

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Амурский государственный университет»
Кафедра «Физики»

Методы обработки экспериментальных данных
Сборник учебно-методических материалов

для направления подготовки 03.04.01 – «Прикладные математика и физика»

Благовещенск 2017

ББК

К55

Методы обработки экспериментальных данных. Сборник учебно-методических материалов для магистров направления подготовки 03.04.01 – «Прикладные математика и физика». / сост. И.Б. Копылова, – Благовещенск: Изд-во АмГУ, 2017.

Сборник учебно-методических материалов содержит методические рекомендации для работы студента на лекционных и лабораторных занятиях, выполнению отчетов по лабораторному практикуму. Приведен краткий конспект лекций, вопросы к экзамену.

Для специальности 03.04.01 – «прикладные математика и физика».
Для магистрантов физических отделений высших учебных заведений.

Составитель: И.Б. Копылова, к.ф.-м.н., доцент.

СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

№ п/п	Наименование темы (раздела)	Содержание темы (раздела)
1	2	3
1	<i>Введение</i>	Введение в анализ данных. Основные понятия и классификация задач анализа данных. Методы и подходы к обработке неопределенных данных.
2	<i>Основы математического и компьютерного моделирования</i>	Построение моделей. Основные вопросы методологии моделирования. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент. Схема вычислительного эксперимента. Принципы, этапы и методы построения моделей.
3	<i>Методы оценки ошибок вычислений</i>	Этапы решения прикладной задачи и классификация ошибок. Абсолютная и относительная погрешности. Оценка погрешностей значения функции. Способы приближенных вычислений по заданной формуле. Приближенные вычисления по формулам с использованием инструментальных пакетов. Вероятностные и эмпирические методы оценки ошибок.
4	<i>Математическая обработка результатов опыта: таблицы и разности. Интегрирование и дифференцирование функций, заданных таблично.</i>	Табулированные функции. Задачи интерполяции и экстраполяции. Методы аппроксимации функций. Особые случаи для кусочно-заданных функций. Формулы численной аппроксимации производных. Проблемы численного дифференцирования и интегрирования.
5	<i>Графическая обработка данных. Обработка экспериментальных данных методом наименьших квадратов.</i>	Постановка задачи. Графический способ подбора формул. Подбор формул по данным опыта по методу наименьших квадратов. Нахождение приближающих функций в виде линейных функций и квадратного трехчлена. Нахождение приближающих функций в виде других элементарных функций. Оценка среднеквадратичного отклонения. Приближение функций с помощью инструментальных средств.
6	<i>Основы теории подобия и размерностей. Автомодельность.</i>	Анализ подобия и размерности. П-теорема. Примеры применения анализа размерностей. Автомодельность, показатель автомодельности. Примеры физических приложений с использованием безразмерных переменных. Измерения в физических системах. Физические парадоксы при моделировании.
1	2	3
7	<i>Методы статистической обработки и анализа</i>	Особенности фиксации и статистической обработки результатов моделирования систем на ЭВМ;

	<i>результатов измерений.</i>	анализ и интерпретация результатов машинного моделирования; обработка результатов машинного эксперимента. Основные понятия прикладной статистики. Важные законы распределения вероятностей. Основы проверки статистических гипотез. Начала теории оценивания. Анализ одной и двух нормальных выборок. Однофакторный анализ. Двухфакторный анализ. Линейный регрессионный анализ. Независимость признаков. Критерии согласия. Выборочные исследования. Многомерный анализ и другие статистические методы. Комплексная статистическая аналитика. Методы контроля качества. Анализ временных рядов.
8	Планирование численного и физического экспериментов	Основные положения теории планирования эксперимента. Общие принципы планирования эксперимента. Варианты постановок задач теории планирования эксперимента. Параметр оптимизации. Обобщенный параметр оптимизации. Фактор. Полный факторный эксперимент. Дробный факторный эксперимент. Проведение эксперимента. Обработка результатов эксперимента.
9	Математические методы обработки изображений	Цифровые изображения в Matlab. Преобразование яркости и пространственная фильтрация. Цифровые изображения в Matlab. Обработка в частотной области. Цифровые изображения в Matlab. Цифровые изображения в Matlab. Восстановление изображений. Цифровые изображения в Matlab. Обработка цветных изображений. Цифровые изображения в Matlab. Вейвлеты. Сжатие изображений.

ТЕМЫ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ

1. Обработка экспериментальных данных. Интерполирование функций.
2. Обработка экспериментальных данных методом наименьших квадратов.
3. Применение операций численного дифференцирования и интегрирования в обработке экспериментальных данных.
4. Статистическая обработка массива данных.
5. Сравнение двух выборок.
6. Дисперсионный анализ.
7. Корреляционный анализ

Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине «Математические методы обработки экспериментальных данных»

1. Копылова И. Б., Математические методы обработки экспериментальных данных [Электронный ресурс]: сборник учебно-методических материалов по дисциплине/И.Б.Копылова. АмГУ,- Благовещенск: Изд-во Амур. гос. ун-та, 2018. - 25 с. Режим доступа http://irbis.amursu.ru/DigitalLibrary/AmurSU_Edition/9901.pdf

МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ПОДГОТОВКЕ И ВЫПОЛНЕНИЮ ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАДАНИЙ.

Лабораторные задания выполняются индивидуально каждым студентом на ЭВМ с помощью прикладных программ.

1. Следует учесть, что **подготовка к практикуму** требует немалого времени, поэтому целесообразно **планировать ее заранее!**
2. Для эффективной подготовки к лабораторной работе придерживайтесь следующих правил:
 - Внимательно прочтите описание работы в методическом пособии по лабораторному практикуму;
 - Отчет по выполнению работы формируется в процессе ее выполнения на компьютере; отчет в распечатанном виде сдается преподавателю.
3. Для **получения зачета** студент представляет преподавателю оформленный отчет со всеми необходимыми расчетами и защищает его в ходе последующего собеседования.
4. **Следует своевременно сдавать выполненные работы:** не допускается выполнение следующей работы при наличии двух выполненных, но не сданных работ!

ПРАВИЛА ОФОРМЛЕНИЯ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ

Оформлять работу следует четко и аккуратно, придерживаясь основных правил оформления отчетных работ:

1. Титульный лист (содержит: наименование вуза, кафедра, ФИО исполнителя, № группы, курс, дисциплина, тема лаб. работы, вариант, выполнил, проверил и т. д.), содержание, введение.
- Основная часть.
2. Лист задания (содержит предложенное задание). Раздел, содержащий теоретические основы соответствующего раздела курса (включая подробный алгоритм основного метода).
3. Раздел, содержащий описание программной реализации. Листинг программного блока и описание интерфейса программы (если таковой имеется) можно вынести в приложение. Предлагаемый ППП – Matlab.
4. Заключение, список использованной литературы.

ВОПРОСЫ К ЭКЗАМЕНУ

1. Основные понятия и классификация задач анализа данных.
2. Методы и подходы к обработке неопределенных данных.
3. Основные вопросы методологии моделирования. Построение моделей.
4. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент. Схема вычислительного эксперимента.
5. Принципы, этапы и методы построения моделей.
6. Этапы решения прикладной задачи и классификация ошибок. Абсолютная и относительная погрешности. Оценка погрешностей значения функции.
7. Способы приближенных вычислений по заданной формуле. Приближенные вычисления по формулам с использованием инструментальных пакетов.
8. Задачи интерполяции и аппроксимации. Методы аппроксимации функций.
9. Математическая обработка результатов эксперимента: таблицы и разности.
10. Формулы численной аппроксимации производных. Проблемы численного дифференцирования и интегрирования.
11. Графический способ обработки экспериментальных данных. Аппроксимация полученных зависимостей методом подбора формул.
12. Подбор формул по данным опыта по методу наименьших квадратов. Нахождение приближающих функций в виде линейных функций и квадратного трехчлена.
13. Подбор формул по данным опыта по методу наименьших квадратов. Нахождение приближающих функций в виде других элементарных функций.
14. Подбор формул по данным опыта по методу наименьших квадратов. Приближение функций с помощью инструментальных средств.
15. Теория подобия и размерности и физические модели. П-теорема. Примеры применения анализа размерностей.

16. LTM – диаграмма. Основные принципы построения диаграмм подобия и области их применения.
17. Выборка и выборочный метод. Статистическая обработка выборочных данных.
18. Анализ одной и двух нормальных выборок.
19. Планирование физического эксперимента. Общие принципы планирования эксперимента. Таблица желательности.
20. Параметр оптимизации. Обобщенный параметр оптимизации.
21. Понятие фактора эксперимента. Однофакторный эксперимент и анализ результатов.
22. Планирование многофакторного эксперимента. Двухфакторный анализ. Матрица планирования.
23. Однофакторный линейный регрессионный анализ. Независимость признаков. Критерии согласия.
24. Фактор. Полный факторный эксперимент.
25. Фактор. Дробный факторный эксперимент.
26. Проведение эксперимента. Требования к оборудованию, планированию, экспериментатору, безопасности.
27. Обработка результатов эксперимента. Представление результатов эксперимента с помощью прикладных программ.
- 28.

КРАТКИЙ КУРС ЛЕКЦИЙ

Основы математического и компьютерного моделирования

Предмет теории моделирования

Развитие научного познания в современном обществе сопряжено с использованием средств и методик математического моделирования (ММ). *Сущность* ММ состоит в замене исходного объекта его «образом» – математической моделью – и дальнейшем изучении модели с помощью реализуемых на компьютере вычислительно-логических алгоритмов. Такой метод познания, конструирования и проектирования сочетает в себе многие *достоинства* как *теории*, так и *эксперимента*.

Под *моделью* (от лат. *modulus* - мера, образец, норма) понимают такой материальный или мысленно представляемый объект, который в процессе познания (изучения) замещает объект-оригинал, сохраняя некоторые важные для данного исследования типичные его черты. Процесс построения и использования модели называется моделированием.

Цели моделирования

Хорошо построенная модель, как правило, доступнее, информативнее и удобнее для исследователя, нежели реальный объект.

Рассмотрим основные цели, преследуемые при моделировании в научной сфере.

Итак, модель нужна для того, чтобы:

1) понять, как устроен конкретный объект: какова его структура, внутренние связи, основные свойства, законы развития, саморазвития и взаимодействия с окружающей средой;

2) научиться управлять объектом или процессом, определять наилучшие способы управления при заданных целях и критериях

3) прогнозировать прямые и косвенные последствия реализации заданных способов и форм воздействия на объект.

Классификация моделей

Представляется возможным подразделить математические модели на различные классы в зависимости от:

- сложности объекта моделирования;
- оператора модели (подмодели);
- входных и выходных параметров;
- способа исследования модели;

- цели моделирования.

Приведем классификацию моделей *по факту неопределенности*: ММ делятся на детерминированные, стохастические и модели с элементами неопределенности.

Приведем и другую классификацию *степень абстрагирования модели от оригинала*.

Аналитической моделью называется такое формализованное описание системы, которое позволяет получить решение уравнения (1.2) в явном виде, используя известный математический аппарат.

Численная модель характеризуется зависимостью (1.2) такого вида, который допускает только частные решения для конкретных начальных условий и количественных параметров моделей.

Имитационная модель — это совокупность описания системы и внешних воздействий, алгоритмов функционирования системы или правил изменения состояния системы под влиянием внешних и внутренних возмущений. Эти алгоритмы и правила не дают возможности использования имеющихся математических методов аналитического и численного решения, но позволяют имитировать процесс функционирования системы и производить вычисления интересующих характеристик. Имитационные модели могут быть созданы для гораздо более широкого класса объектов и процессов, чем аналитические и численные. Поскольку для реализации имитационных моделей служат ВС, средствами формализованного описания ИМ служат универсальные и специальные алгоритмические языки. ИМ в наибольшей степени подходят для исследования ВС на системном уровне.

Этапы вычислительного эксперимента

Обследование объекта моделирования

Этап обследования проводится членами рабочей группы под руководством постановщиков задач и включает следующие работы:

1. тщательное обследование собственно объекта моделирования с целью выявления основных факторов, механизмов, влияющих на его поведение, определения соответствующих параметров, позволяющих описывать моделируемый объект;
2. сбор и проверка имеющихся экспериментальных данных об объектах-аналогах, проведение при необходимости дополнительных экспериментов;
3. аналитический обзор литературных источников, анализ и сравнение между собой построенных ранее моделей данного объекта (или подобных рассматриваемому объекту);
4. анализ и обобщение всего накопленного материала, разработка общего плана создания математической модели.



Весь собранный в результате обследования материал о накопленных к данному моменту знаниях об объекте, содержательная постановка задачи моделирования,

дополнительные требования к реализации модели и представлению результатов оформляются в виде *технического задания на проектирование и разработку модели*.

Математическая постановка задачи моделирования

Законченная концептуальная постановка позволяет сформулировать математическую постановку задачи моделирования, включающую совокупность различных математических соотношений, описывающих поведение и свойства объекта моделирования.

