Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
**«Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
(ВлГУ)**

Институт машиностроения и автомобильного транспорта

Кафедра автомобильного транспорта, безопасности и управления качеством

Баженов М. Ю.

Конспект лекций по дисциплине

«Аналитические и численные методы в планировании эксперимента»

для студентов ВлГУ,
обучающихся по направлению 23.04.03 Эксплуатация транспортно-технологических машин и комплексов

Владимир – 2022 г.

Лекция № 1: Математическое моделирование.
Форма и принципы представления математических моделей

В лекции рассмотрены общие вопросы математического моделирования. Приведена классификация математических моделей.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

АНАЛИТИЧЕСКИЕ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В ПЛАНИРОВАНИИ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Направление подготовки: 23.04.03 «Эксплуатация транспортно-технологических машин и комплексов»

Программа подготовки: Надежность автотранспортных средств в эксплуатации

Уровень высшего образования: академическая магистратура

Форма обучения: очная

Семестр	Трудоемкость зач. ед./ час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	СРС, час.	Форма промежуточного контроля (экз./зачет)
2	4/144	18	18	–	81	экзамен (27)
Итого	4/144	18	18	–	81	экзамен (27)

ЭВМ прочно вошла в нашу жизнь, и практически нет такой области человеческой деятельности, где не применялась бы ЭВМ. ЭВМ сейчас широко используется в процессе создания и исследования новых машин, новых технологических процессов и поиске их оптимальных вариантов; при решении экономических задач, при решении задач планирования и управления производством на различных уровнях. Создание же крупных объектов в ракетотехнике, авиастроении, судостроении, а также проектирование плотин, мостов, и др. вообще невозможно без применения ЭВМ.

Для использования ЭВМ при решении прикладных задач, прежде всего прикладная задача должна быть "переведена" на формальный математический язык, т.е. для реального объекта, процесса или системы должна быть построена его математическая модель.

Слово "Модель" происходит от латинского *modus* (копия, образ, очертание). ***Моделирование*** – это замещение некоторого объекта А другим объектом Б. Замещаемый объект А называется оригиналом или объектом моделирования, а замещающий Б – ***моделью***. Другими словами, модель – это объект-заменитель объекта-оригинала, обеспечивающий изучение некоторых свойств оригинала.

Целью моделирования являются получение, обработка, представление и использование информации об объектах, которые взаимодействуют между собой и внешней средой; а модель здесь выступает как средство познания свойств и закономерности поведения объекта.

Моделирование широко используются в различных сферах человеческой деятельности, особенно в сферах проектирования и управления, где особенными являются процессы принятия эффективных решений на основе получаемой информации.

Модель всегда строится с определенной целью, которая оказывает влияние на то, какие свойства объективного явления оказываются существенными, а какие – нет. Модель представляет собой как бы проекцию объективной реальности под определенным углом зрения. Иногда в зависимости от целей можно получить ряд проекций объективной реальности, вступающих в противоречие. Это характерно, как правило, для сложных систем, у которых каждая проекция выделяет существенное для определенной цели из множества несущественного.

Теорией моделирования является раздел науки, изучающий способы исследования свойств объектов-оригиналов, на основе замещения их другими объектами-моделями. В основе теории моделирования лежит теория подобия. При моделировании абсолютное подобие не имеет места и лишь стремится к тому, чтобы модель достаточно хорошо отображала исследуемую сторону функционирования объекта. Абсолютное подобие может иметь место лишь при замене одного объекта другим точно таким же.

Все модели можно разделить на два класса:

– ***вещественные;***

– ***идеальные.***

В свою очередь **вещественные** модели можно разделить на:

– ***натурные;***

– ***физические;***

– ***математические.***

Идеальные модели можно разделить на:

– ***наглядные;***

– ***знаковые;***

– ***математические.***

Вещественные натурные модели – это реальные объекты, процессы и системы, над которыми выполняются эксперименты научные, технические и производственные.

Вещественные физические модели – это макеты, муляжи, воспроизводящие физические свойства оригиналов (кинематические, динамические, гидравлические, тепловые, электрические, световые модели).

Вещественные математические – это аналоговые, структурные, геометрические, графические, цифровые и кибернетические модели.

Идеальные наглядные модели – это схемы, карты, чертежи, графики, графы, аналоги, структурные и геометрические модели.

Идеальные знаковые модели – это символы, алфавит, языки программирования, упорядоченная запись, топологическая запись, сетевое представление.

Идеальные математические модели – это аналитические, функциональные, имитационные, комбинированные модели.

В приведенной классификации некоторые модели имеют двойное толкование (например – аналоговые). Все модели, кроме натурных, можно объединить в один класс мысленных моделей, т.к. они являются продуктом абстрактного мышления человека.

Остановимся на одном из наиболее универсальных видов моделирования – <u>математическом</u>, ставящим в соответствие моделируемому физическому процессу систему математических соотношений, решение которой позволяет получить ответ на вопрос о поведении объекта без создания физической модели, часто оказывающейся дорогостоящей и неэффективной.

Математическое моделирование – это средство изучения реального объекта, процесса или системы путем их замены математической моделью, более удобной для экспериментального исследования с помощью ЭВМ.

Математическая модель является приближенным представлением реальных объектов, процессов или систем, выраженным в математических терминах и сохраняющим существенные черты оригинала. Математические модели в количественной форме, с помощью логико-математических конструкций, описывают основные свойства объекта, процесса или системы, его параметры, внутренние и внешние связи.

