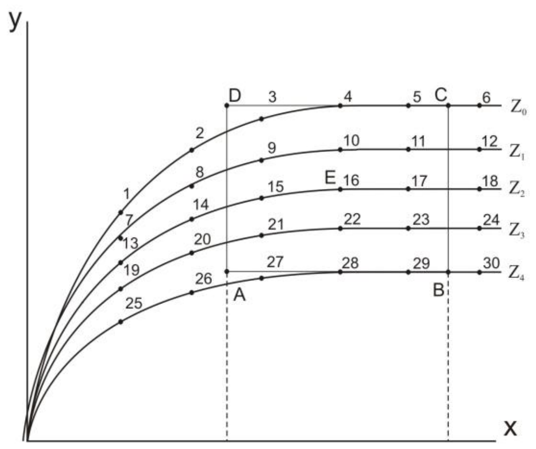


Рисунок 2. Фрагмент результатов традиционного и факторного эксперимента.

На такой эксперимент затрачивается много времени и средств, а если ещё требуется учитывать конструктивные варианты генератора или нагрузки, эксперимент становится дорогостоящим.

Для рассматриваемого примера (рисунок 2) требуется провести 30 опытов, которые в совокупности оценивают характеристики генератора при разных нагрузках и различных типах возбуждения.

В тех случаях, когда на объект действует большое число факторов, когда входные воздействия многообразны и необходимо знать результаты этих воздействий на выходные параметры, а также реакцию всего объекта на них, используют факторный эксперимент. Математическая теория такого эксперимента позволяет не только сохранить ресурсы на проведение опытов, но и расширить круг информации, получаемой при испытании.

Строго доказано, что в рассматриваемом примере для получения необходимой информации не обязательно проводить 30 опытов, а достаточно выполнить всего 5 измерений: для двух значений ток возбуждения (А и В) и двух значений тока нагрузки (Z_0 и Z_4) а также в центре (Е). полученные при этом результаты A,B,C,D,E позволяют построить функцию отклика вида

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^{n} b_i x_i + \sum_{i=1}^{n} b_{ij} x_i x_j \ , \qquad (1)$$

где b_0 – свободный член; n – число факторов; b_i – коэффициент регрессии факторов; $x_i x_j$ – значения факторов; b_{ij} – коэффициент регрессии факторов двойного взаимодействия.

Уравнение (1) описывает поведение изучаемой системы, даёт туже информацию, что и 30 опытов, кроме того получается аналитическое описание результатов и удается оценить точность и достоверность данных.

Планирование эксперимента осуществляют в следующей последовательности:

1. устанавливают цель эксперимента, другими словами определяют отклик эксперимента (функцию отклика);
2. выявляют главные факторы, которые влияют на ожидаемый результат;
3. определяют диапазон измерения факторов;
4. разрабатывают экспериментальную установку;
5. кодируют изменяемые факторы: выделяют наибольшее значение и называют верхнем уровнем, обозначая (+1); выделяют наименьшее значение и называют нижнем уровнем, обозначая (–1). Такие значения называют кодированными переменными;
6. варьируют по специальному алгоритму сразу несколькими, а не одним фактором, что сокращает объем эксперимента;
7. составляют матрицу планирования эксперимента (см. таблицу 1).

Таблица 1 - Матрица планирования

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	Вектор выхода			Среднее значение
					y_1	y_2	y_3	
1	+	–	–	+	$y_{1,1}$	$y_{1,2}$	$y_{1,3}$	$y_{ср1}$
2	+	+	–	–	$y_{2,1}$	$y_{2,2}$	$y_{2,3}$	$y_{ср2}$
3	+	–	+	–	$y_{3,1}$	$y_{3,2}$	$y_{3,3}$	$y_{ср3}$
4	+	+	+	+	$y_{4,1}$	$y_{4,2}$	$y_{4,3}$	$y_{ср4}$

8. результаты обрабатывают по специальным формулам и получают искомое уравнение (1);

9. проверяют значимость коэффициентов регрессии b_{ij} по критерию Стьюдента, сравнивая фактическое значение с табличным значением;

10. однородность опытов, которая характеризует соотношение ошибок и случайных помех, проверяют по критерию Кохрена, это позволяет проверить адекватность модели;

11. при необходимости изменяют алгоритм и осуществляют оптимальную функцию отклика.

Если число факторов больше двух, то планируют и проводят 3-х факторный, или 4-х факторный эксперименты. Когда значения факторов устанавливают на предельных уровнях – то это полный факторный эксперимент. Его условно обозначают 2^2, т.е два уровня планирования для двух факторов. Если производится планирование на *m* уровнях для *n* факторов, то полный факторный эксперимент, исчерпывающий все возможные сочетания факторов, обозначается m^n.

Вопросы

1. Сущность активного планирования?
2. Методика эксперимента?

Список литературы

1. **Трифонова, М.Ф., Заика, П.М., Устюжанин, А.П.** Основы научных исследований / М.Ф. Трифонова, П.М. Заика, А.П. Устюжанин. – М.: «Колос», 1993. – 239 с.

2. **Ерошенко, Г.П., Березнев, Ю.И.** Решение инженерных задач в условиях неопределенности / Г.П. Ерошенко, Ю.И. Березнев. – Саратов, СГАУ, 2004. – 162 с.

3. **Короткова, Е.И.** Практикум по планированию экспериментов / Е.И. Короткова. – Томск: Изд-во ТПУ, 2003. – 97 с.

Лекция № 2

Обработка результатов эксперимента. Погрешности измерений

Под измерением понимается сравнение измеряемой величины с другой величиной, принятой за единицу измерения. Различают прямые и косвенные измерения.

При прямых измерениях определяемая величина сравнивается с единицей измерения непосредственно или при помощи прибора. Это измерение длины линейкой, массы на рычажных весах, промежутков времени при помощи часов и т.п.

Косвенные измерения предполагают дополнительные расчеты прямых результатов через формулы, которые связаны с измеряемой величиной функциональной зависимости. Это, например, измерение скорости движения по результатам измерения длины пройденного пути и промежутка времени и т.п.

Погрешности результата измерений определяются как разность между измеренной и истинной величиной. Погрешности разделяют на две группы: систематические и случайные.

Систематические погрешности – погрешности, связанные с ограниченной точностью прибора или неправильным выбором метода измерений. Обычно эти ошибки поддаются изучению и их можно учесть.

Случайные погрешности – погрешности, обусловлены большим числом случайных факторов и их нельзя заранее учесть, их приходится учитывать при оценки полученных результатов эксперимента. Следует заметить, что понятие погрешность при измерение более полное, чем точность.

Допустим, что произведено прямое измерение величины, истинное значение которого известно – a. Обозначим через a_i результат измерения. Тогда абсолютная погрешность равна:

$$\Delta a_i = a - a_i, \tag{2}$$

где a – относительная величина:

$$\Delta^* = \pm \frac{\Delta a_i}{a} \text{ или } \Delta^* = \pm \frac{\Delta a_i}{100}, \% \qquad (3)$$

Известно, что при большом числе измерений случайные погрешности одинаковой величины, но разного знака компенсируются. Большие погрешности встречаются реже, чем малые, т.е. вероятность появления погрешностей уменьшается с ростом величины погрешности. Поэтому при эксперименте проводят несколько измерений и вычисляют среднеарифметическую величину результата:

$$\bar{a} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} a_i . \qquad (4)$$

Во многих исследованиях результат состоит из нескольких качественно различных измерений – аргументов, каждое из которых дает какую-то погрешность. В этом случае погрешность опыта оценивают на основании вычисления предельной (наибольшей) погрешности. При этом используют следующие правила:

1. ошибка суммы заключена между наибольшей и наименьшей из относительных ошибок слагаемых; практически берут или наибольшую относительную ошибку или среднюю арифметическую.

2. ошибка произведения или частного от деления равна сумме относительных ошибок сомножителей или соответственно делимого и частного.

3. ошибка *n*-й степени какого-либо основания в *n* раз больше относительной ошибки основания.

Рассмотрим известный пример вычисления предельной ошибки при определении производительности агрегата. Теоретически формула имеет вид:

$$W_{см} = 0{,}1 B \nu T_p = 0{,}1 B \frac{S}{T_s} T_p , \qquad (5)$$

где B – захват агрегата, м; ν – скорость, км/ч; S – путь, км; T_s – время измерения, ч; T_p – чистое рабочее время за смену, ч.

В этой формуле есть умножения и деление измеряемых величин, поэтому в соответствии с п.2 правил вычисления предельных ошибок имеем:

$$\frac{\Delta n(W_{см})}{W_{см}} = \pm \frac{\Delta n(B)}{B} + \frac{\Delta n(S)}{S} + \frac{\Delta n(T_s)}{T_s} + \frac{\Delta n(T_p)}{T_p}. \qquad (6)$$

Предельные ошибки определяют для каждого прибора, используемого в опыте. Так, для определения ширины захвата агрегата B использовалась стальная 20-ти метровая линейка ($\Delta_1 = \Delta_n(B)/B = 0{,}25$); для определения пути S применялась также линейка ($\Delta_2 = 0{,}25$); время T_s и T_p определялось с помощью стандартного секундомера ($\Delta_3 = \Delta_4 = 0{,}55$).

Подставляя в формулу (6) значения $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3, \Delta_4$, получим

$$\frac{\Delta n(W_{см})}{W_{см}} = \pm(0{,}25 + 0{,}25 + 0{,}55 + 0{,}55) = \pm 1{,}6\%. \qquad (7)$$

Из изложенного следует: для того чтобы правильно подобрать аппаратуру, необходимо провести сравнительную оценку точности различных способов измерения.

Кроме предельной ошибки вычисляют статическую ошибку неоднократных измерений. Эту ошибку устанавливают на основании методов математической статистики и теории ошибок.

Вопросы для самоконтроля

1. Назначение эксперимента.
2. Классификация экспериментов.
3. Экспериментальная установка.
4. Методика эксперимента.
5. Активное планирование эксперимента.
6. Полный факторный эксперимент.
7. Обработка результатов наблюдений.

Список литературы:

1. **Трифонова, М.Ф., Заика, П.М., Устюжанин, А.П.** Основы научных исследований / М.Ф. Трифонова, П.М. Заика, А.П. Устюжанин. – М.: «Колос», 1993. – 239 с.

2. **Ерошенко, Г.П., Березнев, Ю.И.** Решение инженерных задач в условиях неопределенности / Г.П. Ерошенко, Ю.И. Березнев. – Саратов, СГАУ, 2004. – 162 с.

3. **Короткова, Е.И.** Практикум по планированию экспериментов / Е.И. Короткова. – Томск: Изд-во ТПУ, 2003. – 97 с.

Лекция №3

Выбор отклика или параметра оптимизации

Классификация параметров оптимизации:

1.Экономические

2.Технические

3.Технологические

4.Прочие

Экономические:

1) Прибыль
2) Рентабельность
3) Себестоимость
4) Затраты на эксперимент

и пр.

Технико-экономические:

1) Стабильность
2) Производительность
3) Надежность
4) Коэффициент полезного действия

и пр.

Технологические:

1) Продуктивность
2) Урожайность
3) Показатели биологического развития
4) Биологические характеристики продукта
5) Физико-химические характеристики продукта

и пр.

Прочие:

1) Психологические

2) Эстетические

3) Социальные

и пр.

Реальные ситуации, как правило, сложны. Они часто требуют одновременного учета нескольких, иногда очень многих, параметров.

Движение к оптимуму возможно, если выбран один единственный параметр оптимизации. Тогда прочие характеристики процесса уже не выступают в качестве параметров оптимизации, а служат ограничениями.

Другой путь – построение обобщенного параметра оптимизации как некоторой функции от множества исходных.

Требования к параметру оптимизации

1. Должен быть количественным, т.е. измеряться числом при любой возможной комбинации выбранных уровней факторов.

Множество значений, которые может принимать параметр оптимизации, будем называть областью его определения.

Области определения могут быть непрерывными и дискретными, ограниченными и неограниченными. Он может изменяться в интервале от 0 до 100%. Число бракованных изделий, число зерен на шлифе сплава, число кровяных телец в пробе крови – вот примеры параметров с дискретной областью определения, ограниченной снизу

2. Наличие доступного метрологического оборудования для измерения.

3. Параметр оптимизации должен выражаться одним числом.

4. Однозначность в статистическом смысле. Заданному набору значений факторов должно соответствовать одно с точностью до ошибки эксперимента значение параметра оптимизации. Если точность недостаточна, тогда приходится обращаться к увеличению числа повторных опытов.

5. Для успешного достижения цели исследования необходимо, чтобы параметр оптимизации действительно оценивал эффективность

функционирования системы в заранее выбранном смысле. Это требование является главным, определяющим корректность постановки задачи.

6. **Параметр оптимизации** должен иметь **физический смысл**, быть простым и **легко вычисляемым**. Требование физического смысла связано с последующей интерпретацией результатов эксперимента. Не представляет труда объяснить, что значит максимум извлечения, максимум содержания ценного компонента. Эти и подобные им технологические параметры оптимизации имеют ясный физический смысл, но иногда для них может не выполняться, например, требование статистической эффективности. Тогда рекомендуется переходить к преобразованию параметра оптимизации.

Факторы

После того как выбран объект исследования и параметр оптимизации, нужно включить в рассмотрение все существенные факторы, которые могут влиять на процесс. Если какой-либо существенный фактор окажется неучтенным, то это может привести к неприятным последствиям.

Так, если неучтенный фактор произвольно принимал случайные значения, которые экспериментатор не контролировал, – это значительно увеличит ошибку опыта. При поддержании фактора на некотором фиксированном уровне может быть получено ложное представление об оптимуме, так как нет гарантии, что фиксированный уровень является оптимальным.

Фактором называется измеряемая переменная величина, принимающая в некоторый момент времени определенное значение. **Факторы** соответствуют способам воздействия на объект исследования.

Область определения может быть непрерывной или дискретной. При планировании эксперимента всегда используются дискретные области определения или множество уровней.

В практических задачах области определения факторов, как правило, ограничены. Ограничения могут носить принципиальный либо технический характер.
Факторы разделяются на количественные и качественные.

Требования, предъявляемые к факторам при планировании эксперимента

1. Факторы должны быть управляемыми. Планировать эксперимент можно только в том случае, если уровни факторов подчиняются воле экспериментатора.
2. Факторы должны иметь высокую точность измерения.
3. Факторы должны быть непосредственными воздействиями на объект.

Требования к совокупности факторов

1. Совместимость.
2. Независимость факторов, т. е. возможность установления фактора на любом уровне вне зависимости от уровней других факторов.

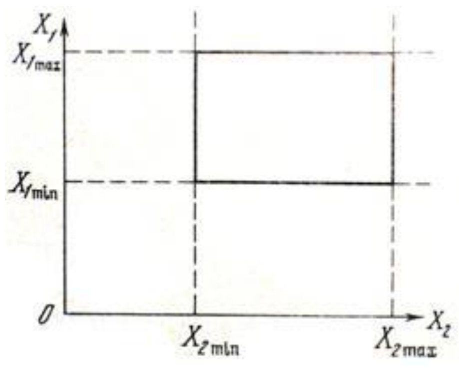
Выбор модели

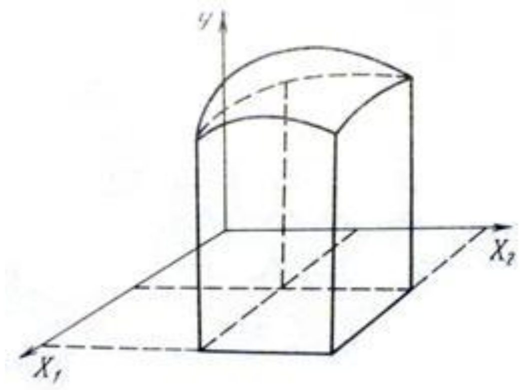
Под моделью мы понимаем функцию отклика

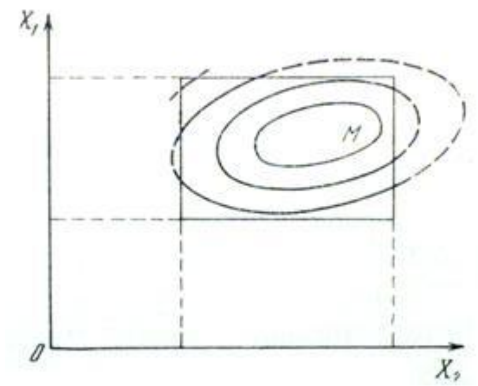
$$y = \varphi(x_1, x_2, \ldots, x_k)$$

Выбрать модель – значит выбрать вид этой функции, записать ее уравнение. Тогда останется спланировать и провести эксперимент для оценки численных значений констант (коэффициентов) этого уравнения.