Математическая постановка задачи моделирования — это совокупность математических соотношений, описывающих поведение и свойства объекта моделирования.

Для контроля правильности полученной системы математических соотношений требуется проведение ряда обязательных проверок:

- *Контроль размерностей.*
- *Контроль порядков.*
- *Контроль характера зависимостей.*
- *Контроль экстремальных ситуаций.*
- *Контроль граничных условий.*
- *Контроль физического смысла.*
- *Контроль математической замкнутости.*

Понятие корректности задачи имеет большое значение в прикладной математике. Математическая модель является *корректной*, если для нее осуществлен и получен положительный результат всех контрольных проверок: размерности, порядков, характера зависимостей, экстремальных ситуаций, граничных условий, физического смысла и математической замкнутости.

Выбор и обоснование выбора метода решения задачи

При использовании разработанных математических моделей, как правило, требуется найти зависимость некоторых неизвестных заранее параметров объекта моделирования (например, координат и скорости центра масс тела, точности броска), удовлетворяющих определенной системе уравнений. Таким образом, поиск решения задачи сводится к отысканию некоторых зависимостей искомых величин от исходных параметров модели.

Для решения математических задач используются следующие основные *группы методов*: аналитические, графические и численные.

Применение любого численного метода неминуемо приводит к погрешности результатов решения задачи. Выделяют три основных составляющих возникающей погрешности при численном решении исходной задачи:

1. *неустраняемая погрешность*, связанная с неточным заданием исходных данных (начальные и граничные условия, коэффициенты и правые части уравнений);
2. *погрешность метода*, связанная с переходом к дискретному аналогу исходной задачи (например, заменяя производную разностным аналогом, получаем погрешность дискретизации);
3. *ошибка округления*, связанная с конечной разрядностью чисел, представляемых в ЭВМ.

Реализация ММ в виде программы для ЭВМ

При создании различных программных комплексов, используемых для решения разнообразных исследовательских, проектно-конструкторских и управленческих задач, в настоящее время, основой, как правило, служат математические модели. В связи с этим возникает необходимость реализации модели в виде программы для ЭВМ. Процесс разработки надежного и эффективного программного обеспечения является не менее сложным, чем все предыдущие этапы создания математической модели. Успешное решение данной задачи возможно лишь при уверенном владении современными алгоритмическими языками и технологиями программирования, знании возможностей вычислительной техники, имеющегося программного обеспечения, особенностей реализации на ЭВМ методов вычислительной математики, наличии опыта решения подобных задач.

Процесс создания программного обеспечения можно разбить на ряд этапов:

1. составление технического задания на разработку пакета программ программного обеспечения;

2. проектирование структуры программного комплекса;
3. кодирование алгоритма;
4. тестирование и отладка;
5. сопровождение и эксплуатация.

Большинство программ, реализующих математические модели, состоят из трех основных частей:

1. препроцессора (подготовка и проверка исходных данных модели);
2. процессора (решение задачи, реализация вычислительного эксперимента);
3. постпроцессора (отображение полученных результатов).

Для эффективной разработки программного обеспечения в области математического моделирования необходимо обратить внимание на создание следующих стандартных библиотек программ:

1. приближенные и численные методы (процессоры);
2. средства подготовки исходных данных (препроцессоры);
3. средства визуализации и представления результатов (постпроцессоры).

Разработка таких общих библиотек программ возможна лишь при стандартизации потоков передачи данных между препроцессором, процессором и постпроцессором. В простейшем случае речь может идти об унификации форматов передаваемых файлов.

Методы оценки ошибок вычислений

Классификация погрешностей

При численном решении математических и прикладных задач почти неизбежно появление на том или ином этапе их решения погрешностей следующих трех типов.

- а) *Погрешность задачи.*
- б) *Погрешность метода.*
- в) *Погрешность округлений.*

Все три описанных типа погрешностей в сумме дают *полную погрешность* результата решения задачи.

Математическая обработка результатов опыта: таблицы и разности. Интегрирование и дифференцирование функций, заданных таблично

Аппроксимация функций

1) В основе большинства численных методов математического анализа лежит подмена одной функции $f(x)$ (известной, неизвестной или частично известной) другой функцией $\varphi(x)$, близкой к $f(x)$ и обладающей «хорошими» свойствами, позволяющими легко производить над ней те или иные аналитические или вычислительные операции.

Как видим, задача аппроксимации состоит в построении для заданной функции $f(x)$ такой функции $\varphi(x)$, что

$$f(x) \approx \varphi(x)$$

Интерполяционный полином Лагранжа

Пусть в точках x_0, x_1, \dots, x_n таких, что $a \leq x_0, x_1, \dots, x_n \leq b$, известны значения функции $y = f(x)$, т.е. на отрезке $[a, b]$ задана **табличная (сеточная) функция (2)**.

Функция $\varphi(x)$ называется **интерполирующей** или **интерполяционной** для $f(x)$ на $[a, b]$,

Таким образом, **базисные многочлены Лагранжа** имеют вид

$$l_i(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdot \dots \cdot (x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \cdot \dots \cdot (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdot \dots \cdot (x_i - x_n)}$$

а искомый **интерполяционный многочлен Лагранжа** есть

$$L_n(x) = \sum_{i=1}^n f_i \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)}$$

Выражение остаточного члена имеет вид:

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{n+1}(x) \quad (8)$$

Знание остаточного члена в предположении $n+1$ -кратной дифференцируемости $f(x)$ позволяет записать точное представление $f(x)$ через ее интерполяционный многочлен $L_n(x)$:

$$f(x) = L_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{n+1}(x) \quad (9)$$

где ξ – некоторая (вообще говоря, неизвестная, причем зависящая от x) точка из промежутка интерполяции (a, b) , а $\prod_{n+1}(x)$ определенный в (*) многочлен.

Конечноразностные интерполяционные формулы

Пусть функция $y = f(x)$ задана на сетке равноотстоящих узлов $x_i = x_0 + ih$, где $i = \overline{0, n}$, и для нее построена таблица конечных разностей.

В соответствии с тем, что было сказано о направлении модификации интерполяционной формулы Лагранжа в начале предыдущего параграфа, будем строить интерполяционный многочлен $P_n(x)$ в форме

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \dots + a_n(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1}). \quad (12)$$

Его $n+1$ коэффициент a_0, a_1, \dots, a_n будем находить последовательно из $n+1$ интерполяционных равенств

$$P_n(x_i) = y_i, i = \overline{0, n}$$

А именно, полагая $i=0$, т.е. $x=x_0$, в (12) имеем $P_n(x_0) = a_0$, а по условию интерполяции $P_n(x_0) = y_0$ следовательно, $a_0 = y_0$.

Далее, при $i=1$ аналогично получаем равенство $a_0 + a_1(x_1 - x_0) = y_1$, в которое подставляем уже найденное значение $a_0 = y_0$. Разрешая это равенство относительно a_1 и используя обозначение конечной разности, получаем

$$a_1 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = \frac{\Delta y_0}{h}$$

Следующий шаг, при $i=2$, дает:

$$a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_2$$

$$y_0 + \frac{\Delta y_0}{h} 2h + a_2 2hh = y_2$$

$$a_2 = \frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{2!h^2} = \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}$$

Полной индукцией можно показать справедливость выражения

$$a_k = \frac{\Delta^k y_0}{k!h^k}, \forall k \in \{1, 2, \dots, n\}$$

Подставляя найденные коэффициенты в (12), получаем многочлен

$$P_n(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x - x_0) + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2!h^2}\Delta^2 y_0 + \dots$$

$$\dots + \frac{(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1})}{n!h^n}\Delta^n y_0,$$
(13)

который называют **первым интерполяционным многочленом Ньютона**.

Учитывая, что каждое слагаемое многочлена (13), начиная со второго, содержит множитель $x - x_0$, естественно предположить, что этот многочлен наиболее приспособлен для интерполирования в окрестности узла x_0 (при x , близких к x_0 , $f(x) \approx y_0$). Будем называть узел x_0 *базовым* для многочлена (13), и упростим (13) введением новой переменной $t = \frac{x - x_0}{h}$, в результате подстановки этих разностей в (13) приходим к *первой интерполяционной формуле Ньютона* в виде

$$f(x) \approx P_n(x_0 + th) = f_0 + t \cdot \Delta f_0 + \frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 f_0 + \dots$$

$$\dots + \frac{t(t-1)\dots(t-n+1)}{n!}\Delta^n f_0,$$
(14)

Остаточный член этой формулы имеет вид:

$$R_n(x) = h^{n+1} \frac{q(q-1)\dots(q-n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi),$$

где ξ – некоторая внутренняя точка наименьшего промежутка, содержащего все узлы x_i и точку x .

Первая формула Ньютона (14) обычно применяется при значениях $|t| < 1$, а именно, для интерполирования вперед, (при $x \in (x_0, x_1)$, т.е. при $q \in (0, 1)$) и экстраполирования назад (при $x < x_0$, т.е. при $q < 0$).

Второй интерполяционный многочлен Ньютона

$$P_n(x) = y_n + (x - x_n) \cdot \frac{\Delta y_{n-1}}{h} + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!h^2}(x - x_n)(x - x_{n-1}) + \dots$$

$$\dots + \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x - x_n)(x - x_{n-1})\dots(x - x_1)$$

в котором базовым является узел x_n и коэффициенты которого определяются конечными разностями, расположенными на восходящей от y_n диагонали.

Положим в (15) $q = \frac{x - x_n}{h}$, В результате приходим ко *второй интерполяционной формуле Ньютона* вида

$$P_n(x) = f_n + q \cdot \Delta f_{n-1} + \frac{q(q+1)}{2!}\Delta^2 f_{n-2} + \dots + \frac{q(q+1)\dots(q+n-1)}{n!}\Delta^n f_0.$$

Остаточный член этой формулы имеет вид:

$$R_n(x) = h^{n+1} \frac{q(q+1)\dots(q+n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi),$$

где ξ – некоторая внутренняя точка наименьшего промежутка, содержащего все узлы x_i и точку x .

Ее также целесообразно использовать при значениях $|q| < 1$, т.е. в окрестности узла x_n для интерполирования назад (при $q \in (-1, 0)$) и экстраполирования вперед (при $q > 0$).

Сплайн-интерполяция

Использование низких степеней многочленов, составляющих $\varphi(x)$, позволяет легко находить их коэффициенты как из интерполяционных, так и из иных условий.

Так, если заданы значения y_i функции $y = f(x)$ на системе узлов x_i таких, что $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ и требуется аппроксимировать $f(x)$ кусочно-линейной функцией $\varphi(x)$, исходя из условий интерполяции $\varphi(x_i) = y_i, i = 0, 1, \dots, n$, то, беря функцию $\varphi(x)$ в виде

$$\varphi(x) = \begin{cases} a_1x + b_1 & \text{при } x \in [x_0, x_1], \\ a_2x + b_2 & \text{при } x \in [x_1, x_2], \\ \dots & \dots \\ a_nx + b_n & \text{при } x \in [x_{n-1}, x_n] \end{cases}$$

для нахождения n пар ее коэффициентов a_k, b_k имеем систему из $2n$ линейных уравнений:

$$\begin{cases} \begin{cases} a_1x_0 + b_1 = y_0 \\ a_1x_1 + b_1 = y_1 \end{cases} \\ \begin{cases} a_2x_1 + b_2 = y_1 \\ a_2x_2 + b_2 = y_2 \end{cases} \\ \dots \\ \begin{cases} a_nx_{n-1} + b_n = y_{n-1} \\ a_nx_n + b_n = y_n \end{cases} \end{cases} \quad (1)$$

причем, как видим, каждая пара соседних уравнений системы (1), имеющих коэффициенты с одинаковыми индексами, не связана с остальными и может решаться отдельно.

Сплайн – это функция, которая на каждом частичном отрезке интерполирования является алгебраическим многочленом, а на заданном отрезке непрерывна вместе с несколькими своими производными.

Определение. Сплайном $S_m(x)$ называется определенная на $[a, b]$ функция, принадлежащая классу $C_{[a,b]}^l$ l раз непрерывно дифференцируемых функций, такая, что на каждом промежутке $[x_{k-1}, x_k], k = \overline{2, n}$ – это многочлен n -й степени. Разность $d := m - l$ между степенью сплайна m и показателем его гладкости l называется *дефектом* сплайна.

Если сплайн $S_m(x)$ строится по некоторой функции $f(x)$ так, чтобы выполнялись условия $S_m(x_i) = f(x_i)$, то такой сплайн называется *интерполяционным сплайном* для функции $f(x)$ при этом узлы сплайна x_k вообще говоря, могут не совпадать с узлами интерполяции x_i .

