



Основы планирования эксперимента

СКИФ



Кафедра «Технология машиностроения»

Лекционный курс

Автор

Чукарина И.М.

Ростов-на-Дону,
2017

Аннотация

Лекционный курс предназначен для студентов (бакалавров, магистров, специалистов) обучающихся по направлению 15.04.05. «Конструкторско-технологическое обеспечение машиностроительных производств» очной и заочной форм обучения.

Автор

Чукарина Ирина Михайловна –

к.т.н., доцент каф. «Технология машиностроения»

Сфера научных интересов – виброакустические характеристики металлорежущего оборудования

ОГЛАВЛЕНИЕ

| | |
|--|----|
| ЛЕКЦИЯ 1 | 4 |
| 1.1 Классификация научных исследований. История планирования эксперимента | 4 |
| 1.2 Примеры тем научных исследований различных видов | 7 |
| 1.3 Классификация методов научных исследований | 8 |
| 1.4 Классификация эмпирических методов научных исследований | 15 |
| 1.5 Экспериментальные исследования. Сущность метода | 19 |
| 1.6 Виды экспериментов | 21 |
| 1.7 Организация и осуществление экспериментов | 23 |
| ЛЕКЦИЯ 2 | 24 |
| 2.1 Разработка программы исследований. | 24 |
| 2.2 Объекты исследований и параметры оптимизации | 28 |
| 2.3 Факторы и модели | 34 |
| ЛЕКЦИЯ 3 | 44 |
| 3.1 Разработка плана эксперимента. Определение целей и задач | 44 |
| 3.2 Выбор варьируемых факторов. Определение фактора | 48 |
| 3.3 Полный факторный эксперимент типа 2^k | 51 |
| 3.4 Дробный факторный эксперимент | 59 |
| 3.5 Подготовка эксперимента. Выбор условий проведения опытов | 66 |
| 3.6 Проведение эксперимента | 66 |
| ЛЕКЦИЯ 4 | 69 |
| 4.1 Методы обработки результатов эксперимента | 69 |
| 4.2 Метод наименьших квадратов | 72 |
| 4.3 Проверка адекватности модели | 74 |
| 4.4 Анализ результатов и принятие решений. Принятие решений после построения модели. Интерпретация результатов | 76 |

ЛЕКЦИЯ 1

1.1 Классификация научных исследований. История планирования эксперимента

Классификация научных исследований

В зависимости от характера и масштабов исследований, состояния и значимости изучаемой проблемы, круга решаемых задач, подлежащих изучению, различают следующие виды НИР:

Фундаментальные - преследующие своей целью разработку теоретических основ процессов, явлений с раскрытием их физической природы, математическим описанием, разработку новых методов анализа, измерений, создание новых видов материалов, новых видов механизмов, энергетических источников, машин и др. Фундаментальные исследования являются основой научно-технического прогресса, в значительной мере определяют пути развития прикладной науки, совершенствование и создание новых видов производств. Практическое использование крупных научных разработок, открытий обычно приводит к радикальному усовершенствованию производства, росту производительности труда, появлению новых отраслей и производств (например, производство полимеров, синтетических алмазов, синтетического каучука, развитие атомной энергетики, гелиоэнергетики, ракетной техники и космических аппаратов, новых видов транспорта и др.). Фундаментальные исследования выполняются преимущественно в академических институтах, в меньшей мере в вузах и НИИ.

Прикладные - направлены на решение конкретных задач в более ограниченные сроки и с учетом реализации их в народном хозяйстве (например, разработка и исследование технологических методов обработки, технологических процессов; изучение свойств и технологического применения новых материалов, новых конструкций оборудования и инструментов; разработка мер и методов, направленных на повышение точности, качества изделий, улучшение их эксплуатационных и товарных свойств и др.). Прикладные исследования выполняются в вузах, академических институтах, отраслевых НИИ, лабораториях крупных предприятий.

Поисковые исследования предусматривают преимущественно первичное изучение проблемы, отдельного явления, метода обработки, энергетического воздействия, характеристики материала и т.п. Как правило, продолжительность поисковых исследований относительно ограничена. Однако в отдельных случаях поисковые исследования могут вестись в течение многих лет.

Поисковые НИР подготавливают обычно следующие виды исследований: плановые и реальные. Как первые, так и вторые предусматривают исследования предварительно изученной проблемы (вопроса). Они выполняются по

Основы планирования эксперимента

предварительно разработанной программе, где достаточно четко определен круг решаемых задач и ожидаемые результаты.

Реальные исследования, помимо перечисленных характеристик решаемых задач, предусматривают практическое применение результатов исследований. Последнее наиболее характерно для НИР в области технологии машиностроения. Работа может преследовать своей целью: разработку специального вида технологического оснащения и его внедрение в производство; разработку и внедрение нового метода обработки; оптимизацию режимов обработки и их практическое освоение и т.п.

Комплексные исследования предусматривают решение широкого круга взаимосвязанных задач, например, разработку технологического процесса, специального оборудования и инструмента.

История планирования эксперимента

Планирование эксперимента (англ. experimental design techniques) — комплекс мероприятий, направленных на эффективную постановку опытов. Основная цель планирования эксперимента — достижение максимальной точности измерений при минимальном количестве проведенных опытов и сохранении статистической достоверности результатов.

Планирование эксперимента применяется при поиске оптимальных условий, построении интерполяционных формул, выборе значимых факторов, оценке и уточнении констант теоретических моделей.

Планирование эксперимента возникло в 50-х годах XX века из потребности устранить или хотя бы уменьшить систематические ошибки в сельскохозяйственных исследованиях путем рандомизации условий проведения эксперимента. Процедура планирования оказалась направленной не только на уменьшение дисперсии оцениваемых параметров, но также и на рандомизацию относительно сопутствующих, спонтанно изменяющихся и неконтролируемых переменных. В результате удалось избавиться от смещения в оценках.

С 1918 г. Р. Фишер начал свою известную серию работ на Рочемстедской агробиологической станции в Англии. В 1935 году появилась его монография «Design of Experiments», давшая название всему направлению. В 1942 году А. Кишен рассмотрел планирование эксперимента по латинским кубам, которое явилось дальнейшим развитием теории латинских квадратов. Затем Р. Фишер независимо опубликовал сведения об ортогональных гипер-греко-латинских кубах и гипер-кубах. Вскоре после этого в 1946 г. Р. Рао рассмотрел их комбинаторные свойства. Дальнейшему развитию теории латинских квадратов посвящены работы Х. Манна (1947—1950 гг.).

Первое глубокое математическое исследование блок-схемы выполнено Р. Боузом в 1939 г. Вначале была разработана теория сбалансированных неполноблочных планов (BIB-схемы). Затем Р. Бóзе, К. Нер и Р. Рао обобщили эти планы и разработали теорию частично сбалансированных неполноблочных планов (PBIB-схемы). С тех пор изучению блок-схем уделяется большое внимание как со стороны специалистов по планированию эксперимента (Ф. Йетс, Г. Кокс, В.

Основы планирования эксперимента

Кокран, В. Федерер, К. Гульден, О. Кемптгорн и другие), так и со стороны специалистов по комбинаторному анализу (Р. Бóзе, Ф. Шимамото, В. Клатсворси, С. Шрикханде, А. Гофман и др.).

Исследования Р. Фишера знаменуют начало первого этапа развития методов планирования эксперимента. Фишер разработал метод факторного планирования. Йетс предложил для этого метода простую вычислительную схему. Факторное планирование получило широкое распространение. Особенностью факторного эксперимента является необходимость ставить сразу большое число опытов.

В 1945 г. Д. Финни ввел дробные реплики от факторного эксперимента. Это позволило сократить число опытов и открыло дорогу техническим приложениям планирования. Другая возможность сокращения необходимого числа опытов была показана в 1946 г. Р. Плакеттом и Д. Берманом, которые ввели насыщенные факторные планы.

Г. Хотеллинг в 1941 г. предложил находить экстремум по экспериментальным данным с использованием степенных разложений и градиента. Следующим важным этапом было введение принципа последовательного шагового экспериментирования. Этот принцип, высказанный в 1947 г. М. Фридманом и Л. Сэвиджем, позволил распространить на экспериментальное определение экстремума — итерацию.

Чтобы построить современную теорию планирования эксперимента, не хватало одного звена — формализации объекта исследования. Это звено появилось в 1947 г. после создания Н. Винером теории кибернетики. Кибернетическое понятие «черный ящик», играет в планировании важную роль.

В 1951 г. работой американских ученых Дж. Бокса и К. Уилсона начался новый этап развития планирования эксперимента. В ней сформулирована и доведена до практических рекомендаций идея последовательного экспериментального определения оптимальных условий проведения процессов с использованием оценки коэффициентов степенных разложений методом наименьших квадратов, движение по градиенту и отыскание интерполяционного полинома в области экстремума функции отклика (почти стационарной области).

В 1954—1955 гг. Дж. Бокс, а затем П. Юл показали, что планирование эксперимента можно использовать при исследовании физико-химических процессов, если априори высказаны одна или несколько возможных гипотез. Направление получило развитие в работах Н. П. Клепикова, С. Н. Соколова и В. В. Федорова в ядерной физике.

Третий этап развития теории планирования эксперимента начался в 1957 г., когда Бокс применил свой метод в промышленности. Этот метод стал называться «эволюционным планированием». В 1958 г. Г. Шеффе предложил новый метод планирования эксперимента для изучения физико-химических диаграмм состав — свойство под названием «симплексная решетка».

Развитие теории планирование эксперимента в СССР отражено в работах В. В. Налимова, Ю. П. Адлера, Ю. В. Грановского, Е. В. Марковой, В. Б. Тихомирова.

1.2 Примеры тем научных исследований различных видов

Тематика НИР в области технологии машиностроения также является разносторонней и многоплановой. Она может отражать как исследования отдельных методов обработки, отдельных этапов (операций) технологического процесса, так и комплексные исследования технологии изготовления деталей или изделия, включая и сборочные процессы. Конкретизацию сказанного можно пояснить следующими примерами тематики НИР из области ТМс:

1. Исследование обрабатываемости алмазным выглаживанием алюминиевых сплавов в зависимости от их состава и структуры. Тема связана с освоением литых алюминиевых сплавов в производстве деталей автомобильных двигателей ЗИЛ.

2. Исследование физико-технологических свойств СОТС на формирование микрорельефа поверхности при шлифовании. Тема предусматривает совершенствование процесса шлифования деталей подшипников качения из закаленной стали ШХ-15.

3. Исследование процесса магнитно-абразивного полирования сферических поверхностей. Тема посвящена изучению технологических возможностей нового метода обработки - МАП.

4. Исследование и оценка технологичности конструкций методами математического программирования. Известно, что процесс отработки технологичности конструкций машин связан с проработкой множества вариантов, является весьма трудоемким, требующим исполнителей высокой квалификации. Применение методов математического программирования при решении такого рода задач существенно повышает эффективность работы инженера-технолога в отыскании оптимального варианта.

5. Технологическое обеспечение долговечности тяжело нагруженных элементов оснастки, изготавливаемых из твердых сплавов методами отделочно-упрочняющей обработки.

6. Пример комплексной темы исследований с охватом всего технологического цикла изготовления: "Исследование производства компрессоров домашних холодильников, методов повышения их производительности и долговечности на основе совершенствования технологических процессов".

7. Примером решения относительно узкой задачи может быть тема исследований: "Повышение эффективности операции шлифования стальных заготовок за счет подачи СОЖ (СОТС) в замороженном состоянии" или "Технологическое обеспечение точности механической обработки нежестких крупногабаритных цилиндрических деталей".

Основы планирования эксперимента

8. Оптимизация процесса многоступенчатой обработки свободными абразивами.

9. Исследование процесса виброударного упрочнения при упругом креплении детали.

10. Повышение интенсивности отделочно-упрочняющей обработки деталей поверхностным пластическим деформированием на основе применения многоконтактных виброударных инструментов.

11. Повышение эффективности отделочно-упрочняющей центробежно-ротационной обработки.

1.3 Классификация методов научных исследований

В структуре общенаучных методов и приемов чаще всего выделяют три уровня:

- методы эмпирического исследования;
- методы теоретического познания;
- общелогические методы и приемы исследования.

I. МЕТОДЫ ЭМПИРИЧЕСКОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

Наблюдение— целенаправленное пассивное изучение предметов, опирающееся в основном на данные органов чувств. В ходе наблюдения мы получаем знания не только о внешних сторонах объекта познания, но и — в качестве конечной цели — о его существенных свойствах и отношениях.

Наблюдение может быть непосредственным и опосредованным различными приборами и другими техническими устройствами. По мере развития науки оно становится все более сложным и опосредованным. Основные требования к научному наблюдению: однозначность замысла (что именно наблюдается); возможность контроля путем либо повторного наблюдения, либо с помощью других методов (например, эксперимента). Важным моментом наблюдения является интерпретация его результатов — расшифровка показаний приборов и т. п.

Эксперимент - активное и целенаправленное вмешательство в протекание изучаемого процесса, соответствующее изменение исследуемого объекта или его воспроизведение в специально созданных и контролируемых условиях, определяемых целями эксперимента, В его ходе изучаемый объект изолируется от влияния побочных, затемняющих его сущность обстоятельств и представляется в «чистом виде».

Основные особенности эксперимента: а) более активное (чем при наблюдении) отношение к объекту исследования, вплоть до его изменения и преобразования; б) возможность контроля за поведением объекта и проверки результатов; в) многократная воспроизводимость изучаемого объекта по желанию

Основы планирования эксперимента

исследователя; г) возможность обнаружения таких свойств явлений, которые не наблюдаются в естественных условиях.

Виды (типы) экспериментов весьма разнообразны. Так, по своим функциям выделяют исследовательские (поисковые), проверочные (контрольные), воспроизводящие эксперименты. По характеру объектов различают физические, химические, биологические, социальные и т. п. Существуют эксперименты качественные и количественные. Широкое распространение в современной науке получил мысленный эксперимент — система мыслительных процедур, проводимых над идеализированными объектами.

Сравнение — познавательная операция, выявляющая сходство или различие объектов (либо ступеней развития одного и того же объекта), т.е. их тождество и различия. Оно имеет смысл только в совокупности однородных предметов, образующих класс. Сравнение предметов в классе осуществляется по признакам, существенным для данного рассмотрения. При этом предметы, сравниваемые по одному признаку, могут быть несравнимы по- другому.

Сравнение является основой такого логического приема, как аналогия (см. далее), и служит исходным пунктом сравнительно-исторического метода. Его суть — выявление общего и особенного в познании различных ступеней (периодов, фаз) развития одного и того же явления или разных сосуществующих явлений.

Описание — познавательная операция, состоящая в фиксировании результатов опыта (наблюдения или эксперимента) с помощью определенных систем обозначения, принятых в науке.

5. Измерение — совокупность действий, выполняемых при помощи определенных средств с целью нахождения числового значения измеряемой величины в принятых единицах измерения.

Следует подчеркнуть, что методы эмпирического исследования никогда не реализуются «вслепую», а всегда «теоретически нагружены», направляются определенными концептуальными идеями.

2 МЕТОДЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО ПОЗНАНИЯ

1. Формализация — отображение содержательного знания в знаково-символическом виде (формализованном языке). Последний создается для точного выражения мыслей с целью исключения возможности для неоднозначного понимания. При формализации рассуждения об объектах переносятся в плоскость оперирования со знаками (формулами), что связано с построением искусственных языков (язык математики, логики, химии и т.п.).

Формализация служит основой для процессов алгоритмизации программирования вычислительных устройств, а тем самым и компьютеризации не только научно-технического, но и других форм знания.

Главное в процессе формализации состоит в том, что над формулами искусственных языков можно производить операции, получать из них новые формулы и соотношения. Тем самым операции с мыслями о предметах заменяются действиями со знаками и символами. Формализация, таким образом, есть обобщение форм различных по содержанию процессов, абстрагирование

Основы планирования эксперимента

этих форм от их содержания. Она уточняет содержание путем выявления его формы и может осуществляться с различной степенью полноты.

Но, как показал австрийский логик и математик XX в. Курт Гёдель, в содержательной теории всегда остается невыявленный неформализуемый остаток. Все более углубляющаяся формализация содержания знания никогда не достигает абсолютной полноты, ибо никогда не прекращается развитие (изменение) предмета познания и знаний о нем. Это означает, что формализация внутренне ограничена в своих возможностях. Доказано, что всеобщего метода, позволяющего любое рассуждение заменить вычислением («сосчитаем!» — мечтал Лейбниц), не существует. Теоремы Гёделя дали достаточно строгое обоснование принципиальной невозможности полной формализации научных рассуждений и научного знания в целом.

2. Аксиоматический метод — способ построения научной теории, при котором в ее основу кладутся некоторые исходные положения — аксиомы (постулаты), из которых все остальные утверждения этой теории выводятся из них чисто логическим путем, посредством доказательства. Для вывода теорем из аксиом (и вообще одних формул из других) формулируются специальные правила вывода. Следовательно, доказательство в аксиоматическом методе—это некоторая последовательность формул, каждая из которых есть либо аксиома, либо получается из предыдущих формул по какому-либо правилу вывода.

Аксиоматический метод — лишь один из методов построения уже добытого научного знания. Он имеет ограниченное применение, поскольку требует высокого уровня развития аксиоматизированной содержательной теории.

3. Гипотетико-дедуктивный метод — метод научного познания, сущность которого заключается в создании системы дедуктивно связанных между собой гипотез, из которых в конечном счете выводятся утверждения об эмпирических фактах. Тем самым этот метод основан на выведении (дедукции) заключений из гипотез и других посылок, истинностное значение которых неизвестно. А это значит, что заключение, полученное на основе данного метода, неизбежно будет иметь вероятностный характер.

Общая структура гипотетико-дедуктивного метода:

а) ознакомление с фактическим материалом, требующим теоретического объяснения и попытка такового с помощью уже существующих теорий и законов. Если нет, то:

б) выдвижение догадки (гипотезы, предположения) о причинах и закономерностях данных явлений с помощью разнообразных логических приемов;

в) оценка основательности и серьезности предположений и отбор из множества из них наиболее вероятного;

г) выведение из гипотезы (обычно дедуктивным путем) следствий с уточнением ее содержания;

д) экспериментальная проверка выведенных из гипотезы следствий. Тут гипотеза или получает экспериментальное подтверждение, или опровергается. Однако подтверждение отдельных следствий не гарантирует ее истинности (или ложности) в целом. Лучшая по результатам проверки гипотеза переходит в теорию.

Основы планирования эксперимента

Разновидностью гипотетико-дедуктивного метода можно считать математическую гипотезу, где в качестве гипотез выступают некоторые уравнения, предоставляющие модификацию ранее известных и проверенных состояний. Изменяя последние, составляют новое уравнение, выражающее гипотезу, которая относится к новым явлениям. Гипотетико-дедуктивный метод (как и аксиоматический) является не столько методом открытия, сколько способом построения и обоснования научного знания, поскольку он показывает каким именно путем можно прийти к новой гипотезе.