В общем случае математическая модель реального объекта, процесса или системы представляется в виде системы функционалов

$$\Phi_i\ (X, Y, Z, t) = 0,$$

где X – вектор входных переменных, $X=[x_1,x_2,x_3, \dots , x_N]t$;

Y – вектор выходных переменных, $Y=[y_1,y_2,y_3, \dots , y_N]t$;

Z – вектор внешних воздействий, $Z=[z_1,z_2,z_3, \dots , z_N]t$;

t – координата времени.

Построение математической модели заключается в определении связей между теми или иными процессами и явлениями, создании математического аппарата, позволяющего выразить количественно и качественно связь между теми или иными процессами и явлениями, между интересующими специалиста физическими величинами, и факторами, влияющими на конечный результат.

Обычно их оказывается настолько много, что ввести в модель всю их совокупность не удается. При построении математической модели перед исследованием возникает задача выявить и исключить из рассмотрения факторы, несущественно влияющие на конечный результат (математическая модель обычно включает значительно меньшее число факторов, чем в реальной действительности).

На основе данных эксперимента выдвигаются гипотезы о связи между величинами, выражающими конечный результат, и факторами, введенными в математическую модель. Такая связь зачастую выражается системами дифференциальных уравнений в частных производных (например, в задачах механики твердого тела, жидкости и газа, теории фильтрации, теплопроводности, теории электростатического и электродинамического полей).

Конечной целью этого этапа является формулирование математической задачи, решение которой с необходимой точностью выражает результаты, интересующие специалиста.

Форма и принципы представления математической модели зависит от многих факторов.

По принципам построения математические модели разделяют на:

– аналитические;

– имитационные.

В <u>аналитических моделях</u> процессы функционирования реальных объектов, процессов или систем записываются в виде явных функциональных зависимостей.

Аналитическая модель разделяется на типы в зависимости от математической проблемы:

– уравнения (алгебраические, трансцендентные, дифференциальные, интегральные),

– аппроксимационные задачи (интерполяция, экстраполяция, численное интегрирование и дифференцирование),

– задачи оптимизации,

– стохастические проблемы.

В <u>имитационном моделировании</u> функционирование объектов, процессов или систем описывается набором алгоритмов. Алгоритмы имитируют реальные элементарные явления, составляющие процесс или систему с сохранением их логической структуры и последовательности протекания во времени. Имитационное моделирование позволяет по исходным данным получить сведения о состояниях процесса или системы в определенные моменты времени, однако прогнозирование поведения объектов, процессов или систем здесь затруднительно. Можно сказать, что имитационные модели – это проводимые на ЭВМ вычислительные эксперименты с математическими моделями, имитирующими поведение реальных объектов, процессов или систем..

В зависимости от характера исследуемых реальных процессов и систем математические модели могут быть:

– детерминированные,

– стохастические.

В <u>детерминированных моделях</u> предполагается отсутствие всяких случайных воздействий, элементы модели (переменные, математические связи) достаточно точно установленные, поведение системы можно точно определить. При построении детерминированных моделей чаще всего используются алгебраические уравнения, интегральные уравнения, матричная алгебра.

<u>Стохастическая модель</u> учитывает случайный характер процессов в исследуемых объектах и системах, который описывается методами теории вероятности и математической статистики.

По виду входной информации модели разделяются на:

– непрерывные,

– дискретные.

Если информация и параметры являются непрерывными, а математические связи устойчивы, то модель – <u>непрерывная</u>. И наоборот, если информация и параметры – дискретны, а связи неустойчивы, то и математическая модель – <u>дискретная</u>.

По поведению моделей во времени они разделяются на:

– статические,

– динамические.

<u>Статические модели</u> описывают поведение объекта, процесса или системы в какой-либо момент времени. <u>Динамические модели</u> отражают поведение объекта, процесса или системы во времени.

По степени соответствия между математической моделью и реальным объектом, процессом или системой математические модели разделяют на:

– изоморфные (одинаковые по форме),

– гомоморфные (разные по форме).

Модель называется <u>изоморфной</u>, если между нею и реальным объектом, процессом или системой существует полное поэлементное соответствие. <u>Гомоморфной</u> – если существует соответствие лишь между наиболее значительными составными частями объекта и модели.

Лекция №2: Особенности построения математических моделей

В лекции описан процесс построения математической модели. Приведен словесный алгоритм процесса.

Для использования ЭВМ при решении прикладных задач прежде всего прикладная задача должна быть "переведена" на формальный математический язык, т.е. для реального объекта, процесса или системы должна быть построена его математическая модель.

Математические модели в количественной форме, с помощью логико-математических конструкций, описывает основные свойства объекта, процесса или системы, его параметры, внутренние и внешние связи.

Для построения математической модели необходимо:
– тщательно проанализировать реальный объект или процесс;
– выделить его наиболее существенные черты и свойства;
– определить переменные, т.е. параметры, значения которых влияют на основные черты и свойства объекта;

– описать зависимость основных свойств объекта, процесса или системы от значения переменных с помощью логико-математических соотношений (уравнения, равенства, неравенства, логико-математические конструкций);
– выделить внутренние связи объекта, процесса или системы с помощью ограничений, уравнений, равенств, неравенств, логико-математических конструкций;
– определить внешние связи и описать их с помощью ограничений, уравнений, равенств, неравенств, логико-математических конструкций.