3.4 Обработка экспериментальных данных методом наименьших квадратов

Пусть в результате измерений получена таблица некоторой зависимости $f(x)$:

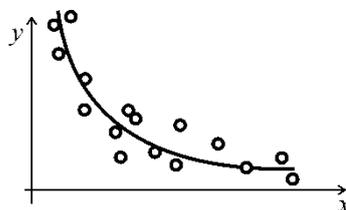
x	x_1	x_2	...	x_n
$F(x)$	y_1	y_2	...	y_n

Требуется найти формулу, выражающую данную зависимость аналитически. Один из подходов состоит в построении интерполяционного многочлена, значения которого в узлах интерполяции x_i совпадают со значениями данной функции $f(x_i) = f_i$.

Если значения функции $f(x)$ известны с некоторой погрешностью, то требование совпадения значений в узлах интерполяции не оправдано, поскольку оно не означает совпадение характеров исходной и интерполирующей функции. Поэтому поставим задачу следующим образом – найти функцию вида

$$y = F(x),$$

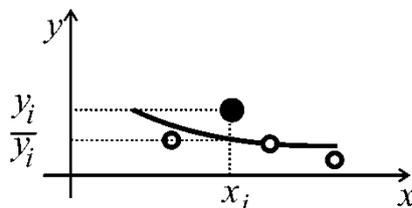
которая в точках x_1, x_2, \dots, x_n принимает значения, близкие к табличным значениям y_1, y_2, \dots, y_n .



Предположим, что приближающая функция $F(x)$ в точках x_1, x_2, \dots, x_n имеет значения $\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n$. Тогда нужно найти функцию $F(x)$ определенного вида так, чтобы сумма квадратов

$$(y_1 - \bar{y}_1)^2 + (y_2 - \bar{y}_2)^2 + \dots + (y_n - \bar{y}_n)^2 \quad (1)$$

была наименьшей.



Нахождение приближающей функции в виде линейной

Пусть приближающая функция имеет вид

$$F(x) = ax + b, \quad (2)$$

где a, b – параметры.

Составим сумму вида (1) для этого случая:

$$\Phi(a, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)^2 \rightarrow \min \quad (3)$$

Функция $\Phi(a, b)$ является неотрицательной квадратичной, поэтому в некоторой области она имеет единственную точку минимума (a^*, b^*) , удовлетворяющую условиям:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial b} = 0,$$

т.е. системе уравнений:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)x_i = 0, \\ \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b) = 0. \end{cases}$$

Разделив каждое уравнение на n , получаем

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2\right) \cdot a + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i\right) \cdot b = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i y_i, \\ \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i\right) \cdot a + b = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n y_i. \end{cases} \quad (5)$$

Вычислив значения параметров a , b , получаем конкретный вид функции (2).

В зависимости от характера табличных данных, изучаемого с помощью их изображения в соответствующей системе координат, при обработке экспериментальных данных часто используют иные семейства двухпараметрических функций. Существует возможность с помощью подходящего преобразования переменных получить линейную зависимость и использовать метод (5) для следующих семейств функций:

Функция $y = f(x)$	Линеаризованная форма, $Y = ax + b$	Замена переменных и постоянных
$y = \frac{a}{x} + b$	$y = a \cdot \frac{1}{x} + b$	$X = \frac{1}{x}, Y = y$
$y = \frac{d}{x+c}$	$y = -\frac{1}{c} \cdot xy + \frac{d}{c}$	$X = xy, Y = y,$ $c = -\frac{1}{a}, d = -\frac{b}{a}$
$y = \frac{1}{ax+b}$	$\frac{1}{y} = ax + b$	$X = x, Y = \frac{1}{y}$
$y = \frac{x}{ax+b}$	$\frac{1}{y} = a \cdot \frac{1}{x} + b$	$X = \frac{1}{x}, Y = \frac{1}{y}$
$y = a \cdot \ln(x) + b$	$y = a \cdot \ln(x) + b$	$X = \ln(x), Y = y$
$y = c \cdot e^{ax}$	$\ln(y) = ax + \ln(c)$	$X = x, Y = \ln(y), c = e^b$
$y = c \cdot x^a$	$\ln(y) = a \cdot \ln(x) + \ln(c)$	$X = \ln(x), Y = \ln(y),$ $c = e^b$
$y = \frac{1}{(ax+b)^2}$	$\frac{1}{\sqrt{y}} = ax + b$	$X = x, Y = \frac{1}{\sqrt{y}}$
$y = \frac{c \cdot x}{e^{dx}}$	$\ln\left(\frac{y}{x}\right) = -dx + \ln(c)$	$X = x, Y = \ln\left(\frac{y}{x}\right),$ $c = e^b, d = -a$
$y = \frac{1}{1+c \cdot e^{ax}}$	$\ln\left(\frac{1}{y} - 1\right) = ax + \ln(c)$	$X = x, Y = \ln\left(\frac{1}{y} - 1\right),$ $c = e^b$

Нахождение приближающей функции в виде квадратного трехчлена
 Приближающая функция имеет вид:

$$F(x) = ax^2 + bx + c, \quad (6)$$

где a, b, c – параметры.

Составим сумму вида (1) как функцию $\Phi(a, b)$ для этого случая:

$$\Phi(a, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i^2 - bx_i - c)^2 \rightarrow \min \quad (7)$$

Функция $\Phi(a, b)$ является неотрицательной квадратичной, поэтому в некоторой области она имеет единственную точку минимума (a^*, b^*) , удовлетворяющую условиям:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial b} = 0,$$

т.е. системе уравнений:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i^2 - bx_i - c)x_i^2 = 0, \\ \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i^2 - bx_i - c)x_i = 0, \\ \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i^2 - bx_i - c) = 0. \end{cases}$$

Разделив каждое уравнение на n , имеем

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^4 \right) \cdot a + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3 \right) \cdot b + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 \right) \cdot c = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i, \\ \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3 \right) \cdot a + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 \right) \cdot b + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i \right) \cdot c = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i y_i, \\ \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 \right) \cdot a + \left(\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n x_i \right) \cdot b + c = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n y_i. \end{cases}$$

Решив систему относительно неизвестных a, b, c , находим значения параметров приближающей функции (6).

Методы статистической обработки и анализа результатов измерений

Выборочный метод

Генеральная совокупность и выборка.

По своей сути математическая статистика – это применение понятий, методов и результатов теории вероятностей к обработке экспериментальных данных. Рассмотрим примеры.

В математической статистике исходная исследуемая величина называется *генеральной совокупностью*, а полученный из нее набор экспериментальных данных – *выборочной совокупностью* или *выборкой*.

Определение. Выборочным методом исследования называется исследование выборки и перенесение его результатов на генеральную совокупность.

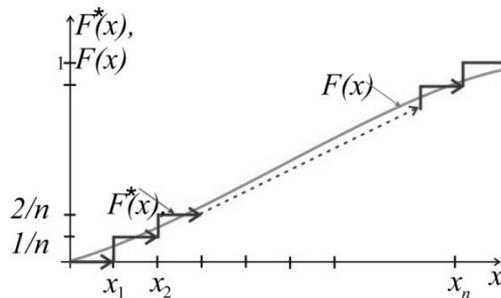
Можно ли вообще применять выборочный метод?

Введем несколько понятий и определений.

Пусть исследуется случайная величина X с функцией распределения $F(X)$. Из нее взята выборка объема n : x_1, x_2, \dots, x_n . Будем считать, что выборку упорядочили $x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_n$. По данным значениям построили функцию – выборочную функцию распределения:

$$F^*(x) = \begin{cases} 0, & x < x_1; \\ \frac{1}{n}, & x_1 \leq x < x_2; \\ \frac{2}{n}, & x_2 \leq x < x_3; \\ \dots\dots\dots \\ \frac{n-1}{n}, & x_{n-1} \leq x < x_n; \\ 1, & x \geq x_n \end{cases} \quad (1)$$

Вид функции распределения:



Почему функцию распределения строят по формуле (1) – ответ дает принцип максимума правдоподобия: На практике чаще всего происходят события с максимальными вероятностями.

Каким бы ни было распределение случайной величины X , с увеличением n выборочная функция распределения $F^*(x)$ сходится по вероятности к функции распределения генеральной совокупности $F(x)$.

Теорема Гливенко-Кантелли. Для любого непрерывного распределения при $n \rightarrow \infty$ максимальная по модулю разность между выборочной функцией распределения $F^*(x)$ и генеральной $F(x)$ имеет предел по вероятности, равный нулю:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \max_{\forall x \in R} |F^*(x) - F(x)| = 0, \quad (2)$$

где под пределом понимается предел по вероятности.

Т.о., если мы будем увеличивать объем выборки n , то $F^*(x)$ будет иметь все больше и больше ступенек, а высота каждой ступеньки будет все меньше и меньше. В пределе выборочная функция распределения $F^*(x)$ будет сглаживаться и стремиться к генеральной функции распределения.

Требование: Выборка должна быть репрезентативной или представительной, т.е. представлять все возможные значения генеральной совокупности и примерно в том же соотношении, что и в исходной величине X .

ДОВЕРИТЕЛЬНЫЕ ОЦЕНКИ ПРАРАМЕТРОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

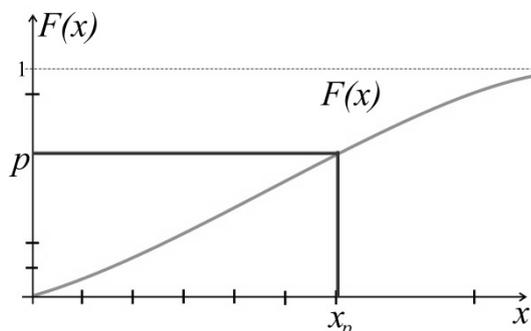
Важно понимать, насколько точно выборочные параметры совпадают с генеральными.

Квантили.

Определение. Квантилем x_p распределения случайной величины X с функцией распределения $F(X)$ называется решение уравнения:

$$F(x_p) = p. \quad (1)$$

Квантиль – это аргумент, соответствующий данному значению функции распределения (см. рис.).



Индекс внизу у квантиля соответствует уровню квантиля. Например, $x_{0.05}$ – 5% квантиль.

Доверительный интервал и доверительная вероятность.

Пусть известен закон распределения генеральной совокупности X , например, ее функции распределения $F(x)$ или плотность распределения $f(x)$. Тогда вероятность того, что случайная величина B^* отличается от своего математического ожидания b на величину, не превышающую ε :

$$P\left(|B^* - b| \leq \varepsilon\right) = \int_{b-\varepsilon}^{b+\varepsilon} f(b^*) db^* = F(b + \varepsilon) - F(b - \varepsilon)$$

и

$$b - \varepsilon \leq B^* \leq b + \varepsilon$$

и

$$B^* - \varepsilon \leq b \leq B^* + \varepsilon.$$

Определение. Доверительным интервалом называется интервал со случайными границами для детерминированной величины – генерального параметра. Доверительной вероятностью называется вероятность попадания генерального параметра в его доверительный интервал.

Величина $q = 1 - p$ – называется уровнем значимости. (p – доверительная вероятность).

Абсолютная и практическая достоверность. Проверка статистических гипотез.

Из каких соображений назначается доверительная вероятность в практических задачах? Конечно, желательно было бы назначить $p=1$, но этому значению соответствует бесконечный доверительный интервал.

Определение. Событие A называется абсолютно достоверным, если $P(A)=1$. Событие A называется практически достоверным, если оно практически всегда происходит на практике ($P(A) \approx 1$).

Определение. Статистической гипотезой называется любое предположение о законе распределения генеральной совокупности или его параметрах.

Определение. Области, не попадающие в доверительный интервал, называются критическими областями статистической гипотезы, а границы доверительного интервала – критическими числами гипотезы.

ОЦЕНКИ ГЕНЕРАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Оценка генерального математического ожидания

Пусть генеральная совокупность X имеет нормальное распределение. Из нее получена выборка x_1, x_2, \dots, x_n . Далее найдено выборочное матожидание. Требуется найти доверительный интервал для генерального матожидания с доверительной вероятностью p .

Если дисперсия генеральной совокупности известна, то

$$m_x^* - \frac{\sigma_x u_{1-\frac{q}{2}}}{\sqrt{n}} \leq m_x \leq m_x^* + \frac{\sigma_x u_{1-\frac{q}{2}}}{\sqrt{n}},$$

где m_x – генеральное среднее, $q = 1 - p$ – уровень значимости.

Данное выражение получено в предположении, что величина

$$U = \frac{M_x^* - m_x}{\sigma_x} \sqrt{n}$$

имеет нормальное распределение.

Однако дисперсия генеральной совокупности на практике часто неизвестна, а известна лишь величина D_x^* .

Тогда, величина

$$T = \frac{M_x^* - m_x}{\sigma_x^*} \sqrt{n}$$

уже не будет иметь нормальное распределение. Этот факт и распределение вошло в историю под именем t -распределения Стьюдента (Госсет, псевдоним – Стьюдент), которое дает доверительный интервал для матожидания:

$$m_x^* - \frac{\sigma_x^* t_{1-\frac{q}{2}}(f)}{\sqrt{n}} \leq m_x \leq m_x^* + \frac{\sigma_x^* t_{1-\frac{q}{2}}(f)}{\sqrt{n}}.$$

Оценка генеральной дисперсии.