4. Восхождение от абстрактного к конкретному — метод теоретического исследования и изложения, состоящий в движении научной мысли от исходной абстракции («начало» — одностороннее, неполное знание) через последовательные этапы углубления и расширения познания к результату — целостному воспроизведению в теории исследуемого предмета. В качестве своей предпосылки данный метод включает в себя восхождение от чувственно-конкретного к абстрактному, к выделению в мышлении отдельных сторон предмета и их «закреплению» в соответствующих абстрактных определениях. Движение познания от чувственно-конкретного к абстрактному — это и есть движение от единичного к общему, здесь преобладают такие логические приемы, как анализ и индукция. Восхождение от абстрактного к мысленно-конкретному — это процесс движения от отдельных общих абстракций к их единству, конкретно-всеобщему, здесь господствуют приемы синтеза и дедукции. Такое движение познания — не какая-то формальная, техническая процедура, а диалектически противоречивое движение, отражающее противоречивое развитие самого предмета, его переход от одного уровня к другому в соответствии с развертыванием его внутренних противоречий.

ОБЩЕЛОГИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И ПРИЕМЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

1. Анализ - реальное или мысленное разделение объекта на составные части и синтез — их объединение в единое органическое целое, а не в механический агрегат. Результат синтеза — совершенно новое образование.

Применяя эти приемы исследования, следует иметь в виду, что, во-первых, анализ не должен упускать качество предметов. В каждой области знания есть свой предел членения объекта, за которым мы переходим в иной мир свойств и закономерностей (атом, молекула и т. п.). Во-вторых, разновидностью анализа является также разделение классов (множеств) предметов на подклассы — их классификация и периодизация. В-третьих, анализ и синтез диалектически взаимосвязаны. Но некоторые виды научной деятельности являются по преимуществу аналитическими (например, аналитическая химия) или синтетическими (например, синергетика).

2. Абстрагирование — процесс мысленного отвлечения от ряда свойств и отношений изучаемого явления с одновременным выделением интересующих исследователя свойств (прежде всего существенных, общих). В результате этого процесса получают различного рода «абстрактные предметы», которыми являются как отдельно взятые понятия и категории («белизна», «развитие»,

Основы планирования эксперимента

«противоречие», «мышление» и др.), так и их системы. Наиболее развитыми из них являются математика, логика, диалектика, философия.

Выяснение того, какие из рассматриваемых свойств являются существенными, а какие второстепенными — главный вопрос абстрагирования. Этот вопрос в каждом конкретном случае решается прежде всего в зависимости от природы изучаемого предмета, а также от конкретных задач исследования.

3. Обобщение — процесс установления общих свойств и признаков предмета, тесно связано с абстрагированием. Притом могут быть выделены любые признаки (абстрактно-общее) или существенные (конкретно-общее, закон).

4. Идеализация — мыслительная процедура, связанная с образованием абстрактных (идеализированных) объектов, принципиально не осуществимых в действительности («точка», «идеальный газ», «абсолютно черное тело» и т. п.). Данные объекты не есть «чистые фикции», а весьма сложное и очень опосредованное выражение реальных процессов. Они представляют собой некоторые предельные случаи последних, служат средством их анализа и построения теоретических представлений о них.

Идеализированный объект в конечном счете выступает как отражение реальных предметов и процессов. Образовав с помощью идеализации о такого рода объектах теоретические конструкторы, можно в дальнейшем оперировать с ними в рассуждениях как с реально существующей вещью и строить абстрактные схемы реальных процессов, служащие для более глубокого их понимания.

Теоретические утверждения, как правило, непосредственно относятся не к реальным, а к идеализированным объектам, познавательная деятельность с которыми позволяет устанавливать существенные связи и закономерности, недоступные при изучении реальных объектов, взятых во всем многообразии их эмпирических свойств и отношений.

5. Индукция — движение мысли от единичного (опыта, фактов) к общему (их обобщению в выводах) и дедукция — восхождение процесса познания от общего к единичному. Это противоположные, взаимно дополняющие ходы мысли. Поскольку опыт всегда бесконечен и неполон, то индуктивные выводы всегда имеют проблематичный (вероятностный) характер. Индуктивные обобщения обычно рассматривают как опытные истины (эмпирические законы).

Из видов индуктивных обобщений выделяют индукцию популярную, неполную, полную, научную и математическую. В логике рассматриваются также индуктивные методы установления причинных связей — каноны индукции (правила индуктивного исследования Бэкона— Милля). К ним относятся методы: единственного сходства, единственного различия, сходства и различия, сопутствующих изменений и метод остатков. Характерная особенность дедукции заключается в том, что от истинных посылок она всегда ведет к истинному, достоверному заключению, а не к вероятностному (проблематичному). Дедуктивные умозаключения позволяют из уже имеющегося знания получать новые истины, и притом с помощью чистого рассуждения, без обращения к опыту, интуиции, здравому смыслу и т.п.

6. Аналогия (соответствие, сходство) В установление сходства в некоторых сторонах, свойствах и отношениях между нетождественными объектами. На основании выявленного сходства делается соответствующий вывод —

Основы планирования эксперимента

умозаключение по аналогии. Его общая схема: объект В обладает признаками а, b, с, d; объект С обладает признаками b, с, d; следовательно, объект С, возможно, обладает признаком а. Тем самым аналогия дает не достоверное, а вероятное знание. При выводе по аналогии знание, полученное из рассмотрения какого-либо объекта («модели»), переносится на другой, менее изученный и менее доступный для исследования объект.

7. Моделирование — метод исследования определенных объектов путем воспроизведения их характеристик на другом объекте — модели, которая представляет собой аналог того или иного фрагмента действительности (вещного или мыслительного) — оригинала модели. Между моделью и объектом, интересующим исследователя, должно существовать известное подобие (сходство) — в физических характеристиках, структуре, функциях и др.

Формы моделирования весьма разнообразны и зависят от используемых моделей и сферы применения моделирования. По характеру моделей выделяют материальное (предметное) и идеальное моделирование, выраженное в соответствующей знаковой форме. Материальные модели являются природными объектами, подчиняющимися в своем функционировании естественным законам физики, механики и т. п. При материальном (предметном) моделировании конкретного объекта его изучение заменяется исследованием некоторой модели, имеющей ту же физическую природу, что и оригинал (модели самолетов, кораблей, космических аппаратов и т. п.).

При идеальном (знаковом) моделировании модели выступают в виде графиков, чертежей, формул, систем уравнений, предложений естественного и искусственного (символы) языка и т. п. В настоящее время широкое распространение получило математическое (компьютерное) моделирование.

8. Системный подход — совокупность общенаучных методологических принципов (требований), в основе которых лежит рассмотрение объектов как систем. К числу этих требований относятся: а) выявление зависимости каждого элемента от его места и функций в системе с учетом того, что свойства целого несводимы к сумме свойств его элементов; б) анализ того, насколько поведение системы обусловлено как особенностями ее отдельных элементов, так и свойствами ее структуры; в) исследование механизма взаимодействия системы и среды; г) изучение характера иерархичности, присущей данной системе; д) обеспечение всестороннего многоаспектного описания системы; е) рассмотрение системы как динамичной, развивающейся целостности.

Специфика системного подхода определяется тем, что он ориентирует исследование на раскрытие целостности развивающегося объекта и обеспечивающих ее механизмов, на выявление многообразных типов связей сложного объекта и сведение их в единую теоретическую картину.

Важным понятием системного подхода является понятие «самоорганизация». Данное понятие характеризует процесс создания, воспроизведения или совершенствования организации сложной, открытой, динамичной, саморазвивающейся системы, связи между элементами которой имеют не жесткий, а вероятностный характер (живая клетка, организм, биологическая популяция, человеческий коллектив и т. п.).

Основы планирования эксперимента

В современной науке самоорганизующиеся системы являются специальным предметом исследования синергетики, общенаучной теории самоорганизации, ориентированной на поиск законов любой природы — природных, социальных, когнитивных (познавательных).

9. Структурно-функциональный (структурный) метод строится на основе выделения в целостных системах их структуры - совокупности устойчивых отношений и взаимосвязей между ее элементами и их роли (функций) относительно друг друга.

Структура понимается как нечто инвариантное (неизменное) при определенных преобразованиях, а функция как «назначение» каждого из элементов данной системы (функции какого-либо биологического органа, функции государства, функции теории и т. д.).

Основные требования (процедуры) структурно-функционального метода (который часто рассматривается как разновидность системного подхода):

- а) изучение строения, структуры системного объекта;
- б) исследование его элементов и их функциональных характеристик;
- в) анализ изменения этих элементов и их функций;
- г) рассмотрение развития (истории) системного объекта в целом;

д) представление объекта как гармонически функционирующей системы, все элементы которой «работают» на поддержание этой гармонии.

10 Вероятностно-статистические методы основаны на учете действия множества случайных факторов, которые характеризуются устойчивой частотой. Это и позволяет вскрыть необходимость (закон) через совокупное действие множества случайностей. Названные методы опираются на теорию вероятностей, которую зачастую насыплют наукой о случайном.

Вероятность - количественная мера (степень) возможности появления некоторого явления, события при определенных условиях. Диапазон вероятности — от нуля (невозможность) до единицы (действительность). Указанные методы основаны на различении динамических и статистических законов по такому критерию (основанию), как характер вытекающих из них предсказаний. В законах динамического типа предсказания имеют точно определенный однозначный характер (например, в классической механике).

В статистических законах предсказания носят не достоверный, а лишь вероятностный характер, который обусловлен действием множества случайных факторов, через сложное переплетение которых и выражается необходимость. Как показала история научного познания, «мы лишь теперь начинаем по достоинству оценивать значение всего круга проблем, связанных с необходимостью и случайностью».

Вероятностно-статистические методы широко применяются при изучении массовых, а не отдельных явлений случайного характера (квантовая механика, статистическая физика, синергетика, социология и др.). Сегодня все чаще говорят о проникновении в науку вероятностного стиля мышления.

1.4 Классификация эмпирических методов научных исследований

Методы эмпирического исследования: наблюдение, эксперимент, сравнение, измерение.

Эмпирическое знание— это совокупность высказываний о реальных, эмпирических объектах. Эмпирическое знание основывается на чувственном познании. Рациональный момент и его формы (суждения, понятия и др.) здесь присутствуют, но имеют подчиненное значение. Поэтому исследуемый объект отражается преимущественно со стороны своих внешних связей и проявлений, доступных созерцанию и выражающих внутренние отношения. Эмпирическое, опытное исследование направлено без промежуточных звеньев на свой объект. Оно осваивает его с помощью таких приемов и средств, как описание, сравнение, измерение, наблюдение, эксперимент, анализ, индукция (от частного к общему), а его важнейшим элементом является факт (от лат. *factum* — сделанное, свершившееся).

Наблюдение — это преднамеренное и направленное восприятие объекта познания с целью получить информацию о его форме, свойствах и отношениях. Процесс наблюдения не является пассивным созерцанием. Это активная, направленная форма гносеологического отношения субъекта по отношению к объекту, усиленная дополнительными средствами наблюдения, фиксации информации и ее трансляции. К наблюдению предъявляются требования: цель наблюдения; выбор методики; план наблюдения; контроль за корректностью и надежностью полученных результатов; обработка, осмысление и интерпретация полученной информации.

Сравнение представляет собой метод сопоставления объектов с целью выявления сходства или различия между ними. Если объекты сравниваются с объектом, выступающим в качестве эталона, то такое называется сравнение измерением.

Это один из наиболее распространенных и универсальных методов исследования. Известный афоризм "все познается в сравнении" — лучшее тому доказательство.

Сравнение - это соотношение между двумя целыми числами a и b , означающие, что разность $(a - b)$ этих чисел делится на заданное целое число t , называемое модулем C ; пишется $a = b \pmod{t}$ [5.5].

В исследовании сравнением называется установление сходства и различия предметов и явлений действительности. В результате сравнения устанавливается то общее, что присуще двум или нескольким объектам, а выявление общего, повторяющегося в явлениях, как известно, есть ступень на пути к познанию закона.

Для того чтобы сравнение было плодотворным, оно должно удовлетворять двум основным требованиям.

- Сравняться должны лишь такие явления, между которыми может существовать определенная объективная общность. Нельзя сравнивать

Основы планирования эксперимента

заведомо несравнимые вещи, — это ничего не дает. В лучшем случае здесь можно только к поверхностным и потому бесплодным аналогиям.

- Сравнение должно осуществляться по наиболее важным признакам. Сравнение по несущественным признакам может легко привести к заблуждению.

Так, формально сравнивая работу предприятий, выпускающих один и тот же вид продукции, можно найти в их деятельности много общего. Если при этом будет упущено сравнение по таким важнейшим параметрам, как уровень производства, себестоимость продукции, различные условия, в которых функционируют сравниваемые предприятия, то легко прийти к методологической ошибке, ведущей к односторонним выводам. Если же учесть эти параметры, то станет ясным, в чем причина и где кроются действительные истоки методологической ошибки. Такое сравнение уже даст истинное, соответствующее реальному положению дел представление о рассматриваемых явлениях.

Различные интересующие исследователя объекты могут сравниваться непосредственно или опосредованно — через сравнение их с каким-либо третьим объектом. В первом случае обычно получают качественные результаты (больше — меньше; светлее — темнее; выше — ниже и т.д.). Однако уже при таком сравнении можно получить простейшие количественные характеристики, выражающие в числовой форме количественные различия между объектами (больше в 2 раза, выше в 3 раза и т.п.).

Когда же объекты сравниваются с каким-либо третьим объектом, выступающим в качестве эталона, количественные характеристики приобретают особую ценность, поскольку они описывают объекты безотносительно друг к другу, дают более глубокое и подробное знание о них (например, знать, что один автомобиль весит 1 т, а другой — 5 т, — это значит знать о них значительно больше того, что заключено в предложении: "первый автомобиль легче второго в 5 раз". Такое сравнение называется измерением. Оно будет подробно рассмотрено ниже.

С помощью сравнения информация об объекте может быть получена двумя различными путями.

Во-первых, она очень часто выступает в качестве непосредственного результата сравнения. Например, установление каких-либо соотношений между объектами, обнаружение различия или сходства между ними есть информация, получаемая непосредственно при сравнении. Эту информацию можно назвать первичной.

Во-вторых, очень часто получение первичной информации не выступает в качестве главной цели сравнения, этой целью является получение вторичной или производной информации, являющейся результатом обработки первичных данных. Наиболее распространенным и наиболее важным способом такой обработки является умозаключение по аналогии. Это умозаключение было обнаружено и исследовано (под названием "парадегма") еще Аристотелем.

Сущность его сводится к следующему: если из двух объектов в результате сравнения обнаружено несколько одинаковых признаков, но у одного из них найден дополнительно еще какой-то признак, то предполагается, что этот признак должен быть присущ также и другому объекту. Коротко ход умозаключения по аналогии можно представить следующим образом:

Основы планирования эксперимента

А имеет признаки $X_1, X_2, X_3, \dots, X_n, X_{n+1}, \dots$

Б имеет признаки $X_1, X_2, X_3, \dots, X_n$.

Вывод: "Вероятно, Б имеет признак X_{n+1} ". Вывод на основе аналогии носит вероятностный характер, он может привести не только к истине, но и к заблуждению. Для того чтобы увеличить вероятность получения истинного знания об объекте, нужно иметь в виду следующее:

- умозаключение по аналогии дает тем более истинное значение, чем больше сходных признаков мы обнаружим у сравниваемых объектов;

- истинность вывода по аналогии находится в прямой зависимости от существенности сходных черт объектов, даже большое количество сходных, но не существенных признаков, может привести к ложному выводу;

- чем глубже взаимосвязь обнаруженных у объекта признаков, тем выше вероятность ложного вывода;

- общее сходство двух объектов не является основанием для умозаключения по аналогии, если у того из них, относительно которого делается вывод, есть признак, несовместимый с переносимым признаком. Иначе говоря, для получения истинного вывода надо учитывать не только характер сходства, но и характер различия объектов.

Измерение исторически развивалось из операции сравнения, являющейся э основой. Однако в отличие от сравнения, измерение является более мощным и универсальным познавательным средством.

Измерение— совокупность действий, выполняемых при помощи средств измерений с целью нахождения числового значения измеряемой величины в принятых единицах измерения. Различают прямые измерения (например, измерение длины проградуированной линейкой) и косвенные измерения, основанные на известной зависимости между искомой величиной и непосредственно измеряемыми величинами .

Измерение предполагает наличие следующих основных элементов:

- объекта измерения;

- единицы измерения, т.е. эталонного объекта;

- измерительного прибора (приборов);

- метода измерения;

- наблюдателя (исследователя).

При прямом измерении результат получается непосредственно из самого процесса измерения (например, в спортивных соревнованиях измерение длины прыжка при помощи рулетки, измерение длины ковровых покрытий в магазине и т.п.).

При косвенном измерении искомая величина определяется математическим путем на основе знания других величин, полученных прямым измерением. Например, зная размер и вес строительного кирпича, можно измерить удельное давление (при соответствующих расчетах), которое должен выдержать кирпич при строительстве многоэтажных домов.

Ценность измерений видна уже хотя бы из того, что они дают точные, количественно определенные сведения об окружающей действительности. В результате измерений могут быть установлены такие факты, сделаны такие эмпирические открытия, которые приводят к коренной ломке устоявшихся в науке

Основы планирования эксперимента

представлений. Это касается в первую очередь уникальных, выдающихся измерений, представляющих собой очень важные вехи в истории науки. Подобную роль сыграли в развитии физики, например, знаменитые измерения А. Майкельсоном скорости света.

Важнейшим показателем качества измерения, его научной ценности является точность. Именно высокая точность измерений Т. Браге, помноженная на необыкновенное трудолюбие И. Кеплера (свои вычисления он повторил 70 раз), позволила установить точные законы движения планет. Практика показывает, что главными путями повышения точности измерений нужно считать:

совершенствование качества измерительных приборов, действующих на основе некоторых утвердившихся принципов;

создание приборов, действующих на основе новейших научных открытий. Например, сейчас время измеряется при помощи молекулярных генераторов с точностью до 11-го знака.

В числе эмпирических методов исследования измерение занимает примерно такое же место, как наблюдение и сравнение. Оно представляет собой сравнительно элементарный метод, одну из составных частей эксперимента - наиболее сложного и значимого метода эмпирического исследования.

Эксперимент

Эксперимент — исследование каких-либо явлений путем активного воздействия на них при помощи создания новых условий, соответствующих целям исследования, или же через изменение течения процесса в нужном направлении. Это наиболее сложный и эффективный метод эмпирического исследования. Он предполагает использование наиболее простых эмпирических методов — наблюдения, сравнения и измерения. Однако сущность его не в особой сложности, "синтетичности", а в целенаправленном, преднамеренном преобразовании исследуемых явлений, во вмешательстве экспериментатора в соответствии с его целями в течение естественных процессов.

Следует отметить, что утверждение экспериментального метода в науке - это длительный процесс, протекавший в острой борьбе передовых ученых Нового времени против античного умозрения и средневековой схоластики. (Например, английский философ-материалист Ф. Бэкон одним из первых выступил против эксперимента в науке, хотя ратовал за опыт.)