Тогда каждому состоянию «ящика» будет соответствовать точка на плоскости.







Полиномиальные модели

Наиболее распространены для представления функции отклика полиномы разных степеней

Выбор степени полинома основывается на компромиссе:

Надо найти такой полином, который содержит как можно меньше коэффициентов, но удовлетворяет требованиям, предъявленным к модели. Чем ниже степень полинома при заданном числе факторов, тем меньше в нем коэффициентов.

Наиболее целесообразным в большинстве случаев является использование полинома второй степени.

Вопросы:

1. Требования к параметрам оптимизации?
2. Требования к факторам при планировании эксперимента?

Список литературы:

1. **Трифонова, М.Ф., Заика, П.М., Устюжанин, А.П.** Основы научных исследований / М.Ф. Трифонова, П.М. Заика, А.П. Устюжанин. – М.: «Колос», 1993. – 239 с.

2. **Ерошенко, Г.П., Березнев, Ю.И.** Решение инженерных задач в условиях неопределенности / Г.П. Ерошенко, Ю.И. Березнев. – Саратов, СГАУ, 2004. – 162 с.

3. **Короткова, Е.И.** Практикум по планированию экспериментов / Е.И. Короткова. – Томск: Изд-во ТПУ, 2003. – 97 с.

Лекция № 4

Полный факторный эксперимент

Планом эксперимента называется таблица, в которой перечислены значения всех факторов в каждом из опытов.

Каждый столбец этой таблицы представляет отдельный фактор,

Каждая строка – отдельный опыт.

При описательном эксперименте чаще всего используется **полный факторный эксперимент**

Полный факторный эксперимент использует все возможные сочетания уровней факторов.

Если число уровней для всех факторов одинаково, что является наиболее распространенным случаем, то необходимое число опытов определяется:

$$N = m^k$$

где N – число опытов;

m – число уровней по каждому фактору;

k – число факторов.

План эксперимента составляется при соблюдении двух условий:

1) Не одна из комбинаций уровней не должна повторятся;
2) В план должны быть включены все возможные комбинации уровней.

При выборе области эксперимента должны учитываться следующие соображения. Прежде всего, надо оценить границы областей определения факторов. При этом должны учитываться ограничения нескольких типов.

Первый тип: принципиальные ограничения для значений факторов, которые не могут быть нарушены ни при каких обстоятельствах. Например, если фактор – температура, то нижним пределом будет абсолютный нуль.

Второй тип – ограничения, связанные с технико-экономическими соображениями, например, со стоимостью сырья, дефицитностью отдельных компонентов, временем ведения процесса.

Третий тип ограничений, с которым чаще всего приходится иметь дело, определяется конкретными условиями проведения процесса, например, существующей аппаратурой, технологией, организацией. В реакторе, изготовленном из некоторого материала, температуру нельзя поднять выше температуры плавления этого материала или выше рабочей температуры данного катализатора.

Оптимизация обычно начинается в условиях, когда объект уже подвергался некоторым исследованиям. Информацию, содержащуюся в результатах предыдущих исследований, будем называть априорной (т.е. полученной до начала эксперимента). Мы можем использовать априорную информацию для получения представления о параметре оптимизации, о факторах, о наилучших условиях ведения процесса и характере поверхности отклика, т.е. о том, как сильно меняется параметр оптимизации при небольших изменениях значений факторов, а также о кривизне поверхности. Для этого можно использовать графики (или таблицы) однофакторных экспериментов, осуществлявшихся в предыдущих исследованиях или описанных в литературе. Если однофакторную зависимость нельзя представить линейным уравнением (в рассматриваемой области), то в многомерном случае, несомненно, будет существенная кривизна. Обратное утверждение, к сожалению, не очевидно.

Итак, выбор экспериментальной области факторного пространства связан с тщательным анализом априорной информации.

Выбор основного уровня

Наилучшим условиям, определенным из анализа априорной информации, соответствует комбинация (или несколько комбинаций) уровней факторов. Каждая комбинация является многомерной точкой в факторном пространстве. Ее можно рассматривать как исходную точку для построения плана эксперимента. Назовем ее основным (нулевым) уровнем. Построение плана эксперимента сводится к выбору экспериментальных точек, симметричных относительно нулевого уровня.

В разных случаях мы располагаем различными сведениями об области наилучших условий. Если имеются сведения о координатах одной наилучшей точки и нет информации о границах определения факторов, то остается рассматривать эту точку в качестве основного уровня. Аналогичное решение принимается, если границы известны и наилучшие условия лежат внутри области.

Положение усложняется, если эта точка лежит на границе (или весьма близко к границе) области. Тогда приходится основной уровень выбирать с некоторым сдвигом от наилучших условий.

Может случиться, что координаты наилучшей точки неизвестны, но есть сведения о некоторой подобласти, в которой процесс идет достаточно хорошо. Тогда основной уровень выбирается либо в центре, либо в случайной точке этой подобласти. Сведения о подобласти можно получить, анализируя изученные ранее подобные процессы, из теоретических соображений или из предыдущего эксперимента.

Наконец, возможен случай с несколькими эквивалентными точками, координаты которых различны. Когда отсутствуют дополнительные данные (технологического, экономического характера и т.д.), выбор произволен. Конечно, если эксперимент недорог и требует немного времени, можно приступить к построению планов экспериментов вокруг нескольких точек.

Резюмируем наши рассуждения о принятии решений при выборе основного уровня в виде блок-схемы

Рисунок 2

После того как нулевой уровень выбран, переходим к следующему шагу – выбору интервалов варьирования.

Выбор интервалов варьирования.

Теперь наша цель состоит в том, чтобы для каждого фактора выбрать два уровня, на которых он будет варьироваться в эксперименте.

Интервалом варьирования факторов называется некоторое число (свое для каждого фактора), прибавление которого к основному уровню дает верхний, а вычитание – нижний уровни фактора. Другими словами, интервал варьирования – это расстояние на координатной оси между основным и верхним (или нижним) уровнем. Таким образом, задача выбора уровней сводится к более простой задаче выбора интервала варьирования.

Заметим еще, что для упрощения записи условий эксперимента и обработки экспериментальных данных масштабы по осям выбираются так, чтобы верхний уровень соответствовал +1, нижний –1, а основной – нулю. Для факторов с непрерывной областью определения это всегда можно сделать с помощью преобразования

$$x_j = \frac{\tilde{x}_j - \tilde{x}_{j0}}{J_j},$$

где

x_j – кодированное значение фактора;

$\tilde{x}_j$ – натуральное значение фактора;

$\tilde{x}_{j0}$ – натуральное значение основного уровня;

J_j – интервал варьирования;

j – номер фактора.

Для качественных факторов, имеющих два уровня, один уровень обозначается +1, а другой –1; порядок уровней не имеет значения.

На выбор интервалов варьирования накладываются естественные ограничения сверху и снизу. Интервал варьирования не может быть меньше той ошибки, с которой экспериментатор фиксирует уровень фактора. Иначе верхний и нижний уровни окажутся неразличимыми. С другой стороны, интервал не может быть настолько большим, чтобы верхний или нижний уровни оказались за пределами области определения. Внутри этих ограничений обычно еще остается значительная неопределенность выбора, которая устраняется с помощью интуитивных решений.

Обратите внимание, что при решении задачи оптимизации мы стремимся выбрать для первой серии экспериментов такую подобласть, которая давала бы возможность для шагового движения к оптимуму. В задачах же интерполяции интервал варьирования охватывает всю описываемую область.

Выбор интервалов варьирования – задача трудная, так как она связана с неформализованным этапом планирования эксперимента. Возникает вопрос, какая априорная информация может быть полезна на данном этапе? Это – сведения о точности, с которой экспериментатор фиксирует значения факторов, о кривизне поверхности отклика и о диапазоне изменения параметра оптимизации. Обычно эта информация является ориентировочной (в некоторых случаях она может оказаться просто ошибочной), но это единственная разумная основа, на которой можно начинать планировать эксперимент. В ходе эксперимента ее часто приходится корректировать.

Точность фиксирования факторов определяется точностью приборов и стабильностью уровня в ходе опыта. Для упрощения схемы принятия решений мы введем приближенную классификацию, полагая, что есть низкая, средняя и высокая точности. Можно, например, считать, что поддержание температуры в реакторе с погрешностью не более 1% соответствует высокой, не более 5% – средней, а более 10% – низкой точности.

Источником сведений о кривизне поверхности отклика могут служить уже упоминавшиеся графики однофакторных зависимостей, а также теоретические соображения. Из графиков сведения о кривизне можно получить визуально. Некоторое представление о кривизне дает анализ табличных данных, так как наличию кривизны соответствует непропорциональное изменение параметра оптимизации при равномерном изменении фактора. Мы будем различать три случая: функция отклика линейна, функция отклика существенно нелинейна и информация о кривизне отсутствует.

Наконец, полезно знать, в каких диапазонах меняются значения параметра оптимизации в разных точках факторного пространства. Если имеются результаты некоторого множества опытов, то всегда можно найти наибольшее или наименьшее значения параметра оптимизации. Разность менаду этими значениями будем называть диапазоном изменения параметра оптимизации для данного множества опытов. Условимся различать широкий и узкий диапазоны. Диапазон будет узким, если он не существенно отличается от разброса значений параметра оптимизации в повторных опытах (этот разброс определяет ошибку опыта). В противном случае будем считать диапазон широким. Учтем также случай, когда информация отсутствует. Итак, для принятия решений используется априорная информация о точности фиксирования факторов, кривизне поверхности отклика и диапазоне изменения параметра оптимизации. Каждое сочетание градаций перечисленных признаков определяет ситуацию, в которой нужно принимать решение. При принятых градациях возможно $3^3 = 27$ различных ситуаций. Они представлены на рис. 3, 4, 5 в виде кружочков, цифры в которых соответствуют порядковым номерам ситуаций.

Теперь мы приблизились к принятию решения о выборе интервалов варьирования. Для интервалов также введем градацию. Будем рассматривать широкий, средний и узкий интервалы варьирования, а также случай, когда трудно принять однозначное решение. Размер интервала варьирования составляет некоторую долю от области определения фактора. Можно, например, условиться о следующем: если интервал составляет не более 10% от области определения, считать его узким, не более 30% – средним, и в остальных случаях – широким. Это, конечно, весьма условно, и в каждой конкретной задаче приходится специально определять эти понятия, которые зависят не только от размера области определения, но и от характера поверхности отклика и от точности фиксирования факторов.

Перейдем к рассмотрению блок-схем принятия решений. На первой схеме (рис. 3) представлены девять ситуаций, имеющих место при низкой точности фиксирования факторов. При выборе решений учитываются информация о кривизне поверхности отклика и о диапазоне изменения параметра оптимизации. Типичное решение – широкий интервал варьирования, узкий интервал варьирования совершенно не используется, что вполне понятно при низкой точности.

Средний интервал варьирования в этой схеме выбирается дважды, причем в девятой ситуации как редко применяемая альтернатива. Здесь отсутствует информация об обоих признаках и выбор широкого интервала представляется более естественным.

Наибольшие трудности возникают, когда поверхность отклика нелинейна. Появляется противоречие между низкой точностью фиксирования факторов и кривизной. Первая требует расширения интервала, а вторая – сужения. Решение оказывается неоднозначным. Как поступить? Приходится рассматривать дополнительные рекомендации (см. блок-схему). Прежде всего, нужно выяснить, нельзя ли увеличить точность эксперимента либо за счет инженерных решений, либо за счет увеличения числа повторных опытов. Если это возможно, то решения принимаются на основе блок-схемы (рис. 4) для средней точности фиксирования факторов. Если это невозможно, то для принятия решения нет достаточных оснований и оно становится интуитивным.

Эта блок-схема, как и последующие, служит весьма грубым приближением к действительности. На практике учитывается ещё масса обстоятельств. Например, решения, принимаемые по каждому фактору в отдельности, корректируются при рассмотрении совокупности факторов.