Пусть генеральная совокупность X имеет нормальное распределение. Из нее получена выборка x_1, x_2, \dots, x_n . Далее найдена выборочная дисперсия. Требуется найти доверительный интервал для генеральной дисперсии с доверительной вероятностью p .

Для этих целей используется величина:

$$\chi^2 = \frac{1}{D_x} \sum_{i=1}^n (X_i - M_x^*)^2,$$

которую ввел в рассмотрение Карл Пирсон.

Распределение этой величины имеет название χ^2 -распределение Пирсона. Тогда доверительный интервал для дисперсии:

$$\frac{f D_x^*}{\chi^2_{1-\frac{q}{2}}} \leq D_x \leq \frac{f D_x^*}{\chi^2_{\frac{q}{2}}}.$$

АНАЛИЗ ЗАКОНА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Простейший критерий проверки основной гипотезы.

Определение. Основной гипотезой называется гипотеза о нормальном распределении генеральной совокупности X .

Определение. Критерием согласия называется критерий проверки правильности подбора теоретического распределения на его соответствие выборке.

Подбор теоретического распределения и его параметров.

Этапы подбора теоретического распределения:

1) подбор вида распределения (закона),

- 2) подбор параметров (числовых констант, входящих в функцию распределения и функцию плотности распределения),
- 3) проверка правильности подбора.

Вид теоретического распределения.

Различные законы распределения отличаются видом графиков $f(x)$ и $F(x)$. Поскольку при дифференцировании особенности проявляются сильнее, график функции плотности распределения является более информативным, чем график функции распределения.

Выборочная плотность распределения:

$$f^*(x) = \frac{n_j}{n \cdot h},$$

– выборочная вероятность попадания в некоторый интервал (отношение числа попаданий в интервал n_j к общему числу попаданий n), деленная на ширину интервала h .

Вопрос: сколько участков k взять? Обычно выбирают для построения гистограммы как ближайшее целое к \sqrt{n} .

Определение. Столбиковая диаграмма числа попаданий в участок n_j называется *гистограммой*.

Гистограмма с точностью до множителя nh совпадает с графиком выборочной плотности распределения.

По виду гистограммы подбирают теоретический закон распределения. Для этого смотрят, на какую плотность распределения похожа гистограмма и выбирают соответствующий закон. Рассмотрим 4 из наиболее часто встречающихся в приложениях законов распределений: нормальное, показательное, равномерное, рэлеевское.

Нормальное распределение.

Плотность имеет вид:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right).$$

Функция распределения:

$$F(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right) dt = \Phi\left(\frac{x-m}{\sigma}\right) + 0.5,$$

где $\Phi(u)$ – интеграл Лапласа.

Нормальное распределение является двухпараметрическим (параметры m и σ).

В Matlab: `normpdf` и `normcdf` с параметрами m и σ .

Плотность показательного распределения отлична от нуля только для неотрицательных значений x . В нуле она принимает максимальное значение, равное α . С ростом x она убывает, оставаясь вогнутой и асимптотически приближаясь к нулю. Плотность показательного распределения:

$$f(x) = \begin{cases} 0; & x < 0; \\ \alpha \exp(-\alpha x); & x \geq 0. \end{cases}$$

Функция распределения:

$$F(x) = \begin{cases} 0; & x < 0; \\ 1 - \exp(-\alpha x); & x \geq 0. \end{cases}$$

Показательное распределение является однопараметрическим (параметр α). В Matlab: `exppdf` и `expcdf` с параметром – величиной, обратной к α .

Плотность равномерного распределения отлична от нуля только в заданном интервале $[a, b]$, и принимает в этом интервале постоянное значение:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}; x \in [a, b]; \\ 0; x \notin [a, b]. \end{cases}$$

Функция распределения:

$$F(x) = \begin{cases} 0; x < a \\ \frac{x-a}{b-a}; x \in [a, b]; \\ 1; x > b \end{cases}$$

Равномерное распределение – двухпараметрическое (параметры a и b). В Matlab: `unifpdf` и `unifcdf` с параметрами a и b .

Плотность рэлеевского распределения отлична от нуля для неотрицательных значений. От нуля она выпуклая и возрастает до некоторого максимального значения. Далее убывает, становясь вогнутой и асимптотически приближается к нулю.

Плотность рэлеевского распределения:

$$f(x) = \begin{cases} 0; x < 0; \\ \frac{x}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right); x \geq 0. \end{cases}$$

Функция распределения:

$$F(x) = \begin{cases} 0; x < 0; \\ 1 - \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right); x \geq 0. \end{cases}$$

Показательное распределение является однопараметрическим (параметр α). В Matlab: `raylpdf` и `raylcdf` с параметром – величиной σ .

Вид гистограммы позволяет выбрать сразу несколько законов. Дальнейшая диагностика основана на критериях согласия.

Параметры теоретического распределения.

Для определения параметров можно применить метод максимального правдоподобия или метод моментов.

Более простым является второй подход. В нем, параметры, входящие в выражения для $f(x)$ и $F(x)$, подбираются так, чтобы вычисленные по этим параметрам матожидание (для 1-параметрических законов) или матожидание и дисперсия (для 2-параметрических законов) совпадали с выборочными. Для 3-параметрических законов распределения должны совпадать среднее, дисперсии, асимметрия и т.д.

Для нормального распределения: $m = m_x^*; \sigma = \sigma_x^*$.

Для показательного распределения: $\alpha = \frac{1}{m_x^*}$.

Для равномерного распределения: $a = m_x^* - \sigma_x^* \sqrt{3}; b = m_x^* + \sigma_x^* \sqrt{3}$.

Для рэлеевского распределения: $\sigma = m_x^* \sqrt{\frac{2}{\pi}}$.

Критерии согласия.

Т.о. получены две функции, как сравнить их? Найти максимальную по ординатам разность и взять ее модуль. Другой вариант – посчитать площадь между кривыми или интеграл от квадрата разности.

Два наиболее распространенных критерия: критерий Колмогорова и критерий Пирсона.

Критерий согласия Колмогорова

Максимальная по модулю разность между выборочной и генеральной функциями распределения:

$$D = \max_{\forall x \in R} |F^*(x) - F(x)|$$

является случайной величиной.

Эта величина с ростом объема выборки сходится по вероятности к нулю. Колмогоров уточнил этот результат, выяснив как именно D сходится к нулю. Он рассмотрел случайную величину $\Lambda = D\sqrt{n}$ и нашел ее закон распределения. При достаточно больших n он вообще не зависит от закона распределения генеральной совокупности.

Теорема (Колмогорова). Для любого непрерывного закона распределения генеральной совокупности X функция распределения случайной величины $\Lambda = D\sqrt{n}$ при достаточно большом n имеет вид:

$$F(\lambda) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} (-1)^k \exp(-2k^2 \cdot \lambda^2).$$

- распределение Колмогорова.

Эта теорема дает возможность проверить правильность подбора теоретического распределения. Если опытные данные взяты из генеральной совокупности с функцией распределения $F(x)$, то вычисленная реализация λ случайной величины Λ на уровне значимости q должна лежать в квантильных границах распределения Колмогорова. 0-гипотезу можно принять, если выполнено условие:

$$\lambda \leq \lambda_{1-q}. \quad (*)$$

Т.о., необходимо найти максимальную по модулю разность между выборочной и теоретической функциями распределения D , вычислить по ней λ - реализацию случайной величины Λ и проверить выполнение условия (*).

В Matlab проверка критерия согласия Колмогорова может быть проведена с помощью функции `kstest`.

При этом выбираем такое распределение, для которого q максимальное (вероятность p разницы между функциями распределения минимальная). График выборочной функции распределения строит функция `cdfplot`.

СРАВНЕНИЕ ВЫБОРОК

Рассмотрим не одну, а две или более выборок и задачи статистики для них. Будем предполагать, что генеральные совокупности независимы и имеют нормальные распределения, опыты в каждой выборке также независимы.

Сравнение двух дисперсий.

Пусть имеются две генеральные совокупности X_1 и X_2 . Из каждой взята выборка объемом n_1, n_2 соответственно. Вычислены выборочные матожидания m_1^*, m_2^* и дисперсии D_1^*, D_2^* . Требуется проверить 0-гипотезу о равенстве генеральных дисперсий:

$$D_1 = D_2.$$

Будем считать, что выборочные дисперсии – это реализации случайных величин – D_1^*, D_2^* . Рассмотрим случайную величину:

$$F = \frac{D_1^*}{D_1} \div \frac{D_2^*}{D_2} = \frac{D_1^*}{D_1} \frac{D_2}{D_2^*}.$$

Распределение этой величины носит имя Фишера и называется *F-распределением Фишера*.

Используя $\chi^2 = \frac{1}{D_x} \sum_{i=1}^n (X_i - M_x^*)^2$ можно получить другое выражение для F :

$$F = \frac{\chi^2(f_1)}{f_1} \div \frac{\chi^2(f_2)}{f_2} = \frac{\chi^2(f_1)}{f_1} \frac{f_2}{\chi^2(f_2)}.$$

F -распределение Фишера используется для проверки 0-гипотезы и носит название *F-критерием Фишера*.

Если 0-гипотеза имеет место отношение выборочных дисперсий должно иметь F -распределение Фишера:

$$F = \frac{D_1^*}{D_1} \div \frac{D_2^*}{D_2} = \frac{D_1^*}{1} \frac{1}{D_2^*}.$$

Значит реализация этой случайной величины, т.е. вычисленное на практике отношение выборочных дисперсий, должно на уровне значимости q попадать в квантильные границы. Интервал для 0-гипотезы:

$$F_{\frac{q}{2}}(f_1, f_2) \leq \frac{D_1^*}{D_2^*} \leq F_{1-\frac{q}{2}}(f_1, f_2).$$

Выход за левую границу интервала соответствует альтернативной гипотезе: $D_1 < D_2$, а за правую – гипотезе $D_1 > D_2$.

Сравнение двух средних

Пусть имеются две генеральные совокупности X_1 и X_2 . Из каждой взята выборка объемом n_1, n_2 соответственно. Вычислены выборочные матожидания m_1^*, m_2^* и дисперсии D_1^*, D_2^* . Требуется проверить 0-гипотезу о равенстве генеральных матожиданий:

$$m_1 = m_2.$$

Если генеральные дисперсии известны, то можно получить следующий доверительный интервал (см. книга):

$$-\sqrt{\frac{D_1}{n_1} + \frac{D_2}{n_2}} \cdot u_{1-\frac{q}{2}} \leq m_1^* - m_2^* \leq \sqrt{\frac{D_1}{n_1} + \frac{D_2}{n_2}} \cdot u_{1-\frac{q}{2}} \quad (**)$$

Если (**) выполняется, то можно принять 0-гипотезу. Однако на практике генеральные дисперсии чаще всего неизвестны. Обычно по выборкам можно найти только выборочные характеристики.

В Matlab сравнение двух средних проводит функция `ttest2`.

ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ

Ранее мы полагали, что все условия опытов остаются неизменными, а разброс экспериментальных данных вызывается лишь случайными причинами. Другая, не менее важная задача матстатистики заключается в том, что во время эксперимента один или несколько подконтрольных нам факторов изменяются и необходимо оценить влияние этих факторов. В более общей постановке необходимо отделить изучаемые факторы от случайных, друг от друга и оценить значимо ли влияет каждый из них на результат эксперимента по сравнению с неконтролируемыми (случайными факторами).

Здесь будем исследовать зависит ли вообще эксперимент от этого фактора или изучаемый фактор лишь незначимо влияет на результат по сравнению со случайными факторами.

Будем считать, что случайные ошибки наблюдений имеют нормальное распределение, а изучаемые факторы A, B и т.д.

- ✓ Не зависят от случайных,
- ✓ Не зависят друг от друга
- ✓ Влияют только на среднее результатов и не влияют на дисперсию.

Как охарактеризовать меру влияния фактора A ? Будем считать, что проведены эксперименты без погрешностей. Пусть при n значениях фактора A получены истинные результаты x_1, x_2, \dots, x_n . Если A не влияет на них, то они все одинаковые, иначе – нас интересует только степень зависимости и в качестве меры влияния удобно взять степень разброса результатов - выборочную дисперсию:

$$m_x^* = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i; \quad (6.1)$$

$$D_A = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - m_x^*)^2. \quad (6.2)$$

D_A – лишь аналог выборочной дисперсии и характеризует не случайность, а лишь влияние фактора A . На практике является очень удобной.

Определение. Изучение переменных факторов по их дисперсиям называется *дисперсионным анализом*.

При решении задач дисперсионного анализа полагают действие факторов и случайностей независимыми случайными событиями. Совместное их действие приводит к тому, что экспериментальные результаты будут реализациями случайной величины, дисперсия которой будет равна сумме дисперсий факторов и случайностей. Например, если генеральная дисперсия X при неизменном A равна D_0 и дисперсия фактора A при отсутствии случайностей равна D_A и других факторов нет, то генеральная дисперсия X будет равна

$$D_x = D_A + D_0. \quad (6.3)$$

1-факторный дисперсионный анализ.