Основателем экспериментальной науки по праву считается Галилео Галилей (1564—1642), считавший основой познания опыт. Его некоторые исследования — основа современной механики: он установил законы инерции, свободного падения и движения тел по наклонной плоскости, сложения движений, открыл изохронность колебания маятника. Он сам построил телескоп с 32-кратным увеличением и открыл горы на Луне, четыре спутника Юпитера, фазы у Венеры, пятна на Солнце. В 1657 г., после его смерти, возникла Флорентийская академия опыта, работавшая по его предначертаниям и ставившая своей целью проведение прежде всего экспериментальных исследований. Научный и технический прогресс требует все более широкого применения эксперимента. Что же касается современной науки, то без эксперимента ее развитие просто немислимо. В настоящее время экспериментальное исследование стало

Основы планирования эксперимента

настолько важным, что рассматривается как одна из основных форм практической деятельности исследователей.

Преимущества эксперимента по сравнению с наблюдением

1. В ходе эксперимента становится возможным изучение того или иного явления в "чистом" виде. Это означает, что всякого рода "юбочные" факторы, затемняющие основной процесс, могут быть устранены, и исследователь получает точное знание именно об интересующем нас явлении.

2. Эксперимент позволяет исследовать свойства объектов действительности в экстремальных условиях:

при сверхнизких и сверхвысоких температурах;

при высочайших давлениях;

при огромных напряженностях электрических и магнитных полей и т.п.

Работа в этих условиях может привести к обнаружению самых неожиданных и удивительных свойств у обыкновенных вещей и тем самым позволяет значительно глубже проникнуть в их сущность. Примером такого рода "странных" явлений, открытых в экстремальных условиях, касающихся области управления, может служить сверхпроводимость.

3. Важнейшее достоинство эксперимента — его повторяемость. В процессе эксперимента необходимые наблюдения, сравнения и измерения могут быть проведены, как правило, столько раз, сколько нужно для получения достоверных данных. Эта особенность экспериментального метода делает его весьма ценным при исследовании.

Наиболее подробно все достоинства эксперимента будут рассмотрены ниже, при изложении некоторых специфических видов эксперимента.

Ситуации, требующие экспериментального исследования

Ситуация, когда необходимо обнаружить у объекта неизвестные ранее свойства. Результатом такого эксперимента являются утверждения, не вытекающие из имевшегося знания об объекте.

Классический пример — опыт Э. Резерфорда по рассеянию α -частиц, в результате которого была установлена планетарная структура атома. Подобные эксперименты называются исследовательскими.

Ситуация, когда необходимо проверить правильность тех или иных утверждений или теоретических построений.

1.5 Экспериментальные исследования. Сущность метода

Задачи и виды экспериментов

Наука — сфера исследовательской деятельности, направленная на получение новых знаний о природе, обществе и мышлении. В настоящее время развитие науки связано с разделением и кооперацией научного труда, созданием научных учреждений, экспериментального и лабораторного оборудования.

Эксперимент в ходе развития науки выступал мощным средством исследования явлений природы и технических объектов. Но лишь сравнительно недавно он стал предметом исследования. Пристальное внимание ученых и

Основы планирования эксперимента

инженеров к тому, как лучше и эффективней проводить эксперимент, возникло не случайно, а является следствием достигнутого уровня и масштаба экспериментальных работ на современном этапе развития науки и техники. Этот этап с рассматриваемой точки зрения характеризуется ростом общего числа проводимых экспериментальных работ; увеличением количества специалистов, занимающихся экспериментальной деятельностью; существенным усложнением объектов исследования и используемого экспериментального оборудования; тенденцией к удлинению среднего времени экспериментирования и удорожанию исследований; начавшаяся процессом внедрения средств и систем автоматизации эксперимента.

Известно, что новая наука может возникнуть, если существует объективная необходимость ее появления и имеется предмет новой науки, представляющий общенаучный интерес. Сказанное в полной мере относится и к теории планирования эксперимента. Предмет исследования этого научного направления – эксперимент. Однако особенности планирования, постановки эксперимента рассматриваются и в физике, и в химии, и в прикладных науках. Для того, чтобы эксперимент стал предметом исследования отдельного научного направления, необходимо, чтобы он характеризовался некоторыми чертами, общими для любого эксперимента независимо от того, в какой конкретной области знаний эксперимент проводится. Такими общими чертами эксперимента является необходимость:

- 1) контролировать любой эксперимент, т.е. исключать влияние внешних переменных, не принятых исследователем по тем или иным причинам к рассмотрению;
- 2) определять точность измерительных приборов и получаемых данных;
- 3) уменьшать до разумных пределов число переменных в эксперименте;
- 4) составлять план проведения эксперимента, наилучший с той или иной точки зрения;
- 5) проверять правильность полученных результатов и их точность;
- 6) выбирать способ обработки экспериментальных данных и форму представления результатов;
- 7) анализировать полученные результаты и давать их интерпретацию в терминах той области, где эксперимент проводится.

Как и в любом сформировавшемся научном направлении, в теории планирования эксперимента выработалась определенная система основополагающих понятий и терминов. Приведем наиболее важные из них.

Объект исследования есть носитель некоторых неизвестных и подлежащих изучению свойств и качеств.

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

Принципы, положенные в основу теории планирования эксперимента, направлены на повышение эффективности экспериментирования, т.е.

- стремление к минимизации общего числа опытов;
- одновременное варьирование всеми переменными, определяющими процесс, по специальным правилам – алгоритмам;

Основы планирования эксперимента

- использование математического аппарата, формализующего многие действия экспериментатора;

- выбор четкой стратегии, позволяющей принимать обоснованное решение после каждой серии экспериментов.

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

Поиск оптимальных условий, построение интерполяционных формул, выбор существенных факторов, оценка и уточнение констант теоретических моделей, выбор наиболее приемлемых из некоторого множества гипотез о механизме явлений, исследование диаграмм – свойство – вот примеры задач, при решении которых применяется планирование эксперимента. Можно сказать, что там, где имеет место эксперимент, есть и наука о его проведении – планирование эксперимента.

Основной целью эксперимента являются выявление свойств исследуемых объектов, проверка справедливости гипотез и на этой основе широкое и глубокое изучение темы научного исследования.

1.6 Виды экспериментов

Основной целью эксперимента являются выявление свойств исследуемых объектов, проверка справедливости гипотез и на этой основе широкое и глубокое изучение темы научного исследования.

Постановка и организация эксперимента определяют его назначение. Эксперименты, которые проводятся в различных отраслях науки, являются химическими, биологическими, физическими, психологическими, социальными и т.д.

Они различаются:

По способу формирования условий:- естественные;- искусственные.

По целям исследования:- преобразующие;- констатирующие;- контролирующие;- поисковые;- решающие.

По организации проведения:- лабораторные;- натурные;- полевые;- производственные и т.д.

По структуре изучаемых объектов и явлений:- простые;- сложные.

По характеру внешних воздействий на объект исследования:- вещественные;- энергетические;- информационные.

По характеру взаимодействия средства экспериментального исследования с объектом исследования:- обычный;- модельный.

По типу моделей, исследуемых в эксперименте:- материальный;- мысленный.

По контролируемым величинам:- пассивный;- активный

По числу варьируемых факторов:- однофакторный;- многофакторный.

По характеру изучаемых объектов или явлений:- технологические;- социометрические.

Конечно, для классификации могут быть использованы и другие признаки.

Основы планирования эксперимента

Для проведения эксперимента любого типа необходимо: разработать гипотезу, подлежащую проверке; создать программы экспериментальных работ; определить способы и приемы вмешательства в объект исследования; обеспечить условия для осуществления процедуры экспериментальных работ; определить способы и приемы вмешательства в объект исследования; обеспечить условия для осуществления процедуры экспериментальных работ; разработать пути и приемы фиксирования хода и результатов эксперимента (приборы, установки, модели и т.п.); обеспечить эксперимент необходимым обслуживающим персоналом.

Различают эксперименты естественные и лабораторные.

Естественный (неконтролируемый) эксперимент – разновидность полевого эксперимента, в которой исследователь заранее не выбирает и не подготавливает независимую переменную (экспериментальный фактор) и не вмешивается в ход событий. Такой вид эксперимента обладает тем преимуществом, что момент искусственности в нем сведен до минимума, а если подготовка к нему проведена тщательно и продуманно, то чистота и достоверность выводов, полученных в результате его проведения, обладает высокой степенью достоверности.

Лабораторные эксперименты проводят с применением специальных моделирующих систем и установок, стендов, а также измерительных приборов и других способов изучения. Эти исследования позволяют наиболее полно и доброкачественно, с требуемой повторяемостью изучить влияние одних характеристик при варьировании других. В теории организационного управления лабораторные эксперименты — это, как правило, вычислительные эксперименты, состоящие в проведении на вычислительных комплексах или системах экспериментов с математическими и имитационными моделями, описывающими поведение сложных процессов и систем в течение заданного периода времени. Однако такие эксперименты не всегда полностью моделируют реальный ход изучаемого процесса, поэтому возникает потребность в проведении производственного эксперимента.

Полигонный эксперимент проходит на специально отведенном государством и оборудованном участке местности, воздушной или морской поверхности (участок суши, неба или моря), который предназначен для испытаний автомобилей, различных типов вооружения, военной техники, гражданской авиации, специальных машин и др.

Производственные экспериментальные исследования имеют целью изучить процесс в реальных условиях с учетом воздействия различных случайных факторов производственной среды.

Одной из разновидностей производственных экспериментов является собирание материалов в организациях, которые накапливают по стандартным формам те или иные данные. Ценность этих материалов заключается в том, что они систематизированы за многие годы по единой методике. Такие данные хорошо поддаются обработке методами статистики и теории вероятностей.

В ряде случаев производственный эксперимент эффективно проводить методом анкетирования. Для изучаемого процесса составляют тщательно

Основы планирования эксперимента

продуманную методику. Основные данные собирают методом опроса производственных организаций по предварительно составленной анкете. Этот метод позволяет собрать очень большое количество данных наблюдений или измерений по изучаемому вопросу. Однако к результатам анкетных данных следует относиться с особой тщательностью, поскольку они не всегда содержат достаточно достоверные сведения.

Иногда возникает необходимость провести поисковые экспериментальные исследования. Они необходимы в том случае, если затруднительно классифицировать все факторы, влияющие на изучаемое явление вследствие отсутствия достаточных предварительных данных. На основе предварительного эксперимента строится программа исследований в полном объеме.

В зависимости от темы научного исследования объем экспериментов может быть разным. В лучшем случае для подтверждения рабочей гипотезы достаточно лабораторного эксперимента, но иногда приходится проводить серию экспериментальных исследований: предварительных (поисковых), лабораторных, полигонных на эксплуатируемом объекте.

В ряде случаев на эксперимент затрачивается большое количество средств. Научный работник производит огромное количество наблюдений и измерений, получает множество диаграмм, графиков, выполняет неоправданно большое количество испытаний.

1.7 Организация и осуществление экспериментов

Под экспериментом будем понимать совокупность операций совершаемых над объектом исследования с целью получения информации о его свойствах. Эксперимент, в котором исследователь по своему усмотрению может изменять условия его проведения, называется активным экспериментом. Если исследователь не может самостоятельно изменять условия его проведения, а лишь регистрирует их, то это пассивный эксперимент.

К основным этапам планирования эксперимента относятся:

1. Установление цели эксперимента – постановка целей и задач проведения эксперимента;
2. Уточнение условий проведения эксперимента – выбор оборудования, сроков работ, способа проведения эксперимента и т.п.;
3. Выбор входных и выходных параметров – выбор зависимой измеряемой переменной, определение случайных и детерминированных независимых переменных;
4. Установление необходимой точности результатов измерений – выбор компромисса между минимальным числом испытаний и статистической достоверностью получаемых результатов;
5. Составление плана и проведение эксперимента – количество и порядок испытаний, задание совокупности значений задаваемых переменных-факторов и их взаимодействий в эксперименте;

Основы планирования эксперимента

6. Статистическая обработка результатов эксперимента – применение методов математической статистики для обработки результатов, построение математической модели эксперимента;
7. Формулирование выводов.

ЛЕКЦИЯ 2

2.1 Разработка программы исследований.

Основные понятия планирования эксперимента. Общие требования к плану эксперимента. Критерии планирования эксперимента.

Планирование эксперимента (англ. *experimental design techniques*) — комплекс мероприятий, направленных на эффективную постановку опытов.

Основная цель планирования эксперимента — достижение максимальной точности измерений при минимальном количестве проведенных опытов и сохранении статистической достоверности результатов. Планирование эксперимента применяется при поиске оптимальных условий, построении интерполяционных формул, выборе значимых факторов, оценке и уточнении констант теоретических моделей и др.

Раскроем сущность каждого из этапов планирования эксперимента.

1. Установление цели эксперимента (определение характеристик, свойств и т. п.) и его вида (определяющие, контрольные, сравнительные, исследовательские).

2. Уточнение условий проведения эксперимента (имеющееся или доступное оборудование, сроки работ, финансовые ресурсы, численность и кадровый состав работников и т. п.). Выбор вида испытаний (нормальные, ускоренные, сокращенные в условиях лаборатории, на стенде, полигонные, натурные или эксплуатационные).

3. Выявление и выбор входных и выходных параметров на основе сбора и анализа предварительной (априорной) информации. Входные параметры (факторы) могут быть детерминированными, то есть регистрируемыми и управляемыми (зависимыми от наблюдателя), и случайными, то есть регистрируемыми, но неуправляемыми. Наряду с ними на состояние исследуемого объекта могут оказывать влияние нерегистрируемые и неуправляемые параметры, которые вносят систематическую или случайную погрешность в результаты измерений. Это — ошибки измерительного оборудования, изменение свойств исследуемого объекта в период эксперимента, например, из-за старения материала или его износа, воздействие персонала и т. д.

4. Установление потребной точности результатов измерений (выходных параметров), области возможного изменения входных параметров, уточнение видов воздействий. Выбирается вид образцов или исследуемых объектов, учитывая степень их соответствия реальному изделию по состоянию, устройству,

Основы планирования эксперимента

форме, размерам и другим характеристикам. На назначение степени точности влияют условия изготовления и эксплуатации объекта, при создании которого будут использоваться эти экспериментальные данные. Условия изготовления, то есть возможности производства, ограничивают наивысшую реально достижимую точность. Условия эксплуатации, то есть условия обеспечения нормальной работы объекта, определяют минимальные требования к точности. Точность экспериментальных данных также существенно зависит от объёма (числа) испытаний — чем испытаний больше, тем (при тех же условиях) выше достоверность результатов. Для ряда случаев (при небольшом числе факторов и известном законе их распределения) можно заранее рассчитать минимально необходимое число испытаний, проведение которых позволит получить результаты с требуемой точностью.

5. Составление плана и проведение эксперимента — количество и порядок испытаний, способ сбора, хранения и документирования данных. Порядок проведения испытаний важен, если входные параметры (факторы) при исследовании одного и того же объекта в течение одного опыта принимают разные значения. Например, при испытании на усталость при ступенчатом изменении уровня нагрузки предел выносливости зависит от последовательности нагружения, так как по-разному идет накопление повреждений, и, следовательно, будет разная величина предела выносливости. В ряде случаев, когда систематически действующие параметры сложно учесть и проконтролировать, их преобразуют в случайные, специально предусматривая случайный порядок проведения испытаний (рандомизация эксперимента). Это позволяет применять к анализу результатов методы математической теории статистики. Порядок испытаний также важен в процессе поисковых исследований: в зависимости от выбранной последовательности действий при экспериментальном поиске оптимального соотношения параметров объекта или какого-то процесса может потребоваться больше или меньше опытов. Эти экспериментальные задачи подобны математическим задачам численного поиска оптимальных решений. Наиболее хорошо разработаны методы одномерного поиска (однофакторные однокритериальные задачи), такие как метод Фибоначчи, метод золотого сечения.

6. Статистическая обработка результатов эксперимента, построение математической модели поведения исследуемых характеристик. Необходимость обработки вызвана тем, что выборочный анализ отдельных данных, вне связи с остальными результатами, или же некорректная их обработка могут не только снизить ценность практических рекомендаций, но и привести к ошибочным выводам. Обработка результатов включает: определение доверительного интервала среднего значения и дисперсии (или среднего квадратичного отклонения) величин выходных параметров (экспериментальных данных) для заданной статистической надежности; проверка на отсутствие ошибочных значений (выбросов), с целью исключения сомнительных результатов из дальнейшего анализа. Проводится на соответствие одному из специальных критериев, выбор которого зависит от закона распределения случайной величины и вида выброса; проверка соответствия опытных данных ранее априорно введенному закону распределения. В зависимости от этого подтверждаются выбранный план эксперимента и методы обработки результатов, уточняется

Основы планирования эксперимента

выбор математической модели. Построение математической модели выполняется в случаях, когда должны быть получены количественные характеристики взаимосвязанных входных и выходных исследуемых параметров. Это — задачи аппроксимации, то есть выбора математической зависимости, наилучшим образом соответствующей экспериментальным данным. Для этих целей применяют регрессионные модели, которые основаны на разложении искомой функции в ряд с удержанием одного (линейная зависимость, линия регрессии) или нескольких (нелинейные зависимости) членов разложения (ряды Фурье, Тейлора). Одним из методов подбора линии регрессии является широко распространенный метод наименьших квадратов. Для оценки степени взаимосвязанности факторов или выходных параметров проводят корреляционный анализ результатов испытаний. В качестве меры взаимосвязанности используют коэффициент корреляции: для независимых или нелинейно зависимых случайных величин он равен или близок к нулю, а его близость к единице свидетельствует о полной взаимосвязанности величин и наличии между ними линейной зависимости. При обработке или использовании экспериментальных данных, представленных в табличном виде, возникает потребность получения промежуточных значений. Для этого применяют методы линейной и нелинейной (полиномиальной) интерполяции (определение промежуточных значений) и экстраполяции (определение значений, лежащих вне интервала изменения данных).

7. Объяснение полученных результатов и формулирование рекомендаций по их использованию, уточнению методики проведения эксперимента. Снижение трудоемкости и сокращение сроков испытаний достигается применением автоматизированных экспериментальных комплексов. Такой комплекс включает испытательные стенды с автоматизированной установкой режимов (позволяет имитировать реальные режимы работы), автоматически обрабатывает результаты, ведет статистический анализ и документирует исследования. Но велика и ответственность инженера в этих исследованиях: четкие поставленные цели испытаний и правильно принятое решение позволяют точно найти слабое место изделия, сократить затраты на доводку и итерационность процесса проектирования. од экспериментом будем понимать совокупность операций, совершаемых над объектом исследования с целью получения информации о его свойствах. Эксперимент, в котором исследователь по своему усмотрению может изменять условия его проведения, называется активным экспериментом. Если исследователь не может самостоятельно изменять условия его проведения, а лишь регистрирует их, то это пассивный эксперимент. Важнейшей задачей методов обработки полученной в ходе эксперимента информации является задача построения математической модели изучаемого явления, процесса, объекта. Ее можно использовать и при анализе процессов и при проектировании объектов. Можно получить хорошо аппроксимирующую математическую модель, если целенаправленно применяется активный эксперимент. Другой задачей обработки полученной в ходе эксперимента информации является задача оптимизации, т.е. нахождения такой комбинации влияющих независимых переменных, при которой выбранный показатель оптимальности принимает экстремальное значение.