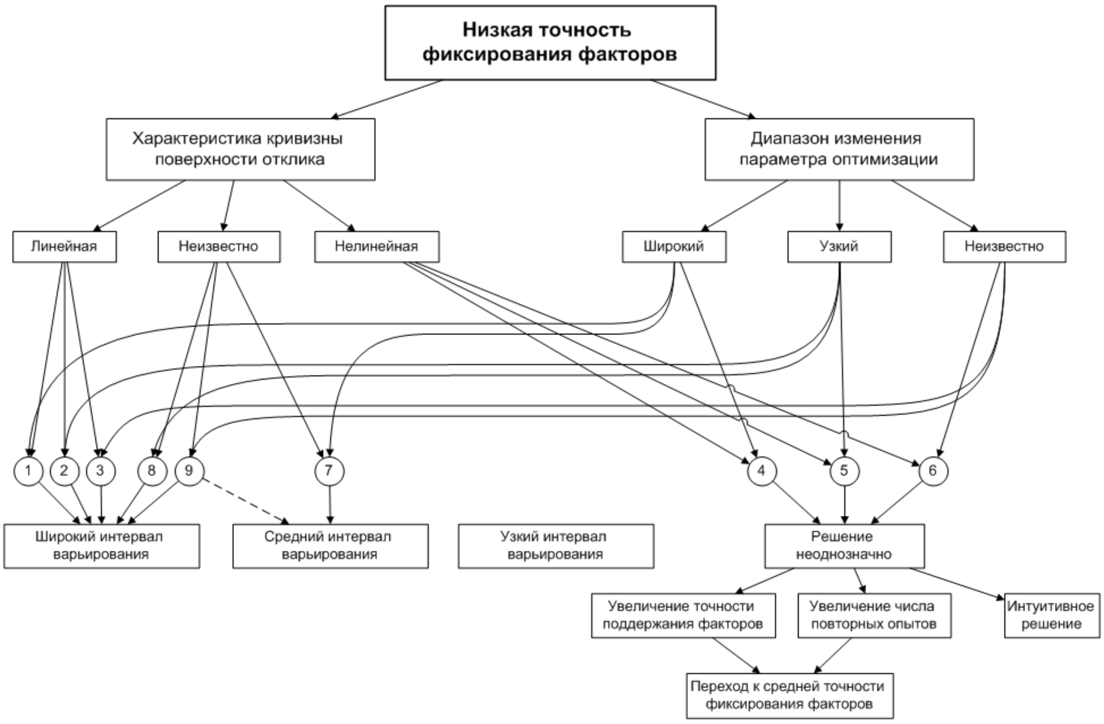


Рисунок 3

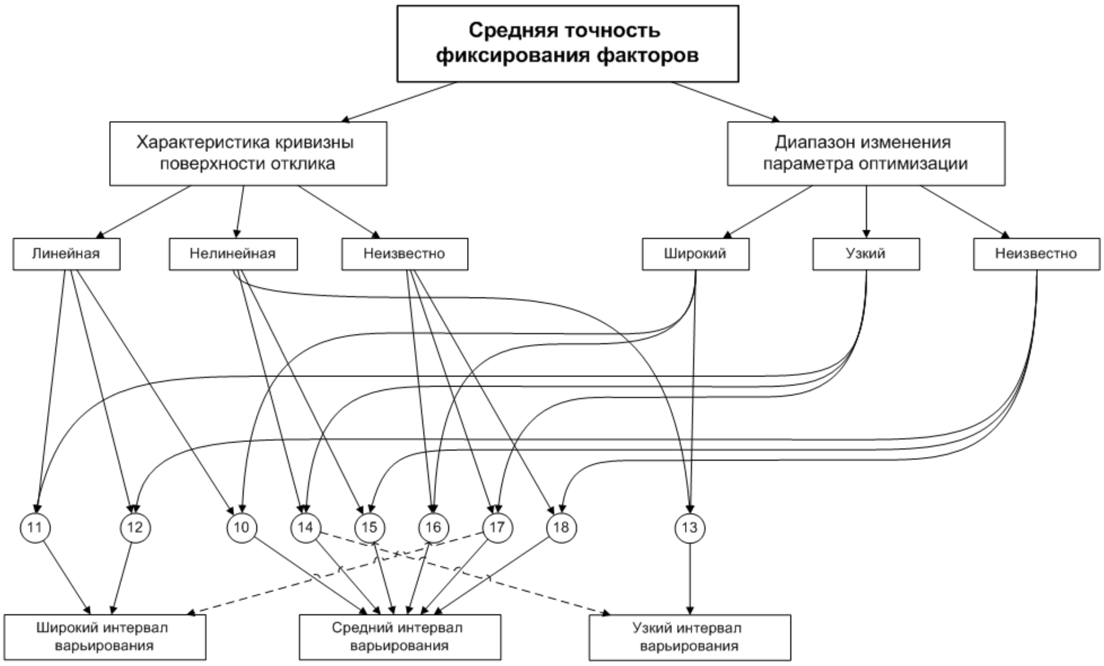


Рисунок 4

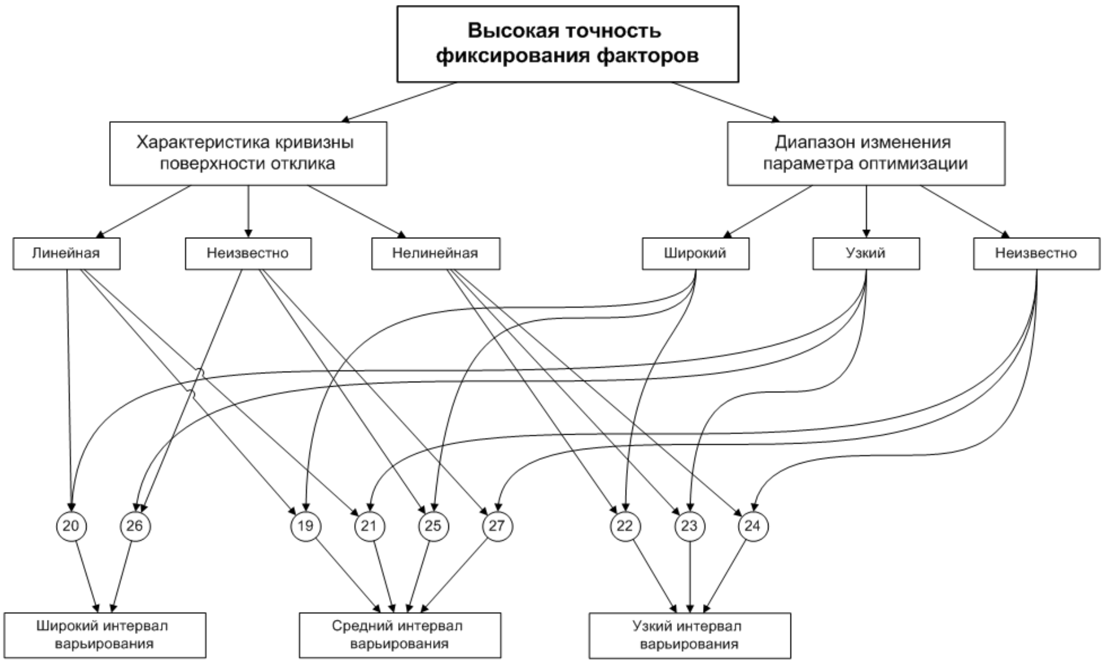


Рисунок 5

На рис. 4 изображена блок-схема для случая средней точности фиксирования фактора. Характерен выбор среднего интервала варьирования. Лишь в случае нелинейной поверхности и широкого диапазона рекомендуется узкий интервал варьирования. При сочетаниях линейной поверхности с узким диапазоном и отсутствием информации о диапазоне выбирается широкий интервал варьирования. Пунктиром, как и выше, показаны редко применяемые альтернативы.

Наконец, на рис. 5 построена блок-схема для случая высокой точности фиксирования фактора. Сочетание высокой точности с нелинейностью поверхности всегда приводит к выбору узкого интервала. Довольно часто выбирается средний интервал и лишь в двух случаях широкий. В обеих последних блок-схемах отсутствуют неоднозначные решения.

Вопросы:

1. Выбор интервалов варьирования?
2. Выбор основного уровня?

Список литературы

1. **Трифонова, М.Ф., Заика, П.М., Устюжанин, А.П.** Основы научных исследований / М.Ф. Трифонова, П.М. Заика, А.П. Устюжанин. – М.: «Колос», 1993. – 239 с.

2. **Ерошенко, Г.П., Березнев, Ю.И.** Решение инженерных задач в условиях неопределенности / Г.П. Ерошенко, Ю.И. Березнев. – Саратов, СГАУ, 2004. – 162 с.

3. **Короткова, Е.И.** Практикум по планированию экспериментов / Е.И. Короткова. – Томск: Изд-во ТПУ, 2003. – 97 с.

Лекция №5

Полный факторный эксперимент

Первый этап планирования эксперимента для получения линейной модели основан на варьировании факторов на двух уровнях. В этом случае, если число факторов известно, можно сразу найти число опытов, необходимое для реализации всех возможных сочетаний уровней факторов. Простая формула, которая для этого используется, уже приводилась: $N = 2^k$, где N – число опытов, k – число факторов, 2 – число уровней. В общем случае эксперимент, в котором реализуются всевозможные сочетания уровней факторов, называется полным факторным экспериментом. Если число уровней каждого фактора равно двум, то имеем полный факторный эксперимент типа 2^k.

Нетрудно написать все сочетания уровней в эксперименте с двумя факторами. Напомним, что в планировании эксперимента используются кодированные значения факторов: +1 и –1 (часто для простоты записи единицы опускают). Условия эксперимента можно записать в виде таблицы, где строки соответствуют различным опытам, а столбцы – значениям факторов. Будем называть такие таблицы матрицами планирования эксперимента.

Матрица планирования для двух факторов приведена ниже

№ опыта	x_1	x_2	y
1	–1	–1	y_1
2	+1	–1	y_2
3	–1	+1	y_3
4	+1	+1	y_4

Каждый столбец в матрице планирования называют вектор-столбцом, а каждую строку – вектор-строкой. Таким образом, мы имеем 2 вектор-столбца независимых переменных и один вектор-столбец параметра оптимизации.

Если для двух факторов все возможные комбинации уровней легко найти прямым перебором (или просто запомнить), то с ростом числа факторов возникает необходимость в некотором приеме построения матриц. Из многих возможных обычно используется три приема, основанные на переходе от матриц меньшей размерности к матрицам большей размерности. Рассмотрим первый. При добавлении нового фактора каждая комбинация уровней исходного плана встречается дважды: в сочетании с нижним и верхним уровнями нового фактора. Отсюда естественно появляется прием: записать исходный план для одного уровня нового фактора, а затем повторить его для другого уровня. Вот как это выглядит при переходе от эксперимента 2^2 к 2^3:

№ опыта	x_1	x_2	x_3	y
1	–	–	+	y_1
2	+	–	+	y_2
3	–	+	+	y_3
4	+	+	+	y_4
5	–	–	–	y_5
6	+	–	–	y_6
7	–	+	–	y_7
8	+	+	–	y_8

Этот прием распространяется на построение матриц любой размерности.

Рассмотрим второй прием. Для этого введем правило перемножения столбцов матрицы. При построчном перемножении двух столбцов матрицы произведение единиц с одноименными знаками дает +1, а с разноименными –1. Воспользовавшись этим правилом, получим для случая, который мы рассматриваем, вектор-столбец произведения x_1x_2 в исходном плане. Далее повторим еще раз исходный план, а у столбца произведений знаки поменяем на обратные. Этот прием тоже можно перенести на построение матриц любой размерности, однако он сложнее, тем первый.

Третий прием основан на правиле чередования знаков. В первом столбце знаки меняются поочередно, во втором столбце они чередуются через два, в третьем – через 4, в четвертом – через 8 и т. д. по степеням двойки.

Свойства полного факторного эксперимента типа 2^k

Мы научились строить матрицы планирования полных факторных экспериментов с факторами на двух уровнях. Теперь выясним, какими общими свойствами эти матрицы обладают независимо от числа факторов. Говоря о свойствах матриц, мы имеем в виду те из них, которые определяют качество модели. Ведь эксперимент и планируется для того, чтобы получить модель, обладающую некоторыми оптимальными свойствами. Это значит, что оценки коэффициентов модели должны быть наилучшими и что точность предсказания параметра оптимизации не должна зависеть от направления в факторном пространстве, ибо заранее неясно, куда предстоит двигаться в поисках оптимума.

Два свойства следуют непосредственно из построения матрицы. Первое из них – симметричность относительно центра эксперимента – формулируется следующим образом: алгебраическая сумма элементов вектор-столбца каждого фактора равна нулю, или, где j – номер фактора, N – число опытов, $i = 1, 2, ..., k$.

Второе свойство – так называемое условие нормировки – формулируется следующим образом: сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу опытов, или $\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 = N$. Это следствие того, что значения факторов в матрице задаются +1 и –1.

Это свойства отдельных столбцов матрицы планирования. Теперь остановимся на свойстве совокупности столбцов. Сумма почленных произведений любых двух вектор-столбцов матрицы равна нулю, или

$$\sum_{i=1}^{N} x_{ji} x_{ui} = 0, \quad j \neq u, \quad j, u = 0, 1, 2, \dots, k .$$

Это важное свойство называется ортогональностью матрицы планирования.

Последнее, четвертое свойство называется ротатабельностью, т. е. точки в матрице планирования подбираются так, что точность предсказания значений параметра оптимизации одинакова на равных расстояниях от центра эксперимента и не зависит от направления.

Полный факторный эксперимент и математическая модель

Для движения к точке оптимума нам нужна линейная модель $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$. Наша цель – найти по результатам эксперимента значения неизвестных коэффициентов модели. До сих пор, говоря о линейной модели, мы не останавливались на важном вопросе о статистической оценке ее коэффициентов. Теперь необходимо сделать ряд замечаний по этому поводу. Можно утверждать, что эксперимент проводится для проверки гипотезы о том, что линейная модель $\eta = \beta_0 + \beta_1x_1 + \beta_2x_2$ адекватна. Греческие буквы использованы для обозначения «истинных» генеральных значений соответствующих неизвестных. Эксперимент, содержащий конечное число опытов, позволяет только получить выборочные оценки для коэффициентов уравнения $y = b_0 + b_1x_1 + \ldots + b_kx_k$. Их точность и надежность зависят от свойств выборки и нуждаются в статистической проверке. Как производится такая проверка, будет показано ниже. А пока займемся вычислением оценок коэффициентов. Их можно вычислить по простой формуле

$$b_j = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_{ji}y_i, \quad j = 0,1,\ldots k,$$

обоснование которой будет приведено ниже. Воспользуемся этой формулой для подсчёта коэффициентов b_1 и b_2:

$$b_1 = \frac{(-1)y_1 + (+1)y_2 + (-1)y_3 + (+1)y_4}{4},$$

$$b_2 = \frac{(-1)y_1 + (-1)y_2 + (+1)y_3 + (+1)y_4}{4}.$$

Благодаря кодированию факторов расчет коэффициентов превратился в простую арифметическую процедуру. Для подсчета коэффициента b_1 используется вектор-столбец x_1, а для b_2 – столбец x_2. Остается неясным, как найти b_0. Если уравнение $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$ справедливо, то оно верно и для средних арифметических значений переменных: $\bar{y} = b_0 + b_1\bar{x}_1 + b_2\bar{x}_2$. Но в силу свойства симметрии $\bar{x}_1 = \bar{x}_2 = 0$. Следовательно, $\bar{y} = b_0$. Мы показали, что b_0 есть среднее арифметическое значений параметра оптимизации. Чтобы его получить, необходимо сложить все y и разделить на число опытов. Чтобы привести, эту процедуру в соответствие с формулой для вычисления коэффициентов, в матрицу планирования удобно ввести вектор-столбец фиктивной переменной x_0, которая принимает во всех опытах значение +1. Это было уже учтено в записи формулы, где j принимало значения от 0 до k.

Теперь у нас есть все необходимое, чтобы найти неизвестные коэффициенты линейной модели

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 .$$

Коэффициенты при независимых переменных указывают на силу влияния факторов. Чем больше численная величина коэффициента, тем большее влияние оказывает фактор. Если коэффициент имеет знак плюс, то с увеличением значения фактора параметр оптимизации увеличивается, а если минус, то уменьшается. Величина коэффициента соответствует вкладу данного фактора в величину параметра оптимизации при переходе фактора с нулевого уровня на верхний или нижний.

Иногда удобно оценивать вклад фактора при переходе от нижнего уровня к верхнему уровню. Вклад, определенный таким образом, называется вкладом фактора (иногда его называют основным или главным эффектом). Он численно равен удвоенному коэффициенту. Для качественных факторов, варьируемых на двух уровнях, основной уровень не имеет физического смысла. Поэтому понятие «эффект фактора» является здесь естественным.

Планируя эксперимент, на первом этапе мы стремимся получить линейную модель. Однако у нас нет гарантии, что в выбранных интервалах варьирования процесс описывается линейной моделью. Существуют способы проверки пригодности линейной модели (проверка адекватности). А если модель нелинейна, как количественно оценить нелинейность, пользуясь полным факторным экспериментом?

Один из часто встречающихся видов нелинейности связан с тем, что эффект одного фактора зависит от уровня, на котором находится другой фактор. В этом случае говорят, что имеет место эффект взаимодействия двух факторов. Полный факторный эксперимент позволяет количественно оценивать эффекты взаимодействия. Для этого надо, пользуясь правилом перемножения столбцов, получить столбец произведения двух факторов. При вычислении коэффициента, соответствующего эффекту взаимодействия, с новым вектор-столбцом можно обращаться так же, как с вектор-столбцом любого фактора. Для полного факторного эксперимента 2^2 матрица планирования с учетом эффекта взаимодействия будет иметь вид

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	y
1	+1	+1	+1	+1	y_1
2	+1	–1	+1	–1	y_2
3	+1	–1	–1	+1	y_3
4	+1	+1	–1	–1	y_4

Очень важно, что при добавлении столбцов эффектов взаимодействий все рассмотренные свойства матриц планирования сохраняются.

Теперь модель выглядит следующим образом:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2.$$

Коэффициент b_{12} вычисляется обычным путем

$$b_{12} = \frac{(+1)y_1 + (-1)y_2 + (+1)y_3 + (-1)y_4}{4}.$$

Столбцы x_1 и x_2 задают планирование – по ним непосредственно определяются условия опытов, а столбцы x_0 и x_1x_2 служат только для расчета.

Обращаем ваше внимание на то, что при оптимизации мы стремимся сделать эффекты взаимодействия возможно меньшими. В задачах интерполяции, напротив, их выявление часто важно и интересно.

С ростом числа факторов число возможных взаимодействий быстро растет. Мы рассмотрели самый простой случай, когда имелось одно взаимодействие. Обратимся теперь к полному факторному эксперименту 2^3.

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y
1	+	–	–	+	+	–	–	+	y_1
2	+	+	–	–	–	–	+	+	y_2
3	+	–	+	–	–	+	–	+	y_3

4	+	+	+	+	+	+	+	+	y_4
5	+	–	–	–	+	+	+	–	y_5
6	+	+	–	+	–	+	–	–	y_6
7	+	–	+	+	–	–	+	–	y_7
8	+	+	+	–	+	–	–	–	y_8

Эффект взаимодействия $x_1x_2x_3$ получается перемножением всех трех столбцов и называется эффектом взаимодействия второго порядка. Эффект взаимодействия двух факторов называется эффектом взаимодействия первого порядка. Вообще, эффект взаимодействия максимального порядка в полном факторном эксперименте имеет порядок, на единицу меньший числа факторов. Довольно часто применяются синонимы: парные эффекты взаимодействия (x_1x_2, x_2x_3...), тройные ($x_1x_2x_3$, $x_2x_3x_4$...) и т. д.

Полное число всех возможных эффектов, включая b_0, линейные эффекты и взаимодействия всех порядков, равно числу опытов полного факторного эксперимента. Чтобы найти число возможных взаимодействий некоторого порядка, можно воспользоваться обычной формулой числа сочетаний

$$C_m^k = \frac{k!}{m!(k-m)!},$$

где k – число факторов, m – число элементов во взаимодействии. Так, для плана 2^4 число парных взаимодействий равно шести

$$C_4^2 = \frac{4!}{2!(4-2)!} = 6.$$

Поясним физический смысл эффекта взаимодействия следующим примером. Пусть на некоторый химический процесс влияют два фактора: температура и время реакции. В области низких температур увеличение времени увеличивает выход продукта. При переходе в область высоких температур эта закономерность нарушается. Здесь, напротив, необходимо уменьшать время реакции. Это и есть проявление эффекта взаимодействия.

Ортогональность матрицы планирования позволяет получить независимые друг от друга оценки коэффициентов. Это означает, что величина любого коэффициента не зависит от того, какие величины имеют другие коэффициенты.

Однако сформулированные выше утверждения справедливы лишь в том случае, если модель включает только линейные эффекты и эффекты взаимодействия. Между тем, существенными могут оказаться коэффициенты при квадратах факторов, их кубах и т. д. Так, для случая существенных квадратичных членов в двухфакторном эксперименте модель можно записать так:

$$y = b_0 x_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 .$$

Какую информацию о квадратичных членах можно извлечь из полного факторного эксперимента?