Часто на практике D_0 не известна. Поэтому на каждом уровне фактора A необходимо проводить несколько измерений. Пусть $A_1, A_2, \dots, A_j, \dots, A_k$ – уровни фактора A . Положим, что на каждом уровне проведено n измерений. Тогда измерения, проведенные на уровне A_j : $x_{j1}, x_{j2}, \dots, x_{ji}, \dots, x_{jn}$ (первый индекс – номер уровня фактора, второй – номер опыта).

Получаем матрицу опыта размера $k \times n$:

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{k1} & x_{k2} & \dots & x_{kn} \end{pmatrix}.$$

Каждая строка соответствует одному уровню фактора.

Чтобы вычислить дисперсию, которая учитывает влияние только случайностей необходимо вычислить дисперсии всех строк, которые должны быть примерно одинаковые (фактор A не влияет на разброс результатов):

$$m_j^* = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ji}; \quad D_j = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_{ji} - m_j^*)^2.$$

Пусть проверка по критериям Барлета или Кохрана (для нескольких выборок) показала, что гипотезы справедливы и выборочные дисперсии сравнимы. По МТИ можно вычислить средневзвешенную всех D_j^* , которую и можно считать оценкой дисперсии случайностей D_0

$$D_0^* = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k D_j^*.$$

Число степеней свободы равно числу степеней свободы всех выборок:

$$f = k(n-1).$$

Т.о. мы нашли знаменатель (6.4) – выборочную дисперсию.

Перейдем к числителю, который оценивает влияние и случайностей, и фактора A .

Способ 1.

Проще всего собрать все kn измерений в одну выборку и найти ее среднее и дисперсию:

$$m_x^* = \frac{1}{kn} \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^n x_{ji},$$

$$D_x^* = \frac{1}{kn-1} \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^n (x_{ji} - m_x^*)^2.$$

Фактор A считаем незначимым на уровне значимости q , если

$$\frac{D_x^*}{D_0^*} \leq F_{1-q}(kn-1, k(n-1)). \quad (6.6)$$

При нарушении (6.6) нужно считать, что фактор A влияет значимо и можно вычислить его выборочную дисперсию по (6.5).

Способ 2.

Можно оценить разброс не всех данных x_{ji} , а только средних m_j^*

$$D_x^{**} = \frac{1}{k-1} \sum_{j=1}^k (m_j^* - m_x^*)^2,$$

то она будет включать в себя не D_0^* , а D_0^*/n .

И вместо (6.3) будем иметь

$$D_x^{**} = D_A^* + D_0^*/n.$$

Критерий 0-гипотезы:

$$\frac{nD_x^{**}}{D_0^*} \leq F_{1-q}(k-1, k(n-1)).$$

Если это неравенство выполняется, то фактор A влияет незначимо, иначе – значимо.

В Matlab задачу 1-факторного дисперсионного анализа решает функция `anova1`.

2-факторный дисперсионный анализ.

Дисперсионный анализ оказывается удобным при исследовании совместного действия нескольких факторов. Пусть изучается 2 фактора: A и B . Уровни фактора A : $A_1, A_2, \dots, A_j, \dots, A_k$ (всего k уровней) и уровни фактора B : $B_1, B_2, \dots, B_i, \dots, B_m$ (всего m уровней).

Матрица экспериментов имеет вид:

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{k1} & x_{k2} & \dots & x_{km} \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

Каждая строка j соответствует j -му уровню фактора A , каждый столбец i соответствует i -му уровню фактора B . Этих данных вполне достаточно, чтобы оценить D_0^* , D_A^* и D_B^* .

По способу 2 найдем средние каждой строки:

$$m_j^{R*} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m x_{ji}, \quad (6.8)$$

а затем разброс относительно общего среднего:

$$D_{A0}^* = \frac{1}{k-1} \sum_{j=1}^k (m_j^{R*} - m_x^*)^2, \quad (6.9)$$

где $m_x^* = \frac{1}{km} \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^m x_{ji}$ – среднее всей матрицы.

В каждом из средних строки (6.8) произведено усреднение по фактору B , поэтому в их дисперсии (6.9) сказывается влияние только фактора A и случайностей. При этом дисперсия случайностей уменьшена в m раз, т.к. вместо конкретного измерения мы берем среднее из m измерений.

$$D_{A0}^* = D_A^* + D_0^* / m. \quad (6.10)$$

Теперь повторим выкладки (6.8-6.10). Найдем среднее каждого столбца:

$$m_j^{C*} = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k x_{ji} \quad (6.11)$$

и разброс относительно общего среднего:

$$D_{B0}^* = \frac{1}{m-1} \sum_{j=1}^m (m_j^{C*} - m_x^*)^2. \quad (6.12)$$

Эта дисперсия учитывает влияние фактора B и случайностей, причем дисперсия случайностей здесь в k раз меньше, чем в том случае, если бы мы вместо средних брали отдельные измерения:

$$D_{B0}^* = D_B^* + D_0^* / k. \quad (6.13)$$

Метод наименьших квадратов

Часто возникает необходимость ответить не просто на вопрос: влияет ли подконтрольный фактор на результаты измерений, а как именно.

МНК и его связь с ПМП

Пусть x – подконтрольный фактор, различные значения которого будем считать детерминированными, Y – результат опыта – случайную величину. Пусть из теоретических соображений известен вид зависимости Y от x :

$$Y = y(x, B_1, B_2, \dots, B_n),$$

где B_1, B_2, \dots, B_n – параметры, которые являются случайными величинами.

Поскольку B_1, B_2, \dots, B_n – случайные величины, то проводится число опытов $n \gg m$.

Поскольку кривых можно провести множество, возникает вопрос: какую кривую считать наилучшей? – Ответ дает ПМП.

КОРРЕЛЯЦИОННЫЙ АНАЛИЗ

В теории вероятностей: рассматриваются детерминированные функции случайных величин. В задачи обработки ЭД МНК необходимо установить связь между детерминированными значениями аргументов и случайными значениями функции.

Рассмотрим промежуточную задачу – где аргумент X и величины Y – случайные, будем оценивать взаимосвязаны ли эти величины, и если да, то насколько.

Понятие о корреляции.

Определение. Связь между координатами случайного вектора (при изменении X меняется и Y) называется стохастической.

Определение. Та часть стохастической связи, которая определяется взаимным влиянием X и Y называется стохастической составляющей стохастической связи.

Определение. Та часть стохастической связи, которая определяется случайностями самих X и Y называется случайной составляющей стохастической связи.

Для численной оценки взаимосвязи X и Y нужно ввести числовую характеристику.

Пусть величины независимы. Тогда

$$D(X + Y) = D_x + D_y. \quad (8.1)$$

Это условие могло бы служить критерием разделения величин на зависимые и независимые, если бы не было справедливо и обратное. Однако, если X и Y зависимые, то не обязательно данное условие будет нарушено.

(8.1) может служить характеристикой стохастической составляющей – корреляции.

Определение. *Корреляцией* называется та часть стохастической составляющей стохастической связи, которая влияет на нарушение равенства (8.2).



Определение. Случайные величины X и Y называются коррелированными, если для них (8.1) нарушается и некоррелированными, если (8.1) имеет место.

Пусть величины X и Y зависимы. Тогда

$$D(X + Y) = M((X - m_x) + (Y - m_y))^2 = D_x + D_y + 2M((X - m_x)(Y - m_y)). \quad (8.2)$$

Появление второго смешанного центрального момента свидетельствует о зависимости X и Y . Поэтому по величине $M((X - m_x)(Y - m_y))$ можно судить об абсолютной величине корреляции.

Определение. Коэффициентом корреляции называется отношение второго смешанного центрального момента величин X и Y к произведению их среднеквадратичных отклонений:

$$\rho = \frac{M((X - m_x)(Y - m_y))}{\sigma_x \sigma_y}.$$

Если $\rho = 0$, то X и Y – некоррелированные.

Свойства коэффициента корреляции:

1) Величина ρ не меняется, если к X и (или) Y прибавить произвольное детерминированное слагаемое.

- 2) Величина ρ не меняется, если к X и (или) Y умножить на произвольный детерминированный множитель.
- 3) Величина ρ изменит только знак, если одну из величин X (или) Y умножить на -1 .
- 4) Величина ρ не изменится, если перейти от X и Y к центрированным и нормированным центральным моментам по формулам:

$$X_0 = \frac{X - m_x}{\sigma_x}, Y_0 = \frac{Y - m_y}{\sigma_y}.$$

- 5) Величина ρ лежит в пределах: $-1 \leq \rho \leq 1$.
- 6) Если $\rho=1$, то X и Y связаны детерминированной линейной зависимостью $Y = kX + b, k > 0$. При $\rho = -1$ они связаны детерминированной линейной зависимостью $Y = kX + b, k < 0$.
- 7) Справедливо и обратное к 6.
- 8) Если X и Y нормальные и некоррелированные ($\rho=0$), то они независимые.

Оценка коэффициента корреляции по данным наблюдений.

Пусть проведено n испытаний и получена выборка $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$.

Требуется по этим данным оценить коэффициент корреляции генеральной совокупности.

Определение. Оценка коэффициента корреляции по данным наблюдений называется *корреляционным анализом*.

Предположим, что генеральные совокупности X и Y имеют нормальное распределения с математическими ожиданиями m_x, m_y и дисперсиями D_x, D_y и коэффициентом корреляции ρ . По этим данным находим второй смешанный центральный момент:

$$M_{xy}^* = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - M_x^*)(Y_i - M_y^*),$$

а затем функцию, реализацией которой является выборочный коэффициент корреляции ρ^* :

$$R = \frac{M_{xy}^*}{\sqrt{D_x^* D_y^*}}. \quad (8.3)$$

Определение. Распределение случайной величины R называется r -распределением выборочного коэффициента корреляции, соответствующего генеральному ρ .

0-гипотезу о некоррелированности величин X и Y можно принять на уровне значимости q , если выборочный коэффициент корреляции лежит в квантильных границах:

$$-r_{1-\frac{q}{2}} \leq \rho^* \leq r_{1-\frac{q}{2}}. \quad (8.4)$$

Если (8.4) нарушается, то нужно принять одну из двух альтернативных гипотез: $\rho > 0, \rho < 0$.

В Matlab функция `corrcoef` вычисляет корреляционную матрицу для массива, состоящего из столбцов данных.

Планирование численного и физического экспериментов

Если модель достаточно точно описывает объект, то эксперимент на объекте может быть заменен экспериментом на модели. В последнее время наряду с физическими моделями все большее распространение получают абстрактные математические модели. Можно получать новые сведения об объекте, экспериментируя на модели, если она достаточно точно описывает объект.

Планирование эксперимента – это процедура выбора числа и условий проведения опытов, необходимых и достаточных для решения поставленной задачи с требуемой точностью. При этом существенно следующее:

- стремление к минимизации общего числа опытов;
- одновременное варьирование всеми переменными, определяющими процесс, по специальным правилам – алгоритмам;
- использование математического аппарата, формализующего многие действия экспериментатора;
- выбор четкой стратегии, позволяющей принимать обоснованные решения после каждой серии экспериментов.

Задачи, для решения которых может использоваться планирование эксперимента, чрезвычайно разнообразны.

Планирование эксперимента предполагает активное вмешательство в процесс и возможность выбора в каждом опыте тех уровней факторов, которые представляют интерес. Поэтому такой эксперимент называется активным. Объект, на котором возможен активный эксперимент, называется управляемым. Это и есть второе требование к объекту исследования.

На практике нет абсолютно управляемых объектов. На реальный объект обычно действуют как управляемые, так и неуправляемые факторы. Неуправляемые факторы влияют на воспроизводимость эксперимента и являются причиной ее нарушения. Если требования воспроизводимости не выполняются, приходится обращаться к активно-пассивному эксперименту.

Планирование экстремального эксперимента – это метод выбора количества и условий проведения опытов, минимально необходимых для отыскания оптимальных условий, т. е. для решения поставленной задачи.

Прежде чем приступить к эксперименту, необходимо однозначно и непротиворечиво сформулировать его цель и выбрать подходящую количественную характеристику этой цели, которую мы назвали параметром оптимизации.

Понятие «объект исследования» требует точного формального определения. Для такого определения удалось приспособить кибернетическое понятие «черный ящик» – модель объекта. Экспериментатор, вставший на путь применения методов планирования эксперимента, должен уметь формулировать свою задачу в терминах «черного ящика».

Входы «черного ящика» называются факторами. Каждый фактор может принимать некоторое определенное число различных значений, называемых уровнями. Сочетание определенных уровней всех факторов определяет возможное состояние «черного ящика» и условия одного из возможных опытов.

Совокупность всех различных возможных состояний определяет сложность «черного ящика» и общее число возможных опытов.