Основы планирования эксперимента

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

Планирование эксперимента – выбор плана эксперимента, удовлетворяющего заданным требованиям, совокупность действий направленных на разработку стратегии экспериментирования (от получения априорной информации до получения работоспособной математической модели или определения оптимальных условий). Это целенаправленное управление экспериментом, реализуемое в условиях неполного знания механизма изучаемого явления. В процессе измерений, последующей обработки данных, а также формализации результатов в виде математической модели, возникают погрешности и теряется часть информации, содержащейся в исходных данных. Применение методов планирования эксперимента позволяет определить погрешность математической модели и судить о ее адекватности. Если точность модели оказывается недостаточной, то применение методов планирования эксперимента позволяет модернизировать математическую модель с проведением дополнительных опытов без потери предыдущей информации и с минимальными затратами.

Цель планирования эксперимента – нахождение таких условий и правил проведения опытов при которых удастся получить надежную и достоверную информацию об объекте с наименьшей затратой труда, а также представить эту информацию в компактной и удобной форме с количественной оценкой точности. Пусть интересующее нас свойство (Y) объекта зависит от нескольких (n) независимых переменных (X_1, X_2, \dots, X_n) и мы хотим выяснить характер этой зависимости - $Y=F(X_1, X_2, \dots, X_n)$, о которой мы имеем лишь общее представление. Величина Y – называется “отклик”, а сама зависимость $Y=F(X_1, X_2, \dots, X_n)$ – “функция отклика”. Отклик должен быть определен количественно. Однако могут встречаться и качественные признаки Y . В этом случае возможно применение рангового подхода. Пример рангового подхода - оценка на экзамене, когда одним числом оценивается сложный комплекс полученных сведений о знаниях студента. Независимые переменные X_1, X_2, \dots, X_n – иначе факторы, также должны иметь количественную оценку. Если используются качественные факторы, то каждому их уровню должно быть присвоено какое-либо число. Важно выбирать в качестве факторов лишь независимые переменные, т.е. только те которые можно изменять, не затрагивая другие факторы. Факторы должны быть однозначными. Для построения эффективной математической модели целесообразно провести предварительный анализ значимости факторов (степени влияния на функцию), их ранжирование и исключить малозначащие факторы. Диапазоны изменения факторов задают область определения Y . Если принять, что каждому фактору соответствует координатная ось, то полученное пространство называется факторным пространством. При $n=2$ область определения Y представляется собой прямоугольник, при $n=3$ – куб, при $n > 3$ - гиперкуб. При выборе диапазонов изменения факторов нужно учитывать их совместимость, т.е. контролировать, чтобы в этих диапазонах любые сочетания факторов были бы реализуемы в опытах и не приводили бы к абсурду. Для каждого из факторов указывают граничные значения, $i=1, \dots, n$. Регрессионный анализ функции отклика

Основы планирования эксперимента

предназначен для получения её математической модели в виде уравнения регрессии: $Y=F(X_1, X_2, \dots, X_n; B_0, B_1, \dots, B_n) + e$, где B_1, \dots, B_n – некоторые коэффициенты; e – погрешность.

Среди основных методов планирования, применяемых на разных этапах исследования, используют: планирование отсеивающего эксперимента, основное значение которого выделение из всей совокупности факторов группы существенных факторов, подлежащих дальнейшему детальному изучению; планирование эксперимента для дисперсионного анализа, т.е. составление планов для объектов с качественными факторами; планирование регрессионного эксперимента, позволяющего получать регрессионные модели (полиномиальные и иные); планирование экстремального эксперимента, в котором главная задача – экспериментальная оптимизация объекта исследования; планирование при изучении динамических процессов и т.д.

2.2 Объекты исследований и параметры оптимизации

Объектом исследования принято называть явление, процесс, которые порождают проблему, затронутую в конкретно взятой работе. Это та часть научных знаний, с которой необходимо работать автору.

Предметом же в научной работе называется конкретно взятая составляющая выбранного объекта исследования. Это определенный вопрос, который затрагивается при рассмотрении затронутой проблемы. Это более узкое значение. Чаще всего при постановке темы работы предмет изучения участвует в ее формулировке.

Параметр оптимизации

При планировании экстремального эксперимента очень важно определить параметр, который нужно оптимизировать. Сделать это не так просто, как кажется на первый взгляд. Цель исследования должна быть сформулирована очень четко и допускать количественную оценку. Будем называть характеристику цели, заданную количественно, параметром оптимизации. Параметр оптимизации является реакцией па воздействие факторов, которые определяют поведение выбранной системы. Реакция объекта многогранна, многоаспектна. Выбор того аспекта, который представляет наибольший интерес, как раз и задается целью исследования.

При традиционном, не математическом, подходе исследователь стремится как-то учесть разные аспекты, взвесить их и принять решение о том, какой опыт «лучше». Однако разные экспериментаторы проведут сравнение опытов не одинаково.

Прежде чем сформулировать требования к параметрам оптимизации и рекомендации по их выбору, необходимо узнать какие бывают виды параметров.

Виды параметров оптимизации

В зависимости от объекта и цели исследования параметры оптимизации могут быть весьма разнообразными. Чтобы ориентироваться в этом многообразии, введен некоторую классификацию (рис. 1). Мы не стремимся к

Основы планирования эксперимента

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.



Рисунок 1

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. 1, или любым подмножеством из этой совокупности. Движение к оптимуму возможно, если выбран один единственный параметр оптимизации. Тогда прочие характеристики процесса уже не выступают в качестве параметров оптимизации, а служат ограничениями. Другой путь – построение обобщенного параметра оптимизации как некоторой функции от множества исходных.

Прокомментируем некоторые элементы схемы.

Экономические параметры оптимизации, такие как прибыль, себестоимость и рентабельность, обычно используются при исследовании действующих промышленных объектов, тогда как затраты на эксперимент имеет смысл оценивать в любых исследованиях, в том числе и лабораторных. Если цена опытов одинакова (см. «Ограничения»), затраты на эксперимент пропорциональны числу опытов, которые необходимо поставить для решения данной задачи. Это в значительной мере определяет выбор плана эксперимента.

Среди технико-экономических параметров наибольшее распространение имеет производительность. Такие параметры, как долговечность, надежность и стабильность, связаны с длительными наблюдениями. Имеется некоторый опыт их использования при изучении дорогостоящих ответственных объектов, например радиоэлектронной аппаратуры.

Почти во всех исследованиях приходится учитывать количество и качество получаемого продукта. Как меру количества продукта используют выход, например, процент выхода химической реакции, выход годных изделий. Показатели качества чрезвычайно разнообразны. В схеме они сгруппированы по видам свойств. Характеристики количества и качества продукта образуют группу технико-технологических параметров.

Под рубрикой прочие сгруппированы различные параметры, которые реже встречаются, но не являются менее важными. Сюда попали статистические

Основы планирования эксперимента

параметры, используемые для улучшения характеристик случайных величин или случайных функций. В качестве примеров назовем задачи на минимизацию дисперсии случайной величины, на уменьшение числа выбросов случайного процесса за фиксированный уровень и т. д. Последняя задача возникает, в частности, при выборе оптимальных настроек автоматических регуляторов или при улучшении свойств нитей (проволока, пряжа, искусственное волокно и др.).

С ростом сложности объекта возрастает роль психологических аспектов взаимодействия человека или животного с объектом. Так, при выборе оптимальной организации рабочего места оператора параметром оптимизации может служить число ошибочных действий в различных возможных ситуациях. Сюда относятся задачи выработки условных рефлексов типа задачи «крысы в лабиринте».

При решении задач технической эстетики или сравнении произведений искусства возникает потребность в эстетических параметрах. Они основаны на ранговом подходе, который будет рассмотрен ниже.

Требования к параметру оптимизации

Параметр оптимизации – это признак, по которому мы хотим оптимизировать процесс. Он должен быть количественным, задаваться числом. Мы должны уметь его применять при любой возможной комбинации выбранных уровней факторов. Множество значений, которые могут принимать параметр оптимизации, будем называть областью его определения. Области определения могут быть непрерывными и дискретными, ограниченными и неограниченными. Например, выход реакции – это параметр оптимизации с непрерывной ограниченной областью определения. Он может изменяться в интервале от 0 до 100%. Число бракованных изделий, число зерен на шлифе сплава, число кровяных телец в пробе крови – вот примеры параметров с дискретной областью определения.

Уметь измерять параметр оптимизации - это значит располагать подходящий прибором. В ряде случаев такого прибора может не существовать или он слишком дорог. Если нет способа количественного измерения результата, то приходится воспользоваться приемом, называемым ранжированием (ранговым подходом). При этом параметрам оптимизации присваиваются оценки – ранги по заранее выбранной шкале: двухбалльной, пятибалльной и т.п. Ранговый параметр имеет дискретную ограниченную область определения. В простейшем случае область содержит два значения (да, нет; хорошо, плохо). Это может соответствовать, например, годной продукции и браку.

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.

Основы планирования эксперимента

Следующее требование: параметр оптимизации должен выражаться одним числом. Иногда это получается естественно, как регистрация показания прибора. Например, скорость движения машины определяется числом на спидометре. Чаще приходится производить некоторые вычисления. 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. Однако обратное неверно: одному и тому же значению параметра могут соответствовать разные наборы значений факторов.

Для успешного достижения цели исследования необходимо, чтобы параметр оптимизации действительно оценивал эффективность функционирования системы в заранее выбранном смысле. Это требование является главным, определяющим корректность постановки задачи.

Представление об эффективности не остается постоянным в ходе исследования. Оно меняется по мере накопления информации и в зависимости от достигнутых результатов. Это приводит к последовательному подходу при выборе параметра оптимизации.

Говоря об оценке эффективности функционирования системы, важно помнить, что речь идет о системе в целом. Часто система состоит из ряда подсистем, каждая из которых может оцениваться своим локальным параметром оптимизации. При этом оптимальность каждой из подсистем по своему параметру оптимизации не оптимальности системы в целом.

Ещё одно 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.

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

Второе требование часто также оказывается весьма существенным. Для процессов разделения термодинамические параметры оптимизации более универсальны.

Основы планирования эксперимента

При выборе параметра оптимизации нужно еще иметь в виду, что параметр оптимизации в некоторой степени оказывает влияние на вид математической модели исследуемого объекта. Экономические параметры, в силу их аддитивной природы, легче представляются простыми функциями, чем физико-химические показатели. Температура плавления сплава является, как известно, сложной, многоэкстремальной характеристикой состава, тогда как стоимость сплава зависит от состава линейно.

Объекты исследований

Для описания объекта исследования удобно пользоваться представлением о кибернетической системе. Иногда такую кибернетическую систему называют «черным ящиком».



Стрелки справа изображают численные характеристики целей исследования. Мы обозначаем их буквой игрек и называем параметрами оптимизации. В литературе можно встретить другие названия: критерий оптимизации, целевая функция, выход «черного ящика» и т.д.

Для проведения эксперимента необходимо иметь возможность воздействовать на поведение «черного ящика». Все способы такого воздействия мы обозначаем буквой икс и называем факторами. Их называют также входами «черного ящика».

При решении задачи будем использовать математические модели объекта исследования. Под математической моделью мы понимаем уравнение, связывающее параметр оптимизации с факторами. Это уравнение в общем виде можно записать так:

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

Такая функция называется функцией отклика.

Каждый фактор может принимать в опыте одно из нескольких значений. Такие значения будем называть уровнями. Может оказаться, что фактор способен принимать бесконечно много значений (непрерывный ряд). Однако на практике точность, с которой устанавливается некоторое значение, не беспредельна. Поэтому мы вправе считать, что всякий фактор имеет определенное число дискретных уровней. Это соглашение существенно облегчает построение «черного ящика» и эксперимента и упрощает оценку их сложности.

Фиксированный набор уровней факторов (т. е. установление каждого фактора на некоторый уровень) определяет одно из возможных состояний «черного ящика». Одновременно это есть условия проведения одного из возможных опытов. Если перебрать все возможные наборы состояний, то мы

Основы планирования эксперимента

получим полное множество различных состояний данного «ящика». Одновременно это будет число возможных различных опытов.

Естественно условиться считать, что число различных состояний определяет сложность данной системы. Зная сложность, мы сразу скажем, сколько различных опытов можно включить в эксперимент в нашей задаче.

Чтобы узнать число различных состояний, достаточно число уровней факторов (если оно для всех факторов одинаково) возвести в степень числа факторов k : p^k , где p – число уровней. Так, на первый взгляд простая система с пятью факторами на пяти уровнях имеет 3125 состояний, а для десяти факторов на четырех уровнях их уже свыше миллиона!

В этих условиях мы просто вынуждены отказаться от таких экспериментов, которые включают все возможные опыты: перебор слишком велик. Тогда возникает вопрос, сколько и каких опытов надо включить в эксперимент, чтобы решить поставленную задачу? Здесь-то и приходит на помощь планирование эксперимента.

Однако нужно иметь в виду, что при планировании эксперимента не безразлично, какими свойствами обладает объект исследования. Укажем два основных требования, с которыми приходится считаться. Прежде всего, существенно, воспроизводятся ли на объекте результаты эксперимента. Выберем некоторые уровни для всех факторов и в этих условиях проведем эксперимент. Затем повторим его несколько раз через неравные промежутки времени и сравним значения параметра оптимизации. Разброс этих значений характеризует воспроизводимость результатов. Если он не превышает некоторой, заранее заданной величины (наших требований к точности эксперимента), то объект удовлетворяет требованию воспроизводимости результатов, а если превышает, то не удовлетворяет.

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.

Возможно, плохая воспроизводимость объясняется действием фактора, систематически изменяющегося (дрейфующего) во времени. Тогда нужно обращаться к специальным методам планирования.

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

При оптимизации распространен так называемый детерминированный подход. Особенно широко он используется в химии. Детерминированный подход предполагает построение физической модели процесса на основании тщательного изучения механизма явления (например, кинетики, гидродинамики).

Основы планирования эксперимента

Такой подход позволяет полудить математическую модель объекта в виде системы дифференциальных уравнений. Несомненно, что детерминированный и статистический (связанный с планированием эксперимента) подходы должны разумно дополнять друг друга, а не противопоставляться, как это иногда делается.

2.3 Факторы и модели

После того как выбран объект исследования и параметр оптимизации, нужно включить в рассмотрение все существенные факторы, которые могут влиять на процесс. Если какой-либо существенный фактор окажется неучтенным, то это может привести к неприятным последствиям. Так, если неучтенный фактор произвольно флуктуировал – принимал случайные значения, которые экспериментатор не контролировал, – это значительно увеличит ошибку опыта. При поддержании фактора на некотором фиксированном уровне может быть получено ложное представление об оптимуме, так как нет гарантии, что фиксированный уровень является оптимальным.

Определение фактора

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

Также, 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. 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 дискретные 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.

Произведем классификацию факторов и зависимости от того, является ли фактор переменной величиной, которую можно оценивать количественно: измерять, взвешивать, титровать и т.п., или же он – некоторая переменная, характеризующаяся качественными свойствами.

Факторы разделяются на количественные и качественные. Качественные факторы – это разные вещества, разные технологические способы, аппараты, исполнители и т. д.

Хотя качественным факторам не соответствует числовая шкала в том смысле, как это понимается для количественных факторов, однако можно

Основы планирования эксперимента

построить условную порядковую шкалу, которая ставит в соответствие уровням качественного фактора числа натурального ряда, т. е. производит кодирование. Порядок уровней может быть произволен, но после кодирования он фиксируется.

В ряде случаев граница между понятием качественного и количественного фактора весьма условна. Пусть, например, при изучении воспроизводимости результатов химического анализа надо установить влияние положения тигля с навеской в муфельной печи. Можно разделить под печи на квадраты и считать номера квадратов уровнями качественного фактора, определяющего положение тигля. Вместо этого можно ввести два количественных фактора – ширину и длину пода печи. Качественным факторам не соответствует числовая шкала, и порядок уровней факторов не играет роли.

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, с помощью которых устанавливаются его конкретные значения (уровни). Такое определение фактора называется операциональным. Так, если фактором является давление в некотором аппарате, то совершенно необходимо указать, в какой точке и с помощью какого прибора оно измеряется и как оно устанавливается. Введение операционального определения обеспечивает однозначное понимание фактора.

Точность замера факторов должна быть возможно более высокой. Степень точности определяется диапазоном изменения факторов. При изучении процесса, который длится десятки часов, нет необходимости учитывать доли минуты, а в быстрых процессах необходимо учитывать, быть может, доли секунды.

Факторы должны быть непосредственными воздействиями на объект. Факторы должны быть однозначны. Трудно управлять фактором, который является функцией других факторов. Но в планировании могут участвовать сложные факторы, такие, как соотношения между компонентами.

Необходимость введения сложных факторов возникает при желании представить динамические особенности объекта в статической форме. Пусть, например, требуется найти оптимальный режим подъема температуры в реакторе. Если относительно температуры известно, что она должна нарастать линейно, то в качестве фактора вместо функции можно использовать тангенс угла наклона, т. е. градиент. Положение усложняется, когда исходная температура не зафиксирована. Тогда ее приходится вводить в качестве еще одного фактора. Для более сложных кривых пришлось бы ввести большее число факторов. Поэтому целесообразно пользоваться сложным качественным фактором – номером кривой. Различные варианты кривых рассматриваются в качестве уровней. Это могут быть разные режимы термообработки сплавов, переходные процессы в системах управления и т. д.

Требования к совокупности факторов

Основы планирования эксперимента

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. Если, не обращать внимания на требование совместимости факторов и запланировать такие условия опыта, которые несовместимы и могут привести к взрыву установки или осмолению продукта.

Несовместимость факторов может наблюдаться на границах областей их определения. Избавиться от нее можно сокращением областей. Положение усложняется, если несовместимость проявляется внутри областей определения. Одно из возможных решений – разбиение на подобласти и решение двух отдельных задач.

При планировании эксперимента важна независимость факторов, т. е. возможность установления фактора на любом уровне вне зависимости от уровней других факторов. Если это условно невыполнимо, то невозможно планировать эксперимент. Итак, мы подошли ко второму требованию – отсутствию корреляции между факторами. Требование некоррелированности не означает, что между значениями факторов нет никакой связи. Достаточно, чтобы связь не была линейной.

Примеры Вы изучаете процесс синтеза аммиака. Колонна синтеза установлена на открытой площадке. Является ли температура воздуха фактором, который можно включить в планирование эксперимента?

Температура воздуха - фактор неуправляемый. А в планировании могут участвовать только те факторы, которыми можно управлять, - устанавливать и поддерживать на выбранном уровне в течение опыта или менять по заданной программе. Температурой окружающей среды в данном случае управлять невозможно. Ее можно только контролировать.

Модель (фр. modèle, от лат. modulus — «мера, аналог, образец») — это система, исследование которой служит средством для получения информации о другой системе; представление некоторого реального процесса, устройства или концепции.

Модель есть абстрактное представление реальности в какой-либо форме (например, в математической, физической, символической, графической или дескриптивной), предназначенное для представления определённых аспектов этой реальности и позволяющее получить ответы на изучаемые вопросы.