Математическое моделирование, кроме исследования объекта, процесса или системы и составления их математического описания, также включает:
– построение алгоритма, моделирующего поведение объекта, процесса или системы;

– проверка адекватности модели и объекта, процесса или системы на основе вычислительного и натурного эксперимента;
– корректировка модели;
– использование модели.

Математическое описание исследуемых процессов и систем зависит от:

– природы реального процесса или системы и составляется на основе законов физики, химии, механики, термодинамики, гидродинамики, электротехники, теории пластичности, теории упругости и т.д.

– требуемой достоверности и точности изучения и исследования реальных процессов и систем.

На этапе выбора математической модели устанавливаются: линейность и нелинейность объекта, процесса или системы, динамичность или статичность, стационарность или нестационарность, а также степень детерминированности исследуемого объекта или процесса. При математическом моделировании сознательно отвлекаются от конкретной физической природы объектов, процессов или систем и, в основном, сосредотачиваются на изучении количественных зависимостей между величинами, описывающими эти процессы.

Математическая модель никогда не бывает полностью тождественна рассматриваемому объекту, процессу или системе. Основанная на упрощении, идеализации она является приближенным описанием объекта. Поэтому результаты, полученные при анализе модели, носят приближенный характер. Их точность определяется степенью адекватности (соответствия) модели и объекта.

Построение математической модели обычно начинается с построения и анализа простейшей, наиболее грубой математической модели рассматриваемого объекта, процесса или системы. В дальнейшем, в случае необходимости, модель уточняется, делается ее соответствие объекту более полным.

Возьмем простой пример. Нужно определить площадь поверхности письменного стола. Обычно для этого измеряют его длину и ширину, а затем перемножают полученные числа. Такая элементарная процедура фактически обозначает следующее: реальный объект (поверхность стола) заменяется абстрактной математической моделью – прямоугольником. Прямоугольнику приписываются размеры, полученные в результате измерения длины и ширины поверхности стола, и площадь такого прямоугольника приближенно принимается за искомую площадь стола.

Однако модель прямоугольника для письменного стола – это простейшая, наиболее грубая модель. При более серьезном подходе к задаче прежде, чем воспользоваться для определения площади стола моделью прямоугольника, эту модель нужно проверить. Проверки можно осуществить следующим образом: измерить длины противоположных сторон стола, а также длины его диагоналей и сравнить их между собой. Если, с требуемой степенью точности, длины противоположных сторон и длины диагоналей попарно равны между собой, то поверхность стола действительно можно рассматривать как прямоугольник. В противном случае модель прямоугольника придется отвергнуть и заменить моделью четырехугольника общего вида. При более высоком требовании к точности может возникнуть необходимость пойти в уточнении модели еще дальше, например, учесть закругления углов стола.

С помощью этого простого примера было показано, что математическая модель не определяется однозначно исследуемым объектом, процессом или системой. Для одного и того же стола мы можем принять либо модель прямоугольника, либо более сложную модель четырехугольника общего вида, либо четырехугольника с закругленными углами. Выбор той или иной модели определяется требованием точности. С повышением точности модель приходится усложнять, учитывая новые и новые особенности изучаемого объекта, процесса или системы.

Таким образом, важно еще раз подчеркнуть, что, чем выше требования к точности результатов решения задачи, тем больше необходимость учитывать при построении математической модели особенности изучаемого объекта, процесса или системы. Однако здесь важно вовремя остановиться, так как сложная математическая модель может превратиться в трудно разрешимую задачу.

Наиболее просто строится модель, когда хорошо известны законы, определяющие поведение и свойства объекта, процесса или системы, и имеется большой практический опыт их применения.

Более сложная ситуация возникает тогда, когда наши знания об изучаемом объекте, процессе или системе недостаточны. В этом случае при построении математической модели приходится делать дополнительные предположения, которые носят характер гипотез, такая модель называется гипотетической. Выводы, полученные в результате исследования такой гипотетической модели, носят условный характер. Для проверки выводов необходимо сопоставить результаты исследования модели на ЭВМ с результатами натурного эксперимента.

Таким образом, вопрос применимости некоторой математической модели к изучению рассматриваемого объекта, процесса или системы не является математическим вопросом и не может быть решен математическими методами.

Построение математической модели в прикладных задачах – один из наиболее сложных и ответственных этапов работы. Опыт показывает, что во многих случаях правильно выбрать модель – значит решить проблему более, чем наполовину. Трудность данного этапа состоит в том, что он требует соединения математических и специальных знаний. Поэтому очень важно, чтобы при решении прикладных задач математики обладали специальными знаниями об объекте, а их партнеры, специалисты, – определенной математической культурой, опытом исследования в своей области, знанием ЭВМ и программирования.

Лекция №3: Основы теории планирования эксперимента. Общая последовательность проведения исследования

Большинство научных исследований связано с экспериментом. Он проводится в лабораториях, на производстве, на опытных полях и участках, в клиниках и т.д. Эксперимент может быть физическим, психологическим или модельным. Он может непосредственно проводиться на объекте или на его модели. Модель обычно отличается от объекта масштабом, а иногда природой.