Результаты эксперимента используются для получения математической модели объект исследования, которая представляет собой уравнение, связывающее параметр оптимизации и факторы. Такое уравнение называется функцией отклика.

Виды параметров оптимизации

В зависимости от объекта и цели исследования параметры оптимизации могут быть весьма разнообразными. Чтобы ориентироваться в этом многообразии, введем некоторую классификацию. Мы не стремимся к созданию полной и детальной классификации. Наша задача – построить такую условную схему, которая включала бы ряд практически важных случаев и помогала экспериментатору ориентироваться в реальных ситуациях.

Реальные ситуации, как правило, сложны. Они часто требуют одновременного учета нескольких, иногда очень многих, параметров. В принципе каждый объект может характеризоваться сразу **всей** совокупностью параметров, приведенных на рис., или любым подмножеством из этой совокупности. Движение к оптимуму возможно, если выбран

единственный параметр оптимизации. Тогда прочие характеристики процесса уже не выступают в качестве параметров оптимизации, а служат ограничениями. Другой путь – построение обобщенного параметра оптимизации как некоторой функции от множества исходных.

Требования к параметру оптимизации

Параметр оптимизации – это признак, по которому мы хотим оптимизировать процесс. Он должен быть *количественным*, задаваться числом. Мы должны уметь его измерять при любой возможной комбинации выбранных уровней факторов. Множество значений, которые может принимать параметр оптимизации, будем называть областью его определения. Области определения могут быть непрерывными и дискретными, ограниченными и неограниченными

Ранг – это количественная оценка параметра оптимизации, но она носит условный (субъективный) характер. Мы ставим в соответствие качественному признаку некоторое число – ранг.

Для каждого физически измеряемого параметра оптимизации можно построить ранговый аналог. Потребность в построении такого аналога возникает, если имеющиеся в распоряжении исследователя численные характеристики неточны или неизвестен способ построения удовлетворительных численных оценок. При прочих равных условиях всегда нужно отдавать предпочтение физическому измерению, так как ранговый подход менее чувствителен и с его помощью трудно изучать тонкие эффекты.

Следующее требование: параметр оптимизации должен выражаться единым числом. Иногда это получается естественно, как регистрация показания прибора. Например, скорость движения машины определяется числом на спидометре. Чаще приходится производить некоторые вычисления. Так бывает при расчете выхода реакции. В химии часто требуется получать продукт с заданным отношением компонентов. Один из возможных вариантов решения подобных задач состоит в том, чтобы выразить отношение одним числом (1,5) и в качестве параметра оптимизации пользоваться значениями отклонений (или квадратов отклонений) от этого числа.

Еще одно требование, связанное с количественной природой параметра оптимизации, – *однозначность* в статистическом смысле. Заданному набору значений факторов должно соответствовать одно с точностью до ошибки эксперимента значение параметра оптимизации.

Следующее требование к параметру оптимизации – требование *универсальности* или *полноты*. Под универсальностью параметра оптимизации понимается его способность всесторонне характеризовать объект. В частности, технологические параметры оптимизации недостаточно универсальны: они не учитывают экономику. Универсальностью обладают, например, обобщенные параметры оптимизации, которые строятся как функции от нескольких частных параметров.

Желательно, чтобы параметр оптимизации имел *физический смысл, был простым и легко вычисляемым*.

Параметры оптимизации бывают экономическими, технико-экономическими, технико-технологическими, статистическими, психологическими и т. д.

Параметр оптимизации должен быть:

1. эффективным с точки зрения достижения цели;
2. универсальным;
3. количественным и выражаться одним числом
4. статистически эффективным;
5. имеющим физический смысл, простым и легко вычисляемым;
6. существующим для всех различимых состояний.

В тех случаях, когда возникают трудности с количественной оценкой параметров оптимизации, приходится обращаться к ранговому подходу. В ходе исследования могут

меняться априорные представления об объекте исследования, что приводит к последовательному подходу при выборе параметра оптимизации.

Из многих параметров, характеризующих объект исследования, только один, часто обобщенный, может служить параметром оптимизации. Остальные рассматриваются как ограничения.

ОБОБЩЕННЫЙ ПАРАМЕТР ОПТИМИЗАЦИИ

Путь к единому параметру оптимизации часто лежит через обобщение. Как уже говорилось, из многих откликов, определяющих объект, очень часто трудно выбрать один, самый важный. Если же это возможно, тогда мы попадаем в ситуацию, описанную в предыдущей главе. Здесь же нам предстоит познакомиться с более сложной ситуацией, когда необходимо множество откликов обобщать (свертывать) в единый количественный признак. С таким обобщением связан ряд трудностей.

Каждый отклик имеет свой физический смысл и свою размерность. Чтобы объединить различные отклики, прежде всего приходится ввести для каждого из них некоторую безразмерную шкалу. Шкала должна быть однотипной для всех объединяемых откликов – это делает их сравнимыми. Выбор шкалы – не простая задача, зависящая от априорных сведений об откликах, а также от той точности, с которой мы хотим определить обобщенный признак.

После того как для каждого отклика построена безразмерная шкала, возникает, следующая трудность – выбор правила комбинирования исходных частных откликов в обобщенный показатель. Единого правила не существует. Здесь можно идти различными путями, и выбор пути не формализован. Рассмотрим несколько различных способов построения обобщенного показателя.

Простейшие способы построения обобщенного отклика

Пусть исследуемый объект характеризуют n частных откликов $y_u (u=1, 2, \dots, n)$ и каждый из этих откликов измеряется в N опытах. Тогда y_{ui} – это значение u -го отклика в i -м опыте ($i=1, 2, \dots, N$). Каждый из откликов y_u имеет свой физический смысл и, чаще всего, разную размерность. Введем простейшее преобразование: набор данных для каждого y_u поставим в соответствие, с самым простым стандартным аналогом – шкалой, на которой имеется только два значения: 0 – брак, неудовлетворительное качество, 1 – годный продукт, удовлетворительное качество. Преобразованные значения обозначим так: y_{ui} – преобразованное значение u -го отклика в i -м опыте. Здесь мы применили шкалу, в которой использовано числовое множество из двух элементов (в данном случае 0 и 1).

Шкала желательности

Одним из наиболее удобных способов построения обобщенного отклика является обобщенная функция желательности Харрингтона. В основе построения этой обобщенной функции лежит идея преобразования натуральных значений частных откликов в безразмерную шкалу желательности или предпочтительности. Шкала желательности относится к психофизическим шкалам. Ее назначение – установление соответствия между физическими и психологическими параметрами. Здесь под физическими параметрами понимаются всевозможные отклики, характеризующие функционирование исследуемого объекта.

Таблица – Стандартные отметки на шкале желательности

Желательность	Отметки на шкале желательности
Очень хорошо	1,00-0,80
Хорошо	0,80-0,63
Удовлетворительно	0,63-0,37
Плохо	0,37-0,20
Очень плохо	0,20-0,00

Обобщенная функция желательности

После того, как выбрана шкала желательности и частные отклики преобразованы в частные функции желательности, можно приступить к основной задаче – построению обобщенного показателя D , названного Харрингтоном обобщенной функцией желательности. Обобщать, то есть переходить от d_i к D предлагается по формуле

$$D = \sqrt[n]{\prod_{u=1}^n d_u} .$$

Здесь обобщенная функция желательности задается как среднее геометрическое частных желательностей. Такое представление можно рассматривать как удобную модель психологической реакции исследователя, которая возникает при решении определенного класса задач. Примером может служить установление пригодности материала с данным набором свойств для использования его в заданных условиях.

Если хотя бы один частный отклик, входящий в комплекс параметров качества материала, не удовлетворяет требованиям спецификации (например, при определенной температуре материал становится хрупким и разрушается), то как бы ни были хороши прочие свойства, этот материал не может быть использован по назначению.

Построение обобщенного параметра оптимизации связано с созданием единого признака, количественно определяющего функционирование исследуемого объекта с многими выходными параметрами. При этом возникают некоторые трудности. Каждый выходной параметр – отклик имеет свой физический смысл, свою размерность. Чтобы объединить различные отклики, необходимо ввести единую для всех откликов искусственную метрику. Набор данных каждого отклика нужно поставить в соответствие с некоторым стандартным аналогом, с безразмерной шкалой. Поэтому первым вопросом, который нужно решить при построении обобщенного параметра оптимизации, является вопрос о выборе шкалы. Шкала должна быть однотипной для всех объединяемых откликов. Построение шкалы во многом зависит от уровня априорных сведений о выходных параметрах, а также от той точности, с которой мы хотим определить обобщенный отклик.

ФАКТОРЫ

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

Так же, как и параметр оптимизации, каждый фактор имеет область определения. Мы будем считать фактор заданным, если вместе с его названием указана область его определения. Под областью определения понимается совокупность всех значений, которые в принципе может принимать данный фактор. Ясно, что совокупность значений фактора, которая используется в эксперименте, является подмножеством из множества значений, образующих область определения.

Область определения может быть непрерывной и дискретной. Однако в тех задачах планирования эксперимента, которые мы собираемся рассматривать, всегда используются дискретно области определения. Так, для факторов с непрерывной областью определения, таких, как температура, время, количество вещества и т.п., всегда выбираются дискретные множества уровней. В практических задачах области определения факторов, как правило, ограничены. Ограничения могут носить принципиальный либо технический характер.

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*.

С операциональным определением связаны выбор размерности фактора и точность его фиксирования. Мы привыкли считать, что выбор размерности фактора не представляет особой трудности. Замена одной измерительной шкалы другой называется преобразованием шкал. Оно может быть использовано для упрощения модели объекта.

Точность замера факторов должна быть возможно более высокой. Степень точности определяется диапазоном изменения факторов.

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. Прежде всего выдвигается требование *совместимости*. Совместимость факторов означает, что все их комбинации осуществимы и безопасны. Это очень важное требование.

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

. Требование некоррелированности не означает, что между значениями факторов нет никакой связи. Достаточно, чтобы связь не была линейной.

ВЫБОР МОДЕЛИ

Выбрать модель – значит выбрать вид функции отклика

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_k),$$

записать ее уравнение. Тогда останется спланировать и провести эксперимент для оценки численных значений констант (коэффициентов) этого уравнения.

Для факторов существуют области определения. Это значит, что у каждого фактора есть минимальное и максимальное возможные значения, между которыми он может изменяться либо непрерывно, либо дискретно. Если факторы совместимы, то границы образуют на плоскости некоторый прямоугольник, внутри которого лежат точки, соответствующие состояниям «черного ящика». Пунктирными линиями на рис. обозначены границы областей определения каждого из факторов, а сплошными – границы их совместной области определения.

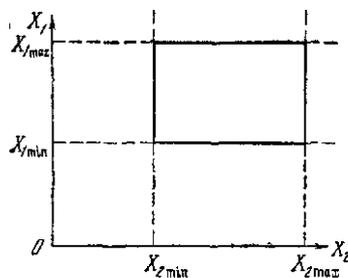


Рис. – Область определения факторов

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. Теперь мы, пожалуй, сможем сформулировать эти требования.

Исходя из выбранной стратегии, ясно, что 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.

Это значит, что 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. Разработаны специальные статистические методы, с помощью которых проверяется адекватность.

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

На рис. изображена логарифмическая функция. На некотором отрезке $[x_{\min}, x_{\max}]$ она с удовлетворительной точностью описывается двумя уравнениями:

$$y = \log_b x,$$

$$y = bx.$$

В втором уравнении b – коэффициент, который мы можем оценить, например, по результатам эксперимента. Какое из уравнений, (1) или (2), 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 уравнение (2) проще, чем уравнение (1).

Полиномиальные модели

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.

Эксперимент нужен только для того, чтобы найти численные значения коэффициентов полинома. Поэтому чем больше коэффициентов, тем больше опытов окажется необходимым. А мы стремимся сократить их число. Значит, 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.

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 (случай, рассматриваемый в этой книге), 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. Тут не приходится выбирать подобласть. Необходимо последовательно увеличивать степень полинома до тех пор, пока модель не окажется адекватной. Если адекватной оказывается линейная, или неполная квадратная модель (без членов, содержащих квадраты факторов), то ее построение аналогично тому, что требуется для оптимизации. Поэтому мы попутно будем рассматривать и эту задачу.

Резюме

Итак, мы выбрали модель, которую будем систематически использовать на первом этапе планирования эксперимента. Это алгебраический полином первой степени – линейная модель.

Чтобы произвести такой выбор, нам понадобилось научиться изображать поверхность отклика в факторном пространстве, задаваемом прямоугольными декартовыми координатами, по осям которых откладываются в некотором масштабе значения (уровни) факторов и значения параметров оптимизации. Поверхность отклика задана только в совместной области определения факторов. В этой области каждому возможному набору значений факторов (состоянию объекта) соответствует единственное значение параметра оптимизации. Для уменьшения размерности факторного пространства при геометрическом построении поверхности отклика можно использовать сечения.

Математическая модель требуется для предсказания направления градиента, т. е. направления, в котором величина параметра оптимизации улучшается быстрее, чем в любом другом направлении. Такая модель позволяет избежать полного перебора состояний объекта и тем самым уменьшить количество опытов, необходимых для отыскания оптимума.

Отказ от полного перебора требует оплаты в виде предположений о свойствах поверхности отклика, которые мы не сможем проверить. Такие предположения можно выбрать по-разному. Мы выбрали предположения об аналитичности функции отклика и об единственности оптимума. Аналитической называется такая функция, которую можно разложить в степенной ряд в окрестностях любой точки из области ее определения.

Используя эти предпосылки, можно предложить процедуру поиска оптимума, основанную на шаговом принципе. Этот принцип гласит: проводи короткие (насколько возможно) серии опытов, по их результатам строй математическую модель, используй модель для оценки градиента, ставь новые опыты только в этом направлении. Получается циклический процесс, который заканчивается при попадании в область, близкую к оптимуму («почти стационарную» область).

Чтобы выбрать теперь конкретную модель, надо сформулировать конкретные требования. К ним относятся адекватность и простота.

Под адекватностью понимается способность модели предсказывать результаты эксперимента в некоторой области с требуемой точностью. После реализации опытов можно проверить адекватность модели.

Простота – вещь относительная. Мы просто условились считать алгебраические полиномы самыми простыми. Это соглашение базируется на накопленном разными исследователями опыте работы с такими моделями и обычно удовлетворяет экспериментатора. Кроме того, полином линейен относительно неизвестных коэффициентов, что упрощает обработку наблюдений.

Выбор области связан с теми интуитивными решениями, которые принимает экспериментатор на каждом этапе работы.

ПОЛНЫЙ ФАКТОРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Весь процесс исследования можно считать состоящим из последовательности этапов, часть из которых полностью формализована, а часть требует «интуитивных» решений. Причем, по мере развития теории формальные этапы будут играть все большую роль, но до конца не вытеснят неформализованные этапы. В силу этого, между прочим, не ожидается создание «логарифмической линейки» по планированию эксперимента и надо тратить время на его изучение.

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). Мы можем использовать априорную информацию для получения представления о параметре оптимизации, о факторах, о наилучших условиях ведения процесса и характере поверхности отклика, т. е. о том, как сильно меняется параметр оптимизации при небольших изменениях значений факторов, а также о кривизне поверхности. Для этого можно использовать графики (или таблицы) однофакторных экспериментов, осуществлявшихся в предыдущих исследованиях или описанных в литературе. Если однофакторную зависимость нельзя представить линейным уравнением (в рассматриваемой области), то в многомерном случае, несомненно, будет существенная кривизна. Обратное утверждение, к сожалению, не очевидно.

Полный факторный эксперимент типа 2^k

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

Таблица - Матрица планирования эксперимента 2^2

Номер опыта	x_1	x_2	y	Номер опыта	x_1	x_2	y
1	-1	-1	y_1	3	-1	+1	y_3
2	+1	-1	y_2	4	+1	+1	y_4

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

Матрица планирования для двух факторов приведена в табл. Каждый столбец в матрице планирования называют вектор-столбцом, а каждую строку – вектор-строкой. Таким образом, в табл. мы имеем два вектора-столбца независимых переменных и один вектор-столбец параметра оптимизаций. То, что записано в этой таблице в алгебраической форме, можно изобразить геометрически. Найдем в области определения факторов точку, соответствующую основному уровню, и проведем через нее новые оси координат, параллельные осям факторов.

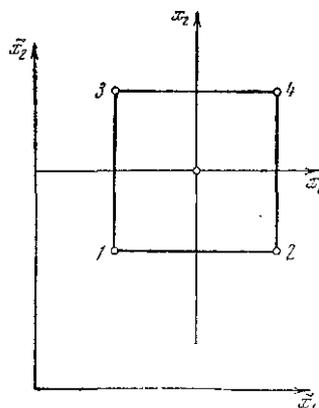


Рис. – Геометрическая интерпретация полного факторного эксперимента 2^2

Выберем масштабы по новым осям так, чтобы интервал варьирования для каждого фактора равнялся единице. Тогда условия проведения опытов будут соответствовать вершинам квадрата, центром которого является основной уровень, а каждая сторона параллельна одной из осей координат и равна двум интервалам. Номера вершин квадрата соответствуют номерам опытов в матрице планирования. Площадь, ограниченная квадратом, называется областью эксперимента. Иногда удобнее считать областью эксперимента площадь, ограниченную окружностью, описывающей квадрат. В задачах интерполяции область эксперимента есть область предсказываемых значений y .

Запись матрицы планирования, особенно для многих факторов, громоздка. Для ее сокращения удобно ввести условные буквенные обозначения строк.

Это делается следующим образом. Порядковый номер фактора ставится в соответствие строчной букве латинского алфавита: $x_1 - a$, $x_2 - b$, ... и т. д. Если теперь для строки матрицы планирования выписать латинские буквы только для факторов, находящихся на верхних уровнях, то условия опыта будут заданы однозначно. Опыт со всеми факторами на нижних уровнях условимся обозначать (1). Матрица планирования вместе с принятыми буквенными обозначениями приведена в табл.

Таблица – Матрица планирования эксперимента 2^2

Номер опыта	x_1	x_2	Буквенные обозначения строк	y
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.

Таблица – Матрица планирования эксперимента 2^3

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.

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

Таблица 6.4 – Построение матрицы планирования эксперимента 2^3

Номер опыта	x_1	x_2	x_3	y
1	-	-	+	y_1
2	-	+	+	y_2
3	+	-	+	y_3
4	+	+	+	y_4
5	-	-	-	y_5
6	-	+	-	y_6
7	+	-	-	y_7
8	+	+	-	y_8

Этот прием распространяется на построение матриц любой размерности.

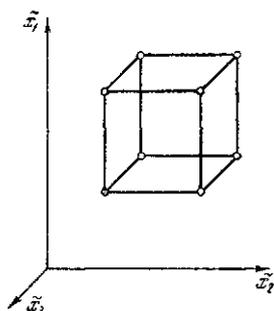
Рассмотрим второй прием. Для этого введем правило перемножения столбцов матрицы. При построчном перемножении двух столбцов матрицы произведение единиц с одноименными знаками дает +1, а с разноименными -1. Воспользовавшись этим правилом, получим для случая, который мы рассматриваем, вектор-столбец произведения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

Этот прием тоже можно перенести на построение матриц любой- размерности, однако он сложнее, чем первый.

Третий прием основан на правиле чередования знаков. В первом столбце знаки меняются поочередно, во втором столбце они чередуются через два, в третьем – через 4, в

четвертом – через 8 и т. д. по степеням двойки. Если в табл. поменять местами столбцы для x_1 и x_2 , то получится нужная матрица.

По аналогии с полным факторным экспериментом 2^2 можно дать геометрическую интерпретацию полного факторного эксперимента 2^3 . 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. К сожалению, мы не умеем рисовать картинки для числа факторов $k > 3$. Но фигура, задающая область эксперимента в многомерном пространстве, является некоторым аналогом куба. Будем называть эту фигуру гиперкубом.

Свойства полного факторного эксперимента типа 2^k

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

Два свойства следуют непосредственно из построения матрицы. Первое из них – симметричность относительно центра эксперимента – формулируется следующим, образом: алгебраическая сумма элементов вектор-столбца каждого фактора равна нулю, или

$$\sum_{i=1}^N x_{ji} = 0,$$

где j – фактора, N – число опытов, $j = 1, 2, \dots, k$.

Второе свойство – так называемое условие нормировки – формулируется следующим образом: сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу опытов, или $\sum_{i=1}^N x_{ji}^2 = N$.

Это следствие того, что значения факторов в матрице задаются +1 и –1.

Мы рассмотрели свойства отдельных столбцов матрицы планирования. Теперь остановимся на свойстве совокупности столбцов.

Сумма почленных произведений любых двух вектор-столбцов матрицы равна нулю, или $\sum_{i=1}^N x_{ji} \cdot x_{ui} = 0, j \neq u, j, u = 0, 1, 2, \dots, k$. Это важное свойство называется

ортогональностью матрицы планирования.

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

Полный факторный эксперимент и математическая модель

Давайте еще раз вернемся к матрице 2^2 (табл.). 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 $y = b_0 + b_1x_1 + \dots + b_kx_k$. Их точность и надежность зависят от свойств выборки и нуждаются в статистической проверке. А пока займемся вычислением оценок коэффициентов. Их можно вычислить по простой формуле

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

Воспользуемся этой формулой для подсчета коэффициентов b_1 и b_2

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

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

Благодаря кодированию факторов расчет коэффициентов превратился в простую арифметическую процедуру. Для подсчета коэффициента b_1 используется вектор-столбец x_1 , а для b_2 – столбец x_2 . Остается неясным, как найти b_0 . Если наше уравнение $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$ справедливо, то оно верно и для средних арифметических значений переменных: $\bar{y} = b_0 + b_1\bar{x}_1 + b_2\bar{x}_2$. Но в силу свойства симметрии $\bar{x}_1 = \bar{x}_2 = 0$. Следовательно, $\bar{y} = b_0$. Мы показали, что b_0 есть среднее арифметическое 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 k .

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

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2.$$

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

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

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

Таблица – Матрица планирования эксперимента 2^2 с эффектом взаимодействия

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

Коэффициент b_{12} вычисляется обычным путем

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

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

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

Покажем на примере еще один способ расчета коэффициентов, известный под названием метода Йетса. Все операции по расчету приведены в табл.

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.

	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		$y_4 - y_3$	$y_1 - y_3 - y_2 + y_4$

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.

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

Однако сформулированные выше утверждения справедливы лишь в том случае, если модель включает только линейные эффекты и эффекты взаимодействия. Между тем

существенными могут оказаться коэффициенты при квадратах факторов, их кубах и т. п. Так, для случая существенных квадратичных членов в двухфакторном эксперименте модель можно записать так:

$$y = b_0x_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2.$$

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

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

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

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

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

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

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

Число опытов в полном факторном эксперименте превышает число коэффициентов линейной модели, причем тем больше, чем больше факторов. Разность между числом опытов и числом коэффициентов во многих случаях оказывается очень велика, и возникает естественное желание сократить число необходимых опытов. Этим мы и займемся в следующей главе. Но прежде подведем итог сказанному.

Резюме

Первой серии опытов предшествует этап неформализованных решений, направленных на выбор локальной области факторного пространства. При этом оцениваются границы областей определения факторов, задаваемые либо принципиальными ограничениями, либо технико-экономическими соображениями, либо конкретными условиями проведения процесса. Установление области связано с тщательным анализом априорной информации об изменении параметра оптимизации и о кривизне поверхности отклика.

Локальная область проведения эксперимента выбирается в два этапа: определение основного уровня и интервалов варьирования. Основной (нулевой) уровень – многомерная точка в факторном пространстве, задаваемая комбинацией уровней факторов. Построение плана эксперимента сводится к выбору экспериментальных точек, симметричных относительно основного уровня. При установлении основного уровня приходится рассматривать различные ситуации. Ситуации задаются информацией о наилучших точках и определяют решения.

Следующий этап – выбор интервалов варьирования факторов. Для каждого фактора определяются два уровня, на которых он варьируется в эксперименте. Уровни факторов изображаются двумя точками на координатной оси, симметричными относительно основного уровня. Один из уровней – верхний, другой – нижний. Интервалом варьирования факторов называется некоторое число (свое для каждого фактора), прибавление которого к основному уровню дает верхний, а вычитание – нижний уровень.

Для упрощения записи условий эксперимента и обработки экспериментальных данных масштабы по осям задают так, чтобы верхний уровень соответствовал +1, нижний – 1, основной – нулю.

На выбор интервалов варьирования накладываются ограничения снизу (он не может быть меньше ошибки фиксирования уровня фактора) и сверху (верхний или нижний уровни не должны выходить за область определения).

В задачах оптимизации выбирают подобласть, которая давала бы возможность реализовать шаговую процедуру движения к оптимуму. В задачах интерполяции интервал варьирования охватывает всю описываемую область.

При определении интервала варьирования используется информация о точности, с которой фиксируются значения факторов, о кривизне поверхности отклика и о диапазоне изменения параметра оптимизации. Для принятых градаций этих признаков существует 27 различных ситуаций. Низкая точность фиксирования факторов определяет типичное решение – широкий интервал варьирования. Для средней точности характерен выбор среднего интервала. Высокая точность обычно приводит либо к узкому, либо к среднему интервалам.

Эксперимент, в котором реализуются все возможные сочетания уровней-, называется полным факторным экспериментом. Если число уровней равно двум, то это полный факторный эксперимент типа 2^k . Условия эксперимента представляют в виде таблицы – матрицы планирования, где строки соответствуют различным опытам, а столбцы – значениям факторов. Геометрическая интерпретация полных факторных планов: план 2^2 задается координатами вершин квадрата, план 2^3 – координатами вершин куба, при $k > 3$ – координатами вершин гиперкуба.