Математическая модель должна удовлетворять требованиям:

- она должна быть адекватна и адекватно описывать эксперимент;
 - должна быть определена совокупность множества наблюдаемых результатов в рамках рассматриваемой математической модели при строго определенных фиксированных начальных данных, описываемых в рамках математической модели;
 - должна существовать принципиальная возможность осуществления эксперимента со случайным исходом сколь угодно количество раз при неизменных входных данных;
 - должно быть доказано требование или априори принята гипотеза о стохастической устойчивости относительной частоты для любого наблюдаемого результата, определённого в рамках математической модели.
- Существует несколько моделей эксперимента

Основы планирования эксперимента

Безупречный эксперимент — невоплотимая на практике модель эксперимента, используемая психологами-экспериментаторами в качестве эталона. Использование подобного образца для сравнения приведёт к более эффективному совершенствованию экспериментальных методик и выявлению возможных ошибок в планировании и проведении психологического эксперимента.

Случайный эксперимент (случайное испытание, случайный опыт) — математическая модель соответствующего реального эксперимента, результат которого невозможно точно предсказать.

Выбор модели

Под моделью мы понимаем функцию отклика

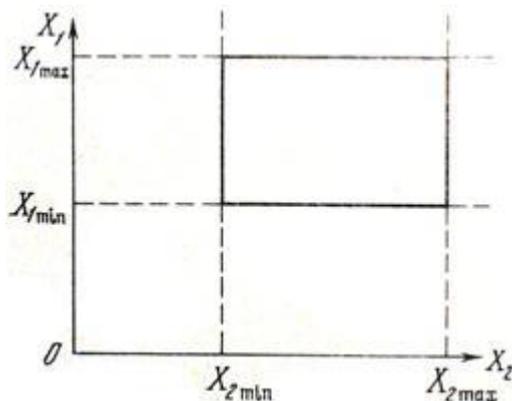
$$y = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_k)$$

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

Построим геометрический аналог функции отклика — поверхность отклика. Будем для наглядности рассматривать случай с двумя факторами.

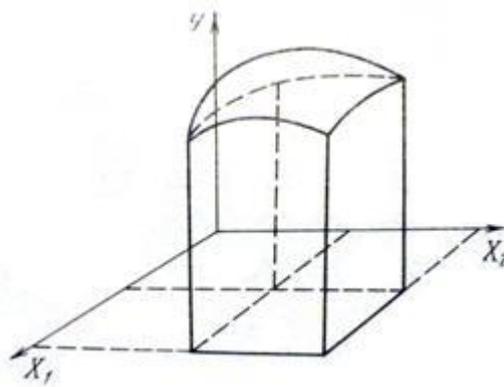
Заметим, что в случае многих факторов геометрическая наглядность теряется. Мы попадаем в абстрактное многомерное пространство, где у нас нет навыка ориентирования. Приходится переходить на язык алгебры.

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



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 рисунке обозначены границы областей определения каждой из факторов, а сплошными — границы их совместной области определения.

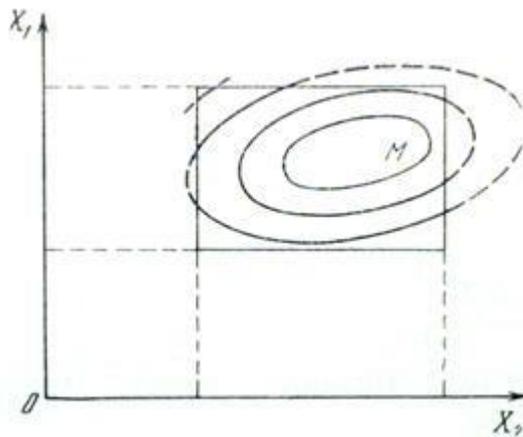
Основы планирования эксперимента



Чтобы указать значение параметра оптимизации, требуется еще одна ось координат. Пространство, в котором строится поверхность отклика, мы будем называть факторным пространством. Оно задается координатными осями, по которым откладываются значения факторов и параметра оптимизации. Размерность факторного пространства зависит от числа факторов. При многих факторах поверхность отклика уже нельзя изобразить наглядно и приходится ограничиваться только алгебраическим языком.

Но для двух факторов можно даже не переходить к трехмерному пространству, а ограничиться плоскостью.

Для этого достаточно произвести сечение поверхности отклика плоскостями, параллельными плоскости X_1OX_2 и полученные в сечениях линии спроектировать на эту плоскость.



Каждая линия соответствует постоянному значению параметра оптимизации. Такая линия называется линией равного отклика

Шаговый принцип

За отказ от полного перебора состояний надо чем-то платить. Цена – это предположения, которые мы должны сделать относительно свойств неизвестной нам модели до начала эксперимента.

Главное предположение – это непрерывность поверхности, ее гладкость и наличие единственного оптимума (быть может, и на границе области определения факторов).

Эти постулаты позволяют представить изучаемую функцию в виде степенного ряда в окрестности любой возможной точки факторного пространства (такие функции в математике называются аналитическими). Кроме того, если мы

Основы планирования эксперимента

придумаем какой-то способ постепенного приближения к оптимальной точке, нужно, чтобы результат не зависел от исходной точки.

Так как мы заранее считаем, что предпосылки выполняются, то надо максимально использовать возможности, которые при этом открываются.

Если, например, мы будем знать значения параметра оптимизации в нескольких соседних точках факторного пространства, мы сможем (в силу гладкости и непрерывности функции отклика) представить себе результаты, которые можно ожидать в других соседних точках. Следовательно, можно найти такие точки, для которых ожидается наибольшее увеличение (или уменьшение, если мы ищем минимум) параметра оптимизации. Тогда ясно, что следующий эксперимент надо переносить именно в эти точки. Надо продвигаться в этом направлении, пренебрегая остальными. Сделав новый эксперимент, снова можно оценить направление, в котором следует двигаться. В силу единственности оптимума мы, таким образом, рано или поздно непременно его достигнем. Это и есть шаговый принцип.

Сделаем некоторые пояснения. Мы выбираем в факторном пространстве какую-то точку и рассматриваем множество точек в ее окрестности, т. е. выбираем в области определения факторов малую подобласть. Здесь мы хотим провести эксперимент, на основании которого должна быть построена первая модель. Эту модель мы намерены использовать для предсказания результатов опытов в тех точках, которые не входили в эксперимент. Если эти точки лежат внутри нашей подобласти, то такое предсказание называется интерполяцией, а если вне – экстраполяцией. Чем дальше от области эксперимента лежит точка, для которой мы хотим предсказать результат, тем меньшей уверенностью это можно делать. Поэтому мы вынуждены экстраполировать недалеко и использовать результаты экстраполяции для выбора условий проведения следующего эксперимента. Дальше цикл повторяется.

Попутно полученную модель можно использовать для проверки различных гипотез о механизме изучаемого явления или о его отдельных сторонах. Например, если вы предполагаете, что увеличение значения некоторого фактора должно приводить к увеличению значения параметра оптимизации, то с помощью модели можно узнать, так ли это. Такая проверка называется интерпретацией модели.

Как выбрать модель?

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. Методы, с помощью которых проверяется адекватность, рассматриваются далее.

Основы планирования эксперимента

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

На будущее мы договоримся, что при прочих равных условиях мы всегда будем предпочитать степенные ряды. Точнее, отрезки степенных рядов – алгебраические полиномы.

Фактически мы произвели выбор класса моделей. Мы сказали, что всегда, когда это возможно, будем искать модель среди полиномов. Построение полинома возможно в окрестностях любой точки факторного пространства, поскольку мы предположили, что функция является аналитической.

Полиномиальные модели

Мы представили неизвестную нам функцию отклика полиномом. Операция замены одной функции другой в каком-то смысле эквивалентной функцией называется аппроксимацией.

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.

Мы хотим, чтобы модель хорошо предсказывала направление наискорейшего улучшения параметра оптимизации. Такое направление называется направлением градиента. Ясно, что движение в этом направлении приведет к успеху быстрее, чем движение в любом другом направлении (это значит, что будет достигнута экономия числа опытов).

Полином первой степени – линейная модель – это то, что нам нужно.

С одной стороны, он содержит информацию о направлении градиента, с другой – в нем минимально возможное число коэффициентов при данном числе факторов. Единственное опасение в том, что неясно, будет ли линейная модель всегда адекватной. Ответ зависит еще и от объекта.

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 можно проверять по результатам эксперимента. Значит, выбрав сначала произвольную подобласть, мы, рано или поздно, найдем ее требуемые размеры, и как только это случится, воспользуемся движением по градиенту.

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

Основы планирования эксперимента

Удачный выбор подобласти имеет 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.

Место моделей в структуре эксперимента, модельный эксперимент

Может показаться, что всякий корректно поставленный эксперимент предполагает использование действующей модели. В самом деле, поскольку в экспериментальной установке исследуется явление в «чистом» виде и полученные результаты характеризуют не только данное единичное явление в единичном опыте, но и другие явления этого класса, на которые переносятся каким-то способом результаты опыта, постольку данное явление можно считать в известном смысле моделью других явлений этого же класса. Однако это не так, ибо отношение между явлениями, которое изучается в данном единичном эксперименте, и другими явлениями этой же области есть отношение тождества, а не аналогии, между тем как именно последняя существенна для модельного отношения. Поэтому следует выделить особую форму эксперимента, для которой характерно использование действующих материальных моделей в качестве специальных средств экспериментального исследования. Такая форма эксперимента называется модельным экспериментом или моделированием.

Существенным отличием модельного эксперимента от обычного является его своеобразная структура. В то время как в обычном эксперименте средства экспериментального исследования так или иначе непосредственно взаимодействуют с объектом исследования, в модельном эксперименте такого взаимодействия нет, поскольку здесь экспериментируют не с самим объектом, а с его заместителем. При этом примечательно, что объект-заместитель и экспериментальная установка объединяются, сливаются в действующей модели в одно целое. «Моделирование, - это есть замена изучения интересующего нас явления в натуре изучением аналогичного явления на модели меньшего или большего масштаба, обычно в специальных лабораторных условиях. Основным смыслом моделирования заключается в том, чтобы по результатам опытов с моделями можно было дать необходимые ответы о характере эффектов и о различных величинах, связанных с явлением в натуральных условиях».

Рассмотрим в этой связи более подробно структуру модельного эксперимента на конкретном примере. Возьмем для этого модель движения газов в паровом котле. Такая модель строится и изучается следующим образом. Из промышленных испытаний котла-объекта получают некоторые данные и параметры, представленные в виде характеристических величин. При помощи соответствующих теоретических средств (логические правила, математические

Основы планирования эксперимента

средства, правила и критерии теории подобия) производится расчет модели, который позволяет решить вопрос об оптимальных условиях ее конструкции (размеры, физическая природа моделирующих элементов, выбор материалов, способы и цели ее последующего исследования). Таким образом, первый этап - это теоретический расчет модели теоретические соображения о задачах, целях и способах последующего экспериментирования с нею. Следующим шагом является создание самой модели. Далее производятся наблюдения, измерения необходимых параметров, изменение и варьирование условий, повторение условий работы самой модели и т. п.

Например, изучение модели движения газов в котле состоит в следующем. Не ограничиваясь простым наблюдением, которого явно недостаточно, производят фотографирование, пользуясь специальным освещением, создают штриховые рисунки, которые, хотя несут отпечаток субъективности, все же отличаются большой простотой и наглядностью. Для улучшения условий наблюдения за движением жидкости по трубкам пользуются различными способами ее подкрашивания. Затем производятся измерения давления или скорости движения воды или газов, расхода жидкости, температуры, количества тепла и т. п.

Таким образом, на новом этапе эксперимента, когда модель построена, субъективная деятельность экспериментатора продолжается, но к ней присоединяются новые моменты, относящиеся к объективной стороне эксперимента, - сама модель (т. е. некоторая экспериментальная установка) и технические средства (лампы, экраны, фотоаппараты, химические вещества, термометры, калориметры и другие измерительные приборы), при помощи которых осуществляются наблюдения и измерения. Все эти средства, которыми пользуются при изучении модели, представляют собой материальные средства, характеризующие объективную сторону всякого эксперимента. Но здесь, помимо них, к объективной стороне относится сама модель, в нашем случае - модель парового котла.

Законно поставить вопрос: каково же место модели в эксперименте? Ясно, что она представляет собой часть гносеологического объекта, как и средства экспериментального исследования, но входит ли она целиком в состав последних или же является чем-то отличным от них?

С одной стороны, очевидно, что модель построена не как самоцель, а как средство изучения какого-то другого объекта, который она замещает, с которым она находится в определенных отношениях сходства или соответствия. Исследователя интересуют свойства модели не сами по себе, а лишь постольку, поскольку их изучение позволяет судить о свойствах другого предмета, получать о нем некоторую информацию. Этот предмет и выступает как подлинный объект изучения, а по отношению к нему модель является лишь средством экспериментального исследования. С другой стороны, в данном эксперименте модель является предметом изучения. Изучается режим ее работы в определенных условиях, над ней ведутся не только визуальные наблюдения, но и измеряются ее параметры при помощи специальных приборов. Она подвергается определенным причинным воздействиям, и экспериментатор регистрирует реакцию данной системы на эти планомерные воздействия и т. п. Словом, в

Основы планирования эксперимента

данном эксперименте изучается модель как некий объект исследования, и в этом отношении она является объектом изучения.

Таким образом, обнаруживается двоякая роль, которую модель выполняет в эксперименте: она одновременно является и объектом изучения (поскольку замещает другой, подлинный объект), и экспериментальным средством (поскольку является средством познания этого объекта).

Вследствие двоякой роли модели структура эксперимента; существенно изменяется, усложняется. Если в обычном, или натурном, эксперименте объект исследования и прибор находились в непосредственном взаимодействии, так как экспериментатор с помощью прибора воздействовал прямо на изучаемый объект, то в модельном эксперименте внимание экспериментатора сосредоточено на исследовании модели, которая теперь подвергается всевозможным воздействиям и исследуется с помощью приборов. Подлинный же объект изучения непосредственно в самом эксперименте не участвует

Для модельного эксперимента характерны следующие основные операции: 1) переход от натурального объекта к модели -- построение модели (моделирование в собственном смысле слова); 2) экспериментальное исследование модели; 3) переход от модели к натурному объекту, состоящий в перенесении результатов, полученных при исследовании, на этот объект.

Модель входит в эксперимент, не только замещая объект исследования, она может также замещать и условия, в которых изучается некоторый объект обычного эксперимента.

Ввиду того, что в модельном эксперименте исследуется не сам объект изучения, а его заместитель, естественно возникает вопрос, на каком основании и в каких границах можно переносить данные, полученные на модели, на моделируемый объект. Этот вопрос решается в зависимости от особенностей различных групп материальных моделей.

Независимо от окончательного вывода о познавательных возможностях модельных экспериментов следует сразу же обратить внимание на то, что в структуре этих экспериментов значительно усилена роль теории как необходимого звена, связывающего постановку опыта и его результаты с объектом исследования. Если обычный эксперимент предполагает наличие теоретического момента в начальной стадии опыта - возникновение проблемы, выдвижение и оценка гипотезы, выведение следствий, теоретические соображения, связанные с конструкцией экспериментальной установки, а также на завершающей стадии - обсуждение и интерпретация полученных данных, их обобщение, то в модельном эксперименте, кроме того, необходимо теоретически обосновать отношение между моделью и натурным объектом. Без этого обоснования модельный эксперимент теряет свое специфическое познавательное значение, ибо он перестает быть источником информации о действительном, или натурном, объекте. Таким образом, в модельном эксперименте теоретическая сторона представлена значительно сильнее, чем в обычном, он еще в большей степени является соединением теории и практики.

Хотя модельный эксперимент расширяет возможности экспериментального исследования ряда объектов, в отмеченном только что обстоятельстве нельзя не заметить некоторой слабости этого метода по сравнению с обычным

Основы планирования эксперимента

экспериментом. Включение теории (сознательной деятельности субъекта) в качестве звена, связывающего модель и объект, может стать источником ошибок, что снижает доказательную силу модельного эксперимента. Однако неограниченные возможности практического исследования свойств, поведения, закономерностей объектов, недоступных по каким-либо причинам для обычного непосредственного экспериментирования, возможности открытия новых способов расширения сферы человеческого познания путем применения модельного эксперимента свидетельствуют о его преимуществах по сравнению с прямым экспериментом.

Поскольку в модельном эксперименте непосредственному исследованию подвергается модель, а результаты исследования переносятся на моделируемый объект, то теоретическое обоснование права на этот перенос является обязательным условием и составной частью такого эксперимента. Поэтому характеристика теоретических средств, при помощи которых обеспечивается перенос результатов исследования модели на «действительный» объект изучения, является необходимой составной частью описания сущности всякого модельного эксперимента.

ЛЕКЦИЯ 3

3.1 Разработка плана эксперимента. Определение целей и задач

Разработка плана эксперимента — комплекс мероприятий, направленных на эффективную постановку опытов. Эксперимент является важнейшей составной частью научных исследований, основой которого является научно поставленный опыт с точно учитываемыми и управляемыми условиями. Само слово эксперимент происходит от лат. Experimentum — проба, опыт.

Основная цель планирования эксперимента— достижение максимальной точности измерений при минимальном количестве проведенных опытов и сохранении статистической достоверности результатов.

Планирование эксперимента применяется при поиске оптимальных условий, построении интерполяционных формул, выборе значимых факторов, оценке и уточнении констант теоретических моделей и др.

Повторим, что к основным этапам планирования эксперимента относятся:

- 8.** Установление цели эксперимента – постановка целей и задач проведения эксперимента;
- 9.** Уточнение условий проведения эксперимента – выбор оборудования, сроков работ, способа проведения эксперимента и т.п.;
- 10.** Выбор входных и выходных параметров – выбор зависимой измеряемой переменной, определение случайных и детерминированных независимых переменных;
- 11.** Установление необходимой точности результатов измерений – выбор компромисса между минимальным числом испытаний и статистической достоверностью получаемых результатов;

Основы планирования эксперимента

12. Составление плана и проведение эксперимента – количество и порядок испытаний, задание совокупности значений задаваемых переменных-факторов и их взаимодействий в эксперименте;

13. Статистическая обработка результатов эксперимента – применение методов математической статистики для обработки результатов, построение математической модели эксперимента;

14. Формулирование выводов.

Нас интересует первый и основополагающий этап планирования эксперимента – установление цели эксперимента и входящая в состав постановка задач. Для научного исследования целью может быть экспериментальное подтверждение новых фактов, данных об объекте, явлении, процессе; новая интерпретация известных данных, систематизация существующих представлений, новые методы или подходы к исследованию. Самое главное — это элементы нового знания — именно они и являются целью любой научной работы.

Для формулировки цели может использоваться следующая формула: результат исследования + объект исследования + путь достижения результата. Цель должна быть наиболее актуальна, формула актуальности $A=f(TЦ, ПЗ, СР)$, т. е. актуальность – функция от сочетания ТЦ, ПЗ, СР. ТЦ – теоретическая ценность, ПЗ – практическая значимость, СР – степень разработанности.

Цель задается самим исследованием, а эксперимент выступает инструментом сбора информации.

На этапе целеполагания возможно выдвижение гипотезы— предполагаемого решения поставленной проблемы. Важно, чтобы гипотеза проверялась существующими методами и содержала имеющиеся в науке понятия. То есть, также можно сформулировать понятие цели эксперимента следующим образом – это выявление свойств исследуемых объектов, проверка справедливости гипотез и на этой основе широкое и глубокое изучение темы научного исследования.