Попытка построения вектор-столбцов для x_1^2 и x_2^2 приводит к получению единичных столбцов, совпадающих друг с другом и со столбцом x_0. Так как эти столбцы неразличимы, то нельзя сказать, за счет чего получилась величина b_0. Она включает значение свободного члена и вклады квадратичных членов. В этом случае говорят, что имеет место смешанная оценка. Это символически записывается следующим образом:

$$b_0 \to \beta_0 + \sum_{j=1}^{k} \beta_{jj} ,$$

где b_0 – вычисленный нами коэффициент, а греческими бувами, как принято в статистике, обозначены неизвестные истинные значения свободного члена (β_0) и квадратичных коэффициентов (β_{jj}). Если бы мы сделали сколь угодно много опытов, то в пределе получили бы истинные значения коэффициентов. На практике реализуются лишь малые выборки, по которым вычисляются оценки истинных коэффициентов.

По отношению к квадратичной модели для двух факторов получается такая система смешивания:

$$b_0 \to \beta_0 + \sum_{j=1}^{k} \beta_{jj} , \qquad b_1 \to \beta_1 , \qquad b_2 \to \beta_2 , \qquad b_{12} \to \beta_{12} .$$

Следовательно, оценки всех коэффициентов, кроме b_0, не смешаны.

Число опытов в полном факторном эксперименте превышает число коэффициентов линейной модели, причем тем больше, чем больше факторов.

Разность между числом опытов и числом коэффициентов во многих случаях оказывается очень велика, и возникает естественное желание сократить число необходимых опытов.

Вопросы:

1. Понятие о полном факторном эксперименте?
2. Математическая модель при полном факторном эксперименте?

Список литературы

1. **Трифонова, М.Ф., Заика, П.М., Устюжанин, А.П.** Основы научных исследований / М.Ф. Трифонова, П.М. Заика, А.П. Устюжанин. – М.: «Колос», 1993. – 239 с.
2. **Ерошенко, Г.П., Березнев, Ю.И.** Решение инженерных задач в условиях неопределенности / Г.П. Ерошенко, Ю.И. Березнев. – Саратов, СГАУ, 2004. – 162 с.
3. **Короткова, Е.И.** Практикум по планированию экспериментов / Е.И. Короткова. – Томск: Изд-во ТПУ, 2003. – 97 с.

Лекция № 6

Дробный факторный эксперимент

Количество опытов в полном факторном эксперименте значительно превосходит число определяемых коэффициентов линейной модели. Другими словами, полный факторный эксперимент обладает большой избыточностью опытов. Было бы заманчивым сократить их число за счет той информации, которая не очень существенна при построении линейных моделей. При этом нужно стремиться, чтобы матрица планирования не лишилась своих оптимальных свойств. Сделать это не так просто, но все же возможно. Итак, начнем поиск путей минимизации опытов.

Минимизация числа опытов

Начнем с самого простого – полного факторного эксперимента 2^k. Запишем еще раз матрицу планирования

№ опыта	x_0	x_1	x_2	(x_3) x_1x_2	y
1	+	–	–	+	y_1
2	+	+	–	–	y_2
3	+	–	+	–	y_3
4	+	+	+	+	y_4

Пользуясь таким планированием, можно вычислить четыре коэффициента и представить результаты эксперт в виде неполного квадратного уравнения

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2$$

Если имеются основания считать, что в выбранных интервалах варьирования процесс может быть описан линейной моделью, то достаточно определить три коэффициента: b_0, b_1 и b_2. Остается одна степень свободы. Употребим ее для минимизации числа опытов. При линейном приближении $b_{12} \to 0$ и вектор-столбец x_1x_2 можно использовать для нового фактора x_3. Поставим этот фактор в скобках над взаимодействием x_1x_2 и посмотрим, каковы будут оценки коэффициентов.

Здесь уже не будет тех раздельных оценок, которые мы имели в полном факторном эксперименте 2^k. Оценки смешаются следующим образом:

$$b_1 \to \beta_1 + \beta_{23}, \qquad b_2 \to \beta_2 + \beta_{13}, \qquad b_3 \to \beta_3 + \beta_{12}.$$

Но нас это не должно огорчать. Ведь мы постулируем линейную модель, и, следовательно, все парные взаимодействия незначимы. Главное, мы нашли средство минимизировать число опытов: вместо 8 опытов для изучения трех факторов оказывается можно поставить четыре! При этом матрица планирования не теряет своих оптимальных свойств (ортогональность, ротатабельность и т.п.). Найденное правило можно сформулировать так: чтобы сократить число опытов, нужно новому фактору присвоить вектор-столбец матрицы, принадлежащий взаимодействию, которым можно пренебречь. Тогда значение нового фактора в условиях опытов определяется знаками этого столбца.

Дробная реплика

Поставив четыре опыта для оценки влияния трех факторов, мы воспользовались половиной полного факторного эксперимента 2^3 или «полурепликой». Если бы мы x_3 приравняли к $-x_1x_2$, то получили бы вторую половину матрицы 2^3. В этом случае $b_1 \to \beta_1 - \beta_{23}$, $b_2 \to \beta_2 - \beta_{13}$, $b_3 \to \beta_3 - \beta_{12}$. При реализации обеих полуреплик можно получить раздельные оценки для линейных эффектов и эффектов взаимодействия, как и в полном факторном эксперименте 2^3. Объединение этих двух полуреплик и есть полный факторный эксперимент 2^3. Матрица из восьми опытов для четырех факторного планирования будет полурепликой от полного факторного эксперимента 2^4, а для пятифакторного планирования – четверть-репликой от 2^5. В последнем случае два линейных эффекта приравниваются к эффектам взаимодействия. Для обозначения дробных реплик, в которых p линейных эффектов приравнены к эффектам взаимодействия, удобно пользоваться условным обозначением 2^{k-p}. Так, полуреплика от 2^3 запишется в виде 2^{3-1} а четвертьреплика от 2^5 – в виде 2^{5-2}.

Выбор полуреплик. Генерирующие соотношения и определяющие контрасты

При построении полуреплики 2^{3-1} существует всего две возможности: приравнять x_3 к $+x_1x_2$ или к $-x_1x_2$. Поэтому есть только две полуреплики 2^{3-1}.

опыта	x_1	x_2	x_3	x_2x_3
1	+	+	+	+
2	–	–	+	+
3	+	–	–	+
4	–	+	–	+

Для произведения трех столбцов первой матрицы выполняется соотношение: $+1 = x_1x_2x_3$,

опыта	x_1	x_2	x_3	x_2x_3
1	+	+	–	–
2	–	–	–	–
3	+	–	+	–
4	–	+	+	–

а для второй матрицы: $-1 = x_1x_2x_3$. Символическое обозначение произведения столбцов, равного +1 или –1, называется определяющим контрастом. Контраст помогает определять смешанные эффекты. Для того чтобы определить, какой эффект смешан с данным, нужно помножить обе части определяющего контраста на столбец, соответствующий данному эффекту. Так, если $+1 = x_1x_2x_3$, то для x_1 имеем

$$x_1 = x_1^2x_2x_3 = x_2x_3,$$

так как всегда $x_i^2 = 1$. Для x_2 находим

$$x_2 = x_1x_2^2x_3 = x_1x_3,$$

для x_3

$$x_3 = x_1x_2x_3^2 = x_1x_2.$$

Это значит, что коэффициенты линейного уравнения будут оценками

$$b_1 \to \beta_1 + \beta_{23},$$

$$b_2 \to \beta_2 + \beta_{13},$$

$$b_3 \to \beta_3 + \beta_{12}.$$

Соотношение, показывающее, с каким из эффектов смешан данный эффект, называется генерирующим соотношением.

Полуреплики, в которых основные эффекты смешаны с двухфакторными взаимодействиями, носят название планов с разрешающей способностью III (по наибольшему числу факторов в определяющем контрасте).Такие планы принято обозначать: 2^{3-1}_{III}.

При выборе полуреплики 2^{4-1} возможны восемь решений:

1. $x_4 = x_1x_2$,
2. $x_4 = -x_1x_2$,
3. $x_4 = x_2x_3$,
4. $x_4 = -x_2x_3$,
5. $x_4 = x_1x_3$,
6. $x_4 = -x_1x_3$,
7. $x_4 = x_1x_2x_3$,
8. $x_4 = -x_1x_2x_3$.

Разрешающая способность этих полуреплик различна. Так, реплики 1–6 имеют по три фактора в определяющем контрасте, а 7–8 по четыре. Реплики 7 и 8 имеют максимальную разрешающую способность и называются главными. Разрешающая способность задается системой смешивания данной реплики. Она будет максимальной, если линейные эффекты смешаны с эффектами взаимодействия наибольшего возможного порядка.

При отсутствии априорной информации об эффектах взаимодействия экспериментатор стремится выбрать реплику с наибольшей разрешающей способностью, так как тройные взаимодействия обычно менее важны, чем парные. Если существует информация об эффектах взаимодействия, то она должна использоваться при выборе реплики.

Реплики, в которых нет ни одного главного эффекта, смешанного с другим главным эффектом или парным взаимодействием, а все парные взаимодействия смешаны друг с другом, носят название планов с разрешающей способностью IV (по наибольшему числу факторов в определяющем контрасте). Они имеют обозначение 2_{IV}^{4-1}.

Такие полуреплики называют главными полурепликами, так как они обладают наибольшей разрешающей способностью.

При выборе полуреплики 2^{5-1} в распоряжении экспериментатора имеется множество вариантов.

Так, x_5 можно приравнять к одному из 6 парных взаимодействий. В этом случае получим полуреплику с разрешающей способностью III. Очевидно, это будет не лучший выбор полуреплики. Далее, x_5 можно приравнять к одному из четырех тройных взаимодействий. Тогда получим план с разрешающей способностью IV, и все линейные эффекты будут смешаны с тройными взаимодействиями. И наконец, полуреплика может быть задана генерирующими соотношениями $x_5 = x_1x_2x_3x_4$ или $x_5 = -x_1x_2x_3x_4$. Определяющими контрастами в этом случае будут.

$1 = x_1x_2x_3x_4x_5$ и $-1 = x_1x_2x_3x_4x_5$.

Такие реплики носят название планов с разрешающей способностью V и обозначаются 2_V^{5-1}.

Полурепликами 2^{6-1} редко пользуются на практике. Ведь полуреплика 2^{6-1} требует 32 опыта, а для экспериментатора выгодны планы 2^{6-2} или 2^{6-3} требующие соответственно 16 и 8 опытов. Поэтому с ростом числа факторов возрастает дробность применяемых реплик.

Заметим, что при построении главных полуреплик в определяющий контраст надо включать наибольшее число факторов.

Выбор 1/4-реплик. Обобщающий определяющий контраст.

При исследовании влияния пяти факторов можно поставить не 16 опытов, а только 8, т. е. воспользоваться репликой 2^{5-2}. Здесь возможны двенадцать решений, если x_4 приравнять парному взаимодействию, а x_5 – тройному.

Допустим, выбран вариант $x_4 = x_1x_3$ и $x_5 = x_1x_2x_3$. Тогда определяющими контрастами являются $1 = x_1x_3x_4$ и $1 = x_1x_2x_3x_5$.

Если перемножить эти определяющие контрасты, то получится третье соотношение, задающее элементы столбца $1 = x_2x_4x_5$. Чтобы полностью охарактеризовать разрешающую способность реплики, необходимо записать обобщающий определяющий контраст.

$1 = x_1x_3x_4 = x_2x_4x_5 = x_1x_2x_3x_5$.

Система смешивания определяется умножением обобщающего определяющего контраста последовательно на x_1, x_2, x_3 и т.д.

$x_1 = x_3x_4 = x_1x_2x_4x_5 = x_2x_3x_5$,

$x_2 = x_1x_2x_3x_4 = x_4x_5 = x_1x_3x_5$,

$x_3 = x_1x_4 = x_2x_3x_4x_5 = x_1x_2x_5$,

$x_4 = x_1x_3 = x_2x_5 = x_1x_2x_3x_4x_5$,

$x_5 = x_1x_3x_4x_5 = x_2x_4 = x_1x_2x_3$,

$x_1x_2 = x_2x_3x_4 = x_1x_4x_5 = x_3x_5$,

$x_1x_5 = x_3x_4x_5 = x_1x_2x_4 = x_2x_3$.

Получается довольно сложная система смешивания линейных эффектов с эффектами взаимодействия первого, второго, третьего и четвертого порядков. Если, например, коэффициенты $b_{12} \to \beta_{12} + \beta_{234} + \beta_{145} + \beta_{35}$ и $b_{15} = \beta_{15} + \beta_{345} + \beta_{124} + \beta_{23}$ отличаются от нуля, то возникают сомнения, можно ли пренебрегать другими парными взаимодействиями, с которыми смешаны линейные эффекты. Тогда следует поставить вторую серию опытов, выбрав нужным образом другую 1/4-реплику.

При этом можно воспользоваться методом «перевала». Смысл этого метода заключается в том, что вторая четверть-реплика получается из первой путем изменения всех знаков матрицы на обратные. Тогда в обобщающей определяющем контрасте тройные произведения имеют знак, противоположный их знаку в первой четверть-реплике. Тройные произведения определяют парные взаимодействия в совместных оценках для линейных эффектов. Усредняя результаты обеих четверть-реплик, можно получить линейные эффекты, не смешанные с парными взаимодействиями.

Реплики большой дробности

При выборе 1/8-реплики 2^{6-3} можно воспользоваться вектор-столбцами трех взаимодействий, например, так:

1. $x_4 = x_1x_2$, $x_5 = x_1x_3$, $x_6 = x_2x_3$;
2. $x_4 = x_1x_3$, $x_5 = x_2x_3$, $x_6 = x_1x_2x_3$;
3. $x_4 = x_1x_2$, $x_5 = x_2x_3$, $x_6 = x_1x_2x_3$;
4. $x_4 = x_1x_2$, $x_5 = x_1x_3$, $x_6 = x_1x_2x_3$.

Для каждого из этих решений можно сделать шесть перестановок. Итого получается 24 возможности выбора 1/8-реплики. Это при условии, что мы всюду выбираем положительные генерирующие соотношения.

Из четырех приведенных выше решений наименее удачно первое, поскольку все линейные эффекты смешиваются с парными взаимодействиями. Если априори известно, что из всех взаимодействий наиболее существенно x_1x_2, то нужно выбрать второе решение, если x_1x_3 – третье, а если x_2x_3 – четвертое.

Допустим, мы избрали четвертое решение, предполагая, что из факторов x_4, x_5, x_6 наиболее существенным является x_4. Приравняем x_4 тройному взаимодействию и запишем генерирующие соотношения

$x_4 = x_1x_2x_3$, $x_5 = x_1x_2$, $x_6 = x_1x_3$.

имеем следующие определяющие контрасты:

$1 = x_1x_2x_3x_4$, $1 = x_1x_2x_5$, $1 = x_1x_3x_6$.

Если попарно перемножить эти определяющие контрасты, то получим

$1 = x_3x_4x_5$, $1 = x_2x_4x_6$, $1 = x_2x_3x_5x_6$.

Произведение трех определяющих контрастов равно

$1 = x_1 x_4 x_5 x_6$.

Чтобы полностью охарактеризовать разрешающую способность данной 1/8-реплики, запишем обобщающий определяющий контраст

$1 = x_1 x_2 x_3 x_4 = x_1 x_2 x_5 = x_1 x_3 x_6 = x_3 x_4 x_5 = x_2 x_4 x_6 = x_2 x_3 x_5 x_6 = x_1 x_4 x_5 x_6$.

Получается следующая система смешивания (эффекты выше второго порядка опущены):

$b_1 \to \beta_1 + \beta_{25} + \beta_{36} + \beta_{234} + \beta_{456}$,

$b_2 \to \beta_2 + \beta_{15} + \beta_{46} + \beta_{134} + \beta_{356}$,

$b_3 \to \beta_3 + \beta_{16} + \beta_{45} + \beta_{124} + \beta_{256}$,

$b_4 \to \beta_4 + \beta_{35} + \beta_{26} + \beta_{123} + \beta_{156}$,

$b_5 \to \beta_5 + \beta_{12} + \beta_{34} + \beta_{236} + \beta_{146}$,

$b_6 \to \beta_6 + \beta_{13} + \beta_{24} + \beta_{235} + \beta_{145}$.

Рассмотрим пример 1/16-реплики от 2^7.

1/16 часть от полного факторного эксперимента 2^7 дает возможность сократить число опытов до 8 вместо 128.

Выберем следующие генерирующие соотношения:

$x_4 = x_1 x_2$, $x_5 = x_1 x_3$, $x_6 = x_2 x_3$, $x_7 = x_1 x_2 x_3$.

Для них имеем следующие определяющие контрасты:

$1 = x_1 x_2 x_4$, $1 = x_1 x_3 x_5$, $1 = x_2 x_3 x_6$, $1 = x_1 x_2 x_3 x_7$.