Полный факторный эксперимент типа 2^k обладает свойствами симметричности, нормировки, ортогональности, ротатабельности (для линейной модели).

Коэффициенты, вычисленные по результатам эксперимента, указывают на силу влияния факторов. Эффект фактора численно равен удвоенному коэффициенту. В тех случаях, когда эффект одного фактора зависит от уровня, на котором находится другой фактор, говорят о наличии эффекта взаимодействия двух факторов. Для его количественной оценки получают столбец произведений этих факторов и обращаются с ним как с вектор-столбцом любого фактора.

Из полного факторного эксперимента нельзя извлечь информацию о квадратичных членах. Вектор-столбцы для квадратичных членов совпадают друг с другом и со столбцом x_0 . Величина свободного члена b_0 включает вклады квадратичных членов, получается смешанная оценка. Оценки остальных коэффициентов не смешаны.

В полном факторном эксперименте разность между числом опытов и числом коэффициентов велика. Возникает проблема уменьшения числа опытов. Этому вопросу посвящена следующая глава.

ДРОБНЫЙ ФАКТОРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

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

Минимизация числа опытов

Начнем с самого простого – полного факторного эксперимента 2^2 . Напишем еще раз эту хорошо нам известную матрицу (табл.).

Таблица – Полный факторный эксперимент 2^2

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	y
-------------	-------	-------	-------	----------	-----

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

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

$$y = b_0x_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2.$$

Если имеются основания считать, что в выбранных интервалах варьирования процесс может быть описан линейной моделью, то достаточно определить три коэффициента b_0, b_1, b_2 . Остается одна степень свободы. Употребим ее для минимизации числа опытов. При линейном приближении $b_{12} \rightarrow 0$ и вектор-столбец x_1x_2 можно использовать для нового фактора x_3 . Поставим этот фактор в скобках над взаимодействием x_1x_2 и посмотрим, каковы будут оценки коэффициентов. Здесь уже не будет тех отдельных оценок, которые мы имели в полном факторном эксперименте 2^k . Оценки смешаются следующим образом:

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

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

Эти матрицы предлагаются взамен полного факторного эксперимента 2^3 , требующего, как вы знаете, восьми опытов. Каким бы из них вы воспользовались?

Матрица № 1

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

Матрица № 2

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	y
1	+	-	-	+	y_1
2	+	+	+	+	y_2
3	+	-	+	-	y_3

Матрица № 3

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	y
1	+	-	-	+	y_1

2	+	+	+	+	y_2
3	+	-	+	-	y_3
4	+	+	-	-	y_4

Проверим свойства матрицы № 1. Каждый вектор-столбец матрицы, кроме первого, содержит равное число +1 и -1. Это означает, что выполняется условие:

$$\sum_{j=1}^4 x_{ji} = 0.$$

Теперь перемножим каждую пару вектор-столбцов и посмотрим, будет ли сумма произведений равна 0. К сожалению,

$$\sum_{i=1}^4 x_{2i}x_{3i} = -4$$

т. е. совершена какая-то ошибка в выборе матрицы. Постараемся ее найти. Вектор-столбцы для x_1 и x_2 не вызывают сомнения. Ведь эта часть матрицы – полный факторный эксперимент 2^2 . А как построен вектор-столбец для x_3 ? Элементы этого столбца обратны по знаку элементам соседнего столбца x_2 . Два этих столбца оказались взаимосвязанными: $x_3 = -x_2$. При этом $b_3 \rightarrow \beta_3 - \beta_2$, $b_2 \rightarrow \beta_2 - \beta_3$. В таком планировании не могут быть отдельно оценены основные эффекты. Значит, мы потеряли информацию о двух линейных коэффициентах нашей модели. Таким планированием воспользоваться невозможно.

Матрица № 2 содержит всего три опыта. Три опыта недостаточны для оценки четырех коэффициентов. Кроме того, ни одно из свойств, присущих полному факторному эксперименту, здесь не выполняется, за исключением нормировки. Матрица № 3 сохраняет все свойства полного факторного эксперимента. Она дает возможность оценить свободный член b_0 и три коэффициента при линейных членах, потому что для x_3 использован вектор-столбец x_1x_2 полного факторного эксперимента 2^2 .

Если мы в дополнение к столбцам матрицы №3 вычислим еще столбцы для произведений x_1x_3 и x_2x_3 то увидим, что элементы столбца x_1x_3 совпадут с элементами столбца x_2 , а элементы столбца x_2x_3 – с элементами столбца x_1 . Найденные нами коэффициенты будут оценками для совместных эффектов

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

Такое планирование нас вполне устраивает. Мы смешали эффекты взаимодействия с основными эффектами. (Но все основные эффекты оцениваются отдельно друг от друга!) Так как постулируется линейная модель, то предполагается, что эффекты взаимодействия близки к нулю, и поэтому $b_2 \cong \beta_2$, $b_1 \cong \beta_1$, $b_3 \cong \beta_3$.

Мы рассмотрели самый простой случай: матрицу из четырех опытов для трехфакторного планирования. С увеличением числа факторов вопрос о минимизации числа опытов превращается в довольно сложную задачу. Рассмотрим ее детально.

Дробная реплика

Поставив четыре опыта для оценки влияния трех факторов, мы воспользовались половиной полного факторного эксперимента 2^3 , или «полуреplikой». Если бы мы x_3 приравняли к $-x_1x_2$, то получили бы вторую половину матрицы 2^3 . В этом случае:

$$b_2 \rightarrow \beta_2 - \beta_{13}, b_1 \rightarrow \beta_1 - \beta_{23}, b_3 \rightarrow \beta_3 - \beta_{12}.$$

При реализации обеих полуреplik можно получить отдельные оценки для линейных эффектов и эффектов взаимодействия, как и в полном факторном эксперименте 2^3 .

Объединение этих двух полуреplik и есть полный факторный -эксперимент 2^3 .

Матрица из восьми опытов для четырехфакторного планирования будет полуреplikой от полного факторного эксперимента 2^4 , а для пятифакторного планирования

— четверть-репликой от 2^5 . В последнем случае два линейных эффекта приравниваются к эффектам взаимодействия. Для обозначения дробных реплик, в которых p линейных эффектов приравнены к эффектам взаимодействия, удобно пользоваться условным обозначением 2^{k-p} . Так, полуреплика от 2^6 запишется в виде 2^{6-x} , а четверть-реплика от 2^5 — в виде 2^{5-2} .

Выбор полуреplik. Генерирующие соотношений и определяющие контрасты

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

Таблица – Две полуреplik 2^{3-1}

Номер опыта	I. $x_3 = x_1x_2$			
	x_1	x_2	x_3	$x_1x_2x_3$
1	+	+	+	+
2	–	–	+	+
3	+	–	–	+
4	–	+	–	+

Номер опыта	II. $x_3 = -x_1x_2$			
	x_1	x_2	x_3	$x_1x_2x_3$
1	+	+	–	–
2	–	–	–	–
3	+	–	+	–
4	–	+	+	–

Для произведения трех столбцов матрицы I выполняется соотношение: $+1 = x_1x_2x_3$, а матрицы II: $-1 = x_1x_2x_3$. Вы видите, что все знаки столбцов произведений одинаковы и в первом случае равны плюс единице, а во втором – минус единице.

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

$$x_1 = x_1^2 x_2 x_3 = x_2 x_3,$$

так как всегда $x_i^2 = 1$.

Для x_2 находим

$$x_2 = x_1 x_2^2 x_3 = x_1 x_3.$$

Для x_3 находим

$$x_3 = x_1 x_2 x_3^2 = x_1 x_2.$$

Это значит, что коэффициенты линейного уравнения будут оценками

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

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

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

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

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

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

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

Реплики, в которых нет ни одного главного эффекта, смешанного с другим главным эффектом или парным взаимодействием, а все парные взаимодействия смешаны друг с другом, носят название планов с разрешающей способностью IV (по наибольшему числу факторов в определяющем контрасте). Полуреплика, заданная определяющим контрастом $I = +x_1x_2x_3x_4$ имеет только четные комбинации букв в каждой строке. Ее можно записать следующим образом, считая строку (1) четной:

(1), *ad, bd, ab, ac, cd, be, abcd.*

А полуреплика, заданная $I = -x_1x_2x_3x_4$, имеет только нечетные комбинации *a, b, c, d, abd, acd, abc, bcd.*

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

Резюме

Дробные реплики находят широкое применение при получении линейных моделей. Целесообразность их применения возрастает с ростом количества факторов. При исследовании влияния 15 факторов можно в 2048 раз сократить число опытов, применяя реплику большой дробности (16 опытов вместо 32768). Эффективность применения дробных реплик зависит от удачного выбора системы смешивания линейных эффектов с эффектами взаимодействия, а также от умелой стратегии экспериментирования в случае значимости некоторых взаимодействий. Априорные сведения о взаимодействиях могут оказать большую услугу экспериментатору.

При построении дробных реплик используют следующее правило: для того чтобы сократить число опытов при введении в планирование нового фактора, нужно поместить этот фактор в вектор-столбец матрицы, принадлежащий взаимодействию, которым можно пренебречь.

Реплики, которые используются для сокращения опытов в 2^m раз, где $m=1, 2, 3, 4, \dots$, называются регулярными. Они пользуются большой популярностью, так как позволяют производить расчет коэффициентов уравнения так же просто, как и в случае полного фактор.

ПРОВЕДЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Анкета для сбора априорной информации

Постановка задачи, выбор параметров оптимизации

1. Краткое описание процесса, объекта.

2. Формулировка цели исследования (если задач несколько – проранжировать их по степени важности).

3. Выбор параметров оптимизации (откликов). Заполните следующую таблицу, включив в нее все возможные отклики

Номер отклика	Название	Размерность	Область определения	Точность	Примечание

4. Желаемый результат. Число и точность.

5. Какой результат будет считаться отличным, хорошим, удовлетворительным, неудовлетворительным.

Выбор факторов

1. Список всех «подозреваемых»: факторов, которые могут влиять на процесс.

2. Список факторов, включаемых в реальный эксперимент.

Номер фактора	Название	Размерность	Область определения	Область интереса	Точность	Примечание

3. Существуют ли возможности установления значения фактора на любом заданном уровне?

4. Сохраняются ли заданные значения уровней в течение опыта?

5. Могут ли некоторые комбинации уровней факторов привести к остановке процесса (например, взрыв, нетехнологичность и т. д.)?

Число опытов

1. Желаемое число опытов, ограничения на число опытов.

2. Желаемый срок проведения исследования.

3. Примерная длительность одного опыта.

4. Стоимость д- затраты труда при проведении одного опыта серии.

5. Желаемое число уровней для одного фактора.

6. Возможность выполнения параллельных опытов и их желаемое число.

7. Возможность проведения параллельных измерений.

8. Желаемая стратегия проведения опытов (например, по одному в день и т. д.).

Учет априорной информации

1. Условия и результаты, достигнутые при изучении аналогичных процессов.

2. Результаты предварительного эксперимента и данные (литературные и собственные) о величине ошибки эксперимента.

3. Взаимодействия факторов.

В следующем параграфе приведен конкретный пример постановки задачи, в котором использованы некоторые части этой анкеты.

Реализация плана эксперимента

К проведению опытов необходимо тщательно подготовиться, собрать опытную установку, проверить и прокалибровать приборы, подготовить исходное сырье, составить специальный журнал. Журнал заранее оформляют в соответствии с методикой и планом опытов так, чтобы была ясна последовательность действий. Первую страницу можно посвятить выбору цели исследования и параметрам оптимизации, с указанием их размерностей. Желательно перечислить все параметры, которые могут служить характеристиками процесса и указать, какая между ними существует корреляция. Если же сведения о корреляции отсутствуют, целесообразно подсчитать коэффициенты парной корреляции, проверить их значимость и выделить группу некоррелированных параметров. На второй странице перечислить факторы и поместить таблицу уровней факторов и

интервалов варьирования. Не забудьте указать единицы измерения факторов! Для матрицы планирования удобно отвести разворот журнала, чтобы имелась возможность дополнить ее до расчетной матрицы, записать повторные опыты и примечания.

Чтобы облегчить работу лаборанта и исключить ошибки при выборе условий опыта, в рабочей матрице планирования целесообразно проставлять не только кодовые значения факторов, но и натуральные.

При составлении рабочей матрицы планирования необходимо оставить место для столбцов, в которых отмечаются даты постановки опытов и фамилии лаборантов, если опыты проводят несколько человек. Имея перед собой план опытов, необходимо подсчитать количество исходного сырья и заранее его подготовить. Желательно, чтобы сырье было однородное. Если требование однородности выполнить невозможно, нужно заблаговременно определить количество различных партий сырья и соответствующим образом разбить матрицу планирования на блоки. На этом вопросе мы далее остановимся подробно. Отдельные страницы нужно отвести для расчетов, которые необходимы для определения количеств всех компонентов реакции и т. п., а также для анализа результатов эксперимента. Все расчеты должны сохраняться до окончания работы.