Цель исследования предполагает определение задач — шагов, ведущих к достижению цели. В общих чертах задачи исследования могут быть обозначены следующим образом:

- изучение состояния вопроса;
- выявление характерных признаков исследуемого явления / уточнение определения понятий;
- разработка и проведение эксперимента / систематизация и анализ полученных данных;
- предлагаемые способы решения проблемы и их аргументация / выделение условий, обеспечивающих эффективное решение проблемы;
- проверка предлагаемого решения проблемы.

Каждая последующая задача опирается на результаты предыдущей. Приведенные задачи условны — в зависимости от специфики исследования они могут варьироваться, некоторые задачи могут отсутствовать.

Цель эксперимента определяет выбор метода. Для того чтобы эксперимент был действительно перспективным необходимо выбрать соответствующий метод

Основы планирования эксперимента

исследования. Неправильный выбор приводит к получению избыточной или недостаточной информации, удорожанию и усложнению эксперимента, а иногда и к ошибочным результатам. Например, задачи о распространении пластических деформаций, форме и размерах фактического очага деформаций, неравномерности их распространения и т.п. решаются с применением метода непосредственного определения деформации (поляризационно-оптическим, тензометри).

Экспериментальные методы позволяют получить информацию, как в дискретной форме, так и в виде непрерывных полей. Опытные данные в дискретной форме регистрируются с большой точностью, но не дают наглядного представления о распределении искомых величин. Поэтому необходимо проводить большое количество измерений, а значит, такие методы целесообразно применять подобные опыты в случае прецизионных единичных исследований.

При постановке массового эксперимента желательно иметь опытные данные в виде непрерывных полей, так как они позволяют провести предварительный качественный анализ процесса, не прибегая к обработке исходных данных. Это важно при изучении быстропротекающих процессов.

Таким образом, сформулировать цель эксперимента – это значит задать следующие вопросы и получить на них ответы:

- какие знания ты хочешь получить с помощью этого опыта (например, узнать, где частицы рабочей среды встречают наибольшее сопротивление движению при виброабразивной обработке деталей);
- какие законы ты хочешь проверить на опыте (например, проверить, действительно ли технологическая жидкость влияет на процесс очистки деталей от формовочной массы при вибрационной обработке свободными абразивами);
- зачем тебе нужен этот эксперимент? Где ты собираешься использовать полученные знания (например, знания нужны, чтобы подготовить магистерскую диссертацию, защитить докторскую или кандидатскую степень, применить их для изобретательского дела и так далее).

Самые распространённые цели экспериментов:

– оценка определенных характеристик изучаемого объекта, проявляющих себя статистически, а также проверка некоторых гипотез, касающихся этих характеристик. Такая задача относится к измерительным процессам;

– выявление воздействия на выходную величину тех или иных факторов; результатом этого эксперимента должно быть одно из утверждений: «да» или «нет», например, влияет ли добавка некоторого компонента на прочность бетона и т.п. Соответствующая экспериментальная процедура называется дисперсионным анализом;

– установление функции отклика, т.е. статистически достоверной зависимости, связывающей отклик с факторами; другими словами, построение математической модели изучаемого объекта. Это задача регрессионного анализа;

– определение степени взаимной статистической связи двух величин, например, затрат на изучение технической информации и количество изобретений

Основы планирования эксперимента

и т.п. Определение степени подобной связи является предметом корреляционного анализа;

– нахождение оптимальных условий протекания процесса, т.е. определение значений факторов, при которых отклик является максимальным (или минимальным). Эта задача решается в ходе выполнения экстремального эксперимента.

План эксперимента - совокупность данных определяющих число, условия и порядок проведения опытов.

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

В процессе измерений, последующей обработки данных, а также формализации результатов в виде математической модели, возникают погрешности и теряется часть информации, содержащейся в исходных данных. Применение методов планирования эксперимента позволяет определить погрешность математической модели и судить о ее адекватности. Если точность модели оказывается недостаточной, то применение методов планирования эксперимента позволяет модернизировать математическую модель с проведением дополнительных опытов без потери предыдущей информации и с минимальными затратами.

Выбор плана эксперимента зависит от:

- целей и задач НИР и эксперимента;
- методов анализа результатов эксперимента, которые планируется применить;
- объема имеющихся материальных ресурсов (финансовых, человеческих и др.);
- временных ресурсов (ограничений на время научных исследований); - других факторов.

Наиболее часто при выполнении НИР целью экспериментальных исследований является получение математической модели объекта.

Выбор плана эксперимента зависит от того, какой вид зависимости φ вы желаете получить: качественный или количественный. Зависимость φ является качественной, если она выражается словами, например: " x_j влияет на y ", "увеличение x_j уменьшает значение y " и др. Зависимость φ является количественной, если она представляет собой математическое выражение.

Так как результаты измерений значений x_j и y являются случайными величинами, то для установления зависимости φ необходимо использовать соответствующие методы математической статистики.

Для получения качественной зависимости φ наиболее часто используют методы корреляционного и дисперсионного анализов, для получения

Основы планирования эксперимента

количественной зависимости – метод регрессионного анализа. Существуют и другие статистические методы анализа: ковариационный, кластерный.

Составление плана и проведение эксперимента— количество и порядок испытаний, способ сбора, хранения и документирования данных. Порядок проведения испытаний важен, если входные параметры (факторы) при исследовании одного и того же объекта в течение одного опыта принимают разные значения. Например, при испытании на усталость при ступенчатом изменении уровня нагрузки предел выносливости зависит от последовательности нагружения, так как по-разному идет накопление повреждений, и, следовательно, будет разная величина предела выносливости. В ряде случаев, когда систематически действующие параметры сложно учесть и проконтролировать, их преобразуют в случайные, специально предусматривая случайный порядок проведения испытаний (рандомизация эксперимента). Это позволяет применять к анализу результатов методы математической теории статистики.

Порядок испытаний также важен в процессе поисковых исследований: в зависимости от выбранной последовательности действий при экспериментальном поиске оптимального соотношения параметров объекта или какого-то процесса может потребоваться больше или меньше опытов. Эти экспериментальные задачи подобны математическим задачам численного поиска оптимальных решений. Наиболее хорошо разработаны методы одномерного поиска (однофакторные однокритериальные задачи. При составлении плана следует минимизировать число опытов, в связи с тем, что количество опытов в полном эксперименте значительно превосходит число определяемых коэффициентов линейной модели. Другими словами, полный факторный эксперимент обладает большой избыточностью опытов. Было бы заманчивым сократить их число за счет той информации, которая не очень существенна при построении линейных моделей. При этом нужно стремиться, чтобы матрица планирования не лишилась своих оптимальных свойств. Сделать это не так просто, но все же возможно. Итак, начнем поиск путей минимизации опытов.

3.2 Выбор варьируемых факторов. Определение фактора

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

Фактор считается заданным, если указаны его название и область определения. В выбранной области определения он может иметь несколько значений, которые соответствуют числу его различных состояний. Выбранные для эксперимента количественные или качественные состояния фактора носят название уровней фактора. Минимальное число уровней, обычно применяемое на первой стадии работы, равно 2. Это верхний и нижний уровни, обозначаемые в кодированных координатах через +1 и -1. Но такое число уровней недостаточно для построения моделей второго порядка (ведь фактор принимает только два значения, а через две точки можно провести множество линий различной кривизны).

Основы планирования эксперимента

Выбор уровней варьирования может осуществляться следующим образом. Предположим, в некоторой задаче фактор (температура) мог изменяться от 140 до 180°C. Естественно, за нулевой уровень было принято среднее значение фактора, соответствующее 160°C. Тогда при трех уровнях варьирования значение фактора на верхнем уровне (+1) будет равно 180°C, а на нижнем 140°C. Интервал варьирования будет равен 20°C.

При решении задачи будем использовать математические модели исследования. Понятие математической модели было дано выше. Под математической моделью мы понимаем уравнение, связывающее параметр оптимизации с факторами. Это уравнение в общем виде можно записать так:

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

где символ $f(\dots)$, как обычно в математике, заменяет слова: «функция от». Такая функция называется функцией отклика. Наглядное, удобное воспринимаемое представление о функции отклика дает ее геометрический аналог - поверхность отклика (рис. 3).

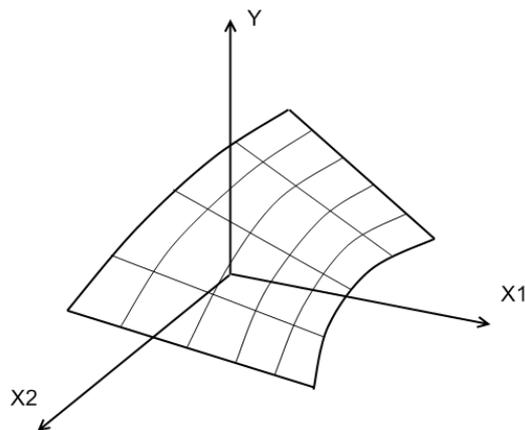


Рис. 3. Поверхность отклика

Наиболее часто в качестве моделей применяются приведенные ниже полиномы.

Полином первой степени:

$$y = \vartheta_0 + \sum_1^k \vartheta_i x_i + \sum_1^k \vartheta_{ij} x_i x_j$$

Полином второй степени:

$$y = \vartheta_0 + \sum_1^k \vartheta_i x_i + \sum_1^k \vartheta_{ij} x_i x_j + \sum_1^k \vartheta_{ii} x_i^2 .$$

Полиномы третьей степени:

$$y = \vartheta_0 + \sum_1^k \vartheta_i x_i + \sum_1^k \vartheta_{ij} x_i x_j + \sum_1^k \vartheta_{ijj} x_i^2 x_j + \\ + \sum_1^k \vartheta_{ijj} x_i x_j^2 + \sum_1^k \vartheta_{iii} x_i^3 .$$

Здесь в этих уравнениях:

y - значения критерия; ϑ_i - линейные коэффициенты регрессии;

ϑ_{ij} - коэффициенты двойного взаимодействия; x_i - кодированные значения факторов.

Основы планирования эксперимента

Модель должна быть адекватной, т.е. с достаточной точностью описывать изменение реального процесса. Проверка адекватности модели выполняется при помощи специальных статистических методов.

После определения факторов, их уровней и интервалов варьирования, параметров оптимизации и построения информационной модели необходимо заполнить матрицу планирования, по которой в дальнейшем будет проводиться эксперимент.

Число возможных опытов определяют по выражению

$$N = p^k,$$

где N - число опытов; p - число уровней; k - число факторов.

Примеры матриц планирования для 2-х и 3-х факторов на 2-х уровнях варьирования представлены в таблицах 1 и 2.

Таблица 1

Матрица проведения эксперимента 2^2

| Номер опыта | Кодовое обозначение | | Натуральные значения | | У |
|-------------|---------------------|----------------|----------------------|--|---|
| | x ₁ | x ₂ | | | |
| 1 | +1 | +1 | | | 1 |
| 2 | -1 | +1 | | | 2 |
| 3 | +1 | -1 | | | 3 |
| 4 | -1 | -1 | | | 4 |

Таблица 2

Матрица проведения эксперимента 2^3

| Номер опыта | Кодовое обозначение | | | Натуральные значения | | | У |
|-------------|---------------------|----------------|----------------|----------------------|--|--|----------------|
| | x ₁ | x ₂ | x ₃ | | | | |
| 1 | +1 | +1 | +1 | | | | y ₁ |
| 2 | -1 | +1 | +1 | | | | y ₂ |
| 3 | +1 | -1 | +1 | | | | y ₃ |

Основы планирования эксперимента

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|----|--|--|----------------|
| | 1 | 1 | | | | | |
| 4 | 1 | - | - | -1 | | | y ₄ |
| 5 | 1 | - | - | -1 | | | y ₅ |
| 6 | 1 | - | - | -1 | | | y ₆ |
| 7 | 1 | - | - | + | | | y ₇ |
| 8 | 1 | - | - | + | | | y ₈ |

3.3 Полный факторный эксперимент типа 2^k

Первый этап планирования эксперимента для получения линейной модели основан на варьировании факторов на двух уровнях. В этом случае, если число факторов известно, можно сразу найти число опытов, необходимое для реализации всех возможных сочетаний уровней факторов. Простая формула, которая для этого используется: $N = 2^k$, 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^k.

Если выбранная модель включает только линейные члены полинома и их произведения, то для оценки всех параметров модели используется план эксперимента с варьированием всех факторов на двух уровнях. Такие планы принято называть планами типа 2ⁿ, где 2ⁿ=N – число всех возможных опытов, n – количество варьируемых факторов.

Полный факторный эксперимент может быть предложен исследователю как один из способов построения математической модели (идентификации) недетерминированного объекта. Этот способ оказывается наиболее предпочтительным в тех случаях, когда отсутствует априорная информация для обоснования структуры модели с позиций физико-химических представлений процессов, происходящих в объекте, отсутствует количественная оценка степени влияния изучаемых факторов на выходную переменную объекта, его выходной показатель.

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

Основы планирования эксперимента

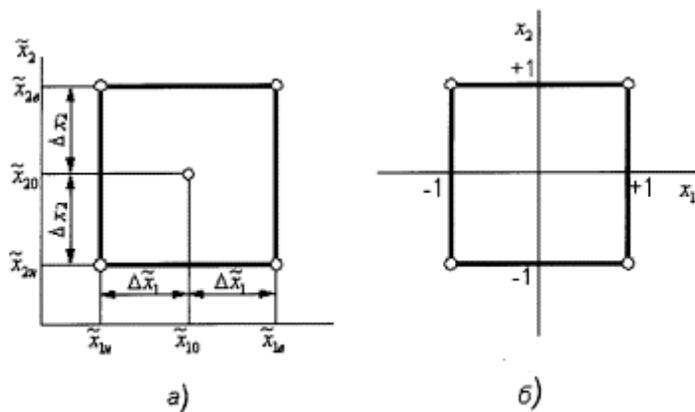
опускают). Условия эксперимента можно записать в виде таблицы, где строки соответствуют различным опытам, а столбцы – значениям факторов. Будем называть такие таблицы матрицами (репликами) планирования эксперимента. Матрица планирования 2^2 для двух факторов показана в табл.

| Номер опыта | Матрица планирования | | Выход у |
|-------------|----------------------|----------------|----------------|
| | x ₁ | x ₂ | |
| 1 | -1 | -1 | y ₁ |
| 2 | +1 | -1 | y ₂ |
| 3 | -1 | +1 | y ₃ |
| 4 | +1 | +1 | y ₄ |

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

Таким образом, мы имеем два вектора-столбца независимых переменных и один вектор-столбец параметра оптимизаций. 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 натуральных значений факторов. Далее, 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 (рис.). 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 у.

На рис. показан в факторном пространстве симметричный двухуровневый план для двухфакторной функции отклика $y=f(x_1x_2)$ при нейтральном (рис.9.2,а) и нормированном (рис.9.2,б) представлении уровней факторов. Здесь $\tilde{x}_{10}, \tilde{x}_{20}$ – искомые натуральные уровни факторов, $\tilde{x}_{1н}, \tilde{x}_{2н}(-1,+1)$ – нижние, $\tilde{x}_{1с}, \tilde{x}_{2с}(-1,+1)$ – верхние уровни, $\Delta\tilde{x}_1, \Delta x_2$ – интервалы варьирования.



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

Основы планирования эксперимента

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. 2.

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

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

| Номер опыта | x_1 | x_2 | x_3 | Буквенные обозначения строк | у |
|-------------|-------|-------|-------|-----------------------------|-------|
| 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, основанные на переходе от матриц меньшей размерности к матрицам большей размерности. Рассмотрим первый. При добавлении нового фактора каждая комбинация уровней исходного плана встречается дважды: в сочетании с нижним и верхним уровнями нового фактора. Отсюда естественно появляется прием: записать исходный план для одного уровня нового фактора, а затем повторить его для другого уровня. Вот как это выглядит при переходе от эксперимента 2^2 к 2^3 .

Этот прием распространяется на построение матриц любой размерности.

Основы планирования эксперимента

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.

СВОЙСТВА ПОЛНОГО ФАКТОРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА ТИПА 2^k

Полный факторный эксперимент относится к числу планов, которые являются наиболее эффективными при построении линейных моделей. Эффективность, иначе оптимальность, полного факторного эксперимента достигается за счет ниже перечисленных его свойств.

Два свойства следуют непосредственно из построения матрицы.

Первое из них – симметричность относительно центра эксперимента – формулируется следующим образом: алгебраическая сумма элементов вектора-

столбца каждого фактора равна нулю, или
$$\sum_{j=1}^N x_{ij} = 0,$$
 где $i = 1, 2, \dots, k$ – номер фактора, N – число опытов.

Второе свойство – так называемое условие нормировки – формулируется следующим образом: сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу опытов, или

$$\sum_{j=1}^N x_{ij}^2 = N$$

. Это следствие того, что значения факторов в матрице задаются +1 и –1. Мы рассмотрели свойства отдельных столбцов матрицы планирования. Рассмотрим свойства совокупности столбцов. Сумма почленных произведений

любых двух вектор-столбцов матрицы равна нулю, или
$$\sum_{j=1}^N x_{ij}x_{uj} = 0$$
 при $i \neq u$, а также $i, u = 0, 1, \dots, k$. Это важное свойство называется ортогональностью матрицы планирования. Последнее, четвертое свойство называется ротатабельностью, т.е. точки в матрице планирования подбираются так, что точность предсказаний значений параметра оптимизации одинакова на равных расстояниях от центра эксперимента и не зависит от направления.

Выполнение этих условий обеспечивает минимальную дисперсию коэффициентов регрессии, но и равенство дисперсии. Это облегчает статистический анализ результатов эксперимента.

Основы планирования эксперимента

Полный факторный эксперимент и математическая модель

Давайте еще раз вернемся к матрице 2³. 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.

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

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

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

$$\Phi = \sum_{i=1}^n (\varphi(X_1, \dots, X_k, b_0, \dots, b_k) - Y_i)^2, \text{ поскольку } \begin{cases} \frac{\partial \Phi}{\partial b_0} = 0 \\ \dots \\ \frac{\partial \Phi}{\partial b_k} = 0 \end{cases},$$

то после дифференцирования получим

$$\begin{cases} \frac{\partial \Phi}{\partial b_0} = 2 \sum_{i=1}^n (\varphi(X_1, \dots, X_k, b_0, \dots, b_k) - Y_i) \frac{\partial \varphi}{\partial b_0} = 0, \\ \dots \\ \frac{\partial \Phi}{\partial b_k} = 2 \sum_{i=1}^n (\varphi(X_1, \dots, X_k, b_0, \dots, b_k) - Y_i) \frac{\partial \varphi}{\partial b_k} = 0. \end{cases}$$

Для линейной регрессии при k=2:

$$Y_i = \varphi(X_{1i}, X_{2i}, b_0, b_1, b_2), Y_i = b_0 + b_1X_{1i} + b_2X_{2i};$$

продифференцировав по коэффициентам, получим:

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

Запишем уравнения в полной форме:

Основы планирования эксперимента

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n (b_0 + b_1 X_{1i} + b_2 X_{2i} - Y_i) * 1 = 0, \\ \sum_{i=1}^n (b_0 + b_1 X_{1i} + b_2 X_{2i} - Y_i) * X_{1i} = 0, \Leftrightarrow \\ \sum_{i=1}^n (b_0 + b_1 X_{1i} + b_2 X_{2i} - Y_i) * X_{2i} = 0. \end{cases}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

Вы видите, что благодаря кодированию факторов расчет коэффициентов превратился в простую арифметическую процедуру.