Как вы считаете, можно ли поставить эксперимент на абстрактной математической модели?

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

Эксперимент занимает центральное место в науке. Однако возникает вопрос, насколько эффективно он используется. Джон Бернал, например, отмечал, что научные исследования организуются и проводятся настолько хаотично, что их коэффициент полезного действия может быть оценен величиной порядка 2%. Для того чтобы повысить эффективность исследований, требуется нечто совершенно новое. Одним из возможных путей является применение математических методов, построение математической теории планирования эксперимента.

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

При этом существенно следующее:

– стремление к минимизации общего числа опытов;

– одновременное варьирование всеми переменными, определяющими процесс, по специальным правилам — алгоритмам;

– использование математического аппарата, формализующего многие действия экспериментатора;

– выбор четкой стратегии, позволяющей принимать обоснованные решения после каждой серии экспериментов.

Задачи, для решения которых может использоваться планирование эксперимента, чрезвычайно разнообразны. Поиск оптимальных условий, построение интерполяционных формул, выбор существенных факторов, оценка и уточнение констант теоретических моделей (например, кинетических), выбор наиболее приемлемых из некоторого множества гипотез о механизме явлений, исследование диаграмм состав-свойство — вот примеры задач, при решении которых применяется планирование эксперимента.

Можно сказать, что там, где есть эксперимент, имеет место и наука о его проведении — планирование эксперимента.

Поиск оптимальных условий является одной из наиболее распространенных научно-технических задач. Они возникают в тот момент, когда установлена возможность проведения процесса и необходимо найти *наилучшие* (оптимальные в некотором смысле) условия его реализации.

Пусть, например, у химика возникла гипотеза о том, что при взаимодействии двух веществ должен получаться некоторый интересующий его продукт. Чтобы убедиться в правильности своей гипотезы, он начинает проводить эксперимент. Возможно, что ему повезло и он получил требуемый продукт. Однако выход продукта весьма низок, скажем, 3%. Вот тут-то и возникает задача выбора оптимальных условий. Требуется так подобрать концентрации реагирующих веществ, температуру, давление, время реакции и другие факторы, чтобы сделать выход возможно более близким к 100%.

В данном примере находятся условия проведения процесса, оптимальные в смысле максимизации выхода требуемого продукта. Но это далеко не единственно возможная постановка задачи. Найденные условия оказались бы другими, если бы ставилась, например, цель минимизации себестоимости продукта или минимизации количества вредных примесей. *Следует подчеркнуть, что всегда необходимо четко формулировать, в каком смысле условия должны быть оптимальными.* Этим определяется выбор цели исследования.

Задачи, сформулированные аналогичным образом, называются ***задачами оптимизации***. Процесс их решения называется ***процессом оптимизации*** или просто ***оптимизацией***. Повышение производительности действующих установок, повышение качества продукции, снижение затрат на ее получение — вот примеры задач оптимизации.

Эксперимент, который ставится для решения задач оптимизации, называется ***экстремальным***. Это название связано с глубокой аналогией между оптимизацией и поиском экстремума некоторой функции. Давайте рассмотрим следующие две задачи.

1. Прочность бетона в значительной степени определяется маркой цемента, количеством наполнителя и количеством воды. Требуется установить связь между прочностью бетона и названными факторами.

2. Надежность некоторого полупроводникового прибора зависит от ряда технологических факторов. Требуется так подобрать значения этих факторов, чтобы надежность прибора повысилась.

Как вы думаете, какая из этих задач является экстремальной?

Чтобы облегчить вам выбор, укажем на признак, отличающий экстремальные задачи. *Задача является экстремальной, если цель ее состоит в поиске экстремума некоторой функции.* Чтобы установить, какая из двух задач является экстремальной, надо обратиться к их формулировкам и выяснить, где удовлетворяются требования экстремальности. В задаче 1 требуется установить связь между прочностью бетона и тремя факторами. Здесь не определено, какая прочность является оптимальной, и не требуется ее оптимизировать. В задаче 2 необходимо повысить надежность прибора. Сама постановка задачи указывает на то, что существующая надежность не удовлетворяет экспериментатора и требуется поиск таких условий, при которых ее значения повысятся. Задачи типа 1 мы будем называть интерполяционными, а типа 2 – экстремальными.

Чтобы продвинуться дальше, нам придется определить еще ряд важных понятий, первое из которых – ***«объект исследования»***. Для описания объекта исследования удобно пользоваться представлением о кибернетической системе, которая схематически изображена на рис. 1. Иногда такую кибернетическую систему называют ***«черным ящиком»***. Стрелки справа изображают численные характеристики целей исследования. Мы обозначаем их буквой "y" и называем *параметрами оптимизации*. В литературе вы можете встретить другие названия: критерий оптимизации, целевая функция, выход «черного ящика» и т.д.