Обобщающий определяющий контраст

$$1 = x_1 x_2 x_4 = x_1 x_3 x_5 = x_2 x_3 x_6 = x_1 x_2 x_3 x_7 =$$
$$= x_2 x_3 x_4 x_5 = x_1 x_3 x_4 x_6 = x_3 x_4 x_7 = x_1 x_2 x_5 x_6 = x_2 x_5 x_7 = x_1 x_6 x_7 =$$
$$= x_4 x_5 x_6 = x_1 x_4 x_5 x_7 = x_2 x_4 x_6 x_7 = x_3 x_5 x_6 x_7 = x_1 x_2 x_3 x_4 x_5 x_6 x_7.$$

Такой обобщающий определяющий контраст получен в результате попарного перемножения исходных контрастов, затем – умножения по три и по четыре.

Если всеми коэффициентами взаимодействия, начиная с тройных, можно пренебречь, то коэффициенты будут совместными оценками:

$b_1 \to \beta_1 + \beta_{24} + \beta_{35} + \beta_{67}$,

$b_2 \to \beta_2 + \beta_{14} + \beta_{36} + \beta_{57}$,

$b_3 \to \beta_3 + \beta_{15} + \beta_{26} + \beta_{47}$,

$b_4 \to \beta_4 + \beta_{12} + \beta_{56} + \beta_{37}$,

$b_5 \to \beta_5 + \beta_{13} + \beta_{46} + \beta_{27}$,

$b_6 \to \beta_6 + \beta_{23} + \beta_{45} + \beta_{17}$,

$b_7 \to \beta_7 + \beta_{34} + \beta_{25} + \beta_{16}$.

Разрешающая способность такой реплики чрезвычайно мала, так как каждый линейный эффект определяется совместно с тремя парными взаимодействиями. Такой репликой можно пользоваться только в том случае, если все парные взаимодействия равны нулю. В большинстве случаев, начиная исследование процесса, трудно априорно предсказать, будут эффекты взаимодействия существенны или нет. Поэтому экспериментатор должен наметить план дальнейших опытов для случая, если парные эффекты значимы и поиск оптимальных условий будет неэффективным.

Матрицу планирования для этой реплики можно получить из первой реплики, изменив в ней все знаки на обратные. Такая реплика задается генерирующими соотношениями

$x_4 = -x_1 x_2$, $x_5 = -x_1 x_3$, $x_6 = -x_2 x_3$, $x_7 = -x_1 x_2 x_3$.

В обобщающем определяющем контрасте все тройные произведения оказываются со знаком минус, и поэтому в совместных оценках для линейных эффектов не будет парных взаимодействий со знаком плюс. Усредняя результаты вычислений для таких двух реплик, можно получить раздельные оценки для всех линейных эффектов.

С ростом числа факторов увеличивается дробность реплик и усложняется система смешивания. Предельное число факторов для восьми опытов – семь. В этом случае оценивается восемь коэффициентов линейного уравнения $y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_4 x_4 + b_5 x_5 + b_6 x_6 + b_7 x_7$ и число степеней свободы равно нулю.

При числе факторов от 9 до 15 приходится ставить 16 опытов. План с предельным числом факторов для данного числа опытов и заданной модели называется насыщенным. В этом случае число опытов равно числу оцениваемых коэффициентов. Все рекомендации для выбора системы смешивания аналогичны приведенным выше. Можно, далее, рассматривать построение дробных планов для числа факторов от 16 до 31 (при этом необходимо ставить 32 опыта), для числа факторов от 32 до 63 (здесь необходимы 64 опыта) и т. д.

Список литературы

1. **Красовский, Г.И., Филаретов, Г.Ф.** Планирование эксперимента / Г.И. Красовский, Г.Ф. Филаретов – Минск: Изд-во БГУ им. В.И. Ленина, 1982. – 302 с.
2. **Гмурман, В.Е.** Теория вероятностей и математическая статистика / В.Е. Гмурман – М.: Изд-во Высшая школа, 1972. – 308 с.
3. **Адлер, Ю.П., Маркова, Е.В., Грановский, Ю.В.** Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий / Ю.П. Адлер, Е.В. Маркова, Ю.В. Грановский – М.: Наука, 1976.
4. **Асатурян, В.И.** Теория планирования эксперимента / В.И. Асатурян – М.: Радио и связь, 1983.

Лекция № 7

Проведение эксперимента

Познакомимся с вычислением ошибки опыта, или, как ее часто называют, ошибки воспроизводимости.

Ошибки параллельных опытов

Каждый эксперимент содержит элемент неопределенности вследствие ограниченности экспериментального материала. Постановка повторных (или параллельных) опытов не дает полностью совпадающих результатов, потому что всегда существует ошибка опыта (ошибка воспроизводимости). Эту ошибку и нужно оценить по параллельным опытам. Для этого опыт воспроизводится по возможности в одинаковых условиях несколько раз и затем берется среднее арифметическое всех результатов. Среднее арифметическое $\bar{y}$ равно сумме всех n отдельных результатов, деленной на количество параллельных опытов n

$$\bar{y} = \frac{y_1 + y_2 + \ldots + y_n}{n} = \frac{1}{n}\sum_{q=1}^{n} y_q .$$

Отклонение результата любого опыта от среднего арифметического можно представить как разность $y_q - \bar{y}$ где y_q – результат отдельного опыта. Наличие отклонения свидетельствует об изменчивости, вариации значений повторных опытов. Для измерения этой изменчивости чаще всего используют дисперсию. Дисперсией называется среднее значение квадрата отклонений величины от ее среднего значения. Дисперсия обозначается s^2 и выражается формулой

$$s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{q=1}^{n}\left(y_q - \bar{y}\right)^2 .$$

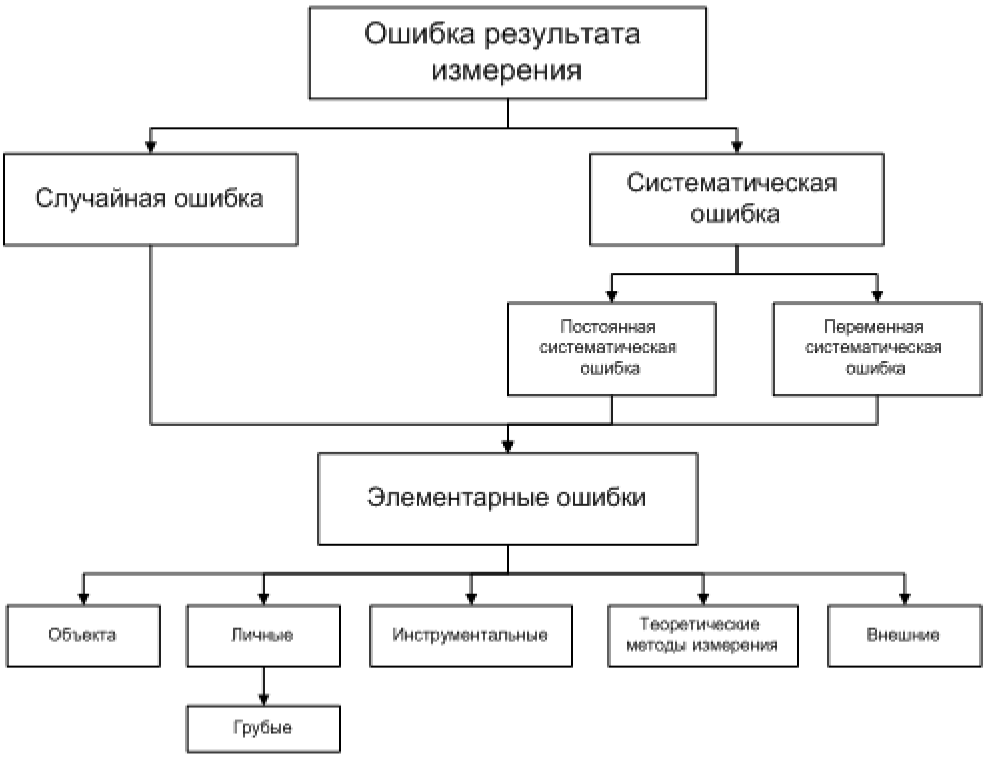
где $(n - 1)$ – число степеней свободы, равное количеству опытов минус единица. Одна степень свободы использована для вычисления среднего.

Корень квадратный из дисперсии, взятый с положительным знаком, называется средним квадратическим отклонением, стандартом или квадратичной ошибкой

Стандарт имеет размерность той величины, для которой он вычислен. Дисперсия и стандарт – это меры рассеяния, изменчивости. Чем больше дисперсия и стандарт, тем больше рассеяны значения параллельных опытов около среднего значения.

Ошибка опыта являемся суммарной величиной, результатом многих ошибок: ошибок измерений факторов, ошибок измерений параметра оптимизации и др. Каждую из этих ошибок можно, в свою очередь, разделить на составляющие.

Вопрос о классификации ошибок довольно сложный и вызывает много дискуссий. В качестве примера одной из возможных схем классификации мы приведем схему из книги Ю. В. Кельница «Теория ошибок измерений» (М., изд-во «Недра», 1967).



Все ошибки принято разделять на два класса: систематические и случайные.

Систематические ошибки порождаются причинами, действующими регулярно, в определенном направлении. Чаще всего эти ошибки можно изучить и определить количественно.

Систематические ошибки находят, калибруя измерительные приборы и сопоставляя опытные данные с изменяющимися внешними условиями (например, при градуировке термопары по реперным точкам, при сравнении с эталонным прибором).

Если систематические ошибки вызываются внешними условиями (переменной температуры, сырья и т. д.), следует компенсировать их влияние. Как это делать, будет показано ниже.

Случайными ошибками называются те, которые появляются нерегулярно, причины возникновения которых неизвестны и которые невозможно учесть заранее.

Систематические и случайные ошибки состоят из множества элементарных ошибок. Для того, чтобы исключать инструментальные ошибки, следует проверять приборы перед опытом, иногда в течение опыта и обязательно после опыта. Ошибки при проведении самого опыта возникают вследствие неравномерного нагрева реакционной среды, разного способа перемешивания и т.п. При повторении опытов такие ошибки могут вызвать большой разброс экспериментальных результатов.

Очень важно исключить из экспериментальных данных грубые ошибки, так называемый брак при повторных опытах. Для отброса ошибочных опытов существуют правила. Для определения брака используют, например, критерий Стьюдента

$$\frac{y-\bar{y}}{s} \geq t.$$

Значение *t* берут из таблицы *t*-распределения Стьюдента. Опыт считается бракованным, если экспериментальное значение критерия *t* по модулю больше табличного значения.

Дисперсия параметра оптимизации

Дисперсия всего эксперимента получается в результате усреднения дисперсий всех опытов. По терминологии, принятой в планировании эксперимента, речь идет о подсчете дисперсии параметра оптимизации $s^2_{\{y\}}$ или, что то же самое, дисперсии воспроизводимости эксперимента $s^2_{воспр.}$

При подсчете дисперсии параметра оптимизации квадрат разности между значением y_q в каждом опыте и средним значением из n повторных наблюдений y нужно просуммировать по числу опытов в матрице N, а затем разделить на $N(n$ - 1):

$$s^2_{\{y\}} = \frac{\sum_{i=1}^{N}\sum_{q=1}^{n}\left(y_{iq} - \bar{y}_i\right)^2}{N(n-1)},$$

Где i = 1, 2, …, N; q = 1, 2, …, n.

Такой формулой можно пользоваться в случаях, когда число повторных опытов одинаково во всей матрице.

Дисперсию воспроизводимости проще всего рассчитывать, когда соблюдается равенство числа повторных опытов во всех экспериментальных точках. На практике весьма часто приходится сталкиваться со случаями, когда число повторных опытов различно. Это происходит вследствие отброса грубых наблюдений, неуверенности экспериментатора в правильности некоторых результатов (в таких случаях возникает желание еще и еще раз повторить опыт) и т.п.

Тогда при усреднении дисперсий приходится пользоваться средним взвешенным значением дисперсий, взятым с учетом числа степеней свободы

$$s^2_{\{y\}} = \frac{s_1^2 f_1 + s_2^2 f_2 + \ldots + s_n^2 f_n}{f_1 + f_2 + \ldots + f_n} = \frac{\sum_{i=1}^{N} s_i^2 f_i}{\sum_{i=1}^{N} f_i},$$

где

s_i^2 – дисперсия i-го опыта;

f_i – число степеней свободы i-м опыте, равное числу параллельных опытов n_i минус 1.

Число степеней свободы средней дисперсии принимается равным сумме чисел степеней свободы дисперсий, из которых она вычислена.

Случай с неравным числом наблюдений, который мы рассмотрели выше, связан с нарушением ортогональности матрицы. Поэтому здесь нельзя использовать расчетные формулы для коэффициентов, приведенные ранее. Этот вопрос будет рассмотрен ниже.

Экспериментатору не следует забывать о проверке однородности дисперсий, неоднородные дисперсии усреднять нельзя. Прежде чем пользоваться приведёнными выше формулами, нужно убедиться в однородности суммируемых дисперсий.

Проверка однородности дисперсий

Проверка однородности дисперсий производится с помощью различных статистических критериев. Простейшим из них является критерий Фишера, предназначенный для сравнения двух дисперсий. Критерий Фишера (*F*-критерий) представляет собою отношение большей дисперсии к меньшей. Полученная величина сравнивается с табличной величиной *F*-критерия.

Если полученное значение дисперсионного отношения больше приведенного в таблице для соответствующих степеней свободы и выбранного уровня значимости, это означает, что дисперсии значимо отличаются друг от друга, т. е. что они неоднородны.

Если сравниваемое количество дисперсий больше двух и одна дисперсия значительно превышает остальные, можно воспользоваться критерием Кохрена. Этот критерий пригоден для случаев, когда во всех точках имеется одинаковое число повторных опытов. При этом подсчитывается дисперсия в каждой горизонтальной строке матрицы

$$s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{q=1}^{n}\left(y_q - \bar{y}\right)^2,$$

а затем из всех дисперсий находится наибольшая $s^2_{\max}$ которая делится на сумму всех дисперсий. Критерий Кохрена – это отношение максимальной дисперсии к сумме всех дисперсий

$$G = \frac{s^2_{\max}}{\sum_{i=1}^{N} s_i^2}.$$

Гипотеза об однородности дисперсий подтверждается, если экспериментальное значение критерия Кохрена не превышает табличного значения. Тогда можно усреднять дисперсии и пользоваться формулой

$$s^2_{\{y\}} = \frac{\sum_{i=1}^{N}\sum_{q=1}^{n}\left(y_{iq} - \bar{y}_i\right)^2}{N(n-1)}.$$

Если возникает предположение о наличии неоднородности дисперсий для случая, когда число повторных опытов неодинаково во всех точках, можно воспользоваться критерием Бартлета. По уже знакомой формуле подсчитывается дисперсия воспроизводимости

$$s^2_{\{y\}} = \frac{\sum_{i=1}^{N} s_i^2 f_i}{\sum_{i=1}^{N} f_i}.$$

Далее находится величина

$$\frac{1}{c}\left\{f \lg s^2_{\{y\}} - \sum_{i=1}^{N} f_i \lg s_i^2\right\},$$

где

$$c = 0{,}4343\left[1 + \frac{1}{3(N-1)}\left\{\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{f_i} - \frac{1}{f}\right\}\right].$$

Здесь число степеней свободы равно N–1, где N – число сравниваемых дисперсий. При планировании эксперимента типа 2^k это число равно числу опытов в матрице.

Бартлет показал, что величина $\frac{1}{c}\left\{f\lg s_{\{y\}}^2-\sum_{i=1}^{N} f_i \lg s_i^2\right\}$ приближенно подчиняется χ^2 – распределению с (N–1) степенями свободы. Значимость критерия Бартлета проверяется обычным способом.

Критерий Бартлета базируется на нормальном распределении. Если имеются отклонения от нормального распределения, то проверка неоднородности дисперсий может привести к ошибочным результатам.

Можно предложить использование F-критерия даже в тех случаях, когда число дисперсий больше двух. Делается это следующим образом. Из всех дисперсий выделяются наибольшая и наименьшая. По F-критерию производится проверка, значимо ли они различаются между собой. Ясно, что если наибольшая и наименьшая дисперсии не отличаются значимо, то дисперсии, имеющие промежуточные значения, также не могут значимо отличаться друг от друга. Тогда всю группу дисперсий можно считать принадлежащей к единой совокупности. В таких случаях нет надобности применять критерий Бартлета.

Вопросы:

1. Критерий Бартлера?
2. Критерий Кохрена?
3. Критерий Стьюдента?

Список литературы:

4. **Красовский, Г.И., Филаретов, Г.Ф.** Планирование эксперимента / Г.И. Красовский, Г.Ф. Филаретов – Минск: Изд-во БГУ им. В.И. Ленина, 1982. – 302 с.

5. **Гмурман, В.Е.** Теория вероятностей и математическая статистика / В.Е. Гмурман – М.: Изд-во Высшая школа, 1972. – 308 с.

6. **Адлер, Ю.П., Маркова, Е.В., Грановский, Ю.В.** Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий / Ю.П. Адлер, Е.В. Маркова, Ю.В. Грановский – М.: Наука, 1976.

7. **Асатурян, В.И.** Теория планирования эксперимента / В.И. Асатурян – М.: Радио и связь, 1983.

Лекция № 8

Рандомизация

Чтобы исключить влияние систематических ошибок, вызванных внешними условиями (переменой температуры, сырья, лаборанта и т. д.), рекомендуется случайная последовательность при постановке опытов, запланированных матрицей. Опыты необходимо рандомизировать во времени. Термин «рандомизация» происходит от английского слова random – случайный.

Разбиение матрицы типа 2^k на блоки

Если экспериментатор располагает сведениями о предстоящих изменениях внешней среды, сырья, аппаратуры и т. п., то целесообразно планировать эксперимент таким образом, чтобы эффект влияния внешних условий был смешан с определенным взаимодействием, которое не жалко потерять. Так, при наличии двух партий сырья матрицу 2^3 можно разбить на два блока таким образом, чтобы эффект сырья сказался на величине трехфакторного взаимодействия. Тогда все линейные коэффициенты и парные взаимодействия будут освобождены от влияния неоднородности сырья.

№ блока	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y
1	+	–	–	+	+	–	–	+	$y_1+\varepsilon$
	+	+	–	–	–	–	+	+	$y_2+\varepsilon$
	+	–	+	–	–	+	–	+	$y_3+\varepsilon$
	+	+	+	+	+	+	+	+	$y_4+\varepsilon$
2	+	–	–	–	+	+	+	–	y_5
	+	+	–	+	–	+	–	–	y_6
	+	–	+	+	–	–	+	–	y_7
	+	+	+	–	+	–	–	–	y_8

В этой матрице при составлении блока 1 отобраны все строки, для которых $x_1x_2x_3 = +1$, а при составления блока 2 – все строки, для которых $x_1x_2x_3 = -1$.

Различие в сырье можно рассматривать как новый фактор x_4. Тогда матрица 2^3, разбитая на два блока, представляет собой полуреплику 2^{4-1} с определяющим контрастом $1 = x_1 x_2 x_3 x_4$.

$$b_0 = \frac{1}{8}\left[(y_1+\varepsilon)+(y_2+\varepsilon)+(y_3+\varepsilon)+(y_4+\varepsilon)+y_5+y_6+y_7+y_8\right], \qquad b_0 \to \beta_0 + \frac{\varepsilon}{2};$$

$$b_1 = \frac{1}{8}\left[-(y_1+\varepsilon)+(y_2+\varepsilon)-(y_3+\varepsilon)+(y_4+\varepsilon)-y_5+y_6-y_7+y_8\right], \qquad b_1 \to \beta_1;$$

$$b_2 = \frac{1}{8}\left[-(y_1+\varepsilon)-(y_2+\varepsilon)+(y_3+\varepsilon)+(y_4+\varepsilon)-y_5-y_6+y_7+y_8\right], \qquad b_2 \to \beta_2;$$

$$b_3 = \frac{1}{8}\left[(y_1+\varepsilon)-(y_2+\varepsilon)-(y_3+\varepsilon)+(y_4+\varepsilon)-y_5+y_6+y_7-y_8\right], \qquad b_3 \to \beta_3;$$

$$b_{12} = \frac{1}{8}\left[(y_1+\varepsilon)-(y_2+\varepsilon)-(y_3+\varepsilon)+(y_4+\varepsilon)+y_5-y_6-y_7+y_8\right], \qquad b_{12} \to \beta_{12};$$

$$b_{13} = \frac{1}{8}\left[-(y_1+\varepsilon)-(y_2+\varepsilon)+(y_3+\varepsilon)+(y_4+\varepsilon)+y_5+y_6-y_7-y_8\right], \qquad b_{13} \to \beta_{13};$$

$$b_{23} = \frac{1}{8}\left[-(y_1+\varepsilon)+(y_2+\varepsilon)-(y_3+\varepsilon)+(y_4+\varepsilon)+y_5-y_6+y_7-y_8\right], \qquad b_{23} \to \beta_{23};$$

$$b_{123} = \frac{1}{8}\left[(y_1+\varepsilon)+(y_2+\varepsilon)+(y_3+\varepsilon)+(y_4+\varepsilon)-y_5-y_6-y_7-y_8\right], \qquad b_{123} \to \beta_{123} + \frac{\varepsilon}{2};$$

Эффект сырья отразился на подсчете свободного члена b_0 и эффекта взаимодействия второго порядка b_{123}.

Аналогично можно разбить на два блока любой эксперимент типа 2^3. Главное – правильно выбрать взаимодействие, которым можно безболезненно пожертвовать. При отсутствии априорных сведений выбирают взаимодействие самого высокого порядка: $x_1x_2x_3$ для 2^3, $x_1x_2x_3x_4$ для 2^4, $x_1x_2x_3x_4x_5$ 2^5 и т. д. Но если экспериментатору известно, что одно из парных взаимодействий лишено, например, физико-химического смысла, то можно пожертвовать парным взаимодействием.

Матрицу типа 2^k можно разбить на количество блоков 2^n (n – степень двойки) при $n < k$. Так, матрица 2^3 разбивается на два блока по четыре опыта в каждом и на четыре блока по два опыта в каждом. Матрица 2^4 – на два блока по 8 опытов в каждом, на четыре блока по четыре опыта и на восемь блоков по два опыта и т.д.

Обработка результатов эксперимента

Тщательное, скрупулезное выполнение эксперимента, несомненно, является главным условием успеха исследования. Это общее правило, и планирование эксперимента не относится к исключениям.

Однако нам не безразлично, как обработать полученные данные. Мы хотим навлечь из них всю информацию и сделать соответствующие выводы. Как всегда, мы находимся между Сциллой и Харибдой. С одной стороны, не извлечь из эксперимента все, что из него следует,– значит пренебречь нелегким трудом экспериментатора. С другой стороны, сделать утверждения, не следующие из эксперимента, – значит создавать иллюзии, заниматься самообманом.

Статистические методы обработки результатов позволяют нам не перейти разумной меры риска.

Метод наименьших квадратов

Начнем с простого случая: один фактор, линейная модель. Интересующая нас функция отклика (которую мы будем также называть уравнением регрессии) имеет вид

$$y = b_0 + b_1 x_1$$

Это хорошо известное уравнение прямой линии. Наша цель – вычисление неизвестных коэффициентов b_0 и b_1. Мы провели эксперимент, чтобы использовать при вычислениях его результаты. Как это сделать наилучшим образом?

Если бы все экспериментальные точки лежали строго на прямой линии, то для каждой из них было бы справедливо равенство

$$y_i - b_0 - b_1 x_{1i} = 0,$$

где i = 1, 2, ..., N – номер опыта. Тогда не было бы никакой проблемы. На практике это равенство нарушается и вместо него приходится писать

$$y_i - b_0 - b_1 x_{1i} = \xi_i,$$

где ξ_i – разность между экспериментальным и вычисленным по уравнению регрессии значениями *y* в *i-й* экспериментальной точке. Эту величину иногда невязкой.

Мы хотим найти такие коэффициенты регрессии, при которых невязки будут минимальны. Это требование можно записать по-разному. В зависимости от этого мы будем получать разные оценки коэффициентов. Вот одна из возможных записей

$$U = \sum_{i=1}^{N} \xi_i^2 = \min,$$

которая приводит к методу наименьших квадратов.

Когда мы ставим эксперимент, то обычно стремимся провести больше (во всяком случае не меньше) опытов, чем число неизвестных коэффициентов. Поэтому система линейных уравнений

$$\xi_i = y_i - b_0 - b_1 x_{1i}$$

оказывается переопределенной и часто противоречивой (т. е. она может иметь бесконечно много решений или может не иметь решений). Переопределенность возникает, когда число уравнений больше числа неизвестных; противоречивость – когда некоторые из уравнений несовместимы друг с другом.

Только если все экспериментальные точки лежат па прямой, то система становится определенной и имеет единственное решение.

МНК обладает тем замечательным свойством, что он делает определенной любую, произвольную систему уравнений. Он делает число уравнений равным числу неизвестных коэффициентов.

Для определения двух неизвестных коэффициентов требуется два уравнения. Давайте попробуем их получить.

$$U = \sum_{i=1}^{N} \xi_i^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - b_0 - b_1 x_{1i}\right)^2 = \min$$

Минимум некоторой функции, если он существует, достигается при одновременном равенстве нулю частных производных по всей неизвестным, т. е.

$$\left.\begin{aligned}\frac{dU}{db_0}=0\\ \frac{dU}{db_1}=0\end{aligned}\right\}.$$

В явном виде это запишется как

$$\left.\begin{aligned}-2\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-b_0-b_1x_{1i}\right)=0\\ -2\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-b_0-b_1x_{1i}\right)x_{1i}=0\end{aligned}\right\},$$

$$\left.\begin{aligned}Nb_0+\left(\sum_{i=1}^{N}x_{1i}\right)b_1=\sum_{i=1}^{N}y_i\\ \left(\sum_{i=1}^{N}x_{1i}\right)b_0+\left(\sum_{i=1}^{N}x_{1i}^2\right)b_1=\sum_{i=1}^{N}y_ix_{1i}\end{aligned}\right\}.$$

Окончательные формулы для вычисления коэффициентов регрессии, которые удобно находить с помощью определителей, имеют вид

$$b_0=\frac{\sum_{i=1}^{N}y_i\cdot\sum_{i=1}^{N}x_{1i}^2-\sum_{i=1}^{N}y_ix_{1i}\cdot\sum_{i=1}^{N}x_{1i}}{N\cdot\sum_{i=1}^{N}x_{1i}^2-\left(\sum_{i=1}^{N}x_{1i}\right)^2},$$

$$b_1=\frac{N\cdot\sum_{i=1}^{N}y_ix_{1i}-\sum_{i=1}^{N}y_i\cdot\sum_{i=1}^{N}x_{1i}}{N\cdot\sum_{i=1}^{N}x_{1i}^2-\left(\sum_{i=1}^{N}x_{1i}\right)^2}.$$

Величина $U=\sum_{i=1}^{N}\xi_i^2=\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-\hat{y}_i\right)^2=\sum_{i=1}^{N}\Delta y_i^2$ называется остаточной суммой квадратов ($\hat{y}_i$ – значение параметра оптимизации, вычисленное из уравнения регрессии). МНК гарантирует, что эта величина минимально возможная.

Обобщение на многофакторный случай не связано с какими-либо принципиальными трудностями.

Воспользуемся тем, что матрицы планирования ортогональны и нормированы, т.е.

$$\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 = N \quad \text{и} \quad \sum_{i=1}^{N} x_{ji} x_{ui} = 0, \quad j \neq u, \quad j,u = 0,1,2,\ldots,k$$

Для любого числа факторов коэффициенты будут вычисляться по формуле

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^{N} y_i x_{ji}}{N}$$

В этой формуле $j = 0, 1, 2 \ldots, k$ – номер фактора. Ноль записан для вычисления b_0. Так как каждый фактор (кроме x_0) варьируется на двух уровнях +1 и –1, то вычисления сводятся к приписыванию столбцу y знаков соответствующего фактору столбца и алгебраическому сложению полученных значений. Деление результата на число опытов в матрице планирования дает искомый коэффициент.

Вопросы:

1. Обработка результатов эксперимента?
2. Метод наименьших квадратов?

Список литературы:

1. **Красовский, Г.И., Филаретов, Г.Ф.** Планирование эксперимента / Г.И. Красовский, Г.Ф. Филаретов – Минск: Изд-во БГУ им. В.И. Ленина, 1982. – 302 с.
2. **Гмурман, В.Е.** Теория вероятностей и математическая статистика / В.Е. Гмурман – М.: Изд-во Высшая школа, 1972. – 308 с.
3. **Адлер, Ю.П., Маркова, Е.В., Грановский, Ю.В.** Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий / Ю.П. Адлер, Е.В. Маркова, Ю.В. Грановский – М.: Наука, 1976.
4. **Асатурян, В.И.** Теория планирования эксперимента / В.И. Асатурян – М.: Радио и связь, 1983.

Лекция № 9

Регрессионный анализ

До сих пор мы пользовались МНК как вычислительным приемом. Нам нигде не приходилось вспоминать о статистике. Но, как только мы начинаем проверять какие-либо гипотезы о пригодности модели или о значимости коэффициентов, приходится вспоминать о статистике. И с этого момента МНК превращается в регрессионный анализ.

А регрессионный анализ как всякий статистический метод, применим при определенных предположениях, постулатах.

Первый постулат. Параметр оптимизации y есть случайная величина с нормальным законом распределения. Дисперсия воспроизводимости – одна из характеристик этого закона распределения.

В данном случае, как и по отношению к любым другим постулатам, нас интересуют два вопроса: как проверить его выполнимость и к чему приводят его нарушения?

При наличии большого экспериментального материала (десятки параллельных опытов) гипотезу о нормальном распределении можно проверить стандартными статистическими тестами (например, χ^2– критерием). К сожалению, экспериментатор редко располагает такими данными, поэтому приходится принимать этот постулат на веру.

При нарушении нормальности мы лишаемся возможности установления вероятностей, с которыми справедливы те или иные высказывания. В этом таится большая опасность. Мы рискуем загипнотизировать себя численными оценками и вероятностями, за которыми ничего не стоит. Вот почему надо очень внимательно относиться к возможным нарушениям предпосылок.

Второй постулат. Дисперсия y не зависит от абсолютной величины y. Выполнимость этого постулата проверяется с помощью критериев однородности дисперсий в разных точках факторного пространства. Нарушение этого постулата недопустимо.

Всегда существует такое преобразование *y*, которое делает дисперсии одно-родными. Увы, его не всегда легко найти. Довольно часто помогает логарифмическое преобразование, с которого обычно начинают поиски.

Третий постулат. Значения факторов суть неслучайные величины. Это несколько неожиданное утверждение практически означает, что установление каждого фактора на заданный уровень и его поддержание существенно точнее, чем сшибка воспроизводимости.

Нарушение этого постулата приводит к трудностям при реализации матрицы планирования. Поэтому оно обычно легко обнаруживается экспериментатором.

Существует еще четвертый постулат, налагающий ограничения на взаимосвязь между значениями факторов. У Нас он выполняется автоматически в силу ортогональности матрицы планирования.

Проверка адекватности модели

Первый вопрос, который нас интересует после вычисления коэффициентов модели, это проверка ее пригодности. Мы будем называть такую проверку проверкой адекватности модели.

Для характеристики среднего разброса относительно линии регрессии вполне подходит остаточная сумма квадратов. Неудобство состоит в том, что она зависит от числа коэффициентов в уравнении: введите столько коэффициентов, сколько вы провели независимых опытов, и получите остаточную сумму, равную нулю. Поэтому предпочитают относить ее на один «свободный» опыт. Число таких опытов называется числом степеней свободы *f*.

Числом степеней свободы в статистике называется разность между числом опытов и числом коэффициентов (констант), которые уже вычислены по результатам этих опытов независимо друг от друга.

Остаточная сумма квадратов, деленная на число степеней свободы, называется остаточной дисперсией, или дисперсией адекватности $s^2_{ад}$.

$$s^2_{ад.} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \Delta y_i^2}{f}.$$

В статистике разработан критерий, который очень удобен для проверки гипотезы об адекватности модели. Он называется *F*-критерием Фишера и определяется следующей формулой:

$$f = \frac{s^2_{ад.}}{s^2_{\{y\}}}.$$

$s^2_{\{y\}}$ – это дисперсия воспроизводимости со своим числом степеней свободы.

Удобство использования критерия Фишера состоит в том, что проверку гипотезы можно свести к сравнению с табличным значением.

Если рассчитанное значение *F*-критерия не превышает табличного, то, с соответствующей доверительной вероятностью, модель можно считать адекватной. При превышении табличного значения эту приятную гипотезу приходится отвергать.

Этот способ расчета дисперсии адекватности, подходит, если опыты в матрице планирования не дублируются, а информация о дисперсии воспроизводимости извлекается из параллельных опытов в нулевой точке или из предварительных экспериментов.

Важны два случая: 1) опыты во всех точках плана дублируются одинаковое число раз (равномерное дублирование), 2) число параллельных опытов не одинаково (неравномерное дублирование).

В первом случае дисперсию адекватности нужно умножать на n, где n – число повторных опытов

$$s^2_{ад.} = \frac{n\sum_{i=1}^{N} \Delta y_i^2}{f}.$$

Такое видоизменение формулы вполне естественно. Чем больше число параллельных опытов, тем с большей достоверностью оцениваются средние значения. Поэтому требования к различиям между экспериментальными и расчетными значениями становятся более жесткими, что отражается в увеличении F-критерия.

Во втором случае, когда приходится иметь дело с неравномерным дублированием, положение усложняется. Даже когда экспериментатор задумал провести равное число параллельных опытов, часто не удается по тем или иным причинам все их реализовать. Кроме того, иногда приходится отбрасывать отдельные опыты как выпадающие наблюдения.

При неравномерном дублировании нарушается ортогональность матрицы планирования и, как следствие, изменяются расчетные формулы для коэффициентов регрессии и их ошибок, а также для дисперсии адекватности.

Для дисперсии адекватности можно записать общую формулу

$$s^2_{ад.} = \frac{\sum_{i=1}^{N} n_i \left(\bar{y}_i - \hat{y}_i\right)^2}{f},$$

где N – число различных опытов (число строк матрицы);

n_i – число параллельных опытов в i-й строке матрицы;

$\bar{y}_i$ – среднее арифметическое из n_i параллельных опытов;

$\hat{y}_i$ – предсказанное по уравнению значение в этом опыте.

Смысл этой формулы очень прост: различию между экспериментальным и расчетным значением придается тем больший вес, чем больше число повторных опытов.

Для b-коэффициентов нельзя записать универсальную расчетную формулу. Все зависит от того, какой был план и как дублировались опыты. Всякий раз приходится делать специальные расчеты, пользуясь методом наименьших квадратов.

Проверка значимости коэффициентов

Проверка значимости каждого коэффициента проводится независимо.

Ее можно осуществлять двумя равноценными способами: проверкой по t-критерию Стьюдента или построением доверительного интервала. При использовании полного факторного эксперимента или регулярных дробных реплик доверительные интервалы для всех коэффициентов (в том числе и эффектов взаимодействия) равны друг другу.

Прежде всего, надо найти дисперсию коэффициента регрессии $s^2_{\{b_i\}}$. Она определяется в нашем по формуле

$$s^2_{\{b_i\}} = \frac{s^2_{\{y\}}}{N}$$

Из формулы видно, что дисперсии всех коэффициентов равны друг другу, так как они зависят только от ошибки опыта и числа опытов.

Теперь легко построить доверительный интервал

$$\Delta b_j = \pm t s\{b_j\}$$

Здесь t – табличное значение критерия Стьюдента при числе степеней свободы, с которыми определялась $s^2_{\{y\}}$, и выбранном уровне значимости (обычно 0,05); $s\{b_j\}$ – квадратичная ошибка коэффициента регрессии.

Коэффициент значим, если его абсолютная величина больше доверительного интервала.

Вопросы:

1. Суть проверки значимости коэффициентов?
2. Суть проверки адекватности моделей?

Список литературы

1. . Амерханов Р.А., Ерошенко Г.П., Шелиманова Е.В. Эксплуатация теплоэнергетических установок и систем. – М.: «Энергоатомиздат», 2008. – 447 с.
2. Оськин С.В. Рекомендации для выполнения и защиты магистерской диссертации. – Краснодар, КубГАУ, 2010. – 40 с.
3. Трифонова М.Ф., Заика П.М., Устюжанин А.П. Основы научных исследований. – М.: «Колос», 1993. – 239 с.
4. Ерошенко Г.П., Березнев Ю.И. Решение инженерных задач в условиях неопределенности. – Саратов, СГАУ, 2004. – 162 с.

Лекция № 10

Принятие решений после построения модели

Интерпретация результатов

Адекватная линейная модель, имеет вид полинома первой степени. Коэффициенты полинома являются частными производными функции отклика по соответствующим переменным. Их геометрический смысл – тангенсы углов наклона гиперплоскости к соответствующей оси. Больший по абсолютной величине коэффициент соответствует большему углу наклона и, следовательно, более существенному изменению параметра оптимизации при изменении данного фактора.

До сих пор мы употребляли абстрактный математический язык. Перевод модели на язык экспериментатора называется интерпретацией модели.

Задача интерпретации весьма сложна. Ее решают в несколько этапов. Первый этап состоит в следующем. Устанавливается, в какой мере каждый из факторов влияет на параметр оптимизации. Величина коэффициента регрессии – количественная мера этого влияния. Чем больше коэффициент, тем сильнее влияет фактор. О характере влияния факторов говорят знаки коэффициентов. Знак плюс свидетельствует о том, что с увеличением значения фактора растет величина параметра оптимизации, а при знаке минус – убывает. Интерпретация знаков при оптимизации зависит от того, ищем ли мы максимум или минимум функции отклика. Если $y \to \max$, то увеличение значений всех факторов, коэффициенты которых имеют знак плюс, благоприятно, а имеющих знак минус – неблагоприятно. Если же $y \to \min$ то, наоборот, благоприятно увеличение значений тех факторов, знаки коэффициентов которых отрицательны.

Далее выясняется, как расположить совокупность факторов в ряд по силе их влияния на параметр оптимизации. Факторы, коэффициенты которых не значимы, конечно не интерпретируются. Можно сказать только, что при данных интервалах варьирования и ошибке воспроизводимости они не оказывают существенного влияния на параметр оптимизации.

Изменение интервалов варьирования приводит к изменению коэффициентов регрессии. Абсолютные величины коэффициентов регрессии увеличиваются с увеличением интервалов. Инвариантными к изменению интервалов остаются знаки линейных коэффициентов регрессии. Однако и они изменяться на обратные, если при движении но градиенту мы «проскочим» экстремум.

В некоторых задачах представляет интерес построение уравнения регрессии для натуральных значений факторов. Уравнение для натуральных переменных можно получить, используя формулу перехода. Коэффициенты регрессии изменятся. При этом пропадает возможность интерпретации влияния факторов по величинам и знакам коэффициентов регрессии. Вектор-столбцы натуральных значений переменных в матрице планирования уже не будут ортогональными, коэффициенты определяются зависимо друг от друга. Если же поставлена задача получения интерполяционной формулы для натуральных переменных, такой прием допустим.

Теперь мы получили основу для перехода к следующему этапу. На основе априорных сведений обычно имеются некоторые представления о характере действия факторов. Источниками таких сведений могут служить теория изучаемого процесса, опыт работы с аналогичными процессами или предварительные опыты и т.д.

Если, например, ожидается, что с ростом температуры должно происходить увеличение параметра оптимизации, а коэффициент регрессии имеет знак минус, то возникает противоречие. Возможны две причины возникновения такой ситуации: либо в эксперименте допущена ошибка, и он должен быть подвергнут ревизии, либо неверны априорные представления. Нужно иметь в виду, что эксперимент проводится в локальной области факторного пространства и коэффициент отражает влияние фактора только в этой области. Заранее неизвестно, в какой мере наивно распространить результат на другие области. Теоретические же представления имеют обычно более общий характер. Кроме того, априорная информация часто основывается на однофакторных зависимостях. При переходе к многофакторному пространству ситуация может изменяться. Поэтому мы должны быть уверены, что эксперимент проведен корректно. Тогда для преодоления противоречия можно выдвигать различные гипотезы и проверять их экспериментально.

В тех, довольно редких, случаях, когда имеется большая априорная информация, позволяющая выдвигать гипотезы о механизме явлений, можно перейти к следующему этапу интерпретации. Он сводится к проверке гипотез о механизме явлений и выдвижению новых гипотез.

Получение информации о механизме явлений не является обязательным в задачах оптимизации, но возможность такого рода следует использовать. Здесь особое внимание приходится уделять эффектам взаимодействия факторов. Как их интерпретировать?

Пусть в некоторой задаче взаимодействие двух факторов значимо и имеет положительный знак. Это свидетельствует о том, что одновременное увеличение, как и одновременное уменьшение, значений двух факторов приводит к увеличению параметра оптимизации (без учета линейных эффектов).

Интерпретация эффектов взаимодействия не так однозначна, как линейных эффектов. В каждом случае имеется дна варианта. Какому из вариантов отдавить предпочтение? Прежде всего, нужно учесть знаки линейных эффектов соответствующих факторов. Если эффект взаимодействия имеет знак плюс и соответствующие линейные эффекты отрицательны, то выбор однозначен: сочетание –1 и –1. Однако возможен случай, когда знаки линейных эффектов различны. Тогда приходится учитывать численные значения коэффициентов и жертвовать самым малым эффектом.

Иногда приходится учитывать технологические соображения: например, эксперимент в одной области факторного пространства дороже (или труднее), чем в другой.

Упомянем еще об интерпретации эффектов взаимодействия высоких порядков. Если значимым оказался эффект взаимодействия трех факторов, например $x_1x_2x_3$, то его можно интерпретировать следующим образом. Этот эффект может иметь знак плюс, если отрицательные знаки будут у четного числа факторов (ноль или любые два). Знак минус будет, если нечетное число факторов имеет знак минус (все три или любой один). Это правило распространяется на взаимодействия любых порядков. Пользуются еще таким приемом: произведение двух факторов условно считают одним фактором и сводят трехфакторное взаимодействие к парному и т.д.

Мы сказали, что интерпретация результатов – это перевод с одного языка на другой. Такой перевод обеспечивает взаимопонимание между статистиком и экспериментатором, работающим совместно над задачами оптимизации. Интерпретация уравнения регрессии важна не только для понимания процесса, но и для принятия решений при оптимизации.

Принятие решений после построения модели процесса

Нам придется принимать решения в сложных ситуациях. Решения зависят от числа факторов, дробности плана, цели исследования (достижение оптимума, построение интерполяционной формулы) и т.д. Количество возможных решений по примерной оценке достигает нескольких десятков тысяч. Поэтому будем рассматривать только наиболее часто встречавшиеся случаи и выделим «типичные» решения. Положение здесь сложнее, чем в случае принятия решений о выборе основного уровня и интервалов варьирования факторов, где удалось рассмотреть все варианты. Ситуации будем различать по адекватности и неадекватности модели, значимости и незначимости коэффициентов регрессии в модели, информации о положении оптимума.

Обсудим сначала принятие решения для адекватного линейного уравнения регрессии.

Линейная модель адекватна. Здесь возможны 3 варианта.

1. Все коэффициенты регрессии значимы.
2. Часть коэффициентов регрессии значима, часть незначима.

3. Все коэффициенты регрессии незначимы.

В каждом варианте оптимум может быть близко, далеко или о его положении нет информации (неопределенная ситуация).

Рассмотрим первый вариант.

Если область оптимума близка, возможны три решения: окончание исследования, переход к планам второго порядка и движение по градиенту.

Переход к планированию второго порядка дает возможность получить математическое описание области оптимума и найти экстремум.

Движение по градиенту используется при малой ошибке опыта, поскольку на фоне большой ошибки трудно установить приращение параметра оптимизации.

Решение при неопределенной ситуации или удаленной области оптимума одно и то же: движение по градиенту.

Второй вариант – часть коэффициентов регрессии значима, часть незначима. Движение по градиенту наиболее эффективно, если коэффициенты значимы. Поэтому выбираются решения, реализация которых приводит к получению значимых коэффициентов. На этом этапе важно выдвинуть гипотезы, объясняющие незначимость эффектов. Это может быть и неудачный выбор интервалов варьирования, и включение (из осторожности) факторов, не влияющих на параметр оптимизации, и большая ошибка опыта, и т.д. Решение зависит от того, какую гипотезу мы предпочитаем.

Если, например, выдвинута первая гипотеза, то возможно такое решение: расширение интервалов варьирования по незначимым факторам и постановка новой серии опытов. Изменение интервалов варьирования иногда сочетают с переносом центра эксперимента в точку, соответствующую условиям наилучшего опыта. Невлияющие факторы стабилизируются и исключаются из дальнейшего рассмотрения. Другие возможные решения для получения значимых коэффициентов: увеличение числа параллельных опытов и достройка плана. Увеличение числа параллельных опытов приводит к уменьшению дисперсии воспроизводимости и соответственно дисперсии коэффициентов регрессии. Опыты могут быть повторены либо во всех точках плана, либо в некоторых.

Достройка плана осуществляется несколькими способами.

1. Методом «перевала» – у исходной реплики изменяют знаки на обратные. В этом случае основные эффекты оказываются не смешанными с парными эффектами
2. Переходом к полному факторному эксперименту.
3. Переходом к реплике меньшей дробности.
4. Переходом к плану второго порядка (если область оптимума близка).

Реализация любого из этих решений требует значительных экспериментальных усилий. Поэтому иногда можно и не следовать строго правилу «двигайтесь по всем факторам», а пойти на некоторый риск и двигаться только по значимым факторам.

Наконец, если область оптимума близка, то возможно принятие таких же решений, как и в случае значимости всех коэффициентов регрессии.

Рассмотрим последний случай: линейная модель адекватна, все коэффициенты регрессии незначимы (кроме b_0). Чаще всего это происходит вследствие большой ошибки эксперимента или узких интервалов варьирования. Поэтому возможные решения направлены, прежде всего, на увеличение точности эксперимента и расширение интервалов варьирования. Увеличение точности может достигаться двумя путями: благодаря улучшению методики проведения опытов или вследствие постановки параллельных опытов.

Если область оптимума близка, то возможно также окончание исследования.

В заключение приведем блок-схему принятия решения в задаче определения оптимальных условий, линейная модель адекватна. В блок-схеме пунктирными линиями обведены ситуации, сплошными линиями – принимаемые решения.

Рисунок 6

Линейная модель неадекватна. Если линейная модель неадекватна, значит не удается аппроксимировать поверхность отклика плоскостью. Формальные признаки (кроме величины *F*-критерия), по которым можно установить неадекватность линейной модели, следующие.

1.Значимость хотя бы одного из эффектов взаимодействия.

2.Значимость суммы коэффициентов регрессии при квадратичных членах $\sum \beta_{ii}$. Оценкой этой суммы служит разность между b_0 и значением зависимой переменной в центре плана y_0. Если разность превосходит ошибку опыта, то гипотеза о незначимости коэффициентов при квадратичных членах не может быть принята. Однако надо учесть, что сумма может быть незначима, и при значимых квадратичных эффектах, если они имеют разные знаки.

Для неадекватной модели мы не будем делать различия между случаями значимых и незначимых линейных коэффициентов регрессии, поскольку решения для них обычно совпадают.

Решения, принимаемые для получения адекватной модели: изменение интервалов варьирования факторов, перенос центра плана, достройка плана.

Наиболее распространенный прием – изменение интервалов варьирования. Он, конечно, требует постановки новой серии опытов. Иногда отказываются от построения адекватной модели, чтобы ценой нескольких опытов проверить возможность движения по градиенту. Это решение нельзя считать достаточно корректным. Движению по градиенту обычно предшествует оценка кривизны поверхности отклика (по сумме коэффициентов при квадратичных членах) и сопоставление величин линейных эффектов и эффектов взаимодействия. Если вклад квадратичных членов и эффектов взаимодействия невелик, то решение о движении по градиенту представляется возможным.

Еще одно решение: включение в модель эффектов взаимодействия и движение с помощью неполного полинома второго порядка. Этот прием связан с получением и анализом уравнений второго порядка. Направление градиента будет меняться от точки к точке.

Если область оптимума близка, то возможны варианты окончания исследования и перехода к построению плана второго порядка.

На рис. 7 приведена блок-схема принятия решений в задаче оптимизации для случая, когда линейная модель неадекватна.

Особый случай возникает при использовании насыщенных планов. При значимости всех коэффициентов регрессии ничего нельзя сказать об адекватности или неадекватности модели. Движение по градиенту в такой ситуации показывает правильность предположения, что коэффициенты регрессии являются оценками для линейных эффектов.

Рисунок 7
Построение интерполяционной формулы, линейная модель неадекватна

Первое, что следует сделать ври решении этой задачи, – включить в уравнение эффекты взаимодействия. Конечно, такое решение возможно, если был применен ненасыщенный план. После добавления эффектов взаимодействия может не хватить степеней свободы для проверки гипотезы адекватности и потребуется реализация ещё двух-трех опытов внутри области эксперимента.

Все остальные способы построения интерполяционной формулы связаны с необходимостью проведения новых опытов. Один из них – достройка плана. Используются все те же приемы, что и при устранении незначимости коэффициентов регрессии: метод «перевала», достройка до полного факторного эксперимента, до дробной реплики, для которой ранее смешанные эффекты становятся «чистыми», достройка до плана второго порядка.

Наконец, если не удалось все же получить адекватную модель, то остается разбить область эксперимента на несколько подобластей и описать отдельно каждую из них. Это требует уменьшения интервалов варьирования факторов.

Приведем блок-схему принятия решений в задаче построения интерполяционной формулы для случая, когда лилейная модель неадекватна. Если линейная модель адекватна, то задача решена.

Рисунок 8

Крутое восхождение по поверхности отклика

Вопросы:

1. **П**ринятие решений после построения модели процесса?
2. Интерпретация результатов?

Список литературы:

1. . Красовский Г.И., Филаретов Г.Ф. Планирование эксперимента. – Минск: Изд-во БГУ им. В.И. Ленина, 1982. – 302 с.
2. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика. – М.: Изд-во Высшая школа, 1972. – 308 с.
3. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука, 1976.
4. Асатурян В.И. Теория планирования эксперимента. – М.: Радио и связь, 1983.
5. Налимов В.В. Теория эксперимента. – М.: Наука, 1971.
6. Планирование и организация измерительного эксперимента. – М.: Высшая школа, 1987.

Лекция №11

Движение по градиенту

Наиболее короткий путь к оптимуму – направление градиента функции отклика. Градиент непрерывной однозначной функции φ есть вектор

$$\nabla\varphi = \frac{d\varphi}{dx_1}i + \frac{d\varphi}{dx_2}j + \ldots + \frac{d\varphi}{dx_k}k,$$

где $\nabla\varphi$ – обозначение градиента, $d\varphi/dx_i$ – частная производная функции по i-му фактору, i, j, k – единичные векторы в направлении координатных осей.

Следовательно, составляющие градиента суть частные производные функции отклика, оценками которых являются, коэффициенты регрессии.

Изменяя независимые переменные пропорционально величинам коэффициентов регрессии, мы будем двигаться в направлении градиента функции отклика по самому крутому пути. Поэтому процедура движения к почти стационарной области называется крутым восхождением.

Величины составляющих градиента определяются формой поверхности отклика и теми решениями, которые были приняты при выборе параметра оптимизации, нулевой точки и интервалов варьирования. Знак составляющих градиента зависит только от формы поверхности отклика и положения нулевой точки.

Расчет крутого восхождения

Возникает вопрос: а как выбрать шаг движения по градиенту? Это еще один этап, для которого не существует формализованного решения. Небольшой шаг потребует значительного числа опытов при движении к оптимуму, большой шаг увеличивает вероятность проскока области оптимума. Во всяком случае, аналогично выбору интервалов варьирования, нижняя граница задается возможностью фиксирования двух соседних опытов, а верхняя областью определения фактора. Для облегчения работы шаги обычно округляют.

На расчет градиента не оказывает влияние b_0. Для качественных факторов на двух уровнях либо фиксируется лучший уровень, либо градиент реализуется дважды для каждого уровня в отдельности. Незначимые факторы стабилизируются на любом уровне в интервале ±1. Если нет специальных соображений, то выбирают нулевой уровень. Если же по экономическим соображениям, например, выгодно поддерживать нижний уровень, то выбирают его. В движении по градиенту эти факторы не участвуют.

Таким образом, расчет сводится к тому, чтобы выбрать шаг движения по одному из факторов и пропорционально произведениям коэффициентов регрессии на интервалы варьирования рассчитать шаги по другим факторам.

Остались не рассмотренными два момента: как влияют на крутое восхождение соотношения численных значений коэффициентов регрессии и почему движение по градиенту начинается из нулевой точки.

Представим себе, что в адекватном линейном уравнении значим только один коэффициент. Тогда в движении по градиенту будет участвовать только один фактор. Многофакторная задача выродится в однофакторную. А это менее эффективно. Рассмотренный случай является крайним, но в практике довольно часто b-коэффициенты существенно различаются между собой, оставаясь значимыми.

Функция, величины коэффициентов которой различаются не существенно, называется симметричной относительно коэффициентов. Движение по градиенту для симметричной функции наиболее эффективно. Удачным выбором интервалов варьирования можно сделать симметричной любую линейную функцию для значимых факторов.

На первом этапе планирования не всегда удается получить симметричную функцию. Если функция резко асимметрична (коэффициенты различаются на порядок), то выгоднее вновь поставить эксперимент, изменив интервалы варьирования, а не двигаться по градиенту.

Реализация мысленных опытов

Рассчитав составляющие градиента, мы получили условия мысленных опытов. Число мысленных опытов зависит от задачи. Ограничением сверху служит граница области определения хотя бы по одному из факторов. Иногда по технологическим соображениям нет смысла определять условия многих опытов. Обычно рассчитывается 5–10 мысленных опытов.

Как реализовать мысленные опыты? Нужно ли ставить все опыты подряд или только некоторые из них? С какого опыта начинать? Если модель адекватна, то начинают реализацию с тех опытов, условия которых выходят за область эксперимента хотя бы по одному из факторов. Для неадекватной модели часто 1–2 опыта выполняют в области эксперимента.

Условия мысленных опытов следует тщательно обдумать и убедиться, что нет затруднений в их реализации. Если что-то не ладится, можно изменить шаг и рассчитать мысленные опыты заново.

Существует две принципиально различные стратегии реализации мысленных опытов. Все намеченные к реализации опыты ставятся одновременно либо последовательно по некоторой программе. Одновременно могут ставиться все мысленные опыты через один, через два и т. д. Последовательный принцип заключается в том, что вначале ставятся два-три опыта, анализируются результаты и принимается решение о постановке новых опытов. Выбор стратегий определяется стоимостью опытов, их длительностью и условиями экспериментирования.

Представьте себе задачу, в которой опыт длится несколько месяцев, но одновременно можно поставить довольно большое число опытов. При последовательной стратегии реализация мысленных опытов надолго затягивается. Выгоднее реализовать сразу все намеченные опыты. Это характерно для сельскохозяйственных, биологических, металлургических задач и т.д.

Преимущество одновременной реализации опытов в том, что эта стратегия исключает временной дрейф.

Когда опыты быстры и дешевы, эта стратегия вполне пригодна. А если опыты дороги, приходится пользоваться последовательной стратегией, так как минимизация числа опытов приобретает большую актуальность.

Имеется несколько вариантов последовательной стратегии. Можно реализовать опыты по одному и после каждого анализировать результаты. Другой путь – ставятся одновременно два-три опыта и затем принимаются решения. При незначительном изменении параметра оптимизации (поверхность пологая) следующим реализуется далеко отстоящий опыт, при сильном (поверхность крутая) – близлежащий.

Иногда пользуются методом «ножниц»: реализуются два крайних мысленных опыта, а затем прощупывается пространство внутри этого интервала. Минимальное число опытов – три, так как оптимум необходимо захватить «в вилку». Два опыта могут оказаться достаточными, когда координаты оптимума близки к координатам опытов исходного плана или же когда попытка продвинуться по неадекватной модели оказывается неудачной.

Крутое восхождение может считаться эффективным, если хотя бы один из реализованных опытов даст лучший результат по сравнению с наилучшим опытом серии.

Остановимся на некоторых особенностях реализации опытов крутого восхождения.

Рассмотрим следующую ситуацию. При эффективном крутом нисхождении достигается граница области определения одного из факторов. По этому фактору дальше двигаться нельзя. Возможны два решения: зафиксировать значение этого фактора и дальше двигаться по остальным или остановиться и поставить новую серию опытов линейного приближения. На практике чаще предпочитают первое решение. В этом случае нужно продолжить расчет мысленных опытов и выбрать стратегию их реализации.

Особого рассмотрения заслуживает постановка повторных опытов. Чаще всего повторные опыты не ставятся, а дублируется только наилучший результат. Будет, конечно, не хуже, если ставить параллельные опыты во всех точках.

Иногда приходится считаться с возможностью временного дрейфа. Ведь между исходной серией опытов и движением по градиенту может пройти значительное время. Здесь можно рекомендовать систематическое повторение нулевых точек исходного плана, рандомизированных с точками крутого восхождения. Это дает возможность проверить гипотезу о наличии дрейфа.

В соответствии с шаговым принципом «ползания» по поверхности отклика крутое восхождение может осуществляться многократно, пока не будет достигнута почти стационарная область.

Вопросы:

1. Суть реализации мысленных опытов?
2. Расчет кругового восхождения?

Список литературы

1. . Красовский Г.И., Филаретов Г.Ф. Планирование эксперимента. – Минск: Изд-во БГУ им. В.И. Ленина, 1982. – 302 с.
2. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика. – М.: Изд-во Высшая школа, 1972. – 308 с.
3. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука, 1976.
4. Асатурян В.И. Теория планирования эксперимента. – М.: Радио и связь, 1983.
5. Налимов В.В. Теория эксперимента. – М.: Наука, 1971.
6. Планирование и организация измерительного эксперимента. – М.: Высшая школа, 1987.

Лекция № 12

Принятие решений после крутого восхождения

После завершения крутого восхождения возникают довольно разнообразные ситуации, требующие принятия решений о дальнейших действиях.
Ситуации различаются по признаку: оказалось крутое восхождение эффективным или нет. Положение оптимума (близко, далеко, неопределенно) также имеет значение в принятии решений. В некоторых случаях нужно учитывать адекватность (или неадекватность) линейной модели.

Крутое восхождение эффективно

Об эффективности движения по градиенту можно судить по величине параметра оптимизации. Движение по градиенту считается эффективным, если реализация мысленных опытов, рассчитанных на стадии крутого восхождения, приводит к улучшению значения параметра оптимизации по сравнению с самым хорошим результатом в матрице.
При эффективном крутом восхождении возможны два исхода: область оптимума достигнута или область оптимума не достигнута.
Область оптимума достигнута. Этот случай является самым легким в смысле принятия решений. Экспериментатор может окончить исследование, если задача заключалась в достижении области оптимума, или продолжить исследование, если задача заключалась не только в достижении области оптимума, но и в детальном ее изучении. При этом необходимо достроить линейный план до плана второго порядка и результаты эксперимента представить в виде полинома второй степени. Перечисленные два варианта принятия решений следуют из концепции Бокса–Уилсона согласно которой задача оптимизации условно разбиваете на два этапа. Первый этап – крутое восхождение с целью скорейшего достижения области оптимума. При этом используется линейное планирование. Линейный план может использоваться один или несколько раз в зависимости от

интенсивности продвижения. Второй этап – описание области оптимума методами нелинейного планирования. При эффективном крутом восхождении весьма часто удается быстро приблизиться к области оптимума (совершить крутое восхождение один раз). Исследователь попадает в область оптимума, которая не может быть описана линейным приближением, и движение по методу крутого восхождения заканчивается. Завершается первый этап оптимизации. Метод крутого восхождения не решает вопроса о самой лучшей точке поверхности отклика, об экстремуме. Чтобы изучить область оптимума, необходимо перейти ко второй стадии планирования – к исследованию почти стационарной области. В принятии решений мы должны рассматривать и этот вариант.

Область оптимума не достигнута. В этом случае строится линейный план следующего цикла и исследование продолжается.

При построении линейного плана второго цикла, прежде всего, возникает вопрос о выборе центра эксперимента. Самая простая рекомендация – расположить центр нового плана в той части факторного пространства, которая соответствует условиям наилучшего опыта при крутом восхождении.

Крутое восхождение неэффективно

Принимать решения при неэффективном движении по градиенту гораздо сложнее. Принятие решений во многом зависит от определенности ситуации (далеко от оптимума, близко, неопределенно) и от адекватности линейной модели. Наиболее типичные случаи показаны на блок-схеме.

Рисунок 9

Рассмотрим каждую ситуацию отдельно.

Область оптимума близка. Если при реализации матрицы планирования удалось получить достаточно высокие значения параметра оптимизации и при крутом восхождении улучшить их не удалось, то наиболее типичными являются решения: 1) окончание исследования (выбирается лучший опыт); 2) построение плана второго порядка для описания облает оптимума.

Если линейная модель была неадекватна, то возможно третье решение – возврат к блок-схеме, чтобы выяснить причины неадекватности линейной модели.

Крутое восхождение неэффективно. Положение оптимума неопределенное. Если нет информации о положении оптимума и на стадии крутого восхождения не удалось улучшить значение параметра оптимизации, то можно рекомендовать поставить опыты в центре эксперимента с тем, чтобы оценить вклад квадратичных членов. При значимой сумме можно приступать к достройке линейного плана до плана второго порядка, так как наличие квадратичных членов свидетельствует о близости к почти стационарной области.

Обратим внимание на то, что при незначимой сумме обратного вывода делать нельзя, ибо возможен, например, такой случай: $b_{11} = 5{,}7$, $b_{22} = –5{,}3$, $b_{11} + b_{22} = +0{,}4$. Сумма незначима, так как коэффициенты имеют разные знаки.

Это случай, когда имеется два оптимума. Если же есть основание полагать, что оптимум один, то при незначимой сумме квадратичных членов можно приступить ко второму циклу крутого восхождения.

Вопросы:

1. Принятие решений после кругового восхождения?

Список литературы

1. . Красовский Г.И., Филаретов Г.Ф. Планирование эксперимента. – Минск: Изд-во БГУ им. В.И. Ленина, 1982. – 302 с.
2. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика. – М.: Изд-во Высшая школа, 1972. – 308 с.
3. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука, 1976.
4. Асатурян В.И. Теория планирования эксперимента. – М.: Радио и связь, 1983.
5. Налимов В.В. Теория эксперимента. – М.: Наука, 1971.
6. Планирование и организация измерительного эксперимента. – М.: Высшая школа, 1987.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Основная

1. **Амерханов, Р.А., Ерошенко, Г.П., Шелиманова, Е.В.** Эксплуатация теплоэнергетических установок и систем / Р.А. Амерханов, Г.П. Ерошенко, Е.В. Шелиманова. – М.: «Энергоатомиздат», 2008. – 447 с.
2. **Оськин, С.В.** Рекомендации для выполнения и защиты магистерской диссертации / С.В. Оськин. – Краснодар, КубГАУ, 2010. – 40 с.

Дополнительная

1. **Трифонова, М.Ф., Заика, П.М., Устюжанин, А.П.** Основы научных исследований / М.Ф. Трифонова, П.М. Заика, А.П. Устюжанин. – М.: «Колос», 1993. – 239 с.
2. **Ерошенко, Г.П., Березнев, Ю.И.** Решение инженерных задач в условиях неопределенности / Г.П. Ерошенко, Ю.И. Березнев. – Саратов, СГАУ, 2004. – 162 с.
3. **Короткова, Е.И.** Практикум по планированию экспериментов / Е.И. Короткова. – Томск: Изд-во ТПУ, 2003. – 97 с.
4. **Красовский, Г.И., Филаретов, Г.Ф.** Планирование эксперимента / Г.И. Красовский, Г.Ф. Филаретов – Минск: Изд-во БГУ им. В.И. Ленина, 1982. – 302 с.
5. **Гмурман, В.Е.** Теория вероятностей и математическая статистика / В.Е. Гмурман – М.: Изд-во Высшая школа, 1972. – 308 с.
6. **Адлер, Ю.П., Маркова, Е.В., Грановский, Ю.В.** Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий / Ю.П. Адлер, Е.В. Маркова, Ю.В. Грановский – М.: Наука, 1976.
7. **Асатурян, В.И.** Теория планирования эксперимента / В.И. Асатурян – М.: Радио и связь, 1983.
8. **Налимов, В.В.** Теория эксперимента / В.В. Налимов – М.: Наука, 1971.

9. Планирование и организация измерительного эксперимента. Е.Т. Володарский, Б.Н. Малиновский, Ю.М. Туз. М.: Высшая школа, 1987.

10. Электронная библиотека СГАУ–http://libraru-sgau.ru

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Амерханов Р.А., Ерошенко Г.П., Шелиманова Е.В. Эксплуатация теплоэнергетических установок и систем. – М.: «Энергоатомиздат», 2008. – 447 с.

2. Оськин С.В. Рекомендации для выполнения и защиты магистерской диссертации. – Краснодар, КубГАУ, 2010. – 40 с.

3. Трифонова М.Ф., Заика П.М., Устюжанин А.П. Основы научных исследований. – М.: «Колос», 1993. – 239 с.

4. Ерошенко Г.П., Березнев Ю.И. Решение инженерных задач в условиях неопределенности. – Саратов, СГАУ, 2004. – 162 с.

3. Короткова Е.И. Практикум по планированию экспериментов. – Томск: Изд-во ТПУ, 2003. – 97 с.

4. Красовский Г.И., Филаретов Г.Ф. Планирование эксперимента. – Минск: Изд-во БГУ им. В.И. Ленина, 1982. – 302 с.

5. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика. – М.: Изд-во Высшая школа, 1972. – 308 с.

6. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука, 1976.

7. Асатурян В.И. Теория планирования эксперимента. – М.: Радио и связь, 1983.

8. Налимов В.В. Теория эксперимента. – М.: Наука, 1971.

9. Планирование и организация измерительного эксперимента. – М.: Высшая школа, 1987.

10. Электронная библиотека СГАУ–http://libraru-sgau.ru

Содержание