Для подсчета коэффициента b_1 используется вектор-столбец x_1 а для b_2 – столбец x_2 . Остается неясным, как найти b_0 . Если наше уравнение $y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2$ 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

Основы планирования эксперимента

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.

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

РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ РЕГРЕССИИ

Построив матрицу планирования осуществляют эксперимент. Получив экспериментальные данные рассчитывают значения коэффициентов регрессии. Значение свободного члена (b_0) берут как среднее арифметическое всех значений параметра оптимизации в матрице:

$$b_0 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N y_u,$$

где y_u - значения параметра оптимизации в u -м опыте; N – число опытов в матрице.

Линейные коэффициенты регрессии рассчитывают по формуле

$$b_i = \frac{\sum_{u=1}^N x_{iu} y_u}{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2} = \frac{\sum_{u=1}^N x_{iu} y_u}{N},$$

где x_{iu} - кодированное значение фактора i в u -м опыте. Коэффициенты регрессии, характеризующие парное взаимодействие факторов, находят по формуле

Основы планирования эксперимента

$$b_{ij} = \frac{\sum_1^N x_{iu} x_{ju} y_u}{\sum_1^N x_{iu}^2} = \frac{\sum_1^N x_{iu} x_{ju} y_u}{N}$$

Рассмотрим пример расчета коэффициентов регрессии для планирования , матрица планирования которой приведена в табл.

$$b_0 = \frac{y_1 + y_2 + y_3 + y_4}{4};$$

$$b_1 = \frac{+y_1 - y_2 + y_3 - y_4}{4};$$

$$b_2 = \frac{+y_1 + y_2 - y_3 - y_4}{4};$$

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

Рассмотрим уравнение регрессии для k=3.

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{123} x_1 x_2 x_3,$$

где b_0 - свободный член;

b_1, b_2, b_3 - линейные коэффициенты;

b_{12}, b_{13}, b_{23} - коэффициенты двойного взаимодействия;

b_{123} - коэффициент тройного взаимодействия.

Полное число всех возможных коэффициентов регрессии, включая 0 в , линейные коэффициенты и коэффициенты взаимодействий всех порядков, равно числу опытов полного факторного эксперимента. Чтобы найти число взаимодействий некоторого порядка, можно воспользоваться формулой числа сочетаний.

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

где k – число факторов; m – число элементов во взаимодействии.

Так, для плана число парных взаимодействий равно шести

$$C_4^2 = \frac{4!}{2!2!} = 6$$

Отсюда видно, что с ростом числа факторов число возможных взаимодействий быстро растет. Рассмотрим на примере физический смысл взаимодействия. Пусть на некоторый химический процесс влияют два фактора: температура и время реакции. В области низких температур увеличение времени увеличивает выход продукта. При переходе в область высоких температур эта закономерность нарушается. Здесь необходимо уменьшить время реакции. Это и есть проявление эффекта взаимодействия

3.4 Дробный факторный эксперимент

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

Минимизация числа опытов

Начнем с самого простого – полного факторного эксперимента 2^k . Запишем еще раз матрицу планирования. Пользуясь таким планированием, можно вычислить четыре коэффициента и представить результаты эксперимент в виде неполного квадратного уравнения.

Если имеются основания считать, что в выбранных интервалах варьирования процесс может быть описан линейной моделью, то достаточно определить три коэффициента: b_0 , b_1 и b_2 . Остается одна степень свободы. Употребим ее для минимизации числа опытов. При линейном приближении $b_{12} \rightarrow 0$ 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.

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

Дробная реплика

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

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 четырех факторного планирования будет полурепликой от полного факторного эксперимента 2^4 , а для пятифакторного планирования – четверть-репликой от 2^5 . В последнем случае два линейных эффекта приравниваются к эффектам взаимодействия. Для

Основы планирования эксперимента

обозначения дробных реплик, в которых p линейных эффектов приравнены к эффектам взаимодействия, удобно пользоваться условным обозначением 2^{k-p} . Так, полуреплика от 2^3 запишется в виде 2^{3-1} а четвертьреплика от 2^5 – в виде 2^{5-2} .

Эксперимент, реализующий часть (дробную реплику) полного факторного эксперимента, называется дробным факторным экспериментом (ДФЭ). ДФЭ позволяет получить приближение искомой функциональной зависимости $Y=f(X_1, \dots, X_n)$ в некоторой небольшой окрестности точки базового режима при минимуме опытов.

С увеличением количества факторов, согласно методу полного факторного эксперимента, резко возрастает общее число опытов. Однако для нахождения коэффициентов регрессии не всегда требуется полное число опытов, определяемое полным факторным экспериментом. Если воспользоваться методом дробного факторного эксперимента, то можно уменьшить общее число опытов. Этот метод заключается в том, что для нахождения уравнения коэффициентов регрессии используется некоторая часть полного факторного эксперимента: $1/2$, $1/4$, $1/8$ и т.д. Такие части полного факторного эксперимента называются дробными репликами.

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

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

Пользуясь таким планированием, можно вычислить четыре коэффициента и представить результаты эксперимента в виде неполного квадратного уравнения $y = b_0 x_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2$.

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 $x_1 x_2$ можно использовать для нового фактора x_3 . Поставим этот фактор в скобках над взаимодействием $x_1 x_2$ 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:

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

Но нас это не должно огорчать. Ведь мы постулируем линейную модель, и, следовательно, все парные взаимодействия незначимы. Главное, мы нашли средство минимизировать число опытов: вместо восьми опытов для изучения трех факторов оказывается можно поставить четыре. При этом матрица планирования

Основы планирования эксперимента

не теряет своих оптимальных свойств (ортогональность, ротатабельность и т.п.), в чем вы можете самостоятельно убедиться. 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.

Три матрицы, приведенные ниже предлагаются взамен полного факторного эксперимента 2^3 , требующего, как вы знаете, восьми опытов.

Каким бы из них вы воспользовались?

| Номер опыта | 0 | x | x | x | x | y |
|-------------|---|---|---|---|---|-------|
| 1 | 1 | + | - | - | + | y_1 |
| 2 | 1 | + | + | + | - | y_2 |
| 3 | 1 | + | - | + | - | y_3 |
| 4 | 1 | + | + | - | + | y_4 |

| Номер опыта | 0 | x | x | x | x | y |
|-------------|---|---|---|---|---|-------|
| 1 | 1 | + | - | - | + | y_1 |
| 2 | 1 | + | + | + | + | y_2 |
| 3 | 1 | + | - | + | - | y_3 |

| Номер опыта | 0 | x | x | x | x | y |
|-------------|---|---|---|---|---|-------|
| 1 | 1 | + | - | - | + | y_1 |
| 2 | 1 | + | + | + | + | y_2 |
| 3 | 1 | + | - | + | - | y_3 |
| 4 | 1 | + | + | - | - | y_4 |

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

Основы планирования эксперимента

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

Теперь перемножим каждую пару вектор-столбцов и посмотрим, будет ли сумма произведений равна 0. К сожалению $\sum_1^4 x_{2i}x_{3i} = -4$, 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 $b_3 \rightarrow \beta_3 - \beta_2$ и $b_2 \rightarrow \beta_2 - \beta_3$. 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: b_0 , b_1 , b_2 и b_3 . 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

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

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 $b_1 \approx \beta_1$; $b_2 \approx \beta_2$; $b_3 \approx \beta_3$.

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. При этом нам не обойтись без новых определений и понятий.

Поставив четыре опыта для оценки влияния трех факторов, мы воспользовались половиной полного факторного эксперимента 2^3 , или «полурепликой». Если бы мы x_3 приравняли к $-x_1x_2$, то получили бы вторую половину матрицы 2^3 . В этом случае: $b_1 \rightarrow \beta_1 - \beta_{23}$; $b_2 \rightarrow \beta_2 - \beta_{13}$; $b_3 \rightarrow \beta_3 - \beta_{12}$. При реализации обеих полуреплик можно получить отдельные оценки для линейных эффектов и эффектов взаимодействия, как и в полном факторном эксперименте 2^3 .

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

Основы планирования эксперимента

Матрица из восьми опытов для четырехфакторного планирования будет полурепликой от полного факторного эксперимента 2^4 , а для пятифакторного планирования – четверть-репликой от 2^5 . В последнем случае два линейных эффекта приравниваются к эффектам взаимодействия. Для обозначения дробных реплик, в которых p линейных эффектов приравнены к эффектам взаимодействия, удобно пользоваться условным обозначением 2^{k-p} . Так, полуреплика от 2^6 запишется в виде 2^{6-1} , а четверть-реплика от 2^5 – в виде 2^{5-2} .

Генерирующие соотношений и определяющие контрасты

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

| номер опыта | I: $x_3 = x_1x_2$ | | | | II: $x_3 = -x_1x_2$ | | | |
|----------------|-------------------|---|---|-------------|---------------------|---|---|-------------|
| | 1 | 2 | 3 | $x_1x_2x_3$ | 1 | 2 | 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. Чтобы определить, какой эффект смешан с данным, нужно помножить обе части определяющего контраста на столбец, соответствующий данному эффекту. Так, для первой полуреплики определяющий контраст $1 = x_1x_2x_3$, помогает вычислить генерирующие соотношения: $x_1 = x_1^2x_2x_3$, так как $x_i^2 = 1$, получим $x_1 = x_2x_3$, аналогично $x_2 = x_1x_2^2x_3 = x_1x_3$ и $x_3 = x_1x_2x_3^2 = x_1x_2$.

Для второй полуреплики с помощью определяющего контраста $-1 = x_1x_2x_3$ будем иметь другие генерирующие соотношения: $x_1 = -x_1^2x_2x_3 = -x_2x_3$; $x_2 = -x_1x_2^2x_3 = -x_1x_3$; $x_3 = -x_1x_2x_3^2 = -x_1x_2$.

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

Если полуреплики заданы генерирующими соотношениями $x_4 = x_1x_2$ и $x_4 = -x_1x_2$, то в этом случае определяющими контрастами являются $1 = x_1x_2x_4$ и $1 = -x_1x_2x_4$, следовательно, мы получаем планы с разрешающей способностью III и некоторые основные эффекты смешиваем с парными взаимодействиями:

- | | |
|-------------------------|-----------------------|
| 1. $x_1 = x_2x_4$ | $x_1 = -x_2x_4$ |
| 2. $x_2 = x_1x_4$ | $x_2 = -x_1x_4$ |
| 3. $x_3 = x_1x_2x_3x_4$ | $x_3 = -x_1x_2x_3x_4$ |
| 4. $x_4 = x_1x_2$ | $x_4 = -x_1x_2$ |
| 5. $x_2x_3 = x_1x_3x_4$ | $x_2x_3 = -x_1x_3x_4$ |

Основы планирования эксперимента

6. $x_1x_3 = x_2x_3x_4$ $x_1x_3 = -x_2x_3x_4$

7. $x_3x_4 = x_1x_2x_3$ $x_3x_4 = -x_1x_2x_3$

Разрешающая способность этих полуреплик ниже, чем у планов с разрешающей способностью IV, с помощью которых линейные эффекты определяются независимо от парных взаимодействий.

Эти полуреплики имеют в каждой строке как четные, так и нечетные комбинации букв. Такие полуреплики не являются главными. Разумен выбор такой полуреплики, если имеется априорная информация о большей значимости тройных взаимодействий по сравнению с парными или о незначимости трех парных взаимодействий x_2x_4 , x_1x_4 , x_1x_2 .

Выбор 1/4-реплик.

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

- | | |
|---------------------|--------------------|
| 1. $x_4 = x_1x_2$ | $x_5 = x_1x_2x_3$ |
| 2. $x_4 = x_1x_2$ | $x_5 = -x_1x_2x_3$ |
| 3. $x_4 = -x_1x_2$ | $x_5 = x_1x_2x_3$ |
| 4. $x_4 = -x_1x_2$ | $x_5 = -x_1x_2x_3$ |
| 5. $x_4 = x_1x_3$ | $x_5 = x_1x_2x_3$ |
| 6. $x_4 = x_1x_3$ | $x_5 = -x_1x_2x_3$ |
| 7. $x_4 = -x_1x_3$ | $x_5 = x_1x_2x_3$ |
| 8. $x_4 = -x_1x_3$ | $x_5 = -x_1x_2x_3$ |
| 9. $x_4 = x_2x_3$ | $x_5 = x_1x_2x_3$ |
| 10. $x_4 = x_2x_3$ | $x_5 = -x_1x_2x_3$ |
| 11. $x_4 = -x_2x_3$ | $x_5 = x_1x_2x_3$ |
| 12. $-x_4 = x_2x_3$ | $x_5 = -x_1x_2x_3$ |

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

Если перемножить эти определяющие контрасты, то получится третье соотношение, задающее элементы столбца $1 = x_2x_4x_5$. Чтобы полностью охарактеризовать разрешающую способность реплики, необходимо записать обобщающий определяющий контраст $1 = x_1x_3x_4 = x_2x_4x_5 = x_1x_2x_3x_5$

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

- $x_1 = x_3x_4 = x_1x_2x_4x_5 = x_2x_3x_5$
 $x_2 = x_1x_2x_3x_4 = x_4x_5 = x_1x_3x_5$
 $x_3 = x_1x_4 = x_2x_3x_4x_5 = x_1x_2x_5$
 $x_4 = x_1x_3 = x_2x_5 = x_1x_2x_3x_4x_5$
 $x_5 = x_1x_3x_4x_5 = x_2x_4 = x_1x_2x_3$
 $x_1x_2 = x_2x_3x_4 = x_1x_4x_5 = x_3x_5$
 $x_1x_5 = x_3x_4x_5 = x_1x_2x_4 = x_2x_3$

Получается довольно сложная система смешивания линейных эффектов с эффектами взаимодействия первого, второго, третьего и четвертого порядков. Если, например, коэффициенты b_{12} и b_{15} отличны от нуля, то возникают сомнения, можно ли пренебрегать другими парными взаимодействиями, с которыми

Основы планирования эксперимента

смешаны линейные эффекты. Тогда следует поставить вторую серию опытов, выбрав нужным образом другую 1/4-реплику.

Достоинство принципа насыщения становится более ощутимым с ростом факторов. Например, при изучении 15 факторов имеется возможность проведения 16 экспериментов, вместе 32768 (2^{15}).

Характеристика дробных реплик

| Число факторов | Дробная реплика | Условное обознач. | Число опытов | |
|----------------|----------------------------|-------------------|--------------------|----------------------------------|
| | | | для дробных реплик | для полного факторного эксперим. |
| 3 | 1/2 – реплика от 2^3 | 2^{3-1} | 4 | 8 |
| 4 | 1/2 – реплика от 2^4 | 2^{4-1} | 8 | 16 |
| 5 | 1/4 – реплика от 2^3 | 2^{5-2} | 8 | 32 |
| 6 | 1/8 – реплика от 2^5 | 2^{6-3} | 8 | 64 |
| 7 | 1/16 – реплика от 2^6 | 2^{7-4} | 8 | 128 |
| 5 | 1/2 – реплика от 2^5 | 2^{5-1} | 16 | 32 |
| 6 | 1/4 – реплика от 2^6 | 2^{6-2} | 16 | 64 |
| 7 | 1/8 – реплика от 2^7 | 2^{7-3} | 16 | 128 |
| 8 | 1/16 – реплика от 2^8 | 2^{8-4} | 16 | 256 |
| 9 | 1/32-реплика от 2^9 | 2^{9-5} | 16 | 512 |
| 10 | 1/64-реплика от 2^{10} | 2^{10-6} | 16 | 1024 |
| 11 | 1/128-реплика от 2^{11} | 2^{11-7} | 16 | 2048 |
| 12 | 1/256-реплика от 2^{12} | 2^{12-8} | 16 | 4096 |
| 13 | 1/512-реплика от 2^{13} | 2^{13-9} | 16 | 8192 |
| 14 | 1/1024-реплика от 2^{14} | 2^{14-10} | 16 | 16384 |
| 15 | 1/2048-реплика от 2^{15} | 2^{15-11} | 16 | 32768 |

Способ сокращения числа экспериментов можно сформулировать в виде общего правила.

Чтобы сократить число опытов, нужно дополнительно вводимый в эксперимент фактор варьировать как вектор–столбец матрицы, соответствующий взаимодействию, которым можно пренебречь. Тогда изменение уровней нового фактора определится знаками этого вектор–столбца.

При выборе дробных реплик необходимо определить и проанализировать с учетом априорной информации схему замещения оценок коэффициентов модели. С этой целью вычисляют генерирующие соотношения, которые показывают, с каким из эффектов смешан данный эффект.

В задачах с большим числом факторов выбор взаимодействия для насыщения плана решает относительно непросто. Следует помнить, что основное положение при выборе взаимодействий в общем случае состоит в следующем.

Основы планирования эксперимента

При введении в эксперимент новых факторов следует выделять им столбцы матрицы, принадлежащие взаимодействиям с более высоким порядком. Так, вводя 4-й фактор в план 2^3 , следует варьировать x_4 как столбец матрицы с взаимодействием третьего порядка $x_1x_2x_3$, т. е. $x_4 = x_1x_2x_3$, так как предположение об отсутствии взаимодействия $x_1x_2x_3$ более реально, по сравнению, например, с взаимодействием x_1x_2 .

3.5 Подготовка эксперимента. Выбор условий проведения опытов

Наиболее важной составной частью научных исследований являются эксперименты. Это один из основных способов получить новые научные знания. Более 2/3 всех трудовых ресурсов науки затрачивается на эксперименты. В основе экспериментального исследования лежит эксперимент, представляющий собой научно поставленный опыт или наблюдение явления в точно учитываемых условиях, позволяющих следить за его ходом, управлять им, воссоздавать его каждый раз при повторении этих условий. От обычного, обыденного, пассивного наблюдения эксперимент отличается активным воздействием исследователя на изучаемое явление.

Основной целью эксперимента является проверка теоретических положений (подтверждение рабочей гипотезы), а также более широкое и глубокое изучение темы научного исследования.

Эксперимент должен быть проведен по возможности в кратчайший срок с минимальными затратами при самом высоком качестве полученных результатов.

Уточнение условий проведения эксперимента (имеющееся или доступное оборудование, сроки работ, финансовые ресурсы, численность и кадровый состав работников и т.п.). Выбор вида испытаний (нормальные, ускоренные, сокращенные в условиях лаборатории).

После того как выбран объект исследования и параметр оптимизации, нужно включить в рассмотрение все существенные факторы, которые могут влиять на процесс. Если какой-либо существенный фактор окажется неучтенным, то это может привести к неприятным последствиям. Так, если неучтенный фактор произвольно флуктуировал – принимал случайные значения, которые экспериментатор не контролировал, – это значительно увеличит ошибку опыта. При поддержании фактора на некотором фиксированном уровне может быть получено ложное представление об оптимуме, так как нет гарантии, что фиксированный уровень является оптимальным.

3.6 Проведение эксперимента

Важное место в экспериментальных исследованиях занимают измерения. Измерение – это нахождение физической величины опытным путем с помощью

Основы планирования эксперимента

специальных технических средств. Суть измерения составляет сравнение измеряемой величины с известной величиной, принятой за единицу (эталон).

Теорией и практикой измерения занимается метрология – наука об измерениях, методах и средствах обеспечения их единства и способах достижения требуемой точности.

Важнейшие значения в метрологии отводятся эталонам и образцовым средствам измерений. К эталонам относятся средства измерений (или комплекс средств измерений), обеспечивающих воспроизведение и хранение единицы с целью передачи ее размера нижестоящим средствам измерения. Эталоны выполнены по особой спецификации. Образцовые средства измерений служат для проверки по ним рабочих (технических) средств измерения, постоянно используемых непосредственно в исследованиях.

Передача размеров единиц от эталонов или образцовых средств измерений рабочим средствам осуществляется государственными и ведомственными метрологическими органами, составляющими метрологическую службу, их деятельность обеспечивает единство измерений и единообразие средств измерений в стране[4, с. 259].

Методы измерений можно подразделить на прямые и косвенные. При прямых измерениях искомую величину устанавливают непосредственно из опыта, при косвенных – функционально от других величин, определенных прямыми измерениями.

Различают также абсолютные и относительные измерения. Абсолютные – это прямые измерения в единицах измеряемой величины; относительные измерения представляют собой отношение измеряемой величины к одноименной величине, играющей роль единицы или измерения этой величины по отношению к одноименной, принимаемой за исходную.

В исследованиях применяются совокупные и совместные измерения. При совокупных измерениях одновременно измеряются несколько одноименных величин, а искомую величину при этом находят путем решения системы уравнений. При совместных измерениях – одновременно проводят измерения неоднородных величин для нахождения зависимости между ними.

Выделяется несколько основных методов измерения.

Метод непосредственной оценки соответствует определению значения величины непосредственно по отсчетному устройству измерительного прибора прямого действия (например, измерение массы на циферблатных весах). При использовании метода сравнения с мерой измеряемую величину сравнивают с величиной, воспроизводимой мерой (например, измерение массы на рычажных весах с уравновешиванием гирями). При методе противопоставления осуществляется сравнение с мерой (измеряемая величина и величина, воспроизводимая мерой, одновременно воздействуют на прибор, с помощью которого устанавливается соотношение между этими величинами, как, например, при измерении массы на равноплечных весах с помещением измеряемой массы и гирь на двух противоположных чашках весов). При дифференциальном методе на измерительный прибор воздействует разность измеряемой и известной величины, воспроизводимой мерой (например, измерения, выполняемые при проверке мер длины сравнением с образцовой мерой на компараторе). При нулевом методе

Основы планирования эксперимента

результатирующий эффект воздействия величины на прибор доводят до нуля (например, измерение электрического сопротивления мостом с полным его уравниванием). При методе замещения измеренную величину замещают известной величиной, воспроизводимой мерой (например, взвешивание с поочередным помещением измеряемой массы и гири на одну и ту же чашку весов). При методе совпадений разность между измеряемой величиной и величиной воспроизводимой мерой измеряется с использованием совпадения отметок шкал или периодических сигналов[4, с. 262].

Неотъемлемой частью экспериментальных исследований являются средства измерений, т.е. совокупность технических средств, имеющих нормированные погрешности, которые дают необходимую информацию для экспериментатора. К средствам измерений относят меры, измерительные приборы, установки и системы.

Измерительные приборы (отсчетные устройства) характеризуются величиной погрешности и точности, стабильностью измерений и чувствительностью. Погрешность средства измерения – одна из важнейших его характеристик. Она возникает вследствие недоброкачественных материалов, комплектующих изделий, применяемых для приготовления приборов; плохого качества изготовления приборов; неудовлетворительной эксплуатации и др. Существенное влияние оказывают градуировка шкалы и периодическая проверка приборов. Кроме этих систематических погрешностей возникают случайные, обусловленные сочетаниями различных случайных факторов – ошибками отсчета, параллаксом, вариацией и т.д. Таким образом необходимо рассматривать не какие-либо отдельные, а суммарные погрешности приборов. Погрешности приборов бывают абсолютными и относительными. Суммарные погрешности, установленные при нормальных условиях, называют основными погрешностями прибора.

Разность между максимальным и минимальным показаниями прибора называют размахом. Если эта величина непостоянная, т.е. если при обратном ходе имеется увеличение или уменьшение хода, то эту разность называют вариацией показаний W . Величина W – это простейшая характеристика погрешности прибора. Другой характеристикой прибора является его чувствительность, т.е. способность отсчитывающего устройства реагировать на изменения измеряемой величины. Под порогом чувствительности прибора понимают наименьшее значение измеренной величины, вызывающее изменение показания прибора, которое можно зафиксировать.

Основной характеристикой прибора является его точность. Она характеризуется суммарной погрешностью. Средства измерения делятся на классы точности. Класс точности – это обобщенная характеристика, определяемая пределами основной и дополнительных допускаемых погрешностей, влияющих на точность.

Стабильность (воспроизводимость прибора) – это свойство отсчетного устройства обеспечивать постоянство показаний одной и той же величины. Со временем в результате старения материалов стабильность показаний приборов нарушается.

Все средства измерения проходят периодическую проверку на точность. Такая проверка предусматривает определение и по возможности уменьшение

Основы планирования эксперимента

погрешностей приборов. Проверка позволяет установить соответствие данного прибора регламентированной степени точности и определяет возможность применения для данных измерений.

ЛЕКЦИЯ 4

4.1 Методы обработки результатов эксперимента

Основная цель обработки экспериментальных данных состоит в получении определённых сведений об исследуемом объекте (процессе, явлении). Особенности процесса обработки определяются характером решаемых задач и объёмом информации, получаемой в ходе эксперимента. По указанным признакам обработка может быть первичной и вторичной.

Задачами первичной обработки являются выделение полезного сигнала на фоне помех (шумов), сжатие данных и приведение их к системе измерений, пригодной для дальнейшей обработки или отображения. Наиболее характерной операцией выделения полезного сигнала является устранение грубых ошибок.

Задачи вторичной обработки могут быть распределены в две группы. Первая группа задач сводится к построению математических моделей реальных процессов и явлений, вторая группа – к анализу таких моделей. Математическая модель – это абстрактное информационное отражение реального процесса или явления на языке математики.

В кибернетике (как технической, так и экономической) и теории управления процедура построения математических моделей объектов управления по результатам наблюдения их входных и выходных процессов называется идентификацией. Параллельно с теорией идентификации в кибернетике развивается теория распознавания образов, которая также связана с проблематикой построения математических моделей по результатам обработки экспериментальных данных. Распознавание образов представляет собой задачу обработки данных, в процессе которой делается вывод о принадлежности распознаваемого образа к определённому классу. Этот класс и определяет вид искомой модели.

Наиболее типовыми задачами построения математических моделей на основе статистических методов являются задачи оценивания параметров (например, параметров законов распределения случайных объектов), оценивания неизвестных функциональных зависимостей (например, законов распределения), проверки гипотез, построения уравнений регрессии и распознавания образов.

В задачах анализа моделей производится оценка влияния множества факторов на конечный результат и выбор наиболее важных факторов, а также исследуется структура экспериментальных данных и построенных на их основе математических моделей.

Один из возможных вариантов перечня задач, решаемых при первичной и вторичной обработке показан на рис

Основы планирования эксперимента



Также обработка экспериментальных данных включает в себя несколько этапов:

- Предварительная обработка данных. На этом этапе как правило, осуществляется устранение помехи действующей на объект и обусловленной случайными факторами, путём использования фильтров. Случайная составляющая помехи встречается практически при любых измерениях.

- Собственно идентификация. Это определение параметров математической модели по экспериментальным данным. При этом виде математической модели (это может быть уравнение прямой, параболы, или любая другая зависимость) выбирается заранее. Определение параметров в общем случае – это поиск минимума многомерной функции-критерия.

- Оценка результатов моделирования, т.е оценка адекватности математической модели данным эксперимента.

Статистическая обработка результатов эксперимента, построение математической модели поведения исследуемых характеристик. Необходимость обработки вызвана тем, что выборочный анализ отдельных данных, вне связи с остальными результатами, или же некорректная их обработка могут не только снизить ценность практических рекомендаций, но и привести к ошибочным выводам. Обработка результатов включает:

- определение доверительного интервала среднего значения и дисперсии (или среднего квадратичного отклонения) величин выходных параметров (экспериментальных данных) для заданной статистической надежности;

- проверка на отсутствие ошибочных значений (выбросов), с целью исключения сомнительных результатов из дальнейшего анализа. Проводится на соответствие одному из специальных критериев, выбор которого зависит от закона распределения случайной величины и вида выброса;

- проверка соответствия опытных данных ранее априорно введенному закону распределения. В зависимости от этого подтверждаются выбранный план

Основы планирования эксперимента

эксперимента и методы обработки результатов, уточняется выбор математической модели.

Построение математической модели выполняется в случаях, когда должны быть получены количественные характеристики взаимосвязанных входных и выходных исследуемых параметров. Это— задачи аппроксимации, то есть выбора математической зависимости, наилучшим образом соответствующей экспериментальным данным. Для этих целей применяют регрессионные модели, которые основаны на разложении искомой функции в ряд с удержанием одного (линейная зависимость, линия регрессии) или нескольких (нелинейные зависимости) членов разложения (ряды Фурье, Тейлора). Одним из методов подбора линии регрессии является широко распространенный метод наименьших квадратов.

Для оценки степени взаимосвязанности факторов или выходных параметров проводят корреляционный анализ результатов испытаний. В качестве меры взаимосвязанности используют коэффициент корреляции: для независимых или нелинейно зависимых случайных величин он равен или близок к нулю, а его близость к единице свидетельствует о полной взаимосвязанности величин и наличии между ними линейной зависимости. При обработке или использовании экспериментальных данных, представленных в табличном виде, возникает потребность получения промежуточных значений. Для этого применяют методы линейной и нелинейной (полиномиальной) интерполяции (определение промежуточных значений) и экстраполяции (определение значений, лежащих вне интервала изменения данных).

Объяснение полученных результатов и формулирование рекомендаций по их использованию, уточнению методики проведения эксперимента.

Снижение трудоемкости и сокращение сроков испытаний достигается применением автоматизированных экспериментальных комплексов. Такой комплекс включает испытательные стенды с автоматизированной установкой режимов (позволяет имитировать реальные режимы работы), автоматически обрабатывает результаты, ведет статистический анализ и документирует исследования. Но велика и ответственность инженера в этих исследованиях: четкие поставленные цели испытаний и правильно принятое решение позволяют точно найти слабое место изделия, сократить затраты на доводку и итерационность процесса проектирования.

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

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

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

4.2 Метод наименьших квадратов

Начнем с простого случая: один фактор, линейная модель. Интересующая нас функция отклика (которую мы будем также называть уравнением регрессии) имеет вид $y = b_0 + b_1 x_1$

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

Если бы все экспериментальные точки лежали строго на прямой линии, то для каждой из них было бы справедливо равенство $y_i - b_0 - b_1 x_{1i} = 0$

где $i = 1, 2, \dots, N$ – номер опыта. Тогда не было бы никакой проблемы. На практике это равенство нарушается и вместо него приходится писать $y_i - b_0 - b_1 x_{1i} = \xi_i$

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

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

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

которая приводит к методу наименьших квадратов.

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

Поэтому система линейных уравнений $\xi_i = y_i - b_0 - b_1 x_{1i}$ оказывается переопределенной и часто противоречивой (т. е. она может иметь бесконечно много решений или может не иметь решений). Переопределенность возникает, когда число уравнений больше числа неизвестных; противоречивость – когда некоторые из уравнений несовместимы друг с другом.

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

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

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

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

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

Основы планирования эксперимента

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

В явном виде это запишется как

$$\left. \begin{aligned} -2 \sum_{i=1}^N (y_i - b_0 - b_1 x_{1i}) &= 0 \\ -2 \sum_{i=1}^N (y_i - b_0 - b_1 x_{1i}) x_{1i} &= 0 \end{aligned} \right\} \begin{cases} Nb_0 + \left(\sum_{i=1}^N x_{1i} \right) b_1 = \sum_{i=1}^N y_i \\ \left(\sum_{i=1}^N x_{1i} \right) b_0 + \left(\sum_{i=1}^N x_{1i}^2 \right) b_1 = \sum_{i=1}^N y_i x_{1i} \end{cases}$$

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

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^N y_i \cdot \sum_{i=1}^N x_{1i}^2 - \sum_{i=1}^N y_i x_{1i} \cdot \sum_{i=1}^N x_{1i}}{N \cdot \sum_{i=1}^N x_{1i}^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_{1i} \right)^2} \quad b_1 = \frac{N \cdot \sum_{i=1}^N y_i x_{1i} - \sum_{i=1}^N y_i \cdot \sum_{i=1}^N x_{1i}}{N \cdot \sum_{i=1}^N x_{1i}^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_{1i} \right)^2}$$

$$U = \sum_{i=1}^N \xi_i^2 = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^N \Delta y_i^2$$

Величина $\sum_{i=1}^N \xi_i^2$ называется остаточной суммой

квадратов \hat{y}_i – значение параметра оптимизации, вычисленное из уравнения регрессии). МНК гарантирует, что эта величина минимально возможная.

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

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

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

Для любого числа факторов коэффициенты будут вычисляться по формуле

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

В этой формуле $j = 0, 1, 2, \dots, k$ – номер фактора. Ноль записан для вычисления b_0 .

Так как каждый фактор (кроме x_0) варьируется на двух уровнях +1 и -1, то вычисления сводятся к приписыванию столбцу у знаков соответствующего фактору столбца и алгебраическому сложению полученных значений. Деление результата на число опытов в матрице планирования дает искомый коэффициент.

Регрессионный анализ

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

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

Основы планирования эксперимента

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

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

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

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

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

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

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

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

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

4.3 Проверка адекватности модели

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

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

Основы планирования эксперимента

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

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

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

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

$$f = \frac{s_{ад}^2}{s_{(y)}^2}$$

$s_{(y)}^2$ – это дисперсия воспроизводимости со своим числом степеней свободы.

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

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

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

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

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

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

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

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

Основы планирования эксперимента

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

Для дисперсии адекватности можно записать общую формулу

$$s_{ад.}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N n_i (\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2}{f}$$

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

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

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

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

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

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

4.4 Анализ результатов и принятие решений. Принятие решений после построения модели. Интерпретация результатов

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

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

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

Основы планирования эксперимента

неблагоприятно. Если же $y \rightarrow \min$ то, наоборот, благоприятно увеличение значений тех факторов, знаки коэффициентов которых отрицательны.

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

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

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

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

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

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

Основы планирования эксперимента

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

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

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

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

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

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

Принятие решений после построения модели процесса

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

Основы планирования эксперимента

Обсудим сначала принятие решения для адекватного линейного уравнения регрессии.

Линейная модель адекватна. Здесь возможны 3 варианта.

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

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

Рассмотрим первый вариант.

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

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

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

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

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

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

Доработка плана осуществляется несколькими способами.

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

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

Основы планирования эксперимента

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

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

Если область оптимума близка, то возможно также окончание исследования.

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



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

1.Значимость хотя бы одного из эффектов взаимодействия.

2.Значимость суммы коэффициентов регрессии при квадратичных членах

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

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

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

Основы планирования эксперимента

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

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

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

На рис. 2 приведена блок-схема принятия решений в задаче оптимизации для случая, когда линейная модель неадекватна.

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



Рис 2 Блок-схема принятия решений в задаче оптимизации для случая, когда линейная модель неадекватна.

Построение интерполяционной формулы, линейная модель неадекватна

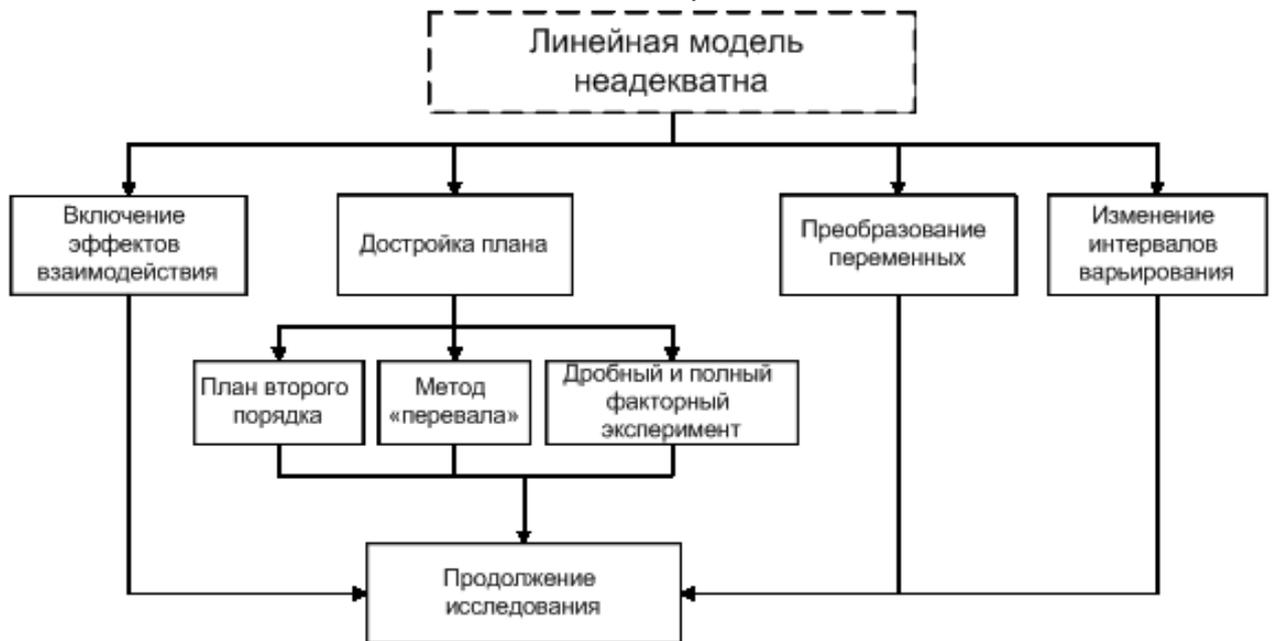
Первое, что следует сделать при решении этой задачи, – включить в уравнение эффекты взаимодействия. Конечно, такое решение возможно, если был применен ненасыщенный план. После добавления эффектов взаимодействия может не хватить степеней свободы для проверки гипотезы адекватности и потребуется реализация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

Основы планирования эксперимента

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

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

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



Проверка значимости коэффициентов

Проверка значимости каждого коэффициента проводится независимо.

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

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

$$s_{\{b_j\}}^2 = \frac{s_{\{y\}}^2}{N}$$

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

Теперь легко построить доверительный интервал $\Delta b_j = \pm ts\{b_j\}$

Основы планирования эксперимента

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

Коэффициент значим, если его абсолютная величина больше доверительного интервала.