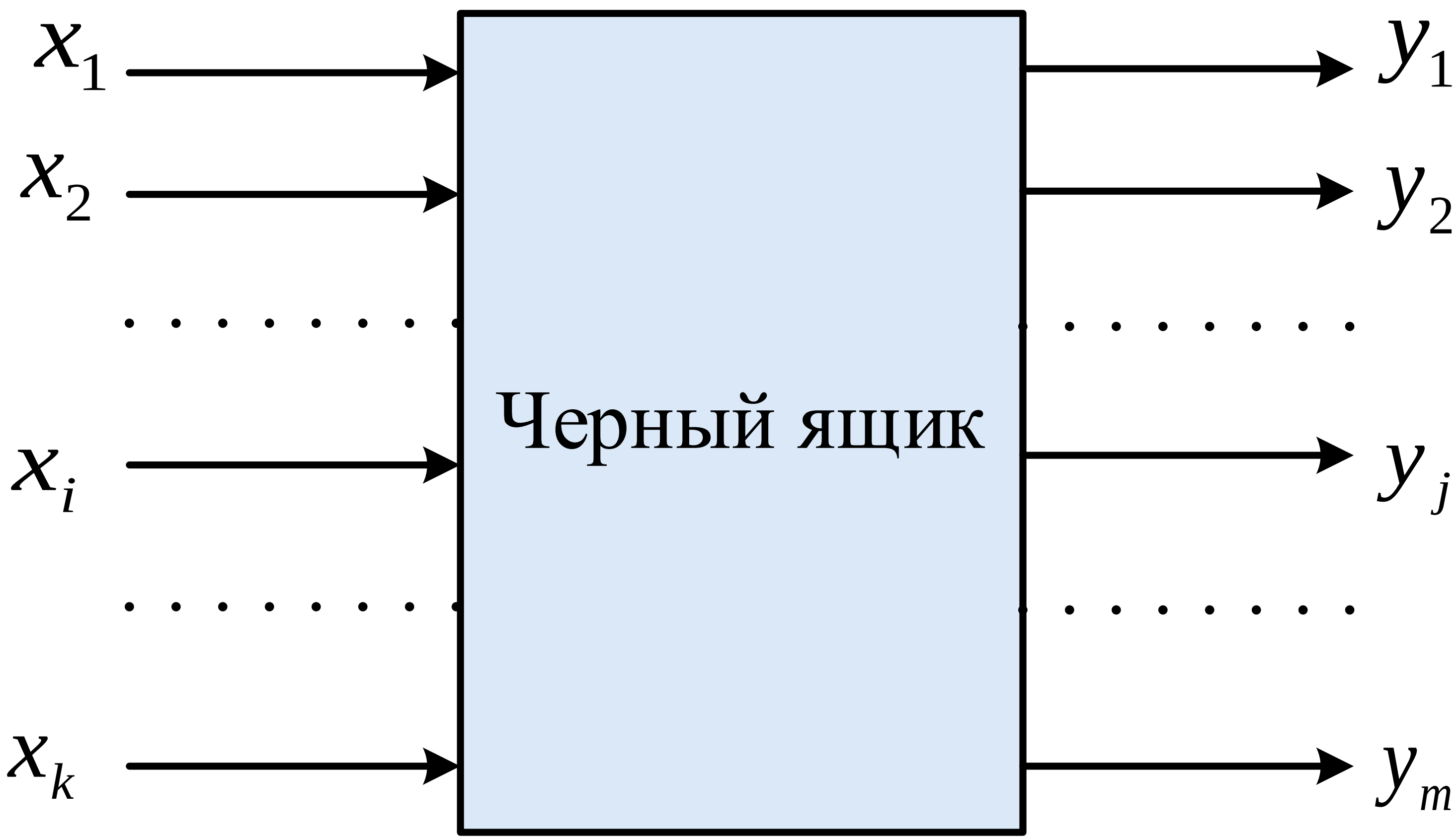


Рис. 1. Схема «черного ящика».

Для проведения эксперимента необходимо иметь возможность воздействовать на поведение «черного ящика». Все способы такого воздействия мы обозначаем буквой "x" 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:

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

где символ $\varphi(\dots)$, как обычно в математике, заменяет слова: «функция от». Такая функция называется ***функцией отклика***. В дальнейшем мы рассмотрим вопрос о том, как эту функцию можно выбрать и построить. А сейчас важно понять, как получаются условия проведения опытов в том эксперименте, который мы собираемся провести.

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, а также упрощает оценку их сложности.

Фиксированный набор уровней факторов определяет одно из возможных состояний «черного ящика». Одновременно это есть условия проведения одного из возможных опытов. Если перебрать все возможные наборы состояний, то мы получим полное множество различных состояний данного «ящика». Одновременно это будет число возможных различных опытов.

Чтобы узнать число различных состояний, достаточно число уровней факторов p (если оно для всех факторов одинаково) возвести в степень числа факторов k: p^k, где p – число уровней. Можно поупражняться в подсчете числа различных состояний для разных случаев. Это пригодится в дальнейшем. Кроме того, вы увидите, что реальные объекты, с которыми вы сталкиваетесь ежедневно, обладают огромной сложностью. Так, на первый взгляд простая система с пятью факторами на пяти уровнях имеет $5^5 = 3125$ 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 этому требованию. Мы будем рассматривать только такие объекты, для которых требование воспроизводимости выполняется.

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. Наконец, возможно, что все факторы неуправляемы. В этом случае возникает задача установления связи между параметром оптимизации и факторами по результатам наблюдений за поведением объекта, или, как говорят, по результатам пассивного эксперимента.

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

Приступая к знакомству с планированием экстремального эксперимента, надо иметь в виду, что при оптимизации распространен так называемый детерминированный подход. При этом предполагается построение физической модели процесса на основании тщательного изучения механизма явлений (например, кинетики, гидродинамики), что позволяет получить 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.

Подведем итог по сегодняшней теме.

Мы познакомились с основными определениями, которые используются в теории планирования экстремального эксперимента. Прежде чем приступать к эксперименту, необходимо однозначно и непротиворечиво сформулировать его цель и выбрать подходящую количественную характеристику этой цели, которую мы назвали параметром оптимизации.

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

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

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

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

Использование для получения модели всех возможных опытов приводит к абсурдно большим экспериментам. Задача выбора необходимых для эксперимента опытов, методов математической обработки их результатов и принятия решений — это и есть задача планирования эксперимента. Частный случай этой задачи — планирование «экстремального эксперимента», т.е. эксперимента, поставленного с целью поиска оптимальных условий функционирования объекта. Планирование экстремального эксперимента — метод выбора минимального количества опытов, необходимых для отыскания оптимальных условий.

Лекция №4:
Параметр оптимизации

При планировании экстремального эксперимента очень важно определить параметр, который нужно оптимизировать. Сделать это совсем 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 (откликом) на воздействие факторов, которые определяют поведение выбранной вами системы. Реакция объекта многогранна, многоаспектна. Выбор того аспекта, который представляет наибольший интерес, как раз и задается целью исследования.

При традиционном нематематическом подходе исследователь стремится как-то учесть разные аспекты, взвесить их и принять согласованное решение о том, какой опыт лучше.

Однако разные экспериментаторы проведут сравнение опытов неодинаково. Различия, если хотите, одно из проявлений таланта исследователя или его бездарности.

Прежде чем сформулировать требования к параметрам оптимизации и рекомендации по их выбору, познакомимся с различными видами параметров.

Виды параметров оптимизации

В зависимости от объекта и цели исследования параметры оптимизации могут быть весьма разнообразными. Чтобы ориентироваться в этом многообразии, введем некоторую классификацию (рис. 1). Мы не стремимся к созданию полной и детальной классификации. Наша задача — построить такую условную схему, которая включала бы ряд практически важных случаев и помогала экспериментатору ориентироваться в реальных ситуациях.

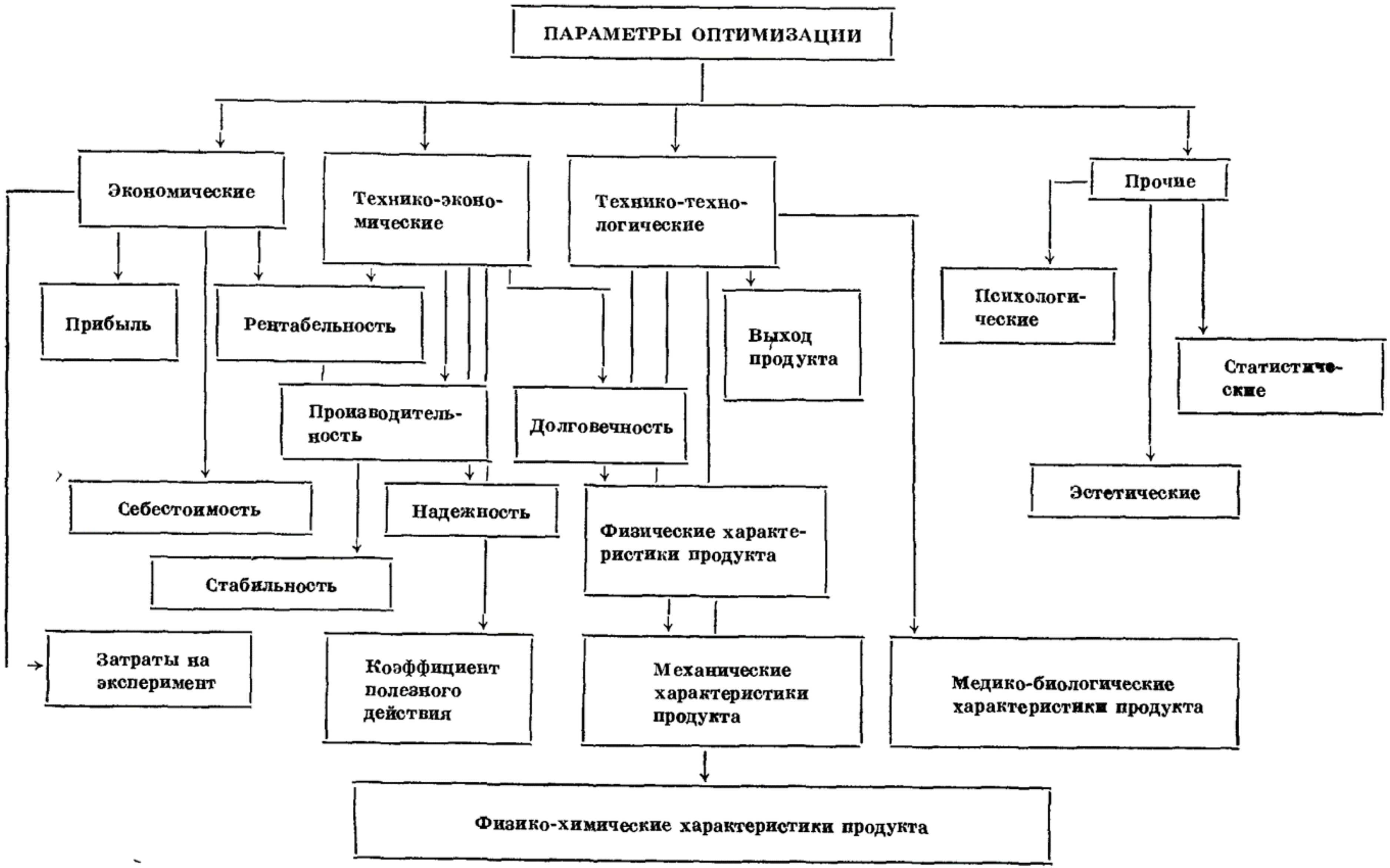


Рис. 1. Классификация параметров оптимизации

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.

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, 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, выход годных изделий.

Показатели качества чрезвычайно разнообразны. В нашей 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 параметры, используемые для улучшения характеристик случайных величин или случайных функций. В качестве примера можно назвать задачи на минимизацию дисперсии случайной величины и т.д.

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.

Давайте рассмотрим следующий пример.

Во время второй мировой войны несколько сот английских торговых судов на Средиземном море были вооружены зенитными орудиями для защиты от вражеских бомбардировщиков. Поскольку это мероприятие было достаточно дорогим (требовалось иметь на каждом судне боевую команду), через несколько месяцев решили оценить его эффективность. Какой из параметров оптимизации более подходит для этой цели?

- ✓ Число сбитых самолетов.
- ✓ Потери в судах, оснащенных орудиями, по сравнению с судами без орудий.

Если Вы считаете, что эффективность установления орудий на торговые суда можно оценить числом сбитых самолетов, то Вы вряд ли смогли бы занять пост командующего английским флотом на Средиземном море. Выбранный Вами параметр оптимизации оценивает эффективность уничтожения самолетов. В то же время ясно, что значения параметра оптимизации в этом случав будут низкими, так как существуют куда более эффективные средства для этой цели (авиация, боевой флот), чем зенитные орудия на торговых судах.

Если же Вы полагаете, что эффективность установки орудий на торговые суда можно оценить сопоставлением потерь в судах, оснащенных орудиями, с потерями в судах без орудий, то это разумный выбор параметра оптимизации, потому что основной задачей при установке орудий была защита судов. Самолеты вынуждены были теперь использовать противозенитные маневры и бомбометание с большой высоты, что уменьшало потери.

Из числа атакованных самолетами торговых судов с зенитными орудиями было потоплено 10% судов, а потери в судах без орудий составили 25%. Затраты на установку орудий и содержание боевых расчетов окупились очень быстро.

Требования к параметру оптимизации

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

Уметь измерять параметр оптимизации — это значит располагать подходящим 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.д. 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.

Примеры рангового подхода: определение чемпиона мира по фигурному катанию или гимнастике, дегустация вин, сравнение произведений искусства и т. д. Или, если хотите, из области химии: сравнение продуктов по цвету, прозрачности, форме кристаллов.

Следующее требование: параметр оптимизации должен выражаться одним числом. Иногда это получается естественно, как регистрация показания прибора. Например, скорость движения транспортного средства определяется числом на спидометре. Чаще приходится производить некоторые вычисления. Например, в химии часто требуется получать продукт с заданным отношением компонентов, например, A : B = 3 : 2. 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. Так, например, на первых стадиях исследования технологических процессов в качестве параметра оптимизации часто используется выпуск автомобилей на линию. Однако в дальнейшем, когда возможность повышения выпуска исчерпана, нас начинают интересовать такие параметры, как себестоимость перевозок, их качество и т.д.

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 исключает возможности гибели системы в целом.

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 исключает возможности гибели системы в целом.

Мало иметь эффективный параметр оптимизации. Надо еще, чтобы он был эффективный в статистическом смысле. Понятие статистической эффективности достаточно сложное, и мы не будем здесь заниматься точными формулировками. Фактически это требование сводится к выбору параметра оптимизации, который определяется с наибольшей возможной точностью.

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

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

Кроме высказанных требований и пожеланий 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 легче представляются простыми функциями, чем физико-химические показатели.

Задачи с одним выходным параметром имеют очевидные преимущества. Но на практике чаще всего приходится учитывать несколько выходных параметров. Иногда их число довольно велико. Так, например, при производстве резиновых и пластмассовых изделий приходится учитывать физико-механические, технологические, экономические, художественно-эстетические и другие параметры (прочность, эластичность, относительное удлинение, способность смеси прилипать к форме и т. д.). Математические модели можно построить для каждого из параметров, но одновременно оптимизировать несколько функций невозможно.

Обычно оптимизируется одна функция, наиболее важная с точки зрения цели исследования, при ограничениях, налагаемых другими функциями. Поэтому из многих выходных параметров выбирается один в качестве параметра оптимизации, а остальные служат ограничениями.

Всегда полезно исследовать возможность уменьшения числа выходных параметров. Для этого можно воспользоваться корреляционным анализом.

При этом между всевозможными парами параметров необходимо вычислить коэффициент парной корреляции, который является общепринятой в математической статистике характеристикой связи между двумя случайными величинами. Если обозначить один параметр через y_1, а другой — через y_2, и число опытов, в которых они будут измеряться, — через N, так, что $u = 1, 2, \ldots, N$, где u — текущий номер опыта, то коэффициент парной корреляции r вычисляется по формуле

$$r_{y_1 y_2} = \frac{\sum_{u=1}^{N}(y_{1u} - \overline{y_1})(y_{2u} - \overline{y_2})}{\sqrt{\sum_{u=1}^{N}(y_{1u} - \overline{y_1})^2 \, (y_{2u} - y_2)^2}}$$

$$\overline{y_1} = \sum_{u=1}^{N} \frac{y_1}{N}, \overline{y_2} = \sum_{u=1}^{N} \frac{y_2}{N}$$

где средние арифметические соответственно для y_1 и y_2.

Значения коэффициента парной корреляции могут лежать в пределах от -1 до +1. Если с ростом значения одного параметра возрастает значение другого, у коэффициента будет знак плюс, а если уменьшается, то минус. Чем ближе найденное значение $r_{y_1 y_2}$ к единице, тем сильнее значение одного параметра зависит от того, какое значение принимает другой, т.е. между такими параметрами существует линейная связь, и при изучении процесса можно рассматривать только один из них. Необходимо помнить, что коэффициент парной корреляции как мера тесноты связи имеет четкий математический смысл только при линейной зависимости между параметрами и в случае нормального их распределения.

Для проверки значимости коэффициента парной корреляции нужно сравнить его значение с табличным (критическим) значением r, которое приведено в табл. 1. Для пользования этой таблицей нужно знать число степеней свободы $f = N - 2$ и выбрать определенный уровень значимости, например, равный 0,05. Такое значение уровня значимости называют еще 5%-ным уровнем риска, что соответствует вероятности верного ответа при проверке нашей гипотезы $P = 1 - \alpha = 0{,}95$, или 95%. Это значит, что в среднем только в 5% случаев возможна ошибка при проверке гипотезы.

Таблица 1. Критические значения коэффициента парной корреляции при $\alpha = 0{,}05$

Число степеней свободы f	Критическое значение r	Число степеней свободы f	Критическое значение r	Число степеней свободы f	Критическое значение r
1	0,997	9	0,602	17	0,456
2	0,950	10	0,576	18	0,444
3	0,878	11	0,553	19	0,433
4	0,811	12	0,532	20	0,423
5	0,754	13	0,514	30	0,349
6	0,707	14	0,497	50	0,273
7	0,666	15	0,482	80	0,217
8	0,632	16	0,468	100	0,195

В практических исследованиях 5%-ный уровень риска применяется наиболее часто. Но экспериментатор всегда свободен в выборе уровня значимости, и возможны ситуации, в которых, например, требуется 1%-ный уровень риска. При этом возрастает надежность ответа.

Проверка гипотезы сводится к сравнению абсолютной величины коэффициента парной корреляции с критическим значением. Если экспериментально найденное значение r меньше критического, то нет оснований считать, что имеется тесная линейная связь между параметрами, а если больше или равно, то гипотеза о корреляционной линейной связи не отвергается.

При высокой значимости коэффициента корреляции любой из двух анализируемых параметров можно исключить из рассмотрения как не содержащий дополнительной информации об объекте исследования. Исключить можно тот параметр, который технически труднее измерять, или тот, физический смысл которого менее ясен. При планировании эксперимента целесообразно измерять все параметры, затем оценить корреляцию между ними и строить модели для их минимально возможного числа или же воспользоваться обобщенным параметром.

Подведем итог сегодняшней лекции.

Мы познакомились с некоторыми практически важными аспектами весьма сложной проблемы — выбора параметра оптимизации. Параметр оптимизации — это реакция (отклик) на воздействия факторов, которые определяют поведение изучаемой системы.

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

Параметр оптимизации должен быть:

- эффективным с точки зрения достижения цели;
- универсальным;
- количественным и выражаться одним числом;
- статистически эффективным;
- имеющим физический смысл, простым и легко вычисляемым;
- существующим для всех различимых состояний.

В тех случаях, когда возникают трудности с количественной оценкой параметров оптимизации, приходится обращаться к ранговому подходу. В ходе исследования могут меняться априорные представления об объекте исследования, что приводит к последовательному подходу при выборе параметра оптимизации.

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

Лекция №5:
Факторы

В этой лекции нам предстоит рассмотреть способы воздействия на оптимизируемый объект. Как вы знаете, способы воздействия были названы факторами.

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.

Известно, что число различных состояний объекта p^k, где p — число уровней, а k — число факторов. И может возникнуть вопрос: «А как же преодолеть большое число опытов? Ведь чем больше факторов, тем больше опытов.» Действительно, число опытов растет по показательной функции. Размерность факторного пространства увеличивается, и математики в таких случаях говорят о «проклятии размерности».

Если число факторов больше пятнадцати, нужно обратиться к методам отсеивания несущественных факторов. Здесь можно воспользоваться формализацией априорной информации, методом случайного баланса, планами Плакета-Бермана и др. Иногда эти планы применяются и при меньшем числе факторов.

Я не имею возможности в рамках этой лекции рассказать об отсеивающих экспериментах и о формализации априорной информации. Мы рассматриваем случай, когда множество факторов задано и число факторов не превышает пятнадцати.

Однако обратить ваше внимание на важность выбора факторов, влияющих на процесс, на опасность пропуска существенного фактора я считаю совершенно необходимым. От удачного выбора факторов зависит успех оптимизации.

Теперь поговорим о факторах. Начнