

Основная литература

1. Спири́н Н.А. Методы планирования и обработки результатов инженерного эксперимента: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по программам бакалавриата 22.03.02 и магистратуры 22.04.02 направления «Металлургия» / Н.А.Спири́н, В.В.Лавров, Л.А.Зайнуллин, А.Р.Бондин, А.А.Бурыкин; под общ. ред. Н.А.Спирина. Екатеринбург: ООО «УИНЦ», 2015. – 289 с.
2. Мельниченко А.С. Статистический анализ в металлургии и материаловедении: Учебник для металлургических специальностей вузов. – М.: Издательский дом МИСИС, 2009. – 268 с.
3. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика. 12 –е изд. –М.: Высшее образование, 2007. – 479 с.
4. Теория случайных процессов и ее инженерные приложения: Учебное пособие для вузов/ Е.С.Венцель, Л.А.Овчаренко и др. – М.: КНОРУС, 2011. – 448 с.

Дополнительная литература

1. Организация металлургического эксперимента. Учебное пособие для вузов / Г.Е.Белый, В.В.Дембовский, О.В.Соценко. Под ред. В.В.Дембовского. – М.: Металлургия, 1993. – 256 с.
2. Теория и техника теплофизического эксперимента: Учебное пособие для вузов / Ю.Ф. Гортышов, Ф.Н. Дресвянников, Н.С.Идиатуллин и др. Под ред. В.К.Щукина. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 360 с.
3. Налимов В.В., Голикова Т.И. Логические основания планирования эксперимента. – М.: Металлургия, 1980. – 152 с.
4. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука, 1976. – 279 с.
5. Чекотовский Э.В. Графический анализ статистических данных в Microsoft Excel 2000. Киев: Диалектика, 2002. – 462 с.

МЕТОДЫ ПЛАНИРОВАНИЯ И ОБРАБОТКИ РЕЗУЛЬТАТОВ

ИНЖЕНЕРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Спирин Н.А., Лавров В.В., Зайнуллин Л.А., Бондин А.Р., Бурькин А.А.

учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по программам бакалавриата 22.03.02 и магистратуры 22.04.02 направления «Металлургия» / Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина. Екатеринбург, 2015. (Издание 2-е переработанное и дополненное). — 289 с.

Электронный научный архив УрФУ:

<http://elar.urfu.ru/handle/10995/39965>

ПОНЯТИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Термину эксперимент устанавливается следующее определение – система операций, воздействий и (или) наблюдений, направленных на получение информации об объекте исследования.

Планирование эксперимента – выбор плана эксперимента, удовлетворяющего заданным требованиям, совокупность действий направленных на разработку стратегии экспериментирования (от получения априорной информации до получения работоспособной математической модели или определения оптимальных условий). Это целенаправленное управление экспериментом, реализуемое в условиях неполного знания механизма изучаемого явления.

Хотя объекты исследований очень разнообразны, методы экспериментальных исследований имеют много общего:

1. каким бы простым ни был эксперимент, вначале выбирают план его проведения;
2. стремятся сократить число рассматриваемых переменных, для того чтобы уменьшить объем эксперимента;
3. стараются контролировать ход эксперимента;
4. пытаются исключить влияние случайных внешних воздействий;
5. оценивают точность измерительных приборов и точность получения данных;
6. и наконец, в процессе любого эксперимента анализируют полученные результаты и стремятся дать их интерпретацию, поскольку без этого решающего этапа весь процесс экспериментального исследования не имеет смысла.

КЛАССИФИКАЦИЯ ВИДОВ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Качественный эксперимент устанавливает только сам факт существования какого-либо явления, но при этом не дает никаких количественных характеристик объекта исследования. Любой эксперимент, каким бы сложным он ни был, всегда заканчивается представлением его результатов, формулировкой выводов, выдачей рекомендаций. Эта информация может быть выражена в виде графиков, чертежей, таблиц, формул, статистических данных или словесных описаний. Качественный эксперимент как раз и предусматривает именно словесное описание его результатов.

Количественный эксперимент не только фиксирует факт существования того или иного явления, но, кроме того, позволяет установить соотношения между количественными характеристиками явления и количественными характеристиками способов внешнего воздействия на объект исследования. Итак, количественный эксперимент, прежде всего, предполагает количественное определение всех тех способов внешнего воздействия на объект исследования, от которых зависит его поведение – количественное описание всех факторов.

Фактор – переменная величина, по предположению влияющая на результаты эксперимента.

При проведении опытов очень многое зависит от того, насколько активно экспериментатор может "вмешиваться" в исследуемое явление, имеет он или нет возможность устанавливать те уровни факторов, которые представляют для него интерес.

С этой точки зрения все факторы можно разбить на три группы:

- **контролируемые и управляемые** – это факторы, для которых можно не только зарегистрировать их уровень, но еще и задать в каждом конкретном опыте любое его возможное значение;
- **контролируемые, но неуправляемые факторы** – это факторы, уровни которых можно только регистрировать, а вот задать в каждом опыте их определенное значение практически невозможно;
- **неконтролируемые** – это факторы, уровни которых не регистрируются экспериментатором и о существовании которых он даже может и не подозревать.

Отклик – наблюдаемая случайная переменная, по предположению зависящая от факторов.

КЛАССИФИКАЦИЯ ВИДОВ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

По тому, какой группой факторов располагает исследователь, количественный эксперимент в свою очередь можно разделить еще на два вида. Если в распоряжении экспериментатора нет управляемых факторов, то такой эксперимент носит название пассивного.

Пассивный эксперимент – эксперимент, при котором уровни факторов в каждом опыте регистрируются исследователем, но не задаются.

Активный эксперимент – эксперимент, в котором уровни факторов в каждом опыте задаются исследователем.

Поскольку в этом случае экспериментатор имеет возможность "активно" вмешиваться в исследуемое явление, то естественно, что активный эксперимент всегда предполагает какой-либо план его проведения.

План эксперимента – совокупность данных, определяющих число, условия и порядок реализации опытов.

Планирование эксперимента – выбор плана эксперимента, удовлетворяющего поставленным требованиям.

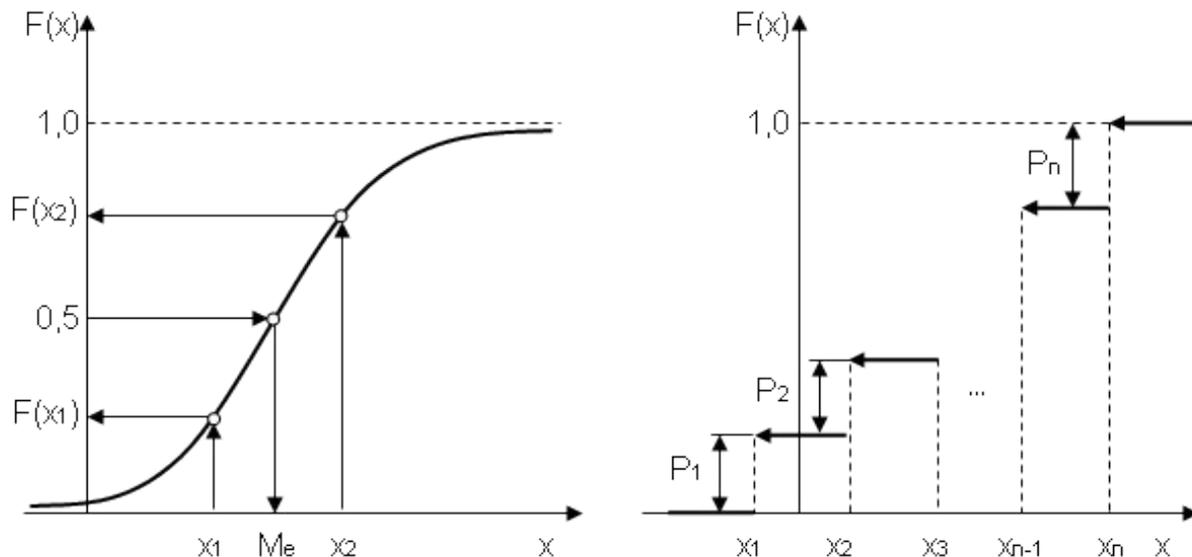
По условиям проведения различают лабораторный и промышленный эксперименты.

Полностью свойства случайной законом ее распределения, под которым понимают связь между возможными значениями случайной величины и соответствующими им вероятностями.

Распределение случайной величины – функция, которая однозначно определяет вероятность того, что случайная величина принимает заданное значение или принадлежит к некоторому заданному интервалу.

В математике используют два способа описания распределений случайных величин: интегральный (функция распределения) и дифференциальный (плотность распределения).

Функция распределения $F(x)$ – функция, определяющая для всех действительных x вероятность того, что случайная величина X принимает значение не больше, чем x .



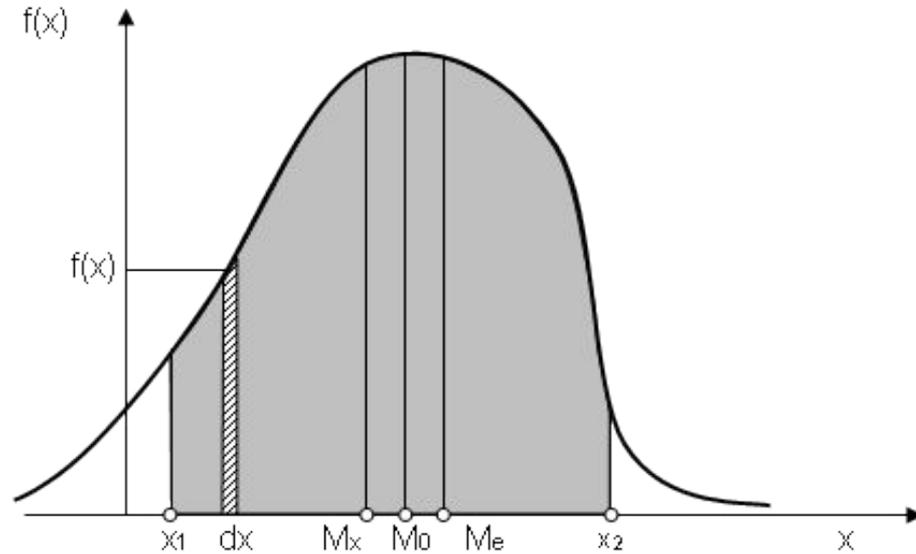
Например, для случайной величины, которая удовлетворяет так называемому нормальному закону распределения (закону распределения Гаусса), функцию распределения можно записать в виде

Рис.2.1. Интегральный закон распределения – функция распределения : а – непрерывной случайной величины; б – дискретной случайной величины

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{(x-M_x)^2}{2\sigma_x^2}} dx,$$

Плотность распределения $f(x)$ – первая производная функции распределения.

$$f(x) = \frac{dF(x)}{dx}.$$



1. Плотность распределения вероятностей является неотрицательной функцией,

$$f(x) \geq 0.$$

2. Функция распределения случайной величины X равна определенному интегралу от плотности

распределения в пределах $(-\infty, x)$:
$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(x) dx.$$

3. Вероятность события, состоящая в том, что случайная величина X примет значение, заключенное в полуинтервале $[x_1, x_2]$, равна определенному интегралу от плотности распределения вероятностей на этом полуинтервале

$$P(x_1 < X \leq x_2) = F(x_2) - F(x_1) = \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx.$$

4. Интеграл плотности распределения в бесконечно большом интервале $(-\infty, +\infty)$ равен единице:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = P(-\infty < X \leq +\infty) = 1,$$

Параметр распределения – постоянная, от которой зависит функция распределения.

Математическое ожидание M_x – среднее взвешенное по вероятностям значение случайной величины.

$$M_x = \int_{-\infty}^{+\infty} xf(x) dx,$$

Мода M_o – значение случайной величины, соответствующее **локальному максимуму плотности вероятностей** для непрерывной случайной величины или **локальному максимуму вероятности** для дискретной случайной величины.

Медиана M_e – значение случайной величины, для которого функция распределения принимает значение $\frac{1}{2}$, или имеет место «скачок» со значения, меньшего чем $\frac{1}{2}$, до значения, большего чем $\frac{1}{2}$.

Дисперсия случайной величины σ_x^2 – математическое ожидание случайной величины $(X - M_x)^2$ или, другими словами, центральный момент второго порядка.

$$\sigma_x^2 = \sum_{i=1}^n (x_i - M_x)^2 \cdot p(x_i).$$

$$\sigma_x^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - M_x)^2 \cdot f(x) dx,$$

Среднее квадратичное отклонение σ_x – неотрицательный квадратный корень из дисперсии.

$$\sigma_x = +\sqrt{\sigma_x^2}.$$

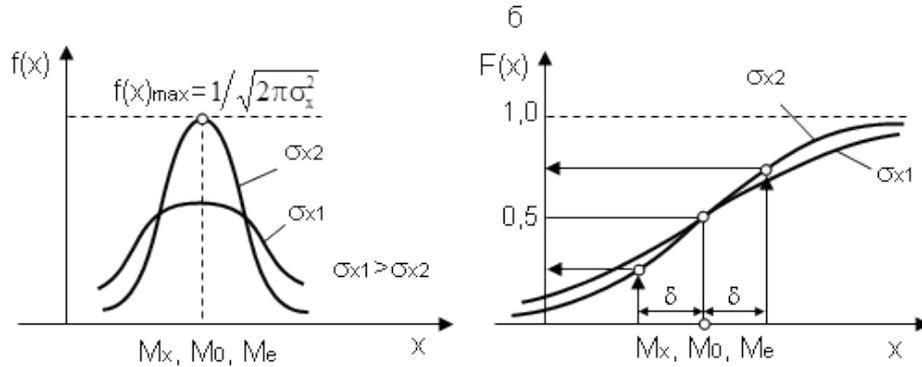
Квантиль порядка P, x_p – значение случайной величины, для которого функция распределения принимает значение P или имеет место «скачок» со значения, меньшего чем P, до значения, большего чем P:

$$F(x_p) = P.$$

$$P(x_{p_1} < X \leq x_{p_2}) = P(X \leq x_{p_2}) - P(X \leq x_{p_1}) = F(x_{p_2}) - F(x_{p_1}) = P_2 - P_1.$$

Нормальный закон распределения

Центральная предельная теорема математической статистики, «при определенных условиях распределение нормированной суммы n независимых случайных величин, распределенных по произвольному закону, стремится к нормальному, когда n стремится к бесконечности».



$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \cdot e^{-\frac{[x-M_x]^2}{2\sigma_x^2}}$$

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{(x-M_x)^2}{2\sigma_x^2}} dx,$$

Приведенная случайная величина – центрированная и нормированная случайная величина

$$Z = \frac{X - M_x}{\sigma_x}$$

$$M_z = 0 \quad \sigma_z^2 = 1$$

$$F(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^z e^{-\frac{z^2}{2}} dz = \Phi(z)$$

$$f(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{z^2}{2}} = \phi(z)$$

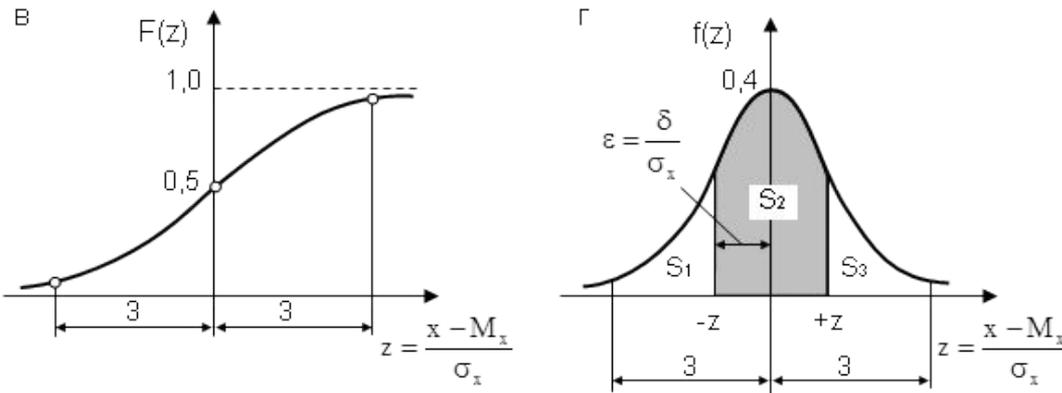


Рис. 2.3. Плотность распределения (а,г) и функция распределения (б,в) при нормальном законе распределения случайных величин

$$\Phi(z_p) = P \quad z_{1-p} = -z_p$$

Значения нормированной функции нормального распределения (функции и значения плотности нормированного нормального распределения табулированы и приведены в различных учебниках и справочниках по математической статистике.

В списке статистических функций электронных таблиц Microsoft Excel им соответствуют

НОРМ.РАСП(x ; 0; 1; ИСТИНА) или **НОРМ.СТ.РАСП**(z , ИСТИНА) – для

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{(x-M_x)^2}{2\sigma_x^2}} dx, \quad F(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^z e^{-\frac{z^2}{2}} dz = \Phi(z)$$

НОРМ.РАСП(x ; 0; 1; ЛОЖЬ) или **НОРМ.СТ.РАСП**(z , ЛОЖЬ) – для

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \cdot e^{-\frac{[x-M_x]^2}{2\sigma_x^2}} \quad f(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{z^2}{2}} = \phi(z)$$

Квантиль z_p порядка p , нормированного нормального закона распределения - это такое значение приведенной случайной величины Z , для которого функция распределения принимает значение P :

$$\Phi(z_p) = P.$$

Определение квантили z_p в электронных таблицах Microsoft Excel сводится к вычислению статистической функции **НОРМ.ОБР**(P ; 0; 1) или **НОРМ.СТ.ОБР**(P) (например, **НОРМ.ОБР**(0,95; 0; 1) = **НОРМ.СТ.ОБР**(0,95) = 1,644853).

Отличие какого-либо из значений случайной величины с нормальным законом распределения от ее математического ожидания не превосходит утроенного среднего квадратичного отклонения с вероятностью 0,997. Это свойство в математической статистике носит название **«правило трех сигм»**.

Предположим, что математическое ожидание содержания кремния в чугуне равно $M_{Si}=0,6\%$, а среднеквадратичное отклонение $\sigma_{Si}=0,15\%$. В этом случае мы можем быть уверены в том, что величина фактически измеренного значения процентного содержания кремния в чугуне будет находиться в интервалах:

$$0,6 \pm 1,00 \cdot 0,15 = 0,6 \pm 0,15 \text{ с вероятностью } 0,68;$$

$$0,6 \pm 1,64 \cdot 0,15 = 0,6 \pm 0,25 \text{ с вероятностью } 0,90;$$

$$0,6 \pm 1,96 \cdot 0,15 = 0,6 \pm 0,29 \text{ с вероятностью } 0,95;$$

$$0,6 \pm 3,00 \cdot 0,15 = 0,6 \pm 0,45 \text{ с вероятностью } 0,997,$$

т.е. из 1000 проб только 3 пробы по содержанию кремния в чугуне будут выходить из диапазона от 0,15 до 1,05%.

Вычисление параметров эмпирических распределений. Точечное оценивание

Наблюдаемая единица – действительный или условный предмет, над которым проводят серию наблюдений.

Результат наблюдения – характеристика свойств единицы, полученная опытным путем.

Генеральная совокупность – множество всех рассматриваемых единиц.

Выборка – любое конечное подмножество генеральной совокупности, предназначенное для непосредственных исследований.

Объем – количество единиц в выборке.

Оценивание – определение приближенного значения неизвестного параметра генеральной совокупности по результатам наблюдений.

Оценка – статистика, являющаяся основой для оценивания неизвестного параметра распределения.

Точечное оценивание – способ оценивания, заключающийся в том, что значение оценки принимают как неизвестное значение параметра распределения.

Выборочное среднее арифметическое

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

Выборочная дисперсия

$$S_x^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}$$

$$S_x^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - M_x)^2}{n}.$$

Выборочное среднее квадратичное отклонение

$$S_x = +\sqrt{S_x^2}$$

$$S_x = +\sqrt{S_x^2}.$$

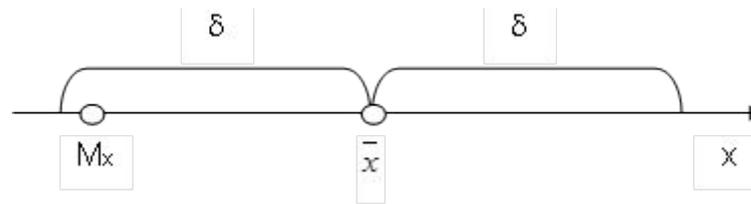
Оценивание с помощью доверительного интервала

Доверительный интервал – интервал, который с заданной вероятностью накрывает неизвестное значение оцениваемого параметра распределения.

Доверительная вероятность – вероятность того, что доверительный интервал накрывает действительное значение параметра, оцениваемого по выборочным данным.

Оценивание с помощью доверительного интервала – способ оценки, при котором с заданной доверительной вероятностью устанавливают границы доверительного интервала.

Построение доверительного интервала для математического ожидания



$$\bar{x} - z_{1-\alpha/2} \frac{\sigma_x}{\sqrt{n}} < M_x < \bar{x} + z_{1-\alpha/2} \frac{\sigma_x}{\sqrt{n}}$$

$$P = 1 - \alpha/2 - \alpha/2 = 1 - \alpha. \quad \delta = z_{1-\alpha/2} \frac{\sigma_x}{\sqrt{n}}$$

При построении доверительного интервала для математического ожидания обычно принимают $P_1 = \alpha/2$ и $P_2 = 1 - \alpha/2$, т.е. рассматривают симметричные границы относительно выборочного среднего арифметического. В инженерных приложениях для значений α обычно выбирают $\alpha = 0,1$ или $\alpha = 0,05$, реже $\alpha = 0,01$, т.е. строят такие доверительные интервалы, которые в 90 или 95% (реже 99%) случаев накрывают математическое ожидание. **НОРМ.СТ.ОБР(0,975) = 1,959961**)

Оценивание с помощью доверительного интервала (продолжение)

Проведено исследование содержания кремния при выплавке передельного чугуна в доменной печи. Всего было отобрано 50 проб чугуна и получены следующие данные: $M_{[Si]} = 0,65$, $\sigma([Si]) = 0,13$. Необходимо определить доверительный интервал $M_{[Si]}$ для вероятности $P=0,95$; Рассчитаем доверительный интервал:

$$0,65 - 1,96 \frac{0,13}{\sqrt{50}} < M_{[Si]} < 0,65 + 1,96 \frac{0,13}{\sqrt{50}},$$

$$0,61 \leq M_{[Si]} \leq 0,69.$$

На практике, как правило, число измерений (например, отбора проб шихты, чугуна, стали и других материалов) конечно и не превышает 10...30. При таком малом числе наблюдений фактическая дисперсия σ_x^2 неизвестна, поэтому при построении доверительного интервала для математического ожидания M_x используют выборочную дисперсию S_x^2 .

Построение доверительного интервала для математического ожидания (продолжение)

На практике, как правило, число измерений (например, отбора проб шихты, чугуна, стали и других материалов) конечно и не превышает 10...30. При таком малом числе наблюдений фактическая дисперсия σ_x^2 неизвестна, поэтому при построении доверительного интервала для математического ожидания M_x используют выборочную дисперсию S_x^2 .

$$\bar{x} - z_{1-\alpha/2} \frac{\sigma_x}{\sqrt{n}} < M_x < \bar{x} + z_{1-\alpha/2} \frac{\sigma_x}{\sqrt{n}}$$

$$\bar{x} - t_{\alpha,m} \frac{S_x}{\sqrt{n}} < M_x < \bar{x} + t_{\alpha,m} \frac{S_x}{\sqrt{n}}$$

где $t_{\alpha,m}$ – так называемый коэффициент Стьюдента (значение квантили статистики t порядка $P = 1 - \alpha / 2$ для числа степеней свободы $m = n - 1$).

Значения $t_{\alpha,m}$ табулированы, их можно определить также, воспользовавшись статистической функцией **СТЮДЕНТ.ОБР.2Х** из электронных таблиц Microsoft Excel, причем при $m > 30$ $t_{\alpha,m} \approx z_{1-\alpha/2}$. Так, при $\alpha = 0,05$ и $m = 31$ **СТЮДЕНТ.ОБР.2Х** (0,05;31) = 2,039515, а **НОРМ.СТ.ОБР**(1-0,05/2) = 1,959961.

Построение доверительного интервала для дисперсии

При построении доверительного интервала для дисперсии используется случайная величина χ^2 (читается: "хи-квадрат"),

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{x_i - \bar{x}}{\sigma_x} \right)^2 = \frac{n-1}{\sigma_x^2} \cdot S_x^2,$$

которая имеет так называемое распределение Пирсона, или χ^2 -распределение ("хи-квадрат-распределение").

$$S_x^2 \frac{n-1}{\chi_{P_1}^2} < \sigma_x^2 < S_x^2 \frac{n-1}{\chi_{P_2}^2}$$

доверительный интервал для дисперсии σ_x^2 с доверительной вероятностью $P = P_2 - P_1 = 1 - \alpha$.

При построении доверительного интервала в технических приложениях обычно принимают $P_1 = \alpha/2$ и $P_2 = 1 - \alpha/2$, а α выбирают равным 0,1 или 0,05, реже 0,01.

Квантили распределения Пирсона в Microsoft Excel для этого используется функция **ХИ2.ОБР.ПХ** (P;m).

$$\text{ХИ2.ОБР.ПХ}(0,025;2) = 7,377779 \text{ и } \text{ХИ2.ОБР.ПХ}(0,975;2) = 0,050636$$

Статистические гипотезы

Статистическая гипотеза – любое предположение, касающееся неизвестного распределения случайной величины.

Статистические гипотезы можно разделить на следующие группы.

✓ *Гипотезы о параметрах распределения.*

✓ *Гипотезы о виде распределения*

Нулевая гипотеза H_0 – гипотеза, подлежащая проверке. Это гипотеза, имеющая наиболее важное значение в проводимом исследовании.

Альтернативная гипотеза H_1 – каждая допустимая гипотеза, отличная от нулевой. Обычно в качестве альтернативной гипотезы принимают гипотезу вторую по значимости после основной.

Статистический критерий – однозначно определенный способ проверки статистических гипотез.

Критическая область ω – область со следующими свойствами: если значения применяемой статистики принадлежат данной области, то отвергают нулевую гипотезу; в противном случае ее принимают.

Различают односторонние и двусторонние критические области

Если хотят убедиться, что одна случайная величина строго больше или строго меньше другой, то используют одностороннюю критическую область.

$$H_0: \Theta = \Theta_0;$$

$$H_1^{(1)}: \Theta < \Theta_0;$$

$$H_1^{(2)}: \Theta > \Theta_0.$$

Если проверяют как положительные, так и отрицательные расхождения между изучаемыми величинами, то используют двусторонние критические области

$$H_0: \Theta = \Theta_0; \quad H_1^{(3)}: \Theta \neq \Theta_0.$$

Проверка любой статистической гипотезы в самом общем случае заключается в следующем:

- 1) формулирование нулевой гипотезы H_0 ;
- 2) выбор одной из альтернативных гипотез $H_1^{(1)}, H_1^{(2)}, H_1^{(3)}$;
- 3) поиск критерия, по которому может быть проверена сформулированная нулевая гипотеза H_0 ;
- 4) расчет значения статистики, применяемой для данного критерия;
- 5) выбор уровня значимости α ;
- 6) построение критической области ω при выбранном уровне значимости α ;
- 7) принятие решения: если значение статистики попало в критическую область – нулевая гипотеза отвергается, при этом вероятность ошибки (первого рода) не превышает выбранный уровень значимости; в противном случае – нулевая гипотеза принимается.

Отсев грубых погрешностей

Результаты наблюдений располагают в возрастающей последовательности

$$x_1 \leq x_2 \leq x_3 \dots \leq x_i \dots \leq x_n$$

H_0 : "Среди результатов наблюдений (выборочных, опытных данных) нет резко выделяющихся (аномальных) значений ".

Альтернативной гипотезой может быть

либо $H_1^{(1)}$: "Среди результатов наблюдений есть только одна грубая ошибка",

либо $H_1^{(2)}$: "Среди результатов наблюдений есть две или более грубых ошибки".

Критерий Н.В. Смирнова альтернативная гипотеза $H_1^{(1)}$

Если известно, что есть только одно аномальное значение, то оно будет крайним членом вариационного ряда. Поэтому проверять выборку на наличие одной грубой ошибки естественно при помощи статистики:

$$u_1 = \frac{\bar{x} - x_1}{s_x} \quad \text{если сомнение вызывает первый член вариационного ряда} \quad x_1 = \min_i x_i$$

$$u_n = \frac{x_n - \bar{x}}{s_x} \quad \text{если сомнителен максимальный член вариационного ряда} \quad x_n = \max_i x_i$$

При выбранном уровне значимости α критическая область для критерия Н.В. Смирнова строится следующим образом: $u_1 > u_{\alpha, n}$ или $u_n > u_{\alpha, n}$,

где $u_{\alpha, n}$ – это табличные значения. В случае если выполняется последнее условие (статистика попадает в критическую область), то нулевая гипотеза отклоняется, т.е. выброс x_1 или x_n не случаен и не характерен для рассматриваемой совокупности данных, а определяется изменившимися условиями или грубыми ошибками при проведении опытов

Сравнение двух рядов наблюдений. Сравнение двух дисперсий

Требуется установить, являются ли выборочные дисперсии $S_1^2 \neq S_2^2$ со степенями свободы m_1 и m_2 значимо отличающимися или же они характеризуют выборки, взятые из одной и той же генеральной совокупности или из генеральных совокупностей с равными дисперсиями ($\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma^2$).

В этом случае нулевая гипотеза формулируется в виде $H_0: \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma^2$, т.е. между двумя генеральными дисперсиями различия нет при заданном уровне значимости α .

Пусть по результатам испытаний двух независимых выборок объемом n_1 и n_2 из нормально распределенных совокупностей подсчитаны оценки дисперсий S_1^2 и S_2^2 , причем $S_1^2 > S_2^2$. Требуется проверить предположение (нулевую гипотезу H_0) о том, что указанные выборки принадлежат генеральным совокупностям с равными дисперсиями.

В соответствии с общим алгоритмом проверки любой статистической гипотезы:

1. $H_0: \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma^2$.

2. Возможно два варианта альтернативной гипотезы:

$$H_1^{(1)}: \sigma_1^2 \neq \sigma_2^2;$$

$$H_1^{(2)}: \sigma_1^2 > \sigma_2^2.$$

3. Используется F-критерий (критерий Фишера) – это отношение двух дисперсий (большой к меньшей),

$$F = \frac{S_1^2}{S_2^2}$$

4. Выбирается уровень значимости α .

5. Нулевую гипотезу принимают, т.е. полагают, что $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma^2$ при выполнении одного из неравенств (для различных альтернативных гипотез):

$$F \leq F_{(\alpha/2), m_1, m_2}$$

$$\text{при } H_1^{(1)} \sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$$

$$F \leq F_{\alpha, m_1, m_2}$$

$$\text{при } H_1^{(2)}: \sigma_1^2 > \sigma_2^2$$

$$S^2 = \frac{(n_1 - 1)S_1^2 + (n_2 - 1)S_2^2}{n_1 + n_2 - 2}$$

Проверка однородности нескольких дисперсий

Критерий Фишера используется для сравнения только двух дисперсий, однако на практике приходится сравнивать между собой три и более дисперсий.

При сопоставлении дисперсий ряда совокупностей нулевая гипотеза заключается в том, что все k совокупностей, из которых взяты выборки, имеют равные дисперсии.

$$1. H_0: \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = \dots = \sigma_k^2 = \sigma^2,$$

т.е. проверке подлежит предположение, что все эмпирические дисперсии $S_1^2, S_2^2, \dots, S_k^2$ относятся к выборкам из совокупности с одной и той же генеральной дисперсией σ^2 .

Пусть среди нескольких серий измерений обнаружена такая, выборочная дисперсия которой S_{\max}^2 заметно больше всех остальных.

$$2. \text{Альтернативная гипотеза может быть выбрана как } H_1: \sigma_{\max}^2 > \sigma^2.$$

3. При равном объеме $n_1 = n_2 = n_3 = \dots = n_k = n$ всех k выборок может быть использован так называемый критерий Кохрена G рассчитывается как отношение S_{\max}^2 к сумме всех выборочных дисперсий:

$$G = \frac{S_{\max}^2}{\sum_{i=1}^k S_i^2}.$$

4. В дальнейшем для выбранного уровня значимости α определяется значение этого критерия, которое зависит от числа степеней свободы $m = n - 1$ и числа сравниваемых дисперсий $k - G_{\alpha, m, k}$.

$$5. \text{Критическая область строится как } G \geq G_{\alpha, m, k}$$

6. При $G < G_{\alpha, m, k}$ гипотеза $H_0: \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = \dots = \sigma_k^2 = \sigma^2$ принимается в качестве рабочей, т.е. отличие выделенной дисперсии S_{\max}^2 считается несущественным.

В случае подтверждения однородности дисперсий можно сделать оценку обобщенной дисперсии σ^2 :

$$S^2 = \frac{\sum_{j=1}^k S_j^2}{k}.$$

Проверка гипотез о числовых значениях математических ожиданий

Для двух нормально распределенных генеральных совокупностей с неизвестными параметрами M_1, σ_1^2 и M_2, σ_2^2 получены независимые выборки объемом соответственно n_1 и n_2 ,

то для сравнения выборочных средних \bar{x}_1 и \bar{x}_2 выдвигается нулевая гипотеза о равенстве математических ожиданий:

1. $H_0: M_1 = M_2$.

2. При этом можно сформулировать три альтернативных гипотезы:

$$H_1^{(1)}: M_1 > M_2; H_1^{(2)}: M_1 < M_2; H_1^{(3)}: M_1 \neq M_2.$$

3. Как и в рассмотренной выше ситуации сравнения с известным математическим ожиданием, используется t-критерий.

4. Вид t-статистики зависит от того, равны $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma^2$ либо не равны $\sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$ между собой генеральные дисперсии (для ответа на этот вопрос можно воспользоваться, например, рассмотренным выше критерием Фишера).

В первом случае, когда дисперсии не имеют значимого отличия, статистика принимает вид

$$t = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{S \sqrt{\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}}} \quad S = \sqrt{\frac{(n_1 - 1)S_1^2 + (n_2 - 1)S_2^2}{n_1 + n_2 - 2}}$$

Во втором случае, когда дисперсии значимо отличаются друг от друга, $\sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$, статистика имеет вид

$$t = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{\sqrt{\frac{S_1^2}{n_1} + \frac{S_2^2}{n_2}}}$$

Проверка гипотез о числовых значениях математических ожиданий

(продолжение)

5. Границы критической области устанавливаются значениям квантилей t -распределения их можно определить, воспользовавшись статистической функцией **СТЮДЕНТ.ОБР.2Х** из электронных таблиц Microsoft Excel. При этом число степеней свободы m рассчитывается:

для $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma^2$ как $m = n_1 + n_2 - 2$;

для $\sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$ $\frac{1}{m} = \frac{c^2}{n_1 - 1} + \frac{(1-c)^2}{n_2 - 1}$, где $c = \frac{\frac{s_1^2}{n_1}}{\frac{s_1^2}{n_1} + \frac{s_2^2}{n_2}}$.

6. Нулевую гипотезу принимают, т.е. полагают, что $M_1 = M_2$ при выполнении неравенств:

- для альтернативных гипотез $H_1^{(1)}: M_1 > M_2$; $H_1^{(2)}: M_1 < M_2$
 $|t| \leq t_{2\alpha, m}$;
- для альтернативной гипотезы $H_1^{(3)}: M_1 \neq M_2$ $|t| \leq t_{\alpha, m}$.

Проверка гипотез о виде функции распределения

Нулевая гипотеза в данном случае заключается в том, что H_0 :- исследуемая генеральная совокупность не противоречит предполагаемому теоретическому закону распределения. При этом альтернативная гипотеза обычно формулируется как H_1 : случайная величина имеет любое другое распределение, отличное от предполагаемого.

1. Находят наибольшее (x_{\max}) и наименьшее (x_{\min}) выборочные значения случайной величины и вычисляют ее размах $R = x_{\max} - x_{\min}$.
2. Размах случайной величины разбивают на k равных интервалов. Количество интервалов k выбирают в зависимости от объема выборки. Например, при $n > 100$ его значение рекомендуется принимать равным $k = 9 \div 15$ (при $n < 100$ $k = 7$).
3. Определяют ширину интервала $h = R/k$.
4. Устанавливают границы интервалов и подсчитывают число попаданий случайной величины в каждый из выбранных интервалов \bar{m}_i , $1 \leq i \leq k$.
5. Определяют частоту попаданий для каждого интервала $P_i = \bar{m}_i / n$

Интервал	Число замеров в каждом интервале \bar{m}_i	Частота попадания в интервал $P_i = \bar{m}_i / n$
$x_1 \div x_2$	\bar{m}_1	\bar{m}_1 / n
$x_2 \div x_3$	\bar{m}_2	\bar{m}_2 / n
...
$x_i \div x_{i+1}$	\bar{m}_i	\bar{m}_i / n
...
$x_k \div x_{k+1}$	\bar{m}_k	\bar{m}_k / n

Проверка гипотез о виде функции распределения

1. Определяется величина ординаты $f_i = P_i/h$, где P_i – вероятность появления случайной величины в i -м интервале.
2. В системе координат $f_i=f(x)$ на ширине интервала h откладывают величины f_i как высоты и строятся прямоугольники.

Очевидно, что площадь элементарного прямоугольника

$$S_i = h \cdot f_i = h \cdot \frac{P_i}{h} = P_i = \frac{m_i}{n}$$

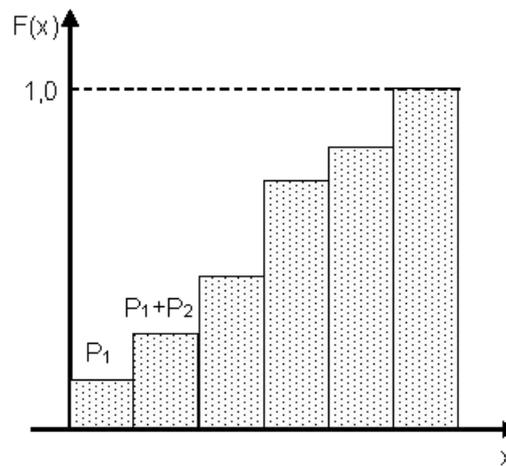
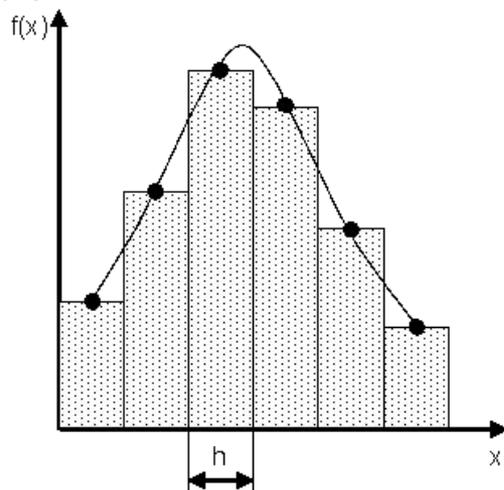
равна отношению числа опытов m_i , при которых случайная величина оказалась внутри этого интервала, к общему числу опытов n .

Площадь всей гистограммы $S = \sum_{i=1}^k S_i = \sum_{i=1}^k P_i = 1$. Следовательно, площадь, ограниченная гистограммой, равна

единице.

3. Построение гистограммы интегральной функции распределения осуществляется суммированием вероятностей:

$$F(x) = \sum_{i=1}^k P_i.$$



К построению гистограммы случайной величины

Критерий Пирсона

Рассмотрим методику проверки гипотезы нормального распределения по критерию χ^2 Пирсона. Этот критерий кроме определения доверительного интервала для дисперсии нередко используется для проверки согласованности распределений, полученных по данным выборки с некоторой теоретической плотностью распределения.

В данном случае применение критерия χ^2 предполагает использование свойств нормированного (стандартного) нормального распределения. Напомним, что уравнение кривой плотности стандартного нормального распределения имеет вид

$$f(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2} \approx 0,4 \cdot e^{-z^2/2}; \quad z = \frac{x - M_x}{\sigma_x}.$$

Тогда теоретическая вероятность попадания случайной величины в интервал $\Delta z = z_{i+1} - z_i$ в случае нормального распределения можно определить по формуле

$$P_i^* = F(z_{i+1}) - F(z_i) = \frac{1}{2\pi} \int_{z_i}^{z_{i+1}} e^{-u^2/2} du.$$

Отличие оценки закона распределения P от теоретического закона распределения P^* можно охарактеризовать величиной

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^k C_i (P_i - P_i^*)^2,$$

где P_i и P_i^* – оценка и теоретическая вероятность случайной величины для i -го интервала; C_i – весовые коэффициенты, которые с большим весом учитывают отклонения для меньших P_i .

Критерий Пирсона (продолжение)

Пирсон выбрал весовые коэффициенты следующим образом:

$$C_i = \frac{n}{P_i^*}.$$

$$\text{Следовательно, } \chi^2 = n \sum_{i=1}^k \frac{(P_i - P_i^*)^2}{P_i^*} = n \sum_{i=1}^k \frac{(\bar{m}_i/n - P_i^*)^2}{P_i^*} = \sum_{i=1}^k \frac{(\bar{m}_i - n \cdot P_i^*)^2}{n \cdot P_i^*}.$$

Очевидно, что при идеальном соответствии экспериментальных данных нормальному закону распределения экспериментальное значение критерия Пирсона будет равно нулю, т.к. $P_i = P_i^*$. Поэтому число степеней свободы чаще всего определяется как $m = k - 2$.

Теоретическое значение критерия Пирсона $\chi^2_{\alpha; m}$ определяется с использованием пакетов прикладных программ при заданном уровне значимости α и числе степеней свободы m .

Алгоритм использования критерия Пирсона заключается в следующем.

1. Выдвигаются нуль-гипотеза H_0 : "Отличие экспериментальных данных от нормального закона распределения не существенно" и альтернативная ей гипотеза H_1 : "Отличие экспериментальных данных от нормального закона распределения существенно, т.е. экспериментальные данные не подчиняются закону нормального распределения".

2. По результатам экспериментальных измерений и предположению нормального закона их распределения определяется расчетное значение критерия Пирсона χ^2 .

3. Определяют число степеней свободы m , задаются уровнем значимости α и определяют теоретическое значение критерия Пирсона $\chi^2_{\alpha; m}$.

4. Если $\chi^2 < \chi^2_{\alpha; m}$, то нуль-гипотеза H_0 о нормальном законе распределения экспериментальных данных принимается с доверительной вероятностью $P=1-\alpha$. В противном случае нуль-гипотеза отвергается и принимается альтернативная гипотеза H_1 .

ХИ2.ОБР.ПХ($\alpha; m$) из электронных таблиц Microsoft Excel

Отметим важные рекомендации по использованию критерия χ^2 .

Если при некотором числе измерений критерий $\chi^2 > \chi^2_{\infty; m}$, но сомнения в нормальности распределения отсутствуют, то следует, если имеется возможность, увеличить число измерений в несколько раз и повторить анализ по этому же критерию.

Число степеней свободы $m=k-2$ относится к такому случаю, когда оба параметра нормального закона распределения определяются по результатам измерений, т.е. когда вместо точных измерений значений M_x и σ_x применяют их эмпирические значения (оценки) \bar{x} и S_x . Если же значение M_x точно известно (например, при измерении эталона), то число степеней свободы равно $k=n-1$; если известны оба параметра M_x и σ_x , то число степеней свободы равно $k=n$. На практике такая ситуация встречается относительно редко, и поэтому для получения числа степеней свободы не менее пяти желательно брать число интервалов не менее семи (иногда девяти).

В табл. приведено содержание кремния в чугуна при выплавке передельного чугуна в доменной печи, которое изменяется в пределах от 0,32 до 0,95%. Всего было отобрано 50 проб чугуна.

Содержание кремния в чугуна по результатам отбора 50 проб

Номер пробы	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
[Si],%	0,32	0,35	0,45	0,43	0,41	0,51	0,52	0,53	0,57	0,58
Номер пробы	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
[Si],%	0,59	0,56	0,56	0,58	0,54	0,57	0,61	0,62	0,63	0,64
Номер пробы	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
[Si],%	0,65	0,66	0,67	0,68	0,69	0,61	0,65	0,62	0,63	0,67
Номер пробы	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
[Si],%	0,65	0,62	0,68	0,71	0,72	0,78	0,75	0,72	0,79	0,72
Номер пробы	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50
[Si],%	0,73	0,72	0,79	0,73	0,84	0,82	0,87	0,90	0,95	0,93

Предварительно вычислим с использованием статистических функций **СРЗНАЧ**, **ДИСП** и **СТАНДОТКЛОН.В** среднее значение \bar{x} , выборочную дисперсию S_x^2 и стандартное отклонение S_x , которые оказались равны соответственно $\bar{x}=0,65$, $S_x^2=0,01853$ и $S_x=0,1361$.

Примем число интервалов равным 7. Тогда величина интервала составит $h=(0,95-0,32)/7=0,09=0,1$.

Процедура вычисления критерия χ^2 Пирсона по данным примера

Интервал $x_{i-1} \div x_i$	\bar{m}_i	$F(x_i)$	$P_i^*=F(x_i)-F(x_{i-1})$	nP_i^*	$\bar{m}_i - nP_i^*$	$\chi_i^2 = \frac{(\bar{m}_i - nP_i^*)^2}{nP_i^*}$
0,3÷0,4	2	0,033	0,033	1,7	0,4	0,07
0,4÷0,5	3	0,135	0,102	5,1	-2,1	0,87
0,5÷0,6	11	0,356	0,221	11,1	-0,1	0,00
0,6÷0,7	17	0,642	0,286	14,3	2,7	0,51
0,7÷0,8	11	0,864	0,222	11,1	-0,1	0,00
0,8÷0,9	4	0,967	0,103	5,2	-1,2	0,26
0,9÷1,0	2	0,995	0,028	1,4	0,6	0,26

Вычисление $F(x_i)$ проводили с использованием статистической функции **НОРМ.РАСП**. В частности, для интервала $0,3 \div 0,4$ находим

**НОРМ.РАСП(0,4; СРЗНАЧ(В4:В53);
СТАНДОТКЛОН.В(В4:В53); ИСТИНА)=0,033.**

Отметим, что поскольку среди аргументов функции **НОРМ.РАСП** есть среднее арифметическое и стандартное отклонение, то для определения соответствующих параметров также воспользуемся встроенными функциями электронных таблиц Microsoft Excel **СРЗНАЧ** и **СТАНДОТКЛОН.В**. В показанном примере полагаем, что данные 50 опытов по содержанию кремния в чугуна расположены на листе электронной таблицы в ячейках от В4 до В53. Аналогично определяли функции распределения для каждого интервала, результаты отражены в

Таким образом, экспериментальное значение критерия Пирсона $\chi^2 = \sum_{i=1}^k \chi_i^2 = 1,96$, а теоретическое при уровне значимости $\alpha=0,05$ и числе степеней свободы $m_1=7-2=5$ составляет $\chi^2_{0,05;5}=11,07$ (**ХИ2.ОБР.ПХ(0,05;5)= 11,07048**), что значительно больше экспериментального значения.

Следовательно, весьма уверенно можно утверждать, что содержание кремния в пробах чугуна подчиняется нормальному закону распределения

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ПАССИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА. ЭМПИРИЧЕСКИЕ ЗАВИСИМОСТИ



Виды связей: а – функциональная связь, все точки лежат на линии; б – связь достаточно тесная, точки группируются возле линии регрессии, но не все они лежат на ней; в – связь слабая

Анализ стохастических связей приводит к различным постановкам задач статистического исследования зависимостей, которые упрощенно можно классифицировать следующим образом:

- 1) задачи корреляционного анализа – задачи исследования наличия взаимосвязей между отдельными группами переменных ;
- 2) задачи регрессионного анализа – задачи, связанные с установлением аналитических зависимостей между переменным y и одним или несколькими переменными $x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_k$, которые носят количественный характер;
- 3) задачи дисперсионного анализа – задачи, в которых переменные $x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_k$ имеют качественный характер, а исследуется и устанавливается степень их влияния на переменное y .

Стохастические зависимости характеризуются формой, теснотой связи и численными значениями коэффициентов уравнения регрессии.

Форма связи устанавливает вид функциональной зависимости $\hat{y} = f(\mathbf{X})$ и характеризуется уравнением регрессии. Если уравнение связи линейное, то имеем линейную многомерную регрессию, в этом случае зависимость \hat{y} от \mathbf{X} описывается линейной зависимостью в k -мерном пространстве:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j,$$

где $b_0, \dots, b_j, \dots, b_k$ – коэффициенты уравнения.

Крайне желательно при обработке результатов эксперимента вид функции $\hat{y} = f(\mathbf{X})$ выбирать, исходя из условия ее соответствия физической природе изучаемых явлений или имеющимся представлениям об особенностях поведения исследуемой величины. К сожалению, такая возможность не всегда имеется, так как эксперименты чаще всего проводятся для исследования недостаточно или неполно изученных явлений

Под теснотой связи понимается степень близости стохастической зависимости к функциональной, т.е. показатель тесноты группирования экспериментальных данных относительно принятого уравнения модели

Определение коэффициентов уравнения регрессии

Первый подход – интерполирование. Базируется на удовлетворении условию, чтобы функция $\hat{y}=(X,b)$ совпадала с экспериментальными значениями в некоторых точках, выбранных в качестве опорных (основных, главных) y_i .

В этом случае для определения $k+1$ неизвестных значений параметров b_j используется система уравнений

$$f(x_i, b_0, \dots, b_j, \dots, b_k) = y_i, \quad 1 \leq i \leq n.$$

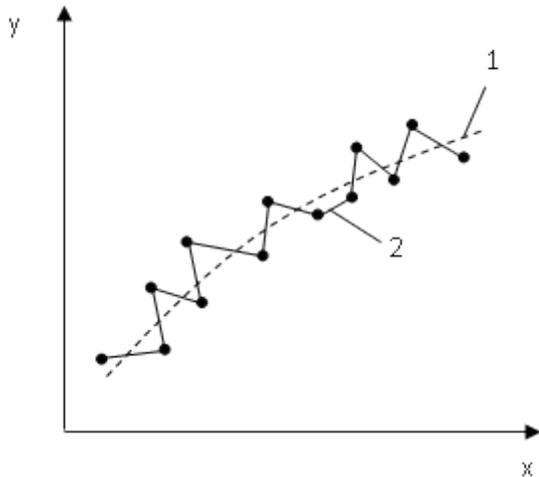


Рис.4.3. Аппроксимация функции с большим (1) и небольшим (2) числом

В данном случае число независимых уравнений системы равно числу опорных точек, в пределе – n поставленных опытов. С другой стороны, для определения $k+1$ коэффициентов необходимо не менее $k+1$ независимых уравнений. Но если число n поставленных опытов и число независимых уравнений равно числу искомых коэффициентов $k+1$, то решение системы может быть единственно, а следовательно, точно соответствует случайным значениям исходных данных.

Метод избранных точек

На основании анализа данных выдвигают гипотезу о виде (форме) зависимости $f(X)$. Предположим, что она линейная, т.е. статистическая связь – это линейная одномерная регрессия

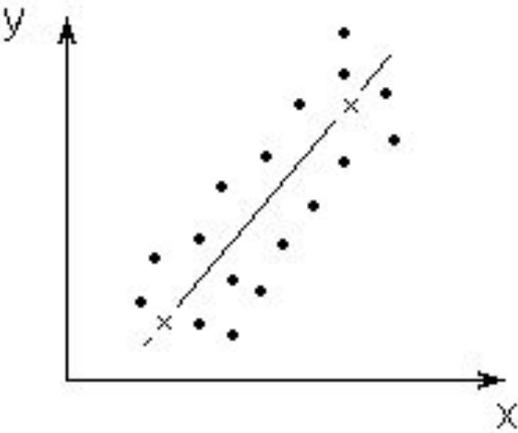
$$\hat{y} = b_0 + b_1 x.$$

Если предполагается, что уравнение регрессии более высокого порядка, то соответственно увеличивают число избранных точек. Недостатки такого подхода очевидны, так как избранные точки выбираются субъективно, а подавляющая часть экспериментального материала не используется для определения параметров (коэффициентов) уравнения регрессии, хотя ее можно использовать в дальнейшем для оценки надежности полученного уравнения.

Метод медианных центров.

Обведенное контуром поле точек делят на несколько частей, число которых равно числу определяемых коэффициентов уравнения регрессии. В каждой из этих частей находят медианный центр, т.е. пересечение вертикали и горизонтали слева и справа, выше и ниже которых оказывается равное число точек. Затем через эти медианные центры проводят плавную кривую и из решения системы уравнений определяют коэффициенты регрессии b_j . Так, в случае линейной зависимости поле делится на две группы. Определяют средние значения $\bar{x}_I, \bar{y}_I; \bar{x}_{II}, \bar{y}_{II}$ для каждой из групп, а неизвестные коэффициенты b_0, b_1 определяют из решения системы уравнений:

$$\begin{aligned}\bar{y}_I &= b_0 + b_1 \bar{x}_I; \\ \bar{y}_{II} &= b_0 + b_1 \bar{x}_{II}.\end{aligned}$$



Метод избранных точек

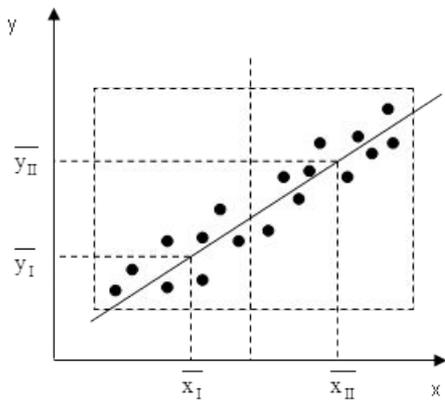


Рис. 4.5. Метод медианных точек

Второй подход – метод наименьших квадратов

$$\Phi(b_0, b_1, \dots, b_j, \dots, b_k) = \sum_{i=1}^n [f(x_i, b_0, b_1, \dots, b_j, \dots, b_k) - y_i]^2 \rightarrow \min_{b_j}, \quad \text{где } n -$$

число экспериментальных точек в рассматриваемом интервале изменения аргумента x .

Необходимым условием минимума функции $\Phi(b_0, b_1, \dots, b_j, \dots, b_k)$ является выполнение равенства

$$\partial \Phi / \partial b_j = 0, \quad 0 \leq j \leq k$$

или

$$\sum_{i=1}^n [f(x_i, b_0, b_1, \dots, b_j, \dots, b_k) - y_i] \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_j} = 0, \quad 0 \leq j \leq k.$$

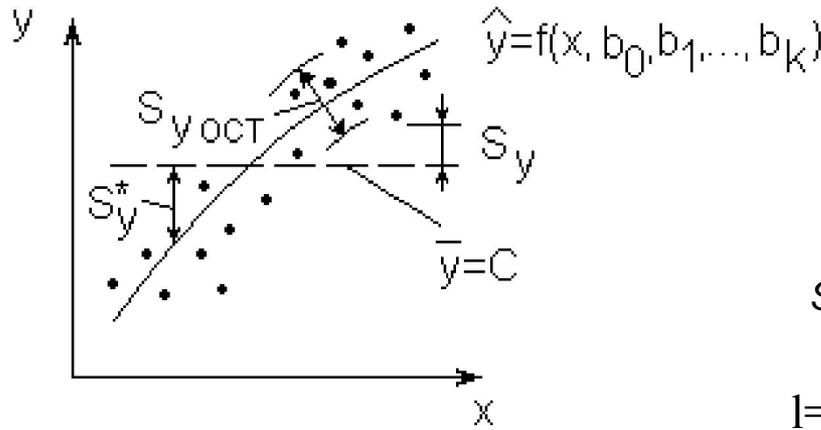
После преобразований получим

$$\sum_{i=1}^n [f(x_i, b_0, b_1, \dots, b_j, \dots, b_k) \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_j} - \sum_{i=1}^n y_i \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_j}] = 0.$$

Система уравнений содержит столько же уравнений, сколько неизвестных коэффициентов b_0, b_1, \dots, b_k входит в уравнение регрессии, и называется в математической статистике системой нормальных уравнений.

Определение тесноты связи между случайными величинами

Тесноту связи между случайными величинами характеризуют корреляционным отношением ρ_{xy} .



Остаточная дисперсия характеризует разброс экспериментально наблюдаемых точек относительно линии регрессии и представляет собой показатель ошибки предсказания параметра y по уравнению регрессии

$$S_{y\text{ост}}^2 = \frac{1}{n-l} \sum_{i=1}^n [y_i - \hat{y}_i]^2 = \frac{1}{n-1-k} \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i, b_0, b_1, \dots, b_k)]^2,$$

$l=k+1$ – число коэффициентов уравнения модели

Общая дисперсия (дисперсия выходного параметра) характеризует разброс экспериментально наблюдаемых точек относительно среднего значения \bar{y} , т.е. линии C

$$S_y^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n [y_i - \bar{y}]^2, \quad \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i.$$

Средний квадрат отклонения линии регрессии от среднего значения линии $Y=C$

$$S_y^{*2} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n [\hat{y}_i - \bar{y}]^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n [f(x_i, b_0, b_1, \dots, b_k) - \bar{y}]^2.$$

$$S_y^2 = S_{y\text{ост}}^2 + S_y^{*2}.$$

Разброс экспериментально наблюдаемых точек относительно линии регрессии характеризуется безразмерной величиной – **выборочным корреляционным отношением**, которое определяет долю, которую привносит величина X в общую изменчивость случайной величины Y.

$$\rho_{xy}^* = \sqrt{\frac{S_y^2 - S_{y\text{ост}}^2}{S_y^2}} = \sqrt{1 - \frac{S_{y\text{ост}}^2}{S_y^2}} = \sqrt{\frac{S_y^{*2}}{S_y^2}} = \frac{S_y^*}{S_y}$$

Проанализируем свойства этого показателя.

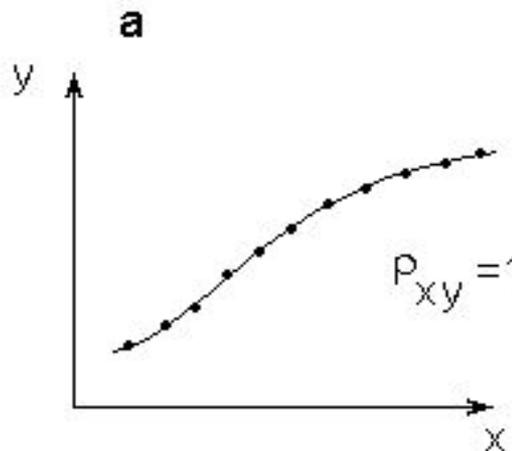
1. В том случае, когда связь является не стохастической, а **функциональной, корреляционное отношение равно 1**, так как все точки корреляционного поля оказываются на линии регрессии, остаточная дисперсия равна

$$S_{y\text{ост}}^2 = 0 \quad S_y^{*2} = S_y^2$$

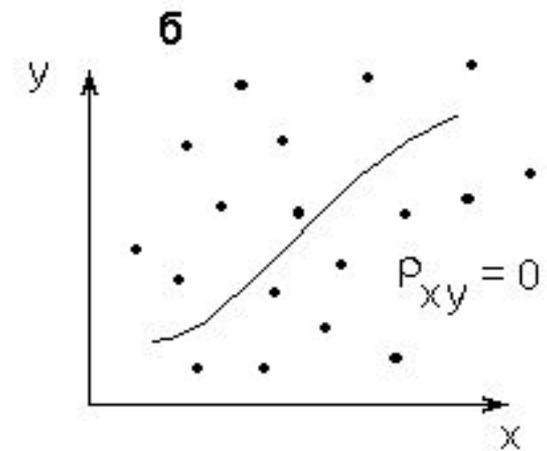
2. Равенство нулю корреляционного отношения указывает на отсутствие какой-либо тесноты связи между величинами x и y для данного уравнения регрессии, поскольку разброс экспериментальных точек относительно среднего значения и линии регрессии одинаков, т.е.

$$S_y^2 = S_{y\text{ост}}^2$$

3. Чем ближе расположены экспериментальные данные к линии регрессии, тем теснее связь, тем меньше остаточная дисперсия и тем больше корреляционное отношение. Следовательно, корреляционное отношение может изменяться в пределах от 0 до 1.



а – функциональная связь;



б – отсутствие связи

Квадрат корреляционного отношения называется коэффициентом детерминации

$$R^2 = \rho_{xy}^{*2} = 1 - \frac{S_{y\text{ост}}^2}{S_y^2}$$

Линейная регрессия от одного фактора

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x. \quad \Phi(b_0, b_1) = \sum_{i=1}^n [y_i - (b_0 + b_1 x_i)]^2 \rightarrow \min_{b_0, b_1}. \quad \frac{\partial \Phi(b_0, b_1)}{\partial b_0} = 0; \quad \frac{\partial \Phi(b_0, b_1)}{\partial b_1} = 0.$$

Система нормальных уравнений в этом случае примет вид

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n [y_i - (b_0 + b_1 x_i)] = 0; \quad n b_0 + b_1 \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i, \\ \sum_{i=1}^n [y_i - (b_0 + b_1 x_i)] \cdot x_i = 0; \quad b_0 \sum_{i=1}^n x_i + b_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i y_i. \end{cases}$$

Решение этой системы относительно b_0 и b_1 дает

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \sum_{i=1}^n (x_i)^2 - \sum_{i=1}^n (x_i y_i) \sum_{i=1}^n x_i}{n \sum_{i=1}^n (x_i)^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}; \quad b_1 = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n (x_i)^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2},$$

Оценку силы линейной связи осуществляют по выборочному (эмпирическому) **коэффициенту парной корреляции r_{xy}** .

Выборочный коэффициент корреляции может быть вычислен двумя способами.

1. Как частный случай корреляционного отношения для линейного уравнения регрессии.

С учетом того, что $\bar{y} = b_0 + b_1 \bar{x}$ $S_y^{*2} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n [b_0 + b_1 x_i - b_0 - b_1 \bar{x}]^2 = b_1^2 S_x^2$,

$$\rho_{xy}^* = \sqrt{\frac{S_y^2 - S_{y\text{ост}}^2}{S_y^2}} = \sqrt{1 - \frac{S_{y\text{ост}}^2}{S_y^2}} = \sqrt{\frac{S_y^{*2}}{S_y^2}} = \frac{S_y^*}{S_y} \quad r_{xy} = b_1 S_x / S_y,$$

2. Как среднее значение произведения центрированных случайных величин, отнесенное к произведению их среднеквадратичных отклонений:

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{(n-1)S_x S_y} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}.$$

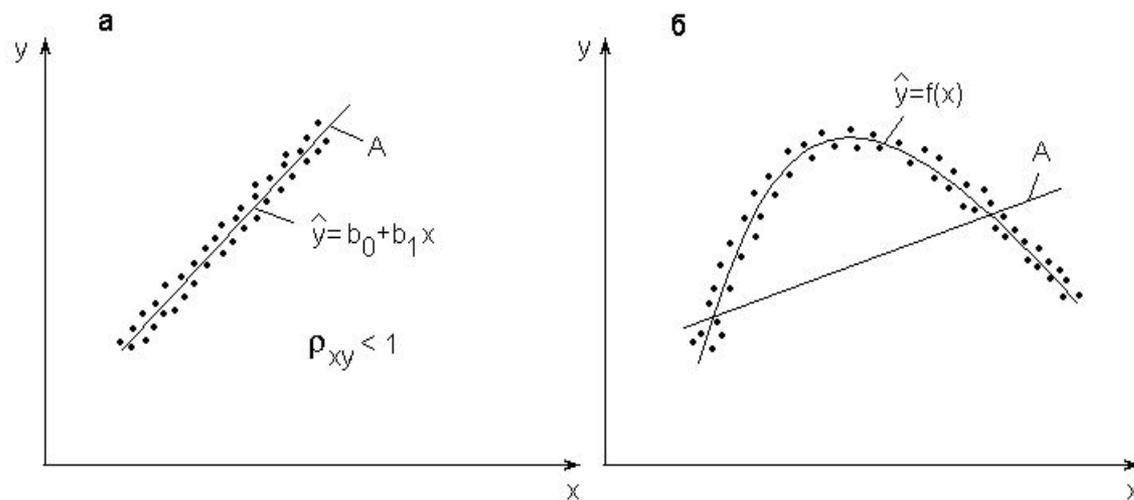
Как правило, по результатам экспериментов находят S_x , S_y , \bar{x} , \bar{y} и рассчитывают r_{xy} , а затем, используя эти величины, определяют коэффициенты уравнения регрессии:

$$b_1 = r_{xy} S_y / S_x; \quad b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x}.$$

Для оценки качества подбора линейной функции рассчитывается **квадрат коэффициента r_{xy} , называемый коэффициентом детерминации $R^2 = (r_{xy})^2$** .

Отметим еще раз область применимости выборочного коэффициента корреляции для оценки тесноты связи.

1. Коэффициент парной корреляции значений y и x применительно к однофакторной зависимости характеризует тесноту группирования данных лишь относительно прямой (например, линия А на рис. а). При более сложной зависимости (б) коэффициент корреляции будет оценивать тесноту экспериментальных точек относительно некоторой прямой, обозначенной буквой А, что, естественно, несет мало сведений о тесноте их группирования относительно искомой кривой $\hat{y} = f(x)$.



2. Даже при выполнении этих, вообще говоря достаточно жестких условий, не всякое значение выборочного коэффициента корреляции является достаточным для статистического обоснования выводов о наличии действительно надежной корреляционной связи между фактором и откликом.

Надежность статистических характеристик ослабевает с уменьшением объема выборки (n). Так, при $n=2$ через две экспериментальные точки можно провести только одну прямую и зависимость будет функциональной, при этом выборочный коэффициент корреляции равен единице ($r_{xy}=1$).

Для определения значимости r_{xy} сформулируем нуль-гипотезу $H_0: r_{xy}^* = 0$, т.е. корреляция отсутствует. Для этого рассчитывается экспериментальное значение t-критерия Стьюдента

$$t = |r_{xy}| \frac{\sqrt{n-2}}{\sqrt{1-(r_{xy})^2}}$$

и сравнивается с теоретическим при числе степеней свободы $n-2$.

Если $t \geq t_{\alpha, n-2}$ при заданном уровне значимости α , то нулевая гипотеза отклоняется, а альтернативная гипотеза $H_1: r_{xy}^* \neq 0$, о том, что коэффициент корреляции существенен, принимается.

При обработке $n=17$ пар данных x и y выборочный коэффициент корреляции составил $r_{xy} = -0,94$, т.е. величина y связана с x достаточно сильной причинной связью, близкой к функциональной зависимости. Требуется определить значимость и найти доверительный интервал выборочного коэффициента корреляции.

Определение значимости коэффициента r_{xy}

$$t = |r_{xy}| \frac{\sqrt{n-2}}{\sqrt{1-(r_{xy})^2}} = 0,94 \frac{\sqrt{17-2}}{\sqrt{1-(0,94)^2}} = 10,6.$$

Критерий Стьюдента $t_{0,05;15} = 2,13$ (СТЬЮДЕНТ.ОБР.2Х (0,05;15)=2,13145).

Поскольку $t > t_{\alpha, n-2}$, то коэффициент корреляции существенен

Регрессионный анализ

После того как уравнение регрессии найдено, необходимо провести статистический анализ результатов. Этот анализ состоит в следующем:

- ✓ проверяется значимость всех коэффициентов;
- ✓ устанавливается адекватность уравнения.

При проведении регрессионного анализа примем следующие допущения:

1) входной параметр x измеряется с пренебрежимо малой ошибкой. Появление ошибки в определении y объясняется наличием в процессе не выявленных переменных и случайных воздействий, не вошедших в уравнение регрессии;

2) результаты наблюдений $y_1, y_2, \dots, y_i, \dots, y_n$ над выходной величиной представляют собой независимые нормально распределенные случайные величины;

3) при проведении эксперимента с объемом выборки n при условии, что каждый опыт повторен m^* раз, выборочные дисперсии $S_1^2, \dots, S_i^2, \dots, S_n^2$ должны быть однородны. При выполнении измерений в различных условиях возникает задача сравнения точности измерений. При этом следует подчеркнуть, что экспериментальные данные можно сравнивать только тогда, когда их дисперсии однородны.

Проверка адекватности модели

Сформулируем нуль-гипотезу

H_0 : "Уравнение регрессии адекватно".

Альтернативная гипотеза H_1 : "Уравнение регрессии неадекватно".

Для проверки этих гипотез принято использовать F-критерий Фишера.

При этом общую дисперсию (дисперсию выходного параметра) S_y^2 сравнивают с остаточной дисперсией $S_{y \text{ ост}}^2$. Напомним, что

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^n [y_i - \bar{y}]^2}{n-1}; S_{y \text{ ост}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n [y_i - \hat{y}_i]^2}{n-l}$$

где $l=k+1$ – число членов аппроксимирующего полинома, а k – число факторов. Так, например, для линейной зависимости (4.5) $k=1$, $l=2$.

В дальнейшем определяется экспериментальное значение F-критерия

$$F = S_y^2 / S_{y \text{ ост}}^2,$$

который в данном случае показывает, во сколько раз уравнение регрессии предсказывает результаты опытов лучше, чем среднее $\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i = C = \text{const}$.

Если $F > F_{\alpha; m_1; m_2}$, то уравнение регрессии адекватно. Чем больше значение F превышает $F_{\alpha; m_1; m_2}$ для выбранного α и числа степеней свободы $m_1 = n-1$, $m_2 = n-l$, тем эффективнее уравнение регрессии.

Рассмотрим также случай, когда в каждой i -й точке x_i осуществляется не одно, а m^* параллельных измерений. Тогда число экспериментальных значений величины y составит $n_{\Sigma}=n \cdot m^*$. В этом случае:

1) определяется $\bar{y}_i = \sum_{j=1}^{m^*} y_{ij} / m^*$ – среднее из серии параллельных опытов при $x=x_i$, где y_{ij} – значение параметра y при $x=x_i$ в j -м случае;

2) рассчитываются значения параметра \hat{y}_i по уравнению регрессии при $x=x_i$;

3) рассчитывается дисперсия адекватности $S_{ад}^2 = \frac{m^* \sum_{i=1}^n [\bar{y}_i - \hat{y}_i]^2}{n-1}$,

где n – число значений x_i ; l – число членов аппроксимирующего полинома (коэффициентов b_i), для линейной зависимости $l=2$;

4) определяется выборочная дисперсия Y при $x=x_i$: $S_i^2 = \frac{\sum_{j=1}^{m^*} [y_{ij} - \bar{y}_i]^2}{m^* - 1}$;

5) определяется дисперсия воспроизводимости $S_{восп}^2 = \sum_{i=1}^n S_i^2 / n$.

Число степеней свободы этой дисперсии равно $m=n(m^*-1)$;

6) определяется экспериментальное значение критерия Фишера $F = S_{ад}^2 / S_{восп}^2$.

7) определяется теоретическое значение этого же критерия F_{α, m_1, m_2} ,

где $m_1=n-1$; $m_2= n(m^*-1)$;

8) если $F \leq F_{\alpha, m_1, m_2}$, то уравнение регрессии адекватно, в противном случае – нет.

Проверка значимости коэффициентов уравнения регрессии

Проверка значимости коэффициентов выполняется по критерию Стьюдента. При этом проверяется нуль-гипотеза $H_0: b_i=0$, т.е. i -й коэффициент генеральной совокупности при заданном уровне значимости α отличен от нуля.

Построим доверительный интервал для коэффициентов уравнения регрессии

$$\Delta b_i = t_{\alpha; n-l} \cdot S_{b_i},$$

где число степеней свободы в критерии Стьюдента определяется по соотношению $n-l$. Потеря $l=k+1$ степеней свободы обусловлена тем, что все коэффициенты b_i рассчитываются зависимо друг от друга.

Тогда доверительный интервал для Δb_i коэффициента уравнения регрессии составит $(b_i - \Delta b_i; b_i + \Delta b_i)$. Чем уже доверительный интервал, тем с большей уверенностью можно говорить о значимости этого коэффициента.

Необходимо всегда помнить рабочее правило: "Если абсолютная величина коэффициента регрессии больше, чем его доверительный интервал, то этот коэффициент значим".

Таким образом, если $|b_i| > |\Delta b_i|$, то b_i коэффициент значим, в противном случае – нет.

Незначимые коэффициенты исключаются из уравнения регрессии, а оставшиеся коэффициенты пересчитываются заново

МЕТОДЫ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ. ЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

Истинный вид функции отклика $y=f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k)$ до эксперимента чаще всего неизвестен, в связи с чем для математического описания поверхности отклика используют уравнение

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i,u=1}^k \beta_{iu} x_i x_u + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \dots, \quad (6.1)$$

где x_i, x_u – переменные факторы при $i=1, \dots, k; u=1, \dots, k; i \neq u$;

$$\beta_i = \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)_0; \beta_{iu} = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_u} \right)_0; \beta_{ii} = \left(\frac{\partial^2 f}{2 \partial x_i^2} \right)_0 - \text{коэффициенты.}$$

Это уравнение является разложением в ряд Тейлора неизвестной функции отклика в окрестности точки с $x_i=x_{i0}$.

На практике по результатам эксперимента производится обработка данных по методу наименьших квадратов. Этот метод позволяет найти оценку b коэффициентов β , и данный полином заменяется уравнением вида

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i,u=1}^k b_{iu} x_i x_u + \sum_{i=1}^k b_{ii} x_i^2 + \dots, \quad (6.2)$$

которое является регрессионной моделью (моделью регрессионного анализа). В этом выражении \hat{y} означает модельное, т.е. рассчитываемое по уравнению модели, значение выхода. Коэффициенты регрессии определяются экспериментально и служат для статистической оценки теоретических коэффициентов, т.е.

$$b_0 \rightarrow \beta_0, b_i \rightarrow \beta_i, b_{iu} \rightarrow \beta_{iu}, b_{ii} \rightarrow \beta_{ii}.$$

В регрессионной модели члены второй степени $x_i x_u, x_i^2$ характеризуют кривизну поверхности отклика. Чем больше кривизна этой поверхности, тем больше в модели регрессии членов высшей степени. На практике чаще всего стремятся ограничиться линейной моделью.

Общая последовательность активного эксперимента

Последовательность активного эксперимента заключается в следующем:

1) разрабатывается схема проведения исследований, т.е. выполняется планирование эксперимента. При планировании экспериментов обычно

требуется с наименьшими затратами и с необходимой точностью либо построить регрессионную модель процесса, либо определить его оптимальные условия;

2) осуществляется реализация опыта по заранее составленному исследователем плану, т.е. осуществляется сам активный эксперимент;

3) выполняется обработка результатов измерений, их анализ и принятие решений.

Таким образом, планирование эксперимента – это процедура выбора условий проведения опытов, их количества, необходимых и достаточных для решения задач с поставленной точностью.

Использование теории планирования эксперимента обеспечивает:

1) минимизацию, т.е. предельное сокращение необходимого числа опытов;

2) одновременное варьирование всех факторов;

3) выбор четкой стратегии, что позволяет принимать обоснованные решения после каждой серии опытов;

4) минимизацию ошибок эксперимента за счет использования специальных проверок.

Пример хорошего и плохого эксперимента

Номер опыта	A	B	C	Результат взвешивания
1	-1	-1	-1	y_0
2	+1	-1	-1	y_1
3	-1	+1	-1	y_2
4	-1	-1	+1	y_3

$$m_A = y_1 - y_0.$$

$$m_B = y_2 - y_0.$$

$$m_C = y_3 - y_0.$$

$$\sigma_A^2 = \sigma_{y_1}^2 + \sigma_{y_0}^2 = 2\sigma^2,$$

*Традиционное проведение эксперимента**) Когда образец кладется на весы, в таблице ставится +1, когда он на весах отсутствует, то -1.

Номер опыта	A	B	C	Результат взвешивания
1	+1	-1	-1	y_1
2	-1	+1	-1	y_2
3	-1	-1	+1	y_3
4	+1	+1	+1	y_4

$$m_A = \frac{1}{2}(y_1 - y_2 - y_3 + y_4);$$

$$m_B = \frac{1}{2}(y_2 - y_1 - y_3 + y_4);$$

$$m_C = \frac{1}{2}(y_3 - y_1 - y_2 + y_4).$$

$$\sigma_A^2 = \frac{1}{4}(\sigma_{y_1}^2 + \sigma_{y_2}^2 + \sigma_{y_3}^2 + \sigma_{y_4}^2) = \sigma^2.$$

Методы планирования экспериментов

В планировании экспериментов применяются в основном *планы первого и второго порядков*. Планы более высоких порядков используются в инженерной практике редко. В связи с этим далее приводится краткое изложение методики составления планов эксперимента для моделей первого и второго порядков.

Под планами первого порядка понимают такие планы, которые позволяют провести эксперимент для отыскания уравнения регрессии, содержащего только первые степени факторов и их произведения:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{\substack{i,u=1 \\ i \neq u}}^k b_{iu} x_i x_u + \sum_{\substack{i,j,u=1 \\ i \neq j \neq u}}^k b_{iju} x_i x_j x_u + \dots$$

Планы второго порядка позволяют провести эксперимент для отыскания уравнения регрессии, содержащего и вторые степени факторов:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i=1}^k b_{ii} x_i^2 + \sum_{\substack{i,u=1 \\ i \neq u}}^k b_{iu} x_i x_u + \dots$$

Нахождение уравнения регрессии методом планирования экспериментов состоит из следующих этапов:

- *выбор основных факторов и их уровней;*
- *планирование и проведение собственно эксперимента;*
- *определение коэффициентов уравнения регрессии;*
- *статистический анализ результатов эксперимента.*

Планирование первого порядка

Выбор основных факторов

1. В качестве факторов можно выбирать только **контролируемые и управляемые переменные**, т.е. такие, которые исследователь может поддерживать постоянными в течение каждого опыта на заданном уровне. В число факторов должны быть включены параметры процесса, оказывающие наиболее сильное влияние на функцию отклика.
2. Для каждого фактора необходимо указать тот **интервал изменения параметров**, в пределах которого ставится исследование. Для этого на основе априорной информации устанавливаются ориентировочные значения факторов $x_{10}, x_{20}, \dots, x_{i0}, \dots, x_{k0}$. Координаты этой точки принимаются за основной (нулевой) уровень.
3. Для факторов с непрерывной областью определения это достигается с помощью преобразования (**кодирования**) факторов:

$$X_i = \frac{x_i - x_{i0}}{\Delta x_i}.$$

Для обработки экспериментальных данных масштабы по осям выбираются так, чтобы верхний уровень составлял +1, нижний -1, а основной - 0.

На первой стадии исследования обычно принимают полином первой степени.

Так, для трехфакторной задачи теоретическое уравнение регрессии имеет вид:

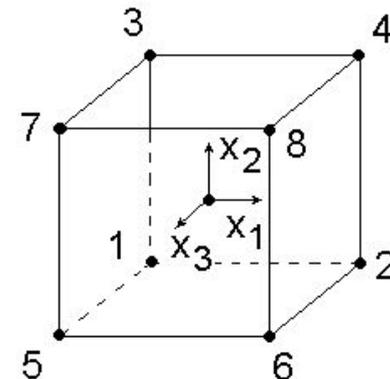
$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^3 \beta_i x_i + \sum_{\substack{i,u=1 \\ i \neq u}}^3 \beta_{iu} x_i x_u + \beta_{123} x_1 x_2 x_3. \quad \text{Итого необходимо найти 8 коэффициентов}$$

Уравнение регрессии, получаемое на основании результатов эксперимента, в отличие от приведенного теоретического уравнения, имеет вид:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^3 b_i x_i + \sum_{\substack{i,u=1 \\ i \neq u}}^3 b_{iu} x_i x_u + b_{123} x_1 x_2 x_3, \quad b_i \rightarrow \beta_i, \quad b_{iu} \rightarrow \beta_{iu}, \quad b_{123} \rightarrow \beta_{123}.$$

Таблица полного факторного эксперимента для трех факторов

Номер опыта	План								Результат
	X_0	X_1	X_2	X_3	X_1X_2	X_1X_3	X_2X_3	$X_1X_2X_3$	
1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	y_1
2	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	y_2
3	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	y_3
4	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	y_4
5	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	y_5
6	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	y_6
7	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	y_7
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_8



1) **свойство симметричности**: алгебраическая сумма элементов вектор-столбца каждого фактора равна нулю (за исключением столбца, соответствующего свободному члену):

$$\sum_{j=1}^n X_{ij} = 0,$$

2) **свойство нормирования**: сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу опытов:

$$\sum_{i=1}^n X_{ij}^2 = n$$

3) **свойство ортогональности**: скалярное произведение всех вектор-столбцов (сумма почленных произведений элементов любых двух вектор-столбцов матрицы) равно нулю:

$$\sum_{j=1}^n X_{ij} X_{uj} = 0, \quad i \neq u.$$

1. В теории планирования экспериментов показано, что **необходимое число уровней факторов на единицу больше порядка уравнения.**
2. После реализации плана получают 8 уравнений с 8 неизвестными, их решение и даст оценку всех 8 коэффициентов регрессии $b_0, b_1, \dots, b_3, b_{12}, \dots, b_{123}$. План, в котором число опытов равно числу определяемых коэффициентов, **называется насыщенным.**
3. Заметим, что мы использовали все точки с "крайними" координатами, т.е. ± 1 , или, говоря другими словами, все возможные комбинации выбранных уровней. В самом деле, всех возможных комбинаций $2^k=8$ (k – число факторов), и мы все их использовали. Если эксперименты проводятся только на двух уровнях (при двух значениях факторов) и при этом в процессе эксперимента осуществляются все возможные неповторяющиеся комбинации из k факторов, то постановка опытов по такому плану носит название **полного факторного эксперимента (ПФЭ) или 2^k** . Иными словами, полный факторный эксперимент (ПФЭ) — это эксперимент, реализующий все возможные неповторяющиеся комбинации уровней независимых факторов. Поскольку результаты наблюдений отклика носят случайный характер, приходится в каждой точке плана проводить не один, а m^* параллельных опытов (обычно $m^*=2\div 4$).
4. В каждой серии экспериментов их последовательность **рандомизируется**, т.е. с помощью таблиц случайных чисел определяется случайная последовательность реализации экспериментов. Рандомизация дает возможность свести эффект некоторого случайного фактора к случайной погрешности. Это позволяет в определенной степени исключить предвзятость и субъективизм исследователя.

Определение коэффициентов уравнения регрессии

Вспользуемся свойствами ПФЭ для определения коэффициентов уравнения регрессии методом наименьших квадратов $\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$.

$$\Phi = \sum_{j=1}^n (y_j - \hat{y}_j)^2 \rightarrow \min_{b_i}$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial b_1} = 2 \sum_{j=1}^n (y_j - b_0 - b_1x_{1j} - b_2x_{2j})x_{1j} = 0; \quad (1)$$

$$\sum_{j=1}^n y_j x_{1j} - b_0 \sum_{j=1}^n x_{1j} - b_1 \sum_{j=1}^n x_{1j}^2 - b_2 \sum_{j=1}^n x_{1j} x_{2j} = 0.$$

Вспользуемся свойствами ПФЭ:

- (симметричности) $b_0 \sum x_{1j} = 0$;
- (нормирования) $b_1 \sum x_{1j}^2 = nb_1$;
- (ортогональности) $b_2 \sum x_{1j} x_{2j} = 0$

$$b_1 = \frac{\sum_{j=1}^n y_j x_{1j}}{n}; \quad b_2 = \frac{\sum_{j=1}^n y_j x_{2j}}{n}; \quad b_0 = \frac{\sum_{j=1}^n y_j x_{0j}}{n}. \quad (2)$$

Следовательно, любые коэффициенты уравнения регрессии определяются скалярным произведением столбца y на соответствующий столбец X .

Определение коэффициентов уравнения регрессии (продолжение)

Можно показать, что аналогичным образом определяются коэффициенты, если в уравнении регрессии учитываются линейные взаимодействия (двойные, тройные):

$$b_{12} = \frac{\sum_{j=1}^n y_j (X_1 X_2)_j}{n}; \quad b_{123} = \frac{\sum_{j=1}^n y_j (X_1 X_2 X_3)_j}{n} \quad \text{и т.д.} \quad (3)$$

Выводы

1. Следует обратить особое внимание на то, что *все линейные коэффициенты независимы, так как в формулы для их расчета (2), (3) входят свои одноименные переменные.*

Поэтому каждый коэффициент характеризует роль соответствующей переменной в процессе или силу влияния факторов. Чем больше численная величина коэффициента, тем большее влияние оказывает этот фактор. Если коэффициент имеет знак плюс, то с увеличением значения фактора отклик увеличивается, а если минус – уменьшается.

В результате определения уравнения регрессии может получиться так, что один (или несколько) коэффициентов не очень большие и окажутся незначимыми.

2. Факторы, имеющие коэффициенты, незначимо отличающиеся от нуля, могут быть выведены из состава уравнения, так как их влияние на параметры отклика будет отнесено к ошибке эксперимента.

Учитывая ортогональность плана, оставшиеся коэффициенты уравнения регрессии можно не пересчитывать.

Статистический анализ результатов эксперимента

Планирование эксперимента исходит из статистического характера зависимостей, поэтому полученные уравнения подвергаются тщательному статистическому анализу с целью извлечь из результатов эксперимента максимум информации и убедиться в достоверности полученной зависимости и ее точности. Процедура проверки значимости коэффициентов уравнения регрессии и его адекватности принципиально не отличается от описания, данного ранее, поэтому остановимся только на отдельных моментах.

Как уже отмечалось ранее, каждый эксперимент несет в себе какую-то погрешность, для повышения надежности результатов производятся для каждой строки таблицы планирования повторения опытов m^* раз.

Построчные (выборочные) дисперсии подсчитываются по формуле

$$S_j^2 = \frac{\sum_{i=1}^{m^*} (y_{ji} - \bar{y}_j)^2}{m^* - 1}, \quad (1)$$

где $\bar{y}_j = \frac{\sum_{i=1}^{m^*} y_{ji}}{m^*}$ – средний отклик по m^* опытам в точке с номером j .

Дисперсия воспроизводимости отклика $S_{\text{восп}}^2$ есть среднеарифметическое дисперсий всех n различных вариантов опытов:

$$S_{\text{восп}}^2 = \frac{\sum_{j=1}^n S_j^2}{n} = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{m^*} (y_{ji} - \bar{y}_j)^2}{n(m^* - 1)}. \quad (2)$$

Прежде чем производить объединение дисперсий, следует убедиться в *их однородности*. Проверка производится с помощью критерия Фишера или Кохрена.

Оценки значимости коэффициентов уравнения регрессии

Прежде всего, находят дисперсию коэффициентов регрессии.

$$S_b^2 = \frac{S_{\text{восп}}^2}{m * n}, \quad (3)$$

а при отсутствии дублирования будем иметь

$$S_b^2 = \frac{S_{\text{восп}}^2}{n}. \quad (3a)$$

Следовательно, все коэффициенты уравнения регрессии ПФЭ имеют одинаковую точность (дисперсию). В этом заключается принципиальное отличие коэффициентов уравнения регрессии, полученных по плану математического планирования эксперимента, от коэффициентов уравнений, полученных пассивным экспериментом

Планы, по результатам которых коэффициенты уравнения регрессии определяются с одинаковой дисперсией, называются *ротатабельными*

В дальнейшем проверка значимости каждого коэффициента производится с использованием t-критерия Стьюдента. *Статистически незначимые коэффициенты исключаются из уравнения, а остальные коэффициенты при этом не пересчитываются.* После этого уравнение регрессии составляется в виде уравнения связи выходного параметра y и переменных X_i , включающего только значимые коэффициенты.

Адекватность модели

После вычисления коэффициентов уравнения следует, прежде всего, проверить его пригодность или адекватность. Для этого достаточно оценить отклонение выходной величины \bar{Y} , предсказанной уравнением регрессии, от результатов эксперимента y в различных точках.

Рассеяние результатов эксперимента относительно уравнения регрессии, аппроксимирующего искомую зависимость, можно, как уже было показано ранее, охарактеризовать с помощью дисперсии адекватности, оценка которой, справедливая при одинаковом числе дублирующих опытов, находится по формуле

$$S_{ад}^2 = \frac{m^* \sum_{j=1}^n (\bar{y}_j - \hat{y}_j)^2}{n-l}. \quad (4)$$

Здесь n – число опытов (вариантов); $l=k+1$, где k – число членов в уравнении регрессии.

Проверка адекватности состоит в выяснении соотношения между дисперсией адекватности $S_{ад}^2$ и дисперсией воспроизводимости $S_{восп}^2$ и проводится с

помощью F-критерия Фишера, который в данном случае рассчитывается как

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_{восп}^2}. \quad (5)$$

Если вычисленное значение критерия меньше теоретического $F_{\alpha; m_1; m_2}$ для соответствующих степеней свободы $m_1=n-l$, $m_2=n(m^*-1)$, при заданном уровне значимости α , то описание свойств объекта уравнением регрессии признается адекватным объекту. Адекватность модели может быть достигнута уменьшением интервала варьирования факторов, а если это не дает результата, то переходом к плану второго порядка.

Дробный факторный эксперимент

Во многих практических задачах взаимодействия второго и высших порядков отсутствуют или пренебрежимо малы. Кроме того, на первых этапах исследования часто необходимо получить в первом приближении лишь линейную аппроксимацию изучаемого уравнения связи при минимальном числе экспериментов. Так, для трех факторов достаточно рассмотреть уравнение вида

$$\bar{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 \quad (1)$$

и определить только четыре коэффициента. Поэтому использование ПФЭ для определения коэффициентов только при линейных членах неэффективно из-за реализации большого числа опытов, особенно при большом числе факторов k .

Если при решении задачи можно ограничиться линейным приближением, то в ПФЭ оказывается много "лишних" опытов. Так, для трех факторов достаточно 4 опыта, а в ПФЭ их 8. Следовательно, есть четыре "лишних". Результаты этих "лишних" опытов могут быть использованы двояко: во-первых, с их помощью можно получить более точные оценки коэффициентов регрессии; во-вторых, их можно использовать для проверки адекватности модели. Однако при 7 факторах ПФЭ содержит $2^7=128$ опытов, а для линейного уравнения требуется всего 8.

Таким образом, остается 120 лишних и, конечно, нет необходимости их все реализовать, а достаточно лишь несколько из них использовать для проверки адекватности и уточнения оценок.

Другими словами, ПФЭ обладает большой избыточностью опытов. В связи с этим возникает вопрос: "Нельзя ли сократить число опытов, необходимых для определения коэффициентов регрессии?"

так, для определения коэффициентов уравнения

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3$$

достаточно ограничиться четырьмя опытами, если в ПФЭ 2^3 использовать x_1x_2 в качестве плана для x_3 , тогда матрица планирования эксперимента примет вид, представленный в табл..

Дробный факторный эксперимент

Номер опыта	План				Результат y_j
	X_0	X_1	X_2	$X_3 = X_1X_2$	
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

Заметим, что мы использовали не все точки с "крайними" координатами, т.е. ± 1 , или, говоря другими словами, не все возможные комбинации выбранных уровней. На самом деле всех возможных комбинаций $2^3=8$, мы же использовали из них только 4. Такой сокращенный план носит название дробного факторного эксперимента (ДФЭ).

Следует подчеркнуть, что формальное приравнение произведения факторов фактору, не входящему в это произведение, является основополагающей идеей метода ДФЭ. В данном случае используется только половина ПФЭ 2^3 , поэтому план, представленный в таблице, называется *полуреplikой* от ПФЭ 2^3 . После реализации плана получают 4 уравнения с 4 неизвестными, их

решение и даст оценку всех четырех коэффициентов регрессии b_i . Например, матрица из 8 опытов для четырехфакторного планирования будет полуреplikой от ПФЭ 2^4 , а для пятифакторного планирования — четвертьреplikой от 2^5 .

Для того чтобы дробная реплика представляла собой ортогональный план, в качестве реплики следует брать ближайший полный факторный эксперимент. При этом число опытов должно быть не менее числа искомых коэффициентов.

Планирование первого порядка

Дробную реплику, в которой P линейных эффектов приравнены к эффектам взаимодействия, обозначают 2^{k-P} .

Таким образом, планы первого порядка, оптимальные двухуровневые планы ПФЭ 2^k и ДФЭ 2^{k-P} имеют следующие преимущества:

- 1 – планы ортогональны, поэтому все вычисления просты;
- 2 – все коэффициенты определяются независимо один от другого;
- 3 – каждый коэффициент определяется по результатам всех n опытов;
- 4 – все коэффициенты регрессии определяются с одинаковой дисперсией, т.е. эти планы обладают и свойством ротатабельности.

Планы второго порядка

Планы второго порядка позволяют провести эксперимент для отыскания уравнения регрессии, содержащего и вторые степени факторов:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i=1}^k b_{ii} x_i^2 + \sum_{\substack{i,u=1 \\ i \neq u}}^k b_{iu} x_i x_u + \dots$$

В этом случае требуется, чтобы каждый фактор варьировался не менее чем **на трех уровнях**.

В этом случае полный факторный эксперимент содержит слишком большое количество опытов, равное 3^k . Так, при $k=3$ их 27, а число коэффициентов b – 10, при $k=5$ число опытов 243, а коэффициентов 21.

В связи с этим осуществление ПФЭ для планов второго порядка не только сложно, но и **нецелесообразно**.

Сократить число опытов можно, воспользовавшись так называемым композиционным или последовательным планом, разработанным Боксом и Уилсоном.

Планы второго порядка (продолжение)

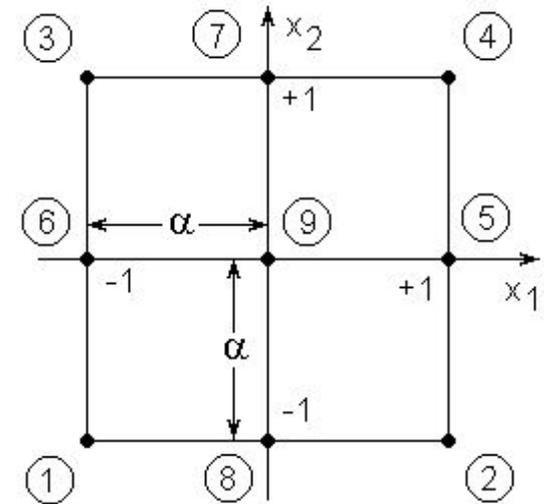
Так, при двух факторах модель функции отклика $y = f(x_1, x_2)$ второго порядка представляет собой поверхность в виде цилиндра, конуса, эллипса и т.д., описываемую в общем виде уравнением

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{12}x_1x_2.$$

Для определения такой поверхности необходимо располагать координатами не менее трех ее точек, т.е. факторы x_1 и x_2 должны варьироваться не менее чем на трех уровнях.

Поэтому план эксперимента в плоскости факторов x_1 и x_2 на рис., а не может состоять лишь из опытов 1, 2, 3, 4 ПФЭ 2^2 , располагающихся в вершинах квадрата, как это было для модели первого порядка.

К ним должны быть *добавлены опыты (звездные точки) 5, 6, 7, 8*, расположенные на осях x_1 и x_2 с координатами $(\pm\alpha; 0)$, $(0; \pm\alpha)$ и *обязательно опыт 9 в центре квадрата*, чтобы по любому направлению (5-9-6), (1-9-4) и т.д. располагалось три точки, определяющие кривизну поверхности в этом направлении.



Ортогональный план второго порядка при $k=2$

Таким образом, в общем случае ядро композиционного плана составляет при $k < 5$ ПФЭ 2^k , а при $k \geq 5$ — дробную реплику от него. Если линейное уравнение регрессии оказалось неадекватным, необходимо:

1) добавить $2 \cdot k$ звездных точек, расположенных на координатных осях факторного пространства $(\pm\alpha, 0, 0, \dots, 0)$, $(0, \pm\alpha, 0, \dots, 0)$, ..., $(0, 0, \dots, \pm\alpha)$, где α — звездное плечо, или расстояние до звездной точки;

2) провести n_0 опытов при значениях факторов в центре плана.

При k факторах общее число опытов в матрице композиционного плана составит

$$n = 2^k + 2 \cdot k + n_0 \text{ при } k < 5,$$

$$n = 2^{k-1} + 2 \cdot k + n_0 \text{ при } k \geq 5.$$

При этом величина звездного плеча α и число опытов в центре плана n_0 зависит от выбранного вида композиционного плана.

Номер опыта	Факторы						Результат
	x_0	x_1	x_2	$x_1 x_2$	x_1^2	x_2^2	
1	+1	-1	-1	+1	+1	+1	y_1
Ядро плана	2	+1	+1	-1	-1	+1	y_2
	3	+1	-1	+1	-1	+1	y_3
	4	+1	+1	+1	+1	+1	y_4
Звездные точки	5	+1	$+\alpha$	0	0	α^2	y_5
	6	+1	$-\alpha$	0	0	α^2	y_6
	7	+1	0	$+\alpha$	0	0	α^2
	8	+1	0	$-\alpha$	0	0	α^2
Центр плана	9	+1	0	0	0	0	y_9

*Композиционный план
второго порядка
для $k=2$ и $n_0=1$*

Ортогональные планы второго порядка

В общем виде план, представленный в табл. неортогонален, так как

$$\sum_{j=1}^n x_{0j} x_{ij}^2 \neq 0; \quad \sum_{j=1}^n x_{ij}^2 x_{uj}^2 \neq 0, \quad i \neq u$$

Приведем его к ортогональному виду, для чего введем новые переменные (преобразования для квадратичных эффектов):

$$x'_{ij} = x_{ij}^2 - \frac{\sum_{j=1}^n x_{ij}^2}{n} = x_{ij}^2 - \bar{x}_i^2.$$

При этом

$$\sum_{j=1}^n x_{0j} x'_{ij} = \sum_{j=1}^n (x_{ij}^2 - \bar{x}_i^2) = \sum_{j=1}^n x_{ij}^2 - n \bar{x}_i^2 = 0.$$

Тогда уравнение регрессии
будет записано как

$$\hat{y} = b_0' + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i,u=1}^k b_{iu} x_i x_u + \sum_{i=1}^k b_{ii}' x_i'.$$

Композиционные планы легко привести к ортогональным, выбирая звездное плечо α . В табл. приведено значение α для различного числа факторов k и числа опытов в центре плана n_0 .

Число опытов в центре плана n_0	Звездное плечо α при различном числе факторов k			
	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$k=5^*$
1	1,000	1,215	1,414	1,546
2	1,077	1,285	1,471	1,606
3	1,148	1,353	1,546	1,664
4	1,214	1,414	1,606	1,718
5	1,267	1,471	1,664	1,772
6	1,320	1,525	1,718	1,819
7	1,369	1,575	1,772	1,868
8	1,414	1,623	1,819	1,913
9	1,454	1,668	1,868	1,957
10	1,498	1,711	1,913	2,000

Ортогональный план второго порядка для k=2 и n0=1

Номер опыта	Факторы						Результат y_j	
	x_0	x_1	x_2	$x_1 x_2$	x_1'	x_2'		
Ядро плана	1	+1	-1	-1	+1	+1/3	+1/3	y_1
	2	+1	+1	-1	-1	+1/3	+1/3	y_2
	3	+1	-1	+1	-1	+1/3	+1/3	y_3
	4	+1	+1	+1	+1	+1/3	+1/3	y_4
Звездные точки	5	+1	$\alpha=+1$	0	0	+1/3	-2/3	y_5
	6	+1	$\alpha=-1$	0	0	+1/3	-2/3	y_6
	7	+1	0	$\alpha=+1$	0	-2/3	+1/3	y_7
	8	+1	0	$\alpha=-1$	0	-2/3	+1/3	y_8
Центр плана	9	+1	0	0	0	-2/3	-2/3	y_9

В этой таблице

$$x'_{ij} = x_{ij}^2 - \frac{\sum_{j=1}^9 x_{ij}^2}{9} = x_{ij}^2 - \frac{2}{3}.$$

Представленный на рис. и в табл. прямоугольный (квадратный) план эксперимента для модели второго порядка работоспособен, хотя и несколько избыточен (9 опытов для определения 6 коэффициентов). Благодаря трем избыточным опытам, он позволяет усреднить случайные погрешности и оценить их характер.

В силу **ортогональности матрицы планирования** все коэффициенты уравнения регрессии b определяются **независимо один от другого** по формулам:

$$b_i = \frac{\sum_{j=1}^n x_{ij} y_j}{\sum_{j=1}^n x_{ij}^2}; \quad b_{ii}' = \frac{\sum_{j=1}^n x_{ij}' \cdot y_j}{\sum_{j=1}^n x_{ij}'^2}; \quad b_{iu} = \frac{\sum_{j=1}^n (x_{ij} x_{iuj}) y_j}{\sum_{j=1}^n (x_{ij} x_{iuj})^2}.$$

Здесь i – номер столбца в матрице планирования; j – номер строки; **суммы в знаменателях различны для линейных, квадратичных эффектов и взаимодействий**

Ортогональные планы второго порядка (продолжение)

Дисперсии коэффициентов уравнения регрессии следующие:

$$S_{b_i}^2 = S^2_{\text{восп}} / \sum_{j=1}^n x_{ij}^2; \quad S_{b_{ii}}^2 = S^2_{\text{восп}} / \sum_{j=1}^n x'_{ij}{}^2; \quad S_{b_{iu}}^2 = S^2_{\text{восп}} / \sum_{j=1}^n (x_{ij}x_{uj})^2.$$

Следует особо отметить, что коэффициенты уравнения регрессии, получаемые с помощью ортогональных планов второго порядка, определяются с разной точностью, в то время как ортогональные планы первого порядка обеспечивают одинаковую точность коэффициентов, т.е. план, представленный в табл., являющийся ортогональным и обеспечивающий независимость определения коэффициентов b , не является ротатабельным.

В результате расчетов по матрице с преобразованными столбцами для квадратичных эффектов получим уравнение регрессии в виде

$$\hat{y} = b_0' + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{j,u=1}^k b_{ju} x_j x_u + \sum_{j=1}^k b_{jj}' (x_j^2 - \bar{x}_j^2).$$

Для преобразования к обычной форме записи следует перейти от коэффициента b_0' к коэффициенту b_0 , используя выражение

$$b_0 = b_0' - \sum_{i=1}^k b_{ii}' \bar{x}_i^2.$$

При этом дисперсия этого коэффициента рассчитывается по следующему соотношению:

$$S_{b_0}^2 = S_{b_0'}^2 + \sum_{i=1}^k \bar{x}_i^2 \cdot S_{b_{ii}'}^2.$$

Исследование причин образования расслоений в горячекатаных листах

Известно, что при прокатке листов толщиной более 12 мм появление брака связано большей частью с дефектами, унаследованными от слитка. Наиболее серьезными дефектами толстого листа являются расслоения, трещины и рванины.

Существует достаточно тесная связь между некоторыми параметрами выплавки стали и пораженностью листов расслоениями. По результатам ультразвуковой дефектоскопии было установлено, что на пораженность листов расслоениями (которая количественно может быть выражена в относительных единицах по площади расслоений, отнесенной к площади всего раската – Y , %).

Наиболее существенно влияют такие два фактора, как скорость выгорания углерода в период рудного кипения – x_1 , %/ч, и время разлива стали – x_2 , мин.

Уровни варьирования факторов

Уровни факторов	Факторы	
	x_1 , %/ч	x_2 , мин
Основной (нулевой)	0,35	5,5
Нижний	0,20	3,5
Верхний	0,50	7,5
Интервал варьирования	0,15	2,0

**Ортогональный план второго порядка для двух факторов
и с тремя опытами в центре плана**

		Факторы (кодированные значения)		Факторы (натуральные значения)		Отклик
		X_1	X_2	$x_1, \%/ч$	$x_2, \text{мин}$	
Ядро плана	1	-1	-1	0,20	3,5	0,36
	2	+1	-1	0,50	3,5	0,51
	3	-1	+1	0,20	7,5	1,33
	4	+1	+1	0,50	7,5	1,51
Звезд- ные точки	5	$\alpha = +1,15$	0	0,52	5,5	0,50
	6	$\alpha = -1,15$	0	0,18	5,5	0,31
	7	0	$\alpha = +1,15$	0,35	7,8	1,59
	8	0	$\alpha = -1,15$	0,35	3,2	0,45
Центр плана	9	0	0	0,35	5,5	0,30
	10	0	0	0,35	5,5	0,29
	11	0	0	0,35	5,5	0,31

В исходную таблицу плана добавим фиктивный столбец $x_0=1$, а также дополнительные столбцы $x_{12}=x_1x_2$.

$$x'_{1j} = x_{1j}^2 - \frac{\sum_{j=1}^{11} x_{1j}^2}{11} \qquad x'_{2j} = x_{2j}^2 - \frac{\sum_{j=1}^{11} x_{2j}^2}{11}.$$

$$\sum_{j=1}^{11} X_{1j}^2 = \sum_{j=1}^{11} X_{2j}^2 = (-1)^2 + (+1)^2 + (-1)^2 + (+1)^2 + (+1,15)^2 + (-1,15)^2 + (0)^2 + \dots + (0)^2 = 6,636,$$

то $X'_{1j} = X_{1j}^2 - \frac{6,636}{11} \approx X_{1j}^2 - 0,6$, аналогично $X'_{2j} \approx X_{2j}^2 - 0,6$.

**Матрица ортогонального плана второго порядка
в кодированных значениях**

Номер опыта	Ф а к т о р ы						Результат		
	X ₀	X ₁	X ₂	X ₁₂	X ₁ '	X ₂ '	y _j	\hat{y}_j	
1	+1	-1	-1	+1	+0,4	+0,4	0,36	0,366	
Ядро плана	2	+1	+1	-1	+0,4	+0,4	0,51	0,526	
	3	+1	-1	+1	+0,4	+0,4	1,33	1,346	
	4	+1	+1	+1	+0,4	+0,4	1,51	1,506	
	5	+1	+1,15	0	0	+0,7225	-0,6	0,50	0,507
Звезд- ные точки	6	+1	-1,15	0	0	+0,7225	-0,6	0,31	0,323
	7	+1	0	+1,15	0	-0,6	+0,7225	1,59	1,587
	8	+1	0	-1,15	0	-0,6	+0,7225	0,45	0,46
	9	+1	0	0	0	-0,6	-0,6	0,30	0,296
Центр плана	10	+1	0	0	0	-0,6	-0,6	0,29	0,296
	11	+1	0	0	0	-0,6	-0,6	0,31	0,296

В таблице приведены значения оценок отклика \hat{y}_j , найденные по модели, после обработки экспериментальных данных.

Для оценки коэффициентов в уравнение регрессии

$$\hat{y} = b_0' + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_{12} X_{12} + b_{11}' X_{11}' + b_{22}' X_{22}'$$

сформируем еще дополнительную таблицы в которых представим результаты всех необходимых промежуточных расчетов

y_j **Таблица произведений кодированных значений факторов на значения отклика**

Номер опыта	Произведения факторов на отклик					
	$X_0 \cdot y$	$X_1 \cdot y$	$X_2 \cdot y$	$X_{12} \cdot y$	$X_1' \cdot y$	$X_2' \cdot y$
1	0,36	-0,36	-0,36	0,36	0,144	0,144
2	0,51	0,51	-0,51	-0,51	0,204	0,204
3	1,33	-1,33	1,33	-1,33	0,532	0,532
4	1,51	1,51	1,51	1,51	0,604	0,604
5	0,5	0,575	0	0	0,36125	-0,3
6	0,31	-0,3565	0	0	0,223975	-0,186
7	1,59	0	1,8285	0	-0,954	1,148775
8	0,45	0	-0,5175	0	-0,27	0,325125
9	0,3	0	0	0	-0,18	-0,18
10	0,29	0	0	0	-0,174	-0,174
11	0,31	0	0	0	-0,186	-0,186
Σ -сумма	7,46	0,5485	3,281	0,03	0,305225	1,9319

Величина квадратов кодированных значений факторов

Номер опыта	Квадраты факторов					
	$(X_0)^2$	$(X_1)^2$	$(X_2)^2$	$(X_{12})^2$	$(X_1')^2$	$(X_2')^2$
1	1	1	1	1	0,16	0,16
2	1	1	1	1	0,16	0,16
3	1	1	1	1	0,16	0,16
4	1	1	1	1	0,16	0,16
5	1	1,3225	0	0	0,522006	0,36
6	1	1,3225	0	0	0,522006	0,36
7	1	0	1,3225	0	0,36	0,522006
8	1	0	1,3225	0	0,36	0,522006
9	1	0	0	0	0,36	0,36
10	1	0	0	0	0,36	0,36
11	1	0	0	0	0,36	0,36
Σ -сумма	11	6,645	6,645	4	3,484013	3,484013

Используя значения из строк « Σ -сумма» в этих двух таблицах, находим оценки коэффициентов регрессии:

$$b_0' = 7,46/11 = 0,678182;$$

$$b_1 = 0,5485/6,645 = 0,082543;$$

$$b_2 = 3,281/6,645 = 0,493755;$$

$$b_{12} = 0,03/4 = 0,0075;$$

$$b_{11}' = 0,305225/3,484013 = 0,087607;$$

$$b_{22}' = 1,9319/3,484013 = 0,554504.$$

Расчет коэффициентов модели

Значимость коэффициентов проверяем по критерию Стьюдента $t_i = |b_i| / S_{b_i}$, для чего находим дисперсию воспроизводимости $S^2_{\text{восп}}$ по трем параллельным опытам в центральной точке плана:

$$S^2_{\text{восп}} = \frac{\sum_{i=1}^3 (y_{0i} - \bar{y}_0)^2}{3-1} = \frac{1}{3-1} \left[\sum_{i=1}^3 y_{0i}^2 - \frac{1}{3} \left(\sum_{i=1}^3 y_{0i} \right)^2 \right] =$$

$$= \frac{1}{2} \left[((0,30)^2 + (0,29)^2 + (0,31)^2) - \frac{1}{3} (0,30 + 0,29 + 0,31)^2 \right] = 0,0001$$

и рассчитываем дисперсии и средние квадратичные отклонения по каждому из коэффициентов:

$$S_{b_0}^2 = 0,0001/11 = 9,09091 \cdot 10^{-6}; \quad S_{b_0} = \sqrt{9,09091 \cdot 10^{-6}} = 0,003015;$$

$$S_{b_1}^2 = S_{b_2}^2 = 0,0001/6,645 = 1,5 \cdot 10^{-5}; \quad S_{b_1} = S_{b_2} = \sqrt{1,5 \cdot 10^{-5}} = 0,003879;$$

$$S_{b_{12}}^2 = 0,0001/4 = 2,5 \cdot 10^{-5}; \quad S_{b_{12}} = \sqrt{2,5 \cdot 10^{-5}} = 0,005;$$

$$S_{b_{11}}^2 = S_{b_{22}}^2 = 0,0001/3,484013 = 2,87 \cdot 10^{-5}; \quad S_{b_{11}} = S_{b_{22}} = \sqrt{2,87 \cdot 10^{-5}} = 0,005357.$$

Оценка значимости коэффициентов

Тогда критерий Стьюдента по каждому из коэффициентов составит:

$$t_{b_0'} = 0,678182/0,003015 = 224,9;$$

$$t_{b_1} = 0,082543/0,003879 = 21,2;$$

$$t_{b_2} = 0,493755/0,003879 = 127,3;$$

$$t_{b_{12}} = 0,0075/0,005 = 1,5;$$

$$t_{b_{11}'} = 0,087607/0,005357 = 16,3;$$

$$t_{b_{22}'} = 0,554504/0,005357 = 103,5.$$

Поскольку критическое значение $t_{0,05;3-1}=4,30$ (СТЮДРАСПОБР(0,05;2)= 4,302655725), то все коэффициенты в уравнении регрессии можно считать значимыми, кроме b_{12} .

Следовательно, окончательно уравнение регрессии можно записать в виде

$$\hat{y} = 0,68 + 0,08 \cdot X_1 + 0,49 \cdot X_2 + 0,09 \cdot X_1' + 0,55 \cdot X_2'.$$

Оценка адекватности модели

Сопоставляя полученные величины \hat{Y}_j с опытными данными y_j , находим дисперсию адекватности, учитывая, что число значимых коэффициентов в уравнении регрессии равно пяти:

$$S_{\text{ад}}^2 = \frac{\sum_{j=1}^{11} (y_j - \hat{y}_j)^2}{11 - 5} = \frac{1}{6} \left[(0,360 - 0,366)^2 + (0,510 - 0,526)^2 + (1,330 - 1,346)^2 + \dots \right] = 0,00019.$$

Адекватность уравнения проверяется по критерию Фишера $F = S_{\text{ад}}^2 / S_{\text{восп}}^2 = 0,00019 / 0,0001 = 1,9$. Уравнение адекватно, поскольку составленное таким образом F-отношение меньше теоретического $F < F_{0,05; m_1=6; m_2=2} = 19,3$ ($F_{\text{РАСПОБР}}(0,05; 6; 2) = 19,3294909$), где $m_1 = 11 - 5 = 6$ – число степеней свободы дисперсии адекватности; $m_2 = 3 - 1 = 2$ – число степеней свободы дисперсии воспроизводимости.

В завершение данного примера перепишем полученное уравнение регрессии относительно X_1^2 и X_2^2 , учтя ранее введенные соотношения для $X_1' \approx X_1^2 - 0,6$ и $X_2' \approx X_2^2 - 0,6$.

$$\begin{aligned} \hat{y} &= 0,68 + 0,08 \cdot X_1 + 0,49 \cdot X_2 + 0,09 \cdot (X_1^2 - 0,6) + 0,55 \cdot (X_2^2 - 0,6) = \\ &= (0,68 - 0,09 \cdot 0,6 - 0,55 \cdot 0,6) + 0,08 \cdot X_1 + 0,49 \cdot X_2 + 0,09 \cdot X_1^2 + 0,55 \cdot X_2^2 = \\ &= 0,29 + 0,08 \cdot X_1 + 0,49 \cdot X_2 + 0,09 \cdot X_1^2 + 0,55 \cdot X_2^2. \end{aligned}$$

Оценка оптимальных значений параметров

Проанализируем полученное уравнение на экстремум относительно X_1 и X_2 :

$$\frac{\partial y}{\partial X_1} = 0,08 + 2 \cdot 0,09 \cdot X_1 = 0;$$
$$\frac{\partial y}{\partial X_2} = 0,49 + 2 \cdot 0,55 \cdot X_2 = 0.$$

Решая два последних соотношения, находим, что экстремум будет достигаться в точке с кодированными координатами $X_1 = -0,08/(2 \cdot 0,09) = -0,44$ и $X_2 = -0,55/(2 \cdot 0,49) = -0,44$, при этом натуральные значения факторов могут быть найдены из соотношений

$$\frac{x_1 - 0,35}{0,15} = X_1 = -0,44;$$
$$\frac{x_2 - 5,5}{2} = X_2 = -0,44.$$

Следовательно, при скорости выгорания углерода в период рудного кипения, равной $0,35 - 0,44 \cdot 0,15 = 0,28$ %/ч, и времени разливки стали $5,5 - 0,44 \cdot 2 = 4,6$ мин пораженность листов расслоениями будет минимальной, и составит порядка 0,16%.

$$y = 0,29 + 0,08 \cdot (-0,44) + 0,49 \cdot (-0,44) + 0,09 \cdot (-0,44)^2 + 0,55 \cdot (-0,44)^2 \approx 0,16.$$

Ортогональные планы второго порядка (продолжение)

В дальнейшем, зная дисперсию воспроизводимости, проверяют значимость коэффициентов и адекватность уравнения:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i,u=1}^k b_{iu} x_i x_u + \sum_{i=1}^k b_{ii} x_i^2.$$

Значимость коэффициентов проверяется по критерию Стьюдента $t_i = |b_i| / S_{b_i}$.

Коэффициент значим, если $t_i > t_{\alpha, m}$, где m – число степеней свободы дисперсии воспроизводимости.

Адекватность уравнения проверяется по критерию Фишера $F = S_{\text{ад}}^2 / S_{\text{восп}}^2$.

Уравнение адекватно, если составленное таким образом F-отношение меньше теоретического:

$$F < F_{\alpha; m_1; m_2},$$

где $m_1 = n - l$ – число степеней свободы дисперсии адекватности; m_2 – число степеней свободы дисперсии воспроизводимости; l – число коэффициентов в уравнении регрессии второго порядка, равное числу сочетаний из $k+2$ по 2, т.е.

$$l = \frac{(k+2)(k+1)}{2}.$$

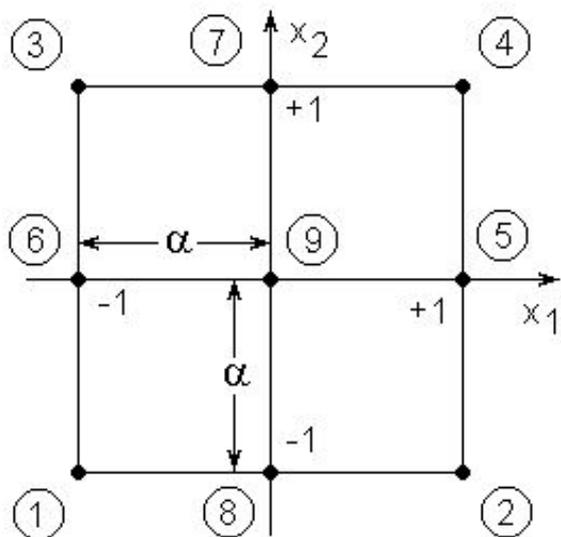
Ротатабельные планы второго порядка

Как мы установили, план второго порядка, представленный в табл., не обладает свойством ротатабельности.

Ротатабельным называют планирование, для которого дисперсия отклика (выходного параметра) \hat{y} , предсказанного уравнением регрессии, постоянна для всех точек, находящихся на равном расстоянии от центра эксперимента.

Экспериментатору заранее не известно, где находится та часть поверхности отклика, которая представляет для него особый интерес, поэтому следует стремиться к тому, чтобы количество информации, содержащееся в уравнении регрессии, было одинаково для всех равноотстоящих от центра эксперимента точек.

Действительно, удаление от центра точек **5,6,7,8** в $\sqrt{2}=1,414$ раза меньше, чем удаление точек **1, 2, 3, 4** и, следовательно коэффициенты уравнения регрессии определяются с различной дисперсией.



Ортогональный план второго
порядка при $k=2$

Ротатабельные планы второго порядка (продолжение)

Бокс и Хантер предложили ротатабельные планы 2-го порядка. Для того чтобы композиционный план был ротатабельным, величину звездного плеча α выбирают из условия:

$$\alpha = 2^{\frac{k}{4}} \quad \text{при } k < 5$$

$$\alpha = 2^{\frac{k-1}{4}} \quad \text{при } k \geq 5$$

$$\text{или в общем случае } \alpha = 2^{\frac{k-p}{4}},$$

где k – число факторов; p – дробность реплики (для ПФЭ $p=0$, для полуреплики $p=1$, для четвертьреплики $p=2$ и т.д.).

Число точек в центре плана n_0 увеличивают.

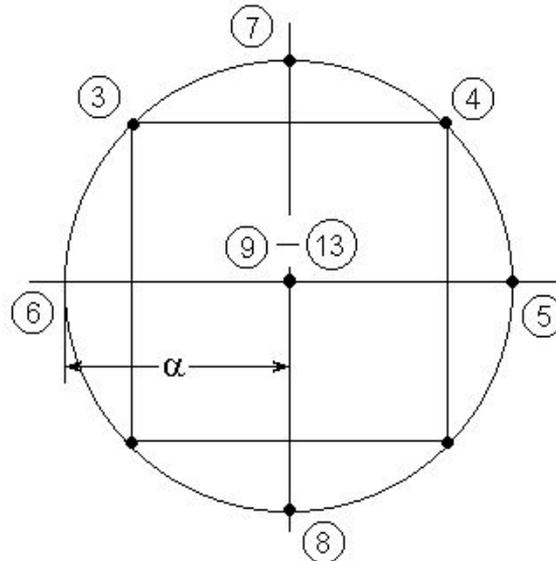
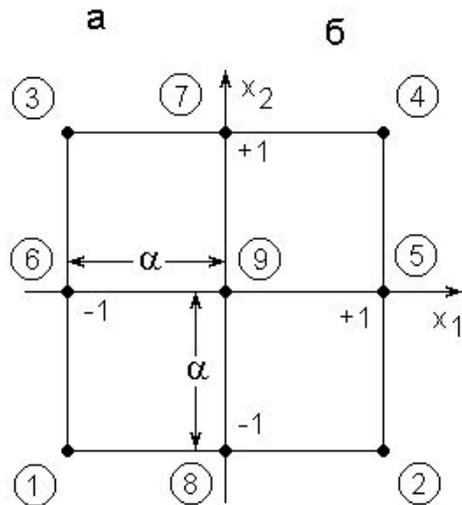
В табл. приведены значения α и n_0 для различного числа независимых факторов.

Значения звездных плеч и числа точек в центре ротатабельных планов

Параметр плана	Значения параметров при числе независимых факторов								
	2	3	4	5	6	6	6	7	7
Ядро плана	2^2	2^3	2^4	2^5	2^{5-1}	2^6	2^{6-1}	2^7	2^{7-1}
Звездное плечо	1,414	1,682	2,00	2,378	2,00	2,828	2,378	3,333	2,828
Число точек в центре плана n_0	5	6	7	10	6	15	9	21	14

Ротатабельные планы второго порядка (продолжение)

Поясним идею выбора значения звездного плеча α на примере матрицы ротатабельного планирования второго порядка для $k=2$, представленной в табл.



Планы второго порядка при $k=2$:

а — ортогональный;

б — ротатабельный

Размещение точек этого плана показано на рис.б. Для обеспечения ротатабельности точек 5, 6, 7, 8 необходимо удалить их от центра плана на расстояние α в $=1,414$ раз $\sqrt{2}$ больше, чем удаление точек 1, 2, 3, 4 от осей X_2 и X_1 . В результате этого все точки плана оказываются лежащими на окружности.

Учитывая существенно большее влияние на функцию отклика случайной ошибки в точке 9, *рекомендуется ставить в этой точке плана не один, а несколько дублирующих опытов (в данном случае опыты с 9 до 13) для усреднения полученных результатов и для осуществления статистического анализа результатов всего эксперимента в целом.*

Ротатабельные планы второго порядка (продолжение)

Номер опыта	Ф а к т о р ы						Результат y_j
	x_0	x_1	x_2	$x_1 x_2$	x_1^2	x_2^2	
Ядро плана	1	+1	-1	-1	+1	+1	y_1
	2	+1	+1	-1	-1	+1	y_2
	3	+1	-1	+1	-1	+1	y_3
	4	+1	+1	+1	+1	+1	y_4
Звездные точки	5	+1	+1,414	0	0	2	y_5
	6	+1	-1,414	0	0	2	y_6
	7	+1	0	+1,414	0	0	y_7
	8	+1	0	-1,414	0	0	y_8
Центр плана	9	+1	0	0	0	0	y_9
	10	+1	0	0	0	0	y_{10}
	11	+1	0	0	0	0	y_{11}
	12	+1	0	0	0	0	y_{12}
	13	+1	0	0	0	0	y_{13}

Матрица ротатабельного планирования, оказывается неортогональной, так как

$$\sum_{j=1}^n x_{0j} \cdot x_{uj}^2 \neq 0; \quad \sum_{j=1}^n x_{ij}^2 \cdot x_{uj}^2 \neq 0; \quad i \neq u.$$

Следовательно, если какой-либо из квадратичных эффектов оказался незначимым, то **после его исключения коэффициенты уравнения регрессии необходимо пересчитать заново.**

При использовании ротатабельных планов второго порядка дисперсию воспроизводимости можно определить *по опытам в центре плана*.

В связи с этим при проверке адекватности уравнения регрессии, полученного по ротатабельному плану второго порядка, поступают следующим образом.

Находят остаточную сумму квадратов с числом степеней свободы

$$S_1^2 = \sum_{j=1}^n (y_j - \bar{y}_j)^2 \quad m_1 = n - l = n - \frac{(k+2)(k+1)}{2}.$$

По опытам в центре плана определяют сумму квадратов воспроизводимости

$$S_2^2 = \sum_{j=1}^{n_0} (y_{0j} - \bar{y}_{0j})^2$$

с числом степеней свободы $m_2 = n_0 - 1$.

Далее находят сумму квадратов, характеризующих неадекватность $S_3^2 = S_1^2 - S_2^2$, число степеней свободы которой

$$m_3 = m_1 - m_2 = n - \frac{(k+2)(k+1)}{2} - (n_0 - 1).$$

Проверяют адекватность по F-критерию: $F = \frac{S_3^2/m_3}{S_2^2/m_2}$. Уравнение адекватно, если $F < F_{\alpha; m_3; m_2}$.

Если модель второго порядка оказалась неадекватной, следует:

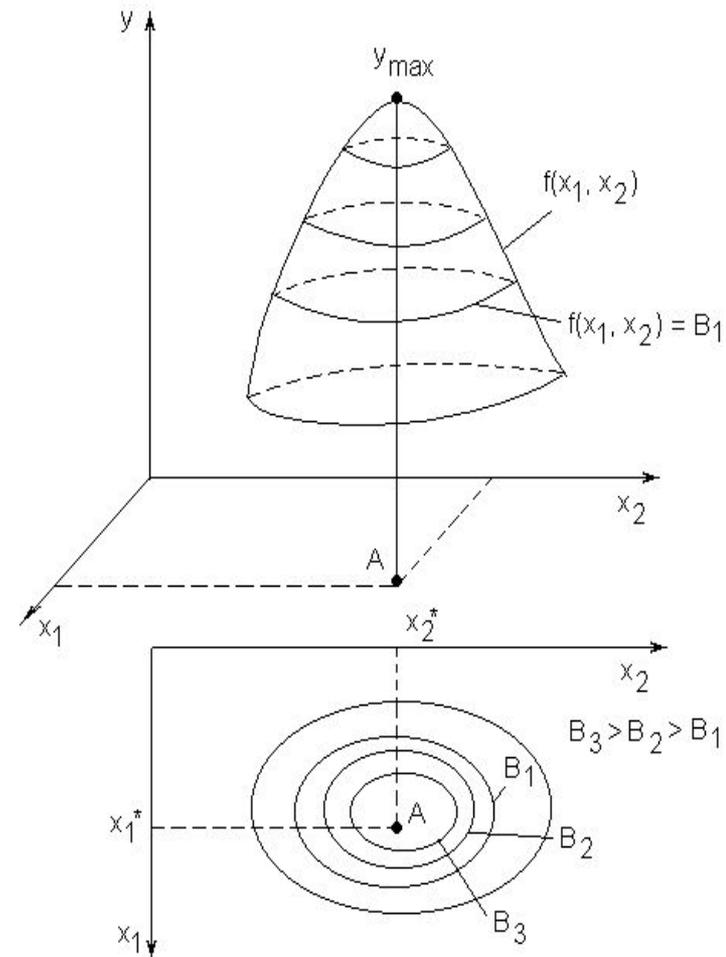
1. Повторить эксперименты на меньшем интервале варьирования факторов.
2. Перенести центр плана в другую точку факторного пространства.
3. В тех случаях, когда адекватность модели по-прежнему не достигается, рекомендуется перейти к планам третьего порядка.

Планирование экспериментов при поиске оптимальных условий

Во многих случаях инженерной практики перед исследователем возникает задача не только выявления характера связи между двумя или несколькими рядами наблюдений, но и нахождения таких численных значений факторов, при которых отклик (выходной параметр) достигает своего экстремального значения (максимума или минимума). Эксперимент, решающий эту задачу, называется экстремальным. В этом случае задача сводится к оптимизационной и формулируется следующим образом: требуется определить такие координаты экстремальной точки $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_k^*)$ поверхности отклика $y=f(x_1, x_2, \dots, x_k)$, в которой она максимальна (минимальна):

$$\max y(x_1, x_2, \dots, x_k) = y(x_1^*, x_2^*, \dots, x_k^*).$$

Графическая интерпретация задачи оптимизации объекта $y(x_1, x_2)$ при двух факторах x_1, x_2 представлена на рис. Здесь точка А соответствует оптимальным значениям факторов x_1^* и x_2^* , обеспечивающим максимум функции отклика y_{\max} . Замкнутые линии на рис. характеризуют линии постоянного уровня и описываются уравнением $y=f(x_1, x_2)=B=\text{const}$.



Поверхность отклика (а) и линии равного уровня (б):
 $y=f(x_1, x_2)=B=\text{const}$ для $n=2$

Планирование экспериментов при поиске оптимальных условий

На модели шахтной печи с противоточно движущимся плотным продуваемым слоем, схема которой представлена на рис., требуется определить расположение фурмы по высоте печи H , ее диаметр D и высов L , обеспечивающие максимальную степень использования теплового потенциала газового потока. В данном случае факторами являются H , D , L , а в качестве функции отклика $y(H, D, L)$ в первом приближении можно использовать температуру отходящих из печи газов.

Заметим, что вид функции отклика в этом случае исследователю заранее неизвестен, т.е. отсутствует математическая модель, адекватно описывающая данный процесс. Требуется с наименьшими затратами (при минимальном числе опытов) определить оптимальные значения H^* , L^* , D^* , при которых температура отходящих газов минимальна.

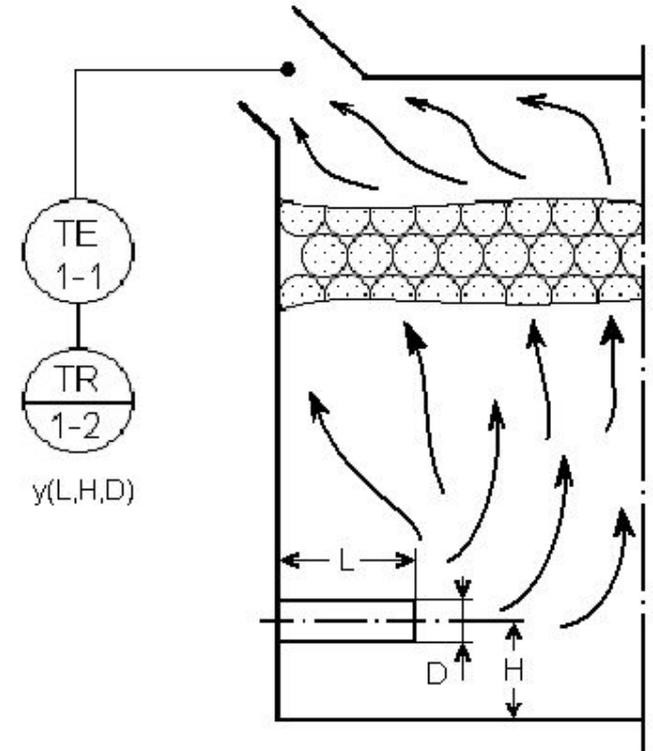


Рис. Схема шахтной печи:

- 1.—датчик температуры;
2. – регистрирующий прибор

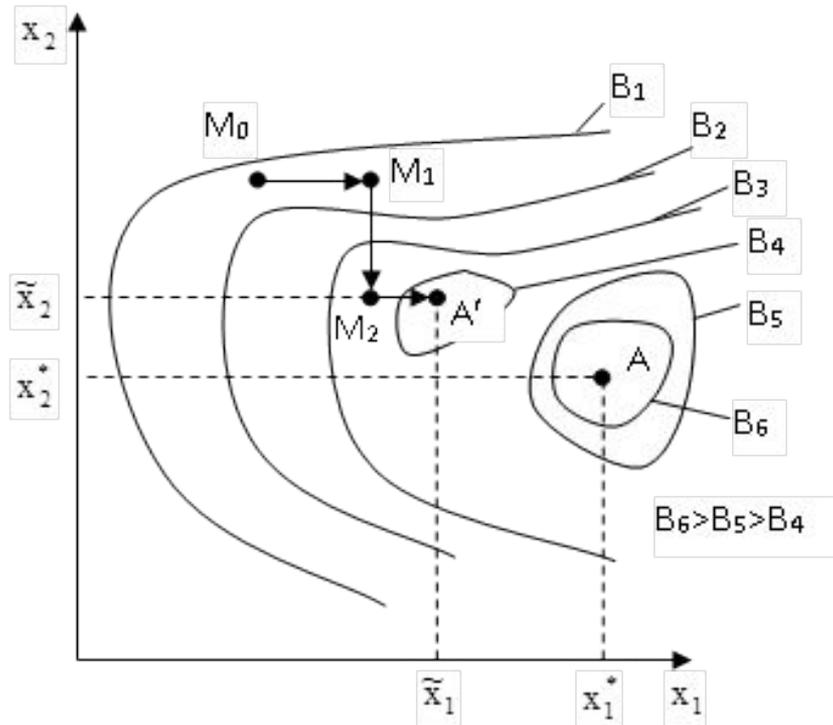
Планирование экспериментов при поиске оптимальных условий

Известный из практики метод "проб" и "ошибок", в котором факторы изменяются на основании опыта, интуиции или наугад, при обычно имеющем место значительном числе факторов при исследовании процессов в металлургии зачастую оказывается малоэффективным вследствие весьма сложной зависимости функции отклика от факторов.

Требуют значительно меньшего числа опытов и быстрее приводят к цели те поисковые методы оптимизации, где шаговое варьирование факторами производится целенаправленно по определенному плану. Поисковые методы оптимизации относятся к классу итерационных процедур, при этом весь процесс разбивается на шаги, на каждом шаге делается ряд опытов и определяется, каким образом нужно изменить факторы, влияющие на процесс, чтобы получить улучшение результата. При этом на каждом очередном шаге получаемая информация используется для выбора последующего шага.

Разработано множество методов пошаговой оптимизации, которые подробно рассматриваются в разделе вычислительной математики – “Численные методы оптимизации”. Мы же рассмотрим только некоторые из них, эффективность использования которых в промышленном и лабораторном эксперименте применительно к металлургическим процессам подтверждена практикой.

Метод покоординатной оптимизации



По этому методу выбирается произвольная точка M_0 и определяются ее координаты. Поиск оптимума осуществляется поочередным варьированием каждого из факторов. При этом сначала изменяют один фактор (x_1) при фиксированных остальных ($x_2 = \text{const}$) до тех пор, пока не прекращается прирост функции отклика (точка M_1). В дальнейшем изменяется другой фактор (x_2) при фиксированных остальных ($x_1 = \text{const}$), и далее процедура повторяется.

— Данный метод весьма прост, однако при большом числе факторов требуется значительное число опытов, чтобы достичь координат оптимума. Более того, при некоторых зависимостях $y = f(x_1, \dots, x_k)$ этот метод может привести к ложному результату. На рис. показан один из таких частных случаев, когда поочередное изменение каждого из факторов в любую сторону вдоль координатных осей x_1 и x_2 вызывает уменьшение Y . В результате решения находится ложный экстремум, находящийся в точке A' с координатами $\tilde{x}_1; \tilde{x}_2$, в то время как действительное значение максимума y_{\max} находится в точке A с координатами x_1^* и x_2^* .

Метод крутого восхождения

Известно, что кратчайший, наиболее короткий путь — это движение по градиенту, т.е. перпендикулярно линиям равного уровня, на которых функция отклика принимает постоянные значения $y(x_1, x_2, \dots, x_k) = V$. В связи с этим при оптимизации процесса рабочее движение целесообразно совершать в направлении наиболее быстрого возрастания функции отклика, т.е. в направлении градиента функции y .

Существуют различные модификации градиентного метода, одним из них является метод крутого восхождения. Сущность этого метода также рассмотрим на примере двухфакторной.

В этом случае шаговое движение осуществляется в направлении наискорейшего возрастания функции отклика, т.е. $\text{grad } y(x_1, x_2)$. Однако направление корректируют не после каждого следующего шага, а при достижении в некоторой точке на данном направлении частного экстремума функции отклика.

Пусть в окрестности точки M_0 как центра плана поставлен ПФЭ 2^2 . Координаты отдельных опытов соответствуют точкам 1-4. По результатам ПФЭ можно рассчитать коэффициенты линейного уравнения регрессии.

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2.$$

Градиент функции отклика в этой точке определяется как

$$\text{grad } y = \frac{\partial y}{\partial x_1} \cdot \hat{i} + \frac{\partial y}{\partial x_2} \cdot \hat{j},$$

\hat{i}, \hat{j} - единичные векторы в направлении координатных осей.

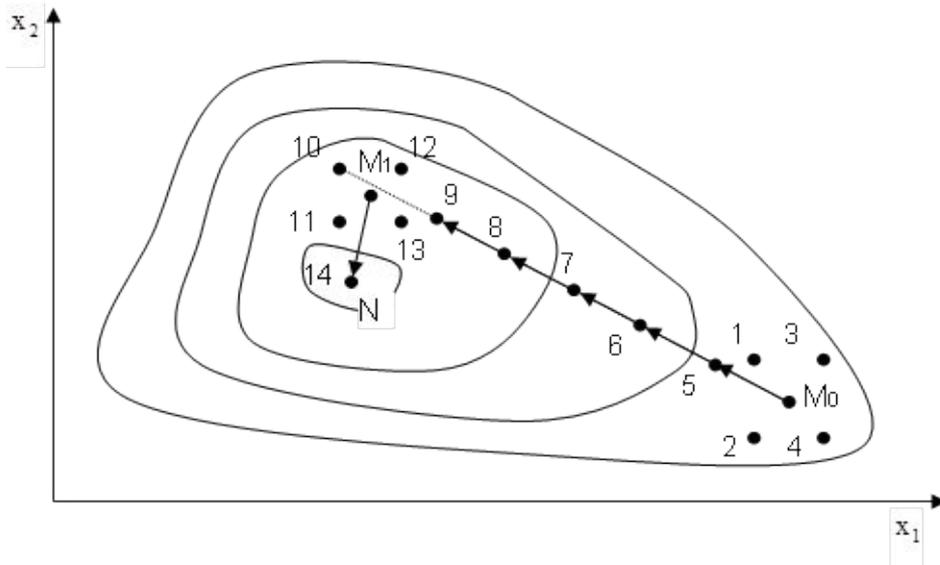


Рис. Процедура оптимизации методом крутого восхождения

Следовательно, для движения по градиенту необходимо изменять факторы пропорционально их коэффициентам регрессии и в сторону, соответствующую знаку коэффициента. В процессе поиска двигаются в этом направлении до тех пор, пока не будет обнаружен локальный максимум (точка M_1 на рис.). В точке последнего находят новое направление градиента (направление M_1N), осуществляя опять же ПФЭ, и далее процедура повторяется. Стрелками на рис. показана траектория движения к оптимуму.

Метод крутого восхождения. Продолжение



Практически алгоритм сводится к следующей последовательности операций.

1. Планирование и постановка ПФЭ (или ДФЭ) в окрестности точки начального состояния x_{i0} . Расчет коэффициентов b_i линейной математической модели с целью определения направления градиента.

2. Расчет произведений $b_i \Delta x_i$, где Δx_i — интервалы варьирования факторов при ПФЭ (ДФЭ).

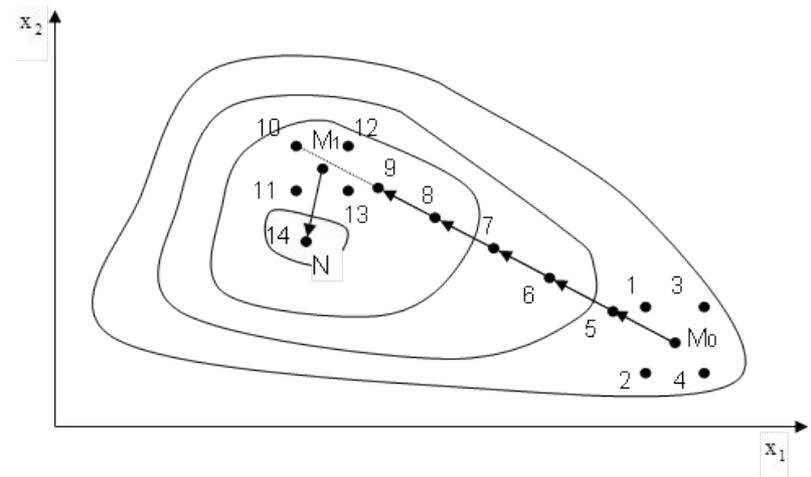
3. Выбор базового фактора $x_i = x_{i0}$, у которого $|b_i \Delta x_i| = a = \max$.

4. Выбор шага крутого восхождения для базового фактора h_a .

Этот выбор производится на основании имеющейся априорной информации или с учетом опыта исследователя, технологических соображений или других критериев. Относительно выбора шага заметим, что слишком малый шаг потребует значительного числа опытов при движении к оптимуму, а большой шаг создает опасность проскакивания области оптимума.

5. Расчет шагов изменения других факторов по формуле $h_i = (b_i \Delta x_i) h_a / a$. Это соотношение между величинами шагов изменения отдельных факторов обеспечивает движение по градиенту в факторном пространстве.

Метод круглого восхождения. Продолжение



6. Составление плана движения по градиенту. Для этого в соответствии с определенными значениями шагов изменения факторов и их последовательным алгебраическим суммированием с основным уровнем в точке $x_{jk} = x_{j0} + kh_j$, $k = 1, 2, \dots$ находят координаты опытов 5, 6, 7, 8, 9, 10 (см.рис.). Часть этих опытов полагают "мысленными". "Мысленный" опыт заключается в получении предсказанных (расчетных) значений функции отклика по линейному уравнению регрессии, что позволяет сократить объем реальных опытов, т.е. увеличить скорость продвижения к экстремуму. При "мысленном эксперименте" перевод координат в кодированную форму и подстановка их в уравнение модели объекта должна подтвердить действительное возрастание y . Обычно реальные опыты в начале движения из базовой точки вдоль направления градиента ставятся через 2-4 мысленных опыта. Другие опыты реализуют на практике, определяя последовательность значений y в направлении градиента. Из опытных данных находят положение локального экстремума (точка M_1 на рис.).

7. В окрестности локального экстремума ставят новую серию опытов (ПФЭ или ДФЭ) для определения новых значений коэффициентов уравнения регрессии и нового направления градиента (направление M_1N на рис.). В дальнейшем процедура повторяется до достижения следующего локального экстремума и так далее вплоть до определения окрестности координат максимума функции отклика, которая носит название почти стационарной области. Признаком достижения этой области является статистическая незначимость коэффициентов b_i . В почти стационарной области становятся значимы эффекты взаимодействия и квадратичные эффекты. Здесь требуется переходить от ДФЭ (если он использовался ранее) к ПФЭ, а если и этого окажется недостаточно, перейти от планов эксперимента первого порядка к планам второго порядка.

Симплексный метод планирования

Метод симплексного планирования позволяет без предварительного изучения влияния факторов найти область оптимума. В этом методе не требуется вычисления градиента функции отклика, поэтому он относится к безградиентным методам поиска оптимума. Для этого используется специальный план эксперимента в виде симплекса.

Симплекс — это **простейший выпуклый многогранник**, образованный $k+1$ вершинами в k -мерном пространстве, которые соединены между собой прямыми линиями. При этом координаты вершин симплекса являются значениями факторов в отдельных опытах. Так, например, в двухфакторном пространстве (на плоскости) $k=2$ симплекс — любой треугольник, в трехфакторном (трехмерном) $k=3$ пространстве — тетраэдр и т.д.

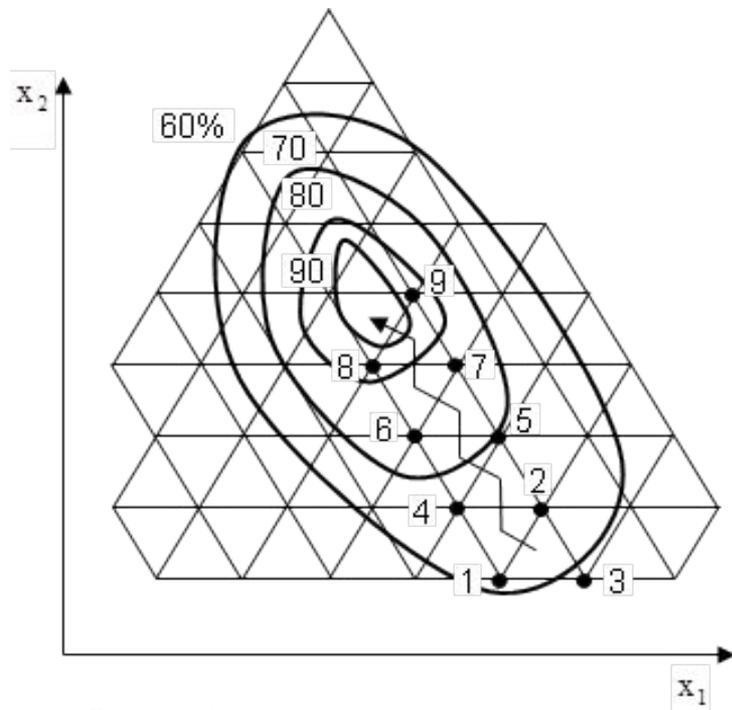


Схема движения к оптимальной области симплексным методом

Симплекс называется правильным или регулярным, если все расстояния между образующими его вершинами равны (равносторонний треугольник, правильный тетраэдр и др.).

После построения исходного симплекса и проведения опытов при значениях факторов, соответствующих координатам его вершин, анализируют результаты и выбирают вершину симплекса, в которой получено наименьшее (наихудшее) значение функции отклика. Для движения к оптимуму необходимо поставить опыт в новой точке, являющейся зеркальным отображением точки с наихудшим (минимальным) результатом относительно противоположной грани симплекса. На рис. представлено геометрическое изображение симплекс-метода для двумерного случая $k=2$.

Симплексный метод планирования

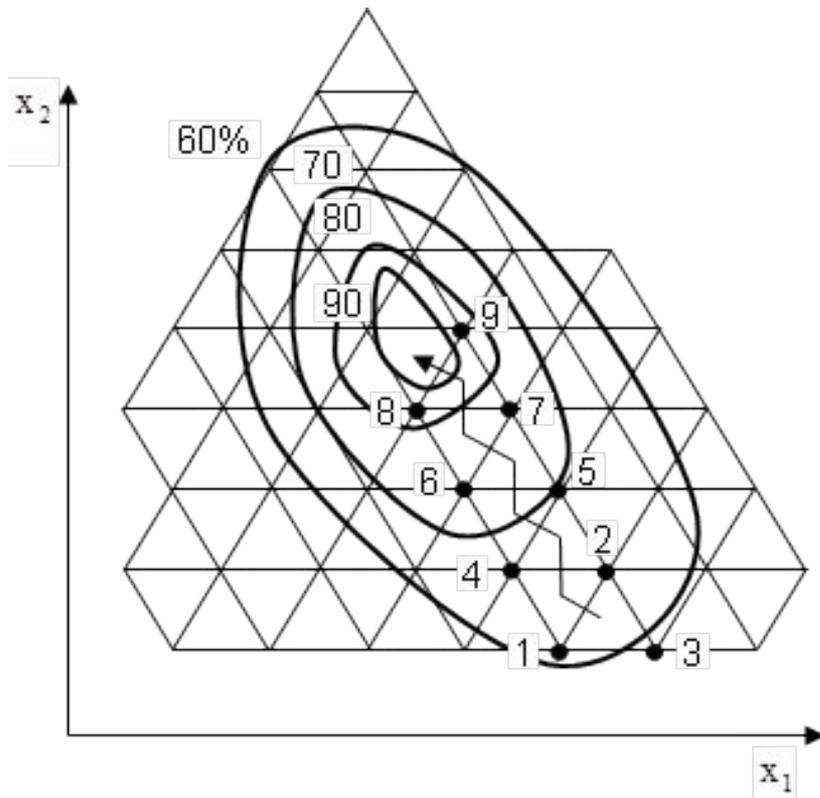


Схема движения к оптимальной области симплексным методом

По итогам проведения опытов 1, 2 и 3 худшим оказался опыт 3. Следующий опыт ставится в точке 4, которая образует с точками 1 и 2 новый правильный симплекс. Далее сопоставляются результаты опытов 1, 2 и 4. Наихудший результат получен в точке 1, поэтому она в новом симплексе заменяется зеркальным отображением (точкой 5) и т.д., пока не будет достигнута почти стационарная область. Следует заметить, что хотя этот путь и зигзагообразен, общее число опытов, необходимых для достижения области оптимума, может быть небольшим за счет того, что проводить $k+1$ опыт приходится лишь в начале, а в дальнейшем каждый шаг сопровождается проведением только одного дополнительного опыта, условия которого выбираются на основе предшествующих результатов.

Выбор размеров симплекса и его начального положения в известной степени произволен. Для построения начального симплекса значения в каждом опыте исходного симплекса определяются по формуле

$$x_{ij} = x_{i0} + C_{ij}\Delta x_i,$$

где x_{i0} — координаты центра начального симплекса; Δx_i — интервал варьирования i -го фактора; C_{ij} — кодированное значение i -го фактора для j -го опыта, выбираемые из числовой матрицы для симплексного планирования, приведенные в табл.

*Коэффициенты C_{ij} для выбора координат симплекса **

Номер опыта ($\downarrow j$)	Факторы ($\rightarrow i$)					
	x_1	x_2	x_3	...	x_{k-1}	x_k
1	k_1	k_2	k_3	...	K_{k-1}	K_k
2	$-R_1$...		K_k
3	0	$-R_2$...		K_k
4	0	0	$-R_3$...		K_k
...	K_k
k	0	0	0	0	R_{k-1}	K_k
$k+1$	0	0	0	0	0	R_k

$$*) k_i = \frac{1}{i+1} \sqrt{\frac{i+1}{2i}} = \sqrt{\frac{1}{2i(i+1)}}; R_i = \sqrt{\frac{i}{2(i+1)}}; i = 1, 2, \dots, k,$$

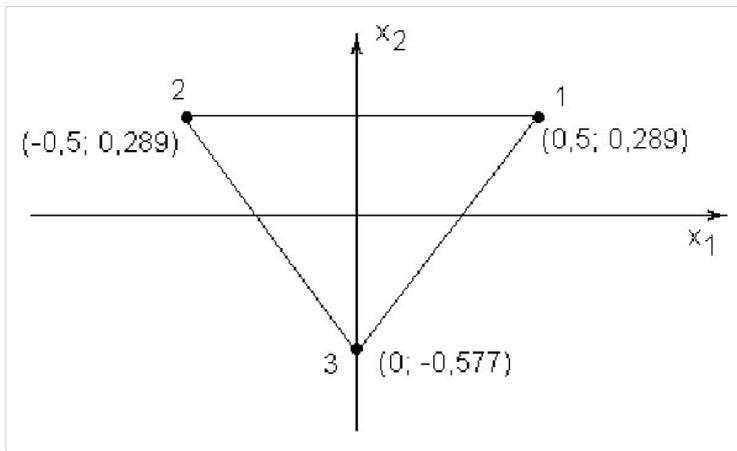
где k — число факторов

Так, если $x_{10}=0$ и $x_{20}=0$, а $\Delta x_1=\Delta x_2=1$, то координаты опытов будут равны (см. рис.): опыт 1 (0,5;0,289), опыт 2 (-0,5; 0,289) и опыт 3 (0;-0,577), что соответствует координатам вершин равностороннего треугольника с длиной стороны, равной 1. Начало координат в этом случае находится в точке пересечения медиан (биссектрис).

Для определения условий проведения опыта в отраженной точке (координат новой вершины симплекса) используется формула

$$x_{in} = \frac{2}{k} \sum_{j=1}^{k+1} x_{ij} - x_{i_3}, \quad j \neq i_3,$$

где x_{in} — координата новой точки (новой вершины) симплекса для i -й переменной; x_{i_3} — координата заменяемой точки (координата вершины симплекса с наихудшим откликом перед ее отбрасыванием); $\frac{1}{k} \sum_{j=1}^{k+1} x_{ij}$ — среднее значение из координат всех вершин симплекса, кроме заменяемой



. Координаты вершин симплекса
при $x_{i0}=0$, $\Delta x_i=1$ и $n=2$

Известны следующие критерии окончания процесса последовательного отражения наихудших вершин и постановки очередных опытов в новых вершинах:

1. Разность значений функции отклика в вершинах симплекса становится меньше ранее заданной величины. Это означает либо выход в "почти стационарную" область вблизи оптимума, либо достижение участка поверхности $y = f(x_1; \dots; x_k) = const$ в виде "плато". В этом случае дополнительными опытами в стороне от симплекса следует удостовериться в отсутствии других участков с более существенной кривизной поверхности $y = f(x_1; \dots; x_k)$ и принять величину с экстремальным значением функции отклика за точку оптимума.

2. Отражение любой из вершин симплекса после однократного качания приводит к его возврату в прежнее положение. При этом есть основания утверждать "накрытие" симплексом точки оптимума.

3. Циклическое движение симплекса вокруг одной из его вершин на протяжении более чем нескольких шагов. Подобная ситуация имеет место, когда искомый оптимум располагается внутри области, охватываемой циркулирующим симплексом.

В случаях 2 и 3 рекомендуется уменьшить размеры симплекса, т.е. расстояния между вершинами, и продолжить поиск до желаемого уточнения координат искомого оптимума.

Существует его модификация, известная под названием "**метод деформируемого симплекса**", которая ускоряет процесс поиска оптимума за счет использования на данном шаге информации, накопленной на предыдущих шагах.

Сущность метода поиска по деформированному симплексу заключается в том, что при отражении наихудшей вершины относительно центра тяжести противоположной грани размер симплекса не остается постоянным, а осуществляется его деформация (растяжение или сжатие). Для пояснения сущности метода введем координату центра тяжести \bar{X}_j остальных (за исключением наихудшей) вершин симплекса:

$$\bar{X}_j = \sum_{i=1}^{k+1} x_{ij} / k; \quad j \neq i_3.$$

или

$$X'_{iH} = \bar{X}_j + \alpha(\bar{X}_j - x_{i_3}).$$

При $\alpha=1$ получим выражение (и $X'_{iH} = x_{iH}$).

Введем обозначения:

y_3 — наихудший (минимальный) отклик в симплексе;

y_{\max} — наилучший (максимальный) отклик;

y_3' — отклик, следующий за наихудшим.

Следовательно $y_3 < y_{\max} < y_3'$.

В зависимости от значения функции отклика в точке нормального отражения y_H при $\alpha=1$ возможны следующие варианты:

1) если $y_3 < y_H < y_{\max}$, т.е. x_{iH} будет нехудшей и нелучшей точкой в новом наборе точек, то x_{i_3} следует заменить на x_{iH} с $\alpha=1$. В этом случае осуществляется нормальное отражение;

2) если $y_H > y_{\max}$, то x_{iH} оказывается новой лучшей точкой в новом наборе точек. В этом случае направление растяжения признается "весьма удачным" и симплекс растягивается в нормальном направлении. Для этого случая $1 < \alpha < 2$ и α называется коэффициентом растяжения;

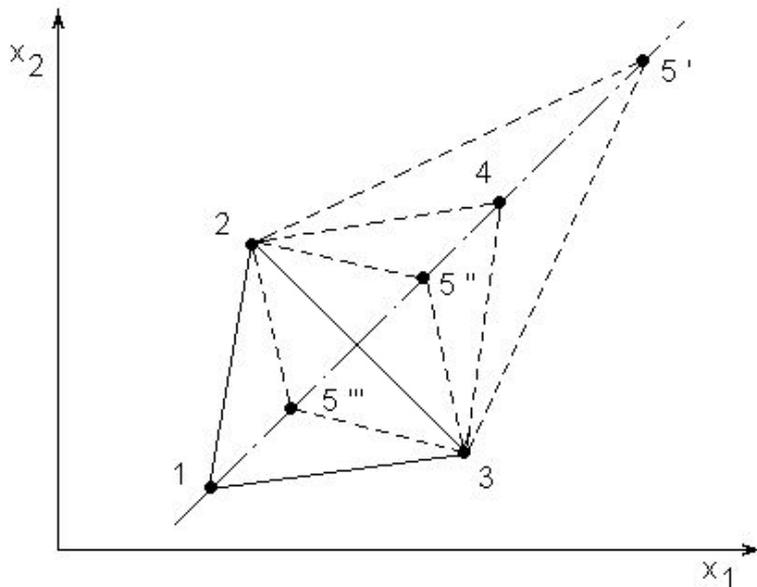
3) если $y_3 < y_H < y_3'$, то направление отражения признается правильным, но симплекс слишком велик и его следует сжать выбором коэффициента сжатия α из диапазона $0 < \alpha < 1$;

4) если $y_H < y_3$, то даже направление отражения выбрано неверно и следует осуществить отрицательное сжатие выбором отрицательного значения коэффициента α ($-1 < \alpha < 0$).

Таким образом, на каждом шаге следует вначале нормально отразить наихудшую вершину симплекса ($\alpha=1$), поставить в этой точке опыт, определить y_n , а затем поставить следующий опыт в точке факторного пространства X_n , координаты которой определяются с учетом рассмотренных вариантов 1-4.

На показаны точка 4 очередного опыта при нормальном отражении ($\alpha=1$) наихудшей вершины 1, точки 5', 5'', 5''' последующих опытов для случаев соответственно растяжения ($\alpha=2$), сжатия ($\alpha=0,5$) и отрицательного сжатия ($\alpha=-0,5$) симплекса.

Таким образом, метод поиска по деформированному симплексу обладает повышенной гибкостью, позволяющей учитывать особенности поверхности отклика



К методу деформированного симплекса