Лекция №3

Фактором называется измеряемая переменная величина, принимающая в некоторый момент времени определенное значение.

Факторы соответствуют способам воздействия на объект исследования.

Каждый фактор имеет область определения. *Под областью определения фактора понимается совокупность всех значений, которые в принципе может принимать данный фактор.*

Совокупность значении фактора, которая используется в эксперименте, является подмножеством из множества значений, образующих *область определения*.

Область определения может быть непрерывной или дискретной.

Факторы разделяются на *количественные и качественные*.

***Качественные факторы* – это разные вещества, разные технологические способы, аппараты, исполнители и т.д.**

Требования, предъявляемые к факторам при планировании эксперимента

При планировании эксперимента факторы должны быть управляемыми. Это значит, что экспериментатор, выбрав нужное значение фактора, может его поддерживать постоянным в течение всего опыта, т.е. может управлять фактором. В этом состоит особенность «активного» эксперимента. Планировать эксперимент можно только в том случае, если уровни факторов подчиняются воле экспериментатора.

Чтобы точно определить фактор, нужно указать последовательность действий (операций), с помощью которых устанавливаются его конкретные значения (уровни).

Такое определение фактора будем называть **операциональным**. Введение операционального определения обеспечивает однозначное понимание фактора. С операциональным определением связаны выбор размерности фактора и точность его фиксирования.

- Иногда выбор размерности превращается в весьма трудную проблему выбора измерительных шкал. Замена одной измерительной шкалы другой называется *преобразованием шкал.*
- *Точность замера факторов должна быть возможно более высокой.* Степень точности определяется диапазоном изменения факторов. При изучении процесса, который длится десятки часов, нет необходимости учитывать доли минуты, а в быстрых процессах необходимо учитывать, быть может, доли секунды.
- *Факторы должны быть непосредственными воздействиями на объект. Факторы должны быть однозначны.* Трудно управлять фактором, который, является функцией других факторов. Но в планировании могут участвовать сложные факторы, такие, как соотношения между компонентами, их логарифмы и т.п.

Требования к совокупности факторов

При планировании эксперимента обычно одновременно изменяется несколько факторов. Поэтому очень важно сформулировать требования, которые предъявляются к совокупности факторов.

<u>Первое требование- требование совместимости</u>

Совместимость факторов означает, что все их комбинации осуществимы и безопасны. Это очень важное требование. Представьте себе, что вы поступили легкомысленно, не обратили внимания на требование совместимости факторов и запланировали такие условия опыта, которые могут привести к взрыву установки. Согласитесь, что такой результат очень далек от целей оптимизации.

Независимость факторов, т.е. возможность установления фактора на любом уровне вне зависимости от уровней других факторов. **Если это условие невыполнимо, то невозможно планировать эксперимент.**

Второе требование – *отсутствию корреляции между факторами.* **Требование некоррелированности не означает, что между значениями факторов нет никакой связи.** ***Достаточно, чтобы связь не была линейной.***

Выбор модели

Под моделью будем понимать вид функции отклика $y = \varphi(x_1, x_2, \ldots, x_k)$. ВЫБРАТЬ МОДЕЛЬ – ЗНАЧИТ ВЫБРАТЬ ВИД ЭТОЙ ФУНКЦИИ, ЗАПИСАТЬ ЕЕ УРАВНЕНИЕ. ТОГДА ОСТАНЕТСЯ СПЛАНИРОВАТЬ И ПРОВЕСТИ ЭКСПЕРИМЕНТ ДЛЯ ОЦЕНКИ ЧИСЛЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ КОНСТАНТ (КОЭФФИЦИЕНТОВ) ЭТОГО УРАВНЕНИЯ.

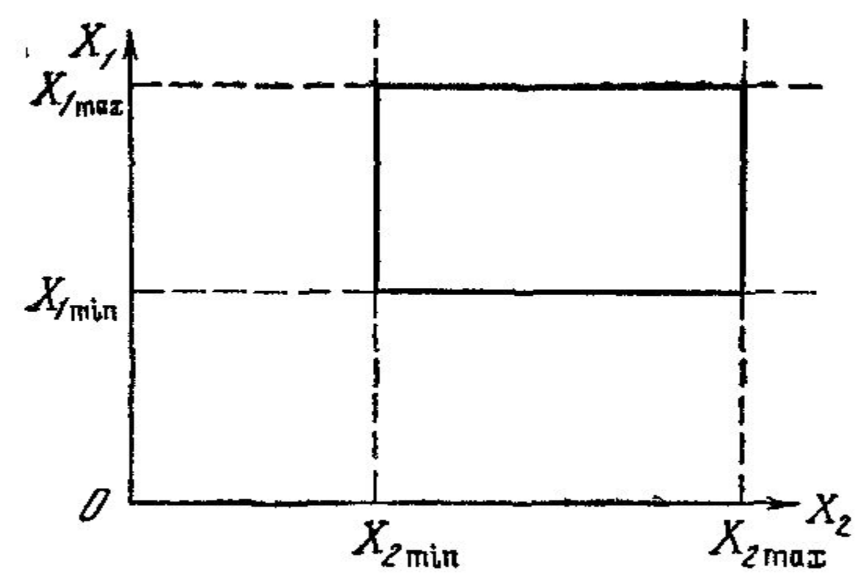


Рис. 11. Область определения факторов

Но как выбрать модель?

Сначала построим геометрический ***аналог функции отклика – поверхность отклика.*** Для наглядности рассматривать случай с двумя факторами.

- Мы хотим изобразить геометрически возможные состояния «черного ящика» с двумя входами. Для этого достаточно располагать плоскостью с обычной декартовой системой координат. По одной оси координат будем откладывать в некотором масштабе значения (уровни) одного фактора, а по другой оси – второго. Тогда каждому состоянию «ящика» будет соответствовать точка на плоскости (рис. 11).

- Если факторы *совместимы, то границы* *образуют на плоскости некоторый прямоугольник, внутри которого лежат точки, соответствующие состояниям «черного ящика».*

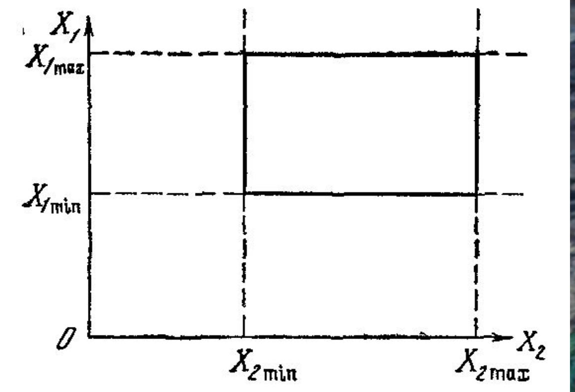


Рис. 11. Область определения факторов

- Пунктирными линиями обозначены границы областей определения каждого из факторов, а сплошными – границы их совместной области определения. Чтобы указать значение параметра оптимизации, требуется еще одна ось координат. Если ее построить, то поверхность отклика будет выглядеть так, как на рис. 12.
- ПРОСТРАНСТВО, В КОТОРОМ СТРОИТСЯ ПОВЕРХНОСТЬ ОТКЛИКА, МЫ БУДЕМ НАЗЫВАТЬ ФАКТОРНЫМ ПРОСТРАНСТВОМ. ОНО ЗАДАЕТСЯ КООРДИНАТНЫМИ ОСЯМИ, ПО КОТОРЫМ ОТКЛАДЫВАЮТСЯ ЗНАЧЕНИЯ ФАКТОРОВ И ПАРАМЕТРА ОПТИМИЗАЦИИ.

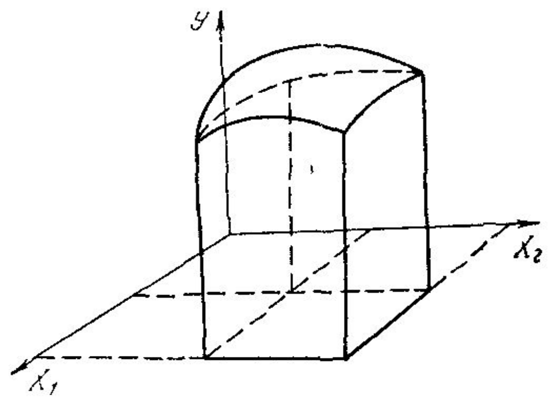


Рис. 12. Поверхность отклика

- Размерность факторного пространства зависит от числа факторов. При многих факторах поверхность отклика уже нельзя изобразить наглядно и приходится ограничиваться только алгебраическим языком.

- Но для двух факторов можно даже не переходить к трехмерному пространству, а ограничиться плоскостью. Для этого достаточно произвести сечение поверхности отклика плоскостями, параллельными плоскости X_1OX_2, и полученные в сечениях линии спроектировать на эту плоскость. Так строят, например, изображения гор и морских впадин на географических картах.;

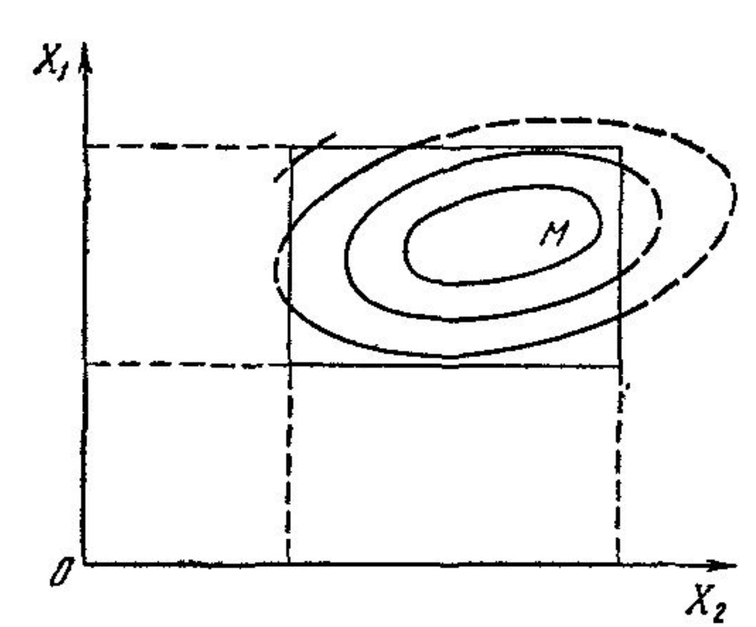


Рис. 13. Проекция сечений поверхности отклика на плоскость

- Размерность факторного пространства зависит от числа факторов. При многих факторах поверхность отклика уже нельзя изобразить наглядно и приходится ограничиваться только алгебраическим

- Точка М на рисунке – это и есть та оптимальная точка, которую мы ищем. *Каждая линия соответствует постоянному значению параметра оптимизации называется линией равного отклика.*
- *Существует соответствие между состоянием «ящика»* и *значением параметра оптимизации: каждому возможному состоянию «ящика» соответствует одно значение параметра оптимизации.* Однако обратное неверно: одному возможному значению параметра оптимизации может соответствовать и одно, и несколько; и сколько угодно состояний «ящиков».
- *Как ставить эксперимент, чтобы найти оптимум при минимуме затрат?*
- *Это прежде всего вопрос стратегии.*

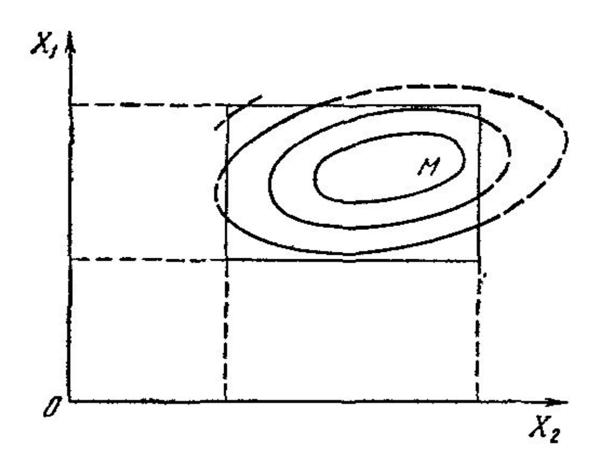


Рис. 13. Проекция сечений поверхности отклика на плоскость

Как выбрать модель???

- Модели бывают разные. Моделей бывает много. Чтобы выбрать одну из них, надо понять, что мы хотим от модели, какие требования мы к ней предъявляем.
- *Главное требование к модели – это способность предсказывать направление дальнейших опытов, причем предсказывать с требуемой точностью.* Так как до получения модели мы не знаем, какое направление нам понадобится, то естественно требовать, чтобы точность предсказания во всех возможных направлениях была одинакова.

В некоторой подобласти, в которую входят и координаты выполненных опытов, предсказанное с помощью модели значение отклика не должно отличаться от фактического больше чем на некоторую заранее заданную величину.

Модель, которая удовлетворяет такому или какому–либо аналогичному требованию, называется адекватной. Проверка выполнимости этого требования называется проверкой адекватности модели.

Если несколько различных моделей отвечают нужным требованиям, то следует предпочесть ту из них, которая является самой

- Если рассмотреть логарифмическую функцую. На некотором отрезке [x_{min}, x_{max}] она с удовлетворительной точностью описывается двумя уравнениями:
- $y=\log_b x$,
- $y=bx$.
- Во втором уравнении b – коэффициент, который мы можем оценить, например, по результатам эксперимента. Какое из уравнений, по вашему мнению, проще?
- Простота – вещь относительная. Если вы заранее не сформулируете точно, что называется простым, а что сложным, то невозможно произвести выбор. Вот почему на наш вопрос не было никакого другого ответа, кроме «не знаю».
- *При прочих равных условиях мы всегда будем предпочитать степенные ряды. Точнее, отрезки степенных рядов – алгебраические полиномы.* При таком соглашении можно сказать, что второе уравнение проще.

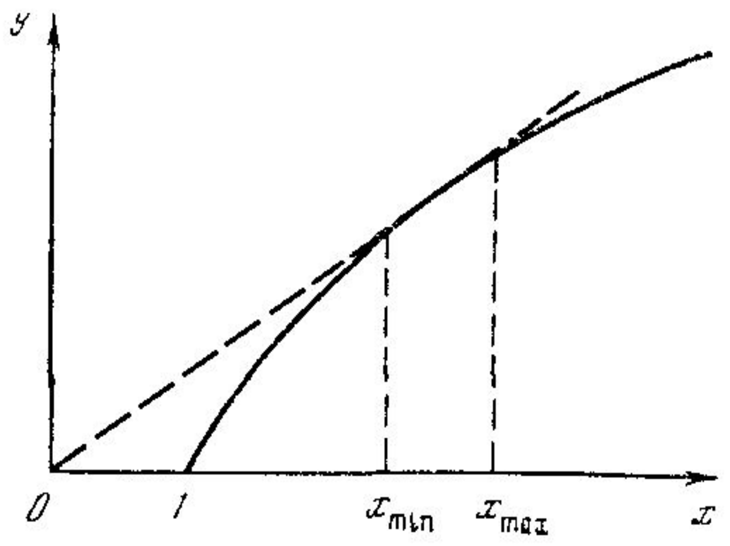


Рис. 17. График логарифмической функции

Итак, мы представили неизвестную нам функцию отклика полиномом.

Операция замены одной функции другой, в каком-то смысле эквивалентной функцией называется аппроксимацией.

Значит, мы аппроксимировали неизвестную функцию полиномом.

НО ПОЛИНОМЫ БЫВАЮТ РАЗНЫХ СТЕПЕНЕЙ. КАКОЙ ВЗЯТЬ НА ПЕРВОМ ШАГЕ?

Эксперимент нужен только для того, чтобы найти численные значения коэффициентов полинома. Надо найти такой *полином, который содержит как можно меньше коэффициентов, но удовлетворяет требованиям, предъявленным к модели.* Чем ниже степень полинома при заданном числе факторов, тем меньше в нем коэффициентов.

- *Модель должна хорошо предсказывать направление наискорейшего улучшения параметра оптимизации. Такое направление называется направлением градиента.*
- **Если выбрать линейную модель - С одной стороны, она содержит информацию о направлении градиента, с другой – в ней минимально возможное число коэффициентов при данном числе факторов. Единственное опасение в том, что неясно, будет ли линейная модель всегда адекватной.**
- **Вопрос в том, как выбрать подобласть в факторном пространстве, чтобы линейная модель оказалась адекватной.**
- **Условие аналитичности функции отклика гарантирует нам эту возможность. Всегда существует такая окрестность любой точки (точнее, почти любой точки), в которой линейная модель адекватна. Размер такой области заранее не известен, но адекватность, как вы помните, можно проверять по результатам эксперимента. Значит, выбрав сначала произвольную подобласть, мы, рано или поздно, найдем ее требуемые размеры. И как только это случится, воспользуемся движением по градиенту.**

На следующем этапе мы будем искать линейную модель уже в другой подобласти. Цикл повторяется до тех пор, пока движение по градиенту не перестанет давать эффект. Это значит, *что мы попали в область, близкую к оптимуму. Такая область называется «почти стационарной».* Здесь линейная модель уже не нужна. Либо попаданием в почти стационарную область задача решена, либо надо переходить к полиномам более высоких степеней, например второй степени, чтобы подробнее описать область оптимума.

- Удачный выбор подобласти имеет, как вы видите, большое значение для успеха всей работы. Он связан с интуитивными решениями, которые принимает экспериментатор на каждом этапе.

- *Кроме задачи оптимизации, иногда возникает задача построения интерполяционной модели. В этом случае нас не интересует оптимум. Просто мы хотим предсказывать результат с требуемой точностью во всех точках некоторой заранее заданной области.*

Принятие решений перед планированием эксперимента

- При выборе области эксперимента прежде всего надо оценить границы областей определения факторов.
- При этом должны учитываться *ограничения нескольких типов.*

- ***Первый тип** – принципиальные ограничения для значений факторов, которые не могут быть нарушены ни при каких обстоятельствах.* **Например, если фактор – температура, то нижним пределом будет абсолютный нуль.**
- ***Второй тип** – ограничения, связанные с технико-экономическими соображениями, например, со стоимостью сырья, дефицитностью отдельных компонентов, временем ведения процесса.*
- ***Третий тип ограничений**, с которым чаще всего приходится иметь дело, определяется конкретными условиями проведения процесса,* **Например, существующей аппаратурой, технологией, организацией. В реакторе, изготовленном из некоторого материала, температуру нельзя поднять выше температуры плавления этого материала или выше рабочей температуры данного катализатора.**

- **Оптимизация обычно начинается в условиях, когда объект уже подвергался некоторым исследованиям. *Информацию, содержащуюся в результатах предыдущих исследований, будем называть априорной (т.е. полученной до начала эксперимента).***
- ***Итак, выбор экспериментальной области факторного пространства связан с тщательным анализом априорной информации.***
- **Далее в области определения надо найти локальную подобласть для планирования эксперимента.**

Процедура выбора этой подобласти включает два этапа:

- ***выбор основного уровня;***
- ***выбор интервалов варьирования.***

Выбор основного уровня.

. Наилучшим условиям, определенным из анализа априорной информации, соответствует комбинация (или несколько комбинаций) уровней факторов. Каждая комбинация рассматривается как исходная точка для построения плана эксперимента. *Назовем ее основным (нулевым) уровнем. Построение плана эксперимента сводится к выбору экспериментальных точек, симметричных относительно нулевого уровня.*

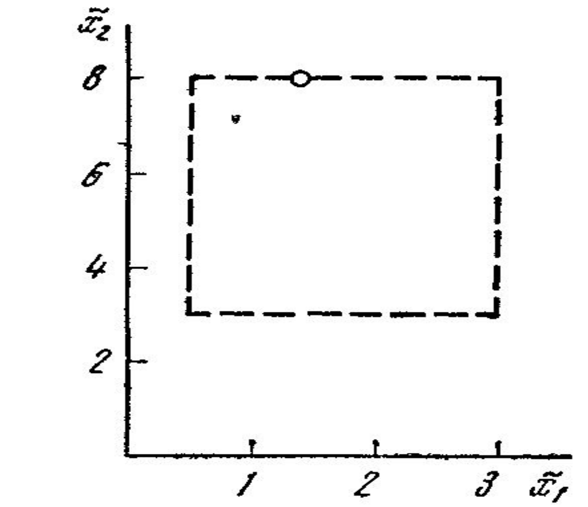


Рис. 18. Область определения двух факторов

- На рис. 18 изображена область определения для двух факторов. Кружком отмечены наилучшие условия, известные из априорной информации. Известно также, что имеется возможность дальнейшего улучшения параметра оптимизации, а данное значение нас не удовлетворяет. Эту точку нельзя рассматривать в качестве основного уровня.
- Дело в том, что она расположена на границе области определения. Требование симметрии экспериментальных точек относительно нулевого уровня привело бы в этом случае к выходу за границы области определения, чего делать также нельзя.
- Резюмируем наши рассуждения о принятии решений при выборе основного уровня.
- ***После того как нулевой уровень выбран, переходим к следующему шагу – выбору интервалов варьирования.***

- **Выбор интервалов варьирования.** ***Для каждого фактора выбрать два уровня, на которых он будет варьироваться в эксперименте.***
- ***Интервал варьирования – это расстояние на координатной оси между основным и верхним (или нижним) уровнем.*** **Таким образом, задача выбора уровней сводится к более простой задаче выбора интервала варьирования.**

Заметим еще, что для упрощения записи условий эксперимента и обработки экспериментальных данных масштабы по осям выбираются так, чтобы верхний уровень соответствовал +1, нижний –1, а основной – нулю. Для факторов с непрерывной областью определения это всегда можно сделать с помощью преобразования , где нормированное значение фактора, *X* – натуральное значение фактора; X_0 – натуральное значение основного уровня фактора; *dx* – интервал варьирования фактора.

- Для качественных факторов, имеющих два уровня, один уровень обозначается +1, а другой – 1; порядок уровней не имеет значения.
- Пусть процесс определяется четырьмя факторами. Основной уровень и интервалы варьирования выбраны следующим образом.
- **Основной уровень 3 30 1,5 15**
- **Интервал варьирования 2 10 1 10**
- Остановимся на первом факторе. Отметим на координатной оси три уровня: нижний, основной и верхний.
- **Натуральные значения 1 2 3 5**
- **Кодированные значения –1 × 0 +1**
- Нужно найти кодированное значение для $x_1 = 2{,}0$. Это значение лежит между 1,0 и 3,0, т.е. между – 1 и 0 в кодированном масштабе. Так как в натуральном масштабе 2,0 лежит посередине между 1,0 и 3,0; то ему соответствует – 0,5 в кодированном масштабе.

На выбор интервалов варьирования накладываются естественные ограничения сверху и снизу. *Интервал варьирования не может быть меньше той ошибки, с которой экспериментатор фиксирует уровень фактора.* Иначе верхний и нижний уровни окажутся неразличимыми.

С другой стороны, *интервал не может быть настолько большим, чтобы верхний или нижний уровни оказались за пределами области*

- *Выбор интервалов варьирования – задача трудная, так как она связана с неформализованным этапом планирования эксперимента.*
- ***Точность фиксирования факторов определяется точностью приборов и стабильностью уровня в ходе опыта.*** **Для упрощения схемы принятия решений мы введем приближенную классификацию, полагая, что есть низкая, средняя и высокая точности. Можно, например, считать, что поддержание температуры в реакторе с погрешностью не более 1% соответствует высокой, ее более 5% – средней, а более 16% – низкой точности.**

Источником сведений о кривизне поверхности отклика могут служить уже упоминавшиеся графики однофакторных зависимостей, а также теоретические соображения. Полезно знать, в каких диапазонах меняются значения параметра оптимизации в разных точках факторного пространства.

Если имеются результаты некоторого множества опытов, то всегда можно найти наибольшее или наименьшее значения параметра оптимизации. Разность между этими значениями будем называть диапазоном изменения параметра оптимизации для данного множества опытов.

Для принятия решений используется априорная информация о точности фиксирования факторов, кривизне поверхности отклика и диапазоне изменения параметра оптимизации. Каждое сочетание градаций перечисленных признаков определяет ситуацию, в которой нужно принимать решение.

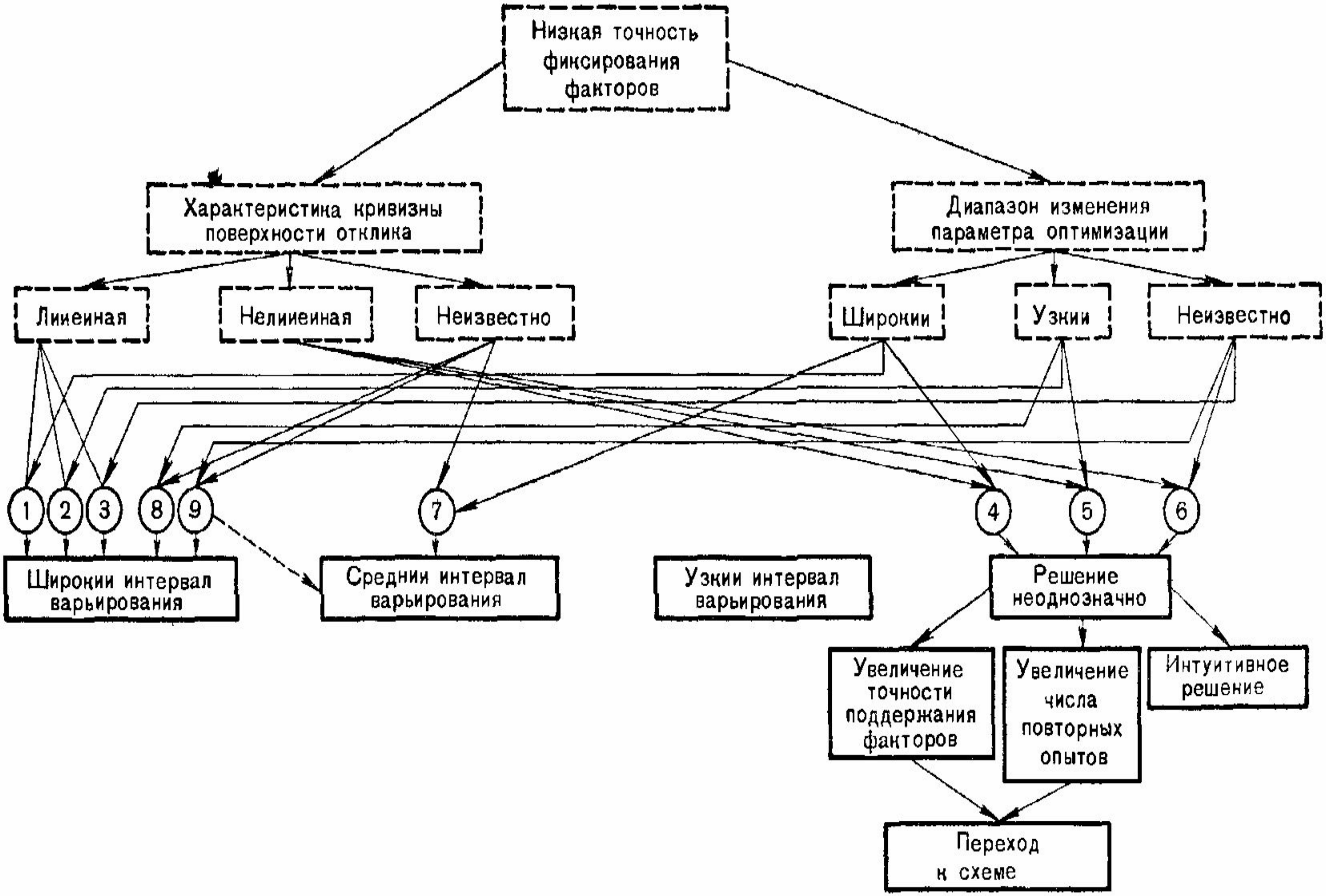


Рис. 19. Принятие решений при низкой точности фиксирования факторов

Перейдем к рассмотрению блок-схем принятия решений.

На первой схеме (рис. 19) представлены девять ситуаций, имеющих место при низкой точности фиксирования факторов. При выборе решений учитываются информация о кривизне поверхности отклика и о

Типичное решение – широкий интервал варьирования. Узкий **интервал варьирования совершенно не используется, что вполне понятно при низкой точности.**

Наибольшие трудности возникают, когда поверхность отклика нелинейна. Появляется противоречие между низкой точностью фиксирования факторов и кривизной. Первая требует расширения интервала, а вторая – сужения. Решение оказывается неоднозначным.

Как поступить?

Приходится рассматривать дополнительные рекомендации (см. блок-схему). Прежде всего нужно выяснить, нельзя ли увеличить точность эксперимента либо за счет инженерных решений, либо за счет увеличения числа повторных опытов. *Если это возможно, то решения принимаются на основе блок-схемы (рис. 20) для средней точности фиксирования факторов.* Если это невозможно, то для принятия решения нет достаточных оснований и оно становится интуитивным.

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

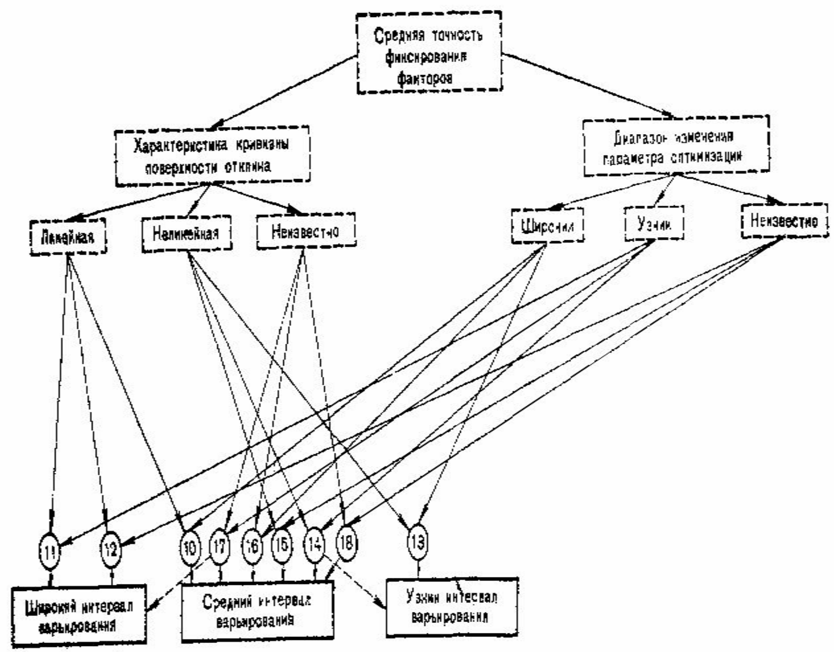


Рис. 20. Принятие решений при средней точности фиксирования факторов

На рис. 20 изображена блок-схема для случая средней точности фиксирования факторов.

Характерен выбор среднего интервала варьирования. Лишь в случае нелинейной поверхности и широкого диапазона рекомендуется узкий интервал варьирования. При сочетаниях линейной поверхности с узким диапазоном и отсутствием информации о диапазоне выбирается широкий интервал варьирования. Пунктиром, как и выше, показаны редко применяемые альтернативы.

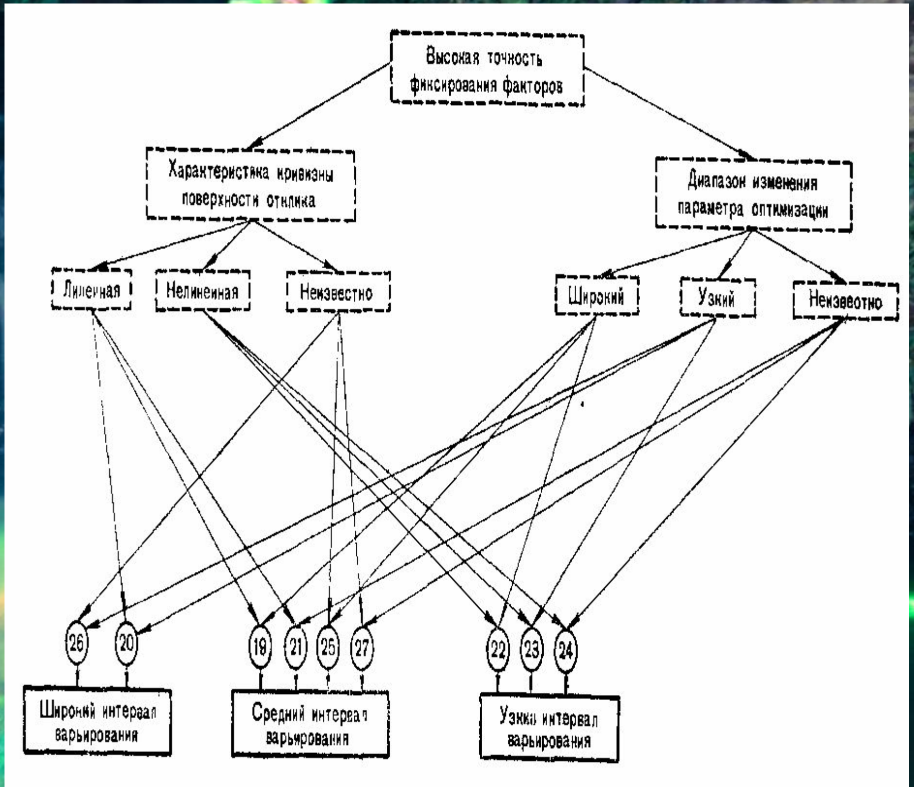


Рис. 21. Принятие решений при высокой точности фиксирования факторов

Наконец, на рис. 21 построена блок-схема для случая высокой точности фиксирования фактора. Сочетание высокой точности с нелинейностью поверхности всегда приводит к выбору узкого интервала. Довольно часто выбирается средний интервал и лишь в двух случаях широкий. В обеих последних блок-схемах отсутствуют неоднозначные решения.

Итак, вооружившись умением выбирать основной уровень и интервалы варьирования факторов, мы готовы приступить к построению плана проведения эксперимента.

Полный факторный эксперимент типа $2^к$

- Простая формула, которая для этого используется, $N = 2^к$, где N – число опытов, к – число факторов, 2 – число уровней. В общем случае ***эксперимент, в котором реализуются все возможные сочетания уровней факторов, называется полным факторным экспериментом.***
- Если выбранная модель включает только линейные члены полинома и их произведения, то для оценки всех параметров модели используется план эксперимента с варьированием всех факторов на двух уровнях. **Такие планы принято называть *планами типа 2^n*, где $2^n=N$ – число всех возможных опытов, *n* – количество варьируемых факторов.**

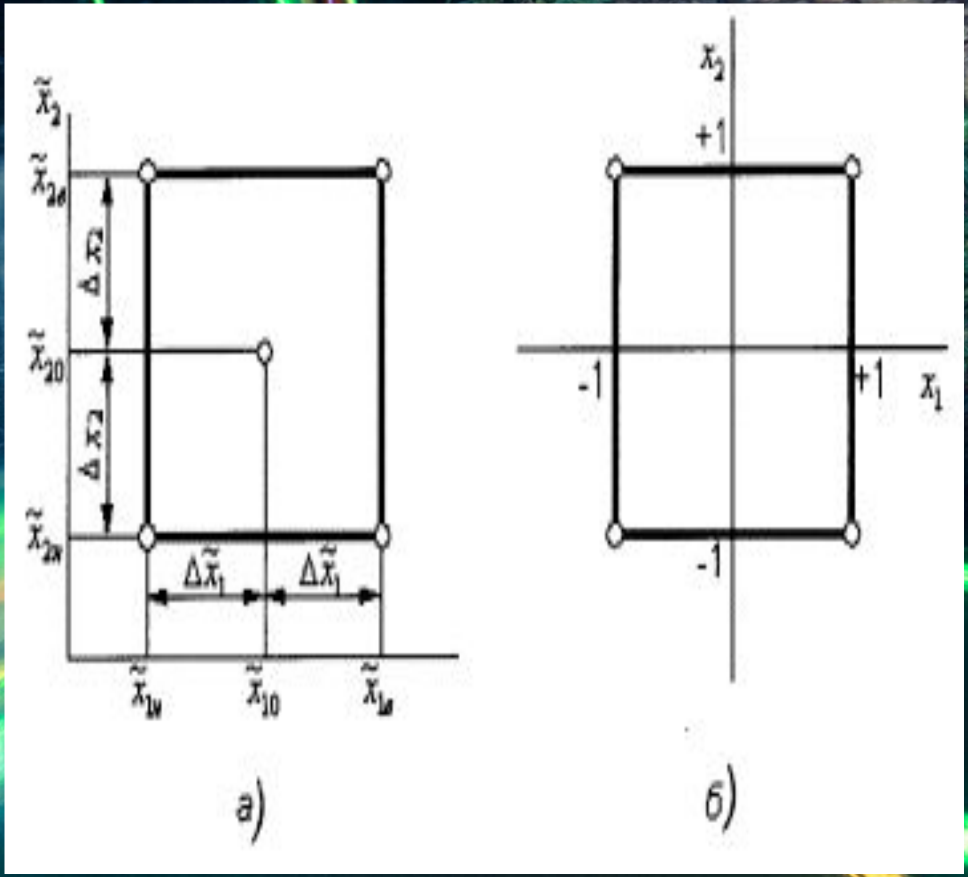
- Условия эксперимента можно записать в виде таблицы, где строки соответствуют различным опытам, а столбцы – значениям факторов. Будем называть такие таблицы матрицами (репликами) планирования эксперимента.
- Матрица планирования 2^2 для двух факторов показана в табл.

Номер опыта	Матрица планирования		Выход y
	x_1	x_2	
1	–1	–1	y_1
2	+1	–1	y_2
3	–1	+1	y_3
4	+1	+ 1	y_4

Каждый столбец в матрице планирования называют вектор-столбцом, а каждую строку – вектор-строкой.

Таким образом, мы имеем два вектора-столбца независимых переменных и один вектор-столбец параметра оптимизаций.

На рис.9.2 показан в факторном пространстве симметричный двухуровневый план для двухфакторной функции отклика *y=f(x$_1$x$_2$)* при нейтральном (рис.9.2,*а*) и нормированном (рис.9.2,*б*) представлении уровней факторов. Здесь , – искомые натуральные уровни факторов, – нижние, – верхние уровни, , – интервалы варьирования.



- **Запись матрицы планирования, особенно для многих факторов, громоздка. Для ее сокращения удобно ввести условные буквенные обозначения строк.**
- **Матрица планирования вместе с принятыми буквенными обозначениями приведена в табл. 2**

Номер опыта	Матрица планирования		Буквенные обозначения строк	Выход y
	x_1	x_2		
1	–1	–1	(1)	y_1
2	+1	–1	a	y_2
3	–1	+1	b	y_3
4	+1	+ 1	ab	y_4

Теперь вместо полной записи матрицы планирования можно пользоваться только буквенными обозначениями, Ниже приведена буквенная запись еще одного плана: c, b, a, abc, (1), bc, ac, ab. Матрица планирования приведена в табл. 3.

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	Буквенные обозначения строк	y
1	–1	–1	+1	c	y_1
2	–1	+1	–1	b	y_2
3	+1	–1	–1	a	y_3
4	+1	+1	+1	abc	y_4
5	–1	–1	–1	(1)	y_5
6	–1	+1	+1	bc	y_6
7	+1	–1	+1	ac	y_7
8	+1	+1	–1	ab	y_8

- Таким образом, вы построили полный факторный эксперимент 2^3. Он имеет восемь опытов и включает все возможные комбинации уровней трех факторов.
- Геометрической интерпретацией полного факторного эксперимента 2^3 служит куб, координаты вершин которого задают условия опытов.
- Если поместить центр куба в точку основного уровня факторов, а масштабы по осям выбрать так, чтобы интервал варьирования равнялся единице, то получится куб, изображенный на рис. Куб задает область эксперимента, а центр куба является ее центром.

Рис. 23. Геометрическая интерпретация полного факторного эксперимента 2^3

Фигура, Задающая Область Эксперимента В Многомерном Пространстве, Является Некоторым Аналогом Куба. Будем Называть Эту Фигуру Гиперкубом.

Свойства полного факторного эксперимента типа 2^k

- *Два свойства отдельных столбцов матрицы планирования следуют непосредственно из построения матрицы.*

- *Первое* из них – симметричность относительно центра эксперимента – формулируется следующим, образом: алгебраическая сумма элементов вектор-столбца каждого фактора равна нулю, или , где *j* – номер фактора, *i* – номер опыта, *N* – число опытов.
- *Второе* свойство – так называемое условие нормировки – формулируется следующим образом: сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу опытов, или . Это следствие того, что значения факторов в матрице задаются +1 и –1.
- *Третье свойство* - свойство совокупности столбцов: сумма почленных произведений любых двух вектор-столбцов матрицы равна нулю,

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

- Даны две матрицы планирования:
- Давайте проверим, как выполняются все три свойства для каждой из матриц. Первое свойство выполняется для всех столбцов обеих матриц.
- Действительно, для первого столбца матрицы а) имеем $(-1) + (+1) + (-1) + (+1) = 0$.
- Аналогичный результат получается для всех других столбцов.
- Второе свойство– также выполняется для обеих матриц.
- С третьим свойством, однако, дело обстоит иначе.
- Если для матрицы а) формула ортогональности выполняется, то в случае б) это не так. Действительно $(-1)(+1) + (+1)(-1) + (-1)(+1) + (+1)(-1) = -4 \neq 0$.

x1	x2	x1	x2
-	-	-	+
+	-	+	-
-	+	-	+
+	+	+	-

Полный факторный эксперимент и математическая модель

Давайте еще раз вернемся к матрице 2^3. Для движения к точке оптимума нам нужна линейная модель $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$. Наша цель – найти по результатам эксперимента значения неизвестных коэффициентов модели. До сих пор, говоря о линейной модели, мы не останавливались на важном вопросе о статистической оценке ее коэффициентов. Теперь необходимо сделать ряд замечаний по этому поводу.

Можно утверждать, что эксперимент проводится для проверки гипотезы о том, что линейная модель $\eta = \beta_0 + \beta_1x_1 + \beta_2x_2$ адекватна. Греческие буквы использованы для обозначения «истинных» генеральных значений соответствующих неизвестных. Эксперимент, содержащий конечное число опытов, позволяет только получить выборочные оценки для коэффициентов уравнения $y = b_0 + b_1x_1 + \ldots + b_kx_k$. Их точность и надежность зависят от свойств выборки и нуждаются в статистической проверке.

- **После проведения опытов во всех точках факторного пространства необходимо найти коэффициенты уравнения регрессии. Для этого воспользуемся методом наименьших квадратов.**

$$\Phi = \sum_{i=1}^{n} (\hat{Y}_i - Y_i)^2 \rightarrow \min$$

$$\hat{Y}_i = \varphi(X_1, \dots, X_k, b_0, \dots, b_k)$$

$$\Phi = \sum_{i=1}^{n} (\varphi(X_1, \dots, X_k, b_0, \dots, b_k) - Y_i)^2,$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Phi}{\partial b_0} = 0 \\ \dots \\ \dfrac{\partial \Phi}{\partial b_k} = 0 \end{cases}$$

поскольку:

- **то после дифференцирования получим:**

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Phi}{\partial b_0} = 2\sum\limits_{i=1}^{n} (\varphi(X_1,\ldots,X_k,b_0,\ldots,b_k) - Y_i)\dfrac{\partial \varphi}{\partial b_0} = 0, \\ \ldots \\ \dfrac{\partial \Phi}{\partial b_k} = 2\sum\limits_{i=1}^{n} (\varphi(X_1,\ldots,X_k,b_0,\ldots,b_k) - Y_i)\dfrac{\partial \varphi}{\partial b_k} = 0. \end{cases}$$

- **Для линейной регрессии при k=2:** $Y_i = \varphi(X_{1i}, X_{2i}, b_0, b_1, b_2),\ Y_i = b_0 + b_1 X_{1i} + b_2 X_{2i}.$

- продифференцировав по коэффициентам, получим:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial b_0} = 1, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial b_1} = X_{1i}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial b_2} = X_{2i}.$$

- **Запишем уравнения в полной форме:**

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n}(b_0 + b_1X_{1i} + b_2X_{2i} - Y_i) * 1 = 0, \\ \sum\limits_{i=1}^{n}(b_0 + b_1X_{1i} + b_2X_{2i} - Y_i) * X_{1i} = 0, \\ \sum\limits_{i=1}^{n}(b_0 + b_1X_{1i} + b_2X_{2i} - Y_i) * X_{2i} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow$$

$$\begin{cases} (\sum\limits_{i=1}^{n}1)b_0 + (\sum\limits_{i=1}^{n}X_{1i})b_1 + (\sum\limits_{i=1}^{n}X_{2i})b_2 = \sum\limits_{i=1}^{n}Y_i, \\ (\sum\limits_{i=1}^{n}X_{1i})b_0 + (\sum\limits_{i=1}^{n}X_{1i}^{\ 2})b_1 + (\sum\limits_{i=1}^{n}X_{2i}X_{1i})b_2 = \sum\limits_{i=1}^{n}X_{1i}Y_i, \\ (\sum\limits_{i=1}^{n}X_{2i})b_0 + (\sum\limits_{i=1}^{n}X_{1i}X_{2i})b_1 + (\sum\limits_{i=1}^{n}X_{2i}^{\ 2})b_2 = \sum\limits_{i=1}^{n}X_{2i}Y_i. \end{cases}$$

$\sum_{i=1}^{n} 1 = n,$ разделим каждое уравнение на n

$$
\begin{cases}
b_0 + \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_{1i}\right)b_1 + \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_{2i}\right)b_2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Y_i, \\
\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_{1i}\right)b_0 + \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_{1i}^{2}\right)b_1 + \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_{2i}X_{1i}\right)b_2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_{1i}Y_i, \\
\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_{2i}\right)b_0 + \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_{1i}X_{2i}\right)b_1 + \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_{2i}^{2}\right)b_2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_{2i}Y_i.
\end{cases}
$$

- Отсюда, принимая в расчет свойства матрицы планирования, получим следующие формулы для вычисления коэффициентов:

$$b_0 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Y_i ,$$

$$b_1 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_{1i} Y_i ,$$

$$b_2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_{2i} Y_i .$$

- **или в общем виде:**

$$b_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_{ji} Y_i, \; j = \overline{0,k}.$$

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$$

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

Коэффициенты при независимых переменных указывают на силу влияния факторов.

Чем больше численная величина коэффициента, тем большее влияние оказывает фактор.

Если коэффициент имеет знак плюс, то с увеличением значения фактора параметр оптимизации увеличивается, а если минус, то уменьшается. Величина коэффициента соответствует вкладу данного фактора в величину параметра оптимизации при переходе фактора с нулевого уровня на верхний или нижний.

- **Матрица планирования эксперимента 2^2**
- **с учетом взаимодействия факторов**

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	y
1	+1	–1	–1	+1	y_1
2	+1	+1	–1	–1	y_2
3	+1	–1	+1	–1	y_3
4	+1	+1	+1	+1	y_4

- Теперь модель выглядит следующим образом:

$$y = b_0 x_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2.$$

- Коэффициент b_{12} вычисляется обычным путем.
- Столбцы x_1 и x_2 задают планирование – по ним непосредственно определяются условия опытов, а столбцы x_0 и x_1x_2 служат только для расчета.
- **Обращаем Ваше Внимание На То, Что При Оптимизации Мы Стремимся Сделать Эффекты Взаимодействия Возможно Меньшими.**
- В задачах интерполяции, напротив, их выявление часто важно и интересно.
- Покажем на примере еще один способ расчета коэффициентов, известный под названием метода Йетса. Все операции по расчету приведены в табл.

1	2	3
y_1	$y_1 + y_2$	$y_1 + y_2 + y_3 + y_4$
y_2	$y_3 + y_4$	$y_2 - y_1 + y_4 - y_3$
y_3	$y_2 - y_1$	$y_3 + y_4 - y_1 - y_2$
y_4	$y_4 - y_3$	$y_4 - y_3 - y_2 + y_1$

- Слева в этой таблице выписан вектор-столбец значений параметра оптимизации. Первая операция (2-й столбец) состоит в попарном сложении и вычитании этих значений, причем верхнее число вычитается из нижнего. Вторая операция (3-й столбец) состоит в том же действии, но уже с числами второго столбца.
- Если теперь числа, оказавшиеся в третьем столбце, разделить на число опытов, то получим значения коэффициентов. Операции сложения и вычитания повторяются столько раз, сколько имеется факторов.


Спасибо за внимание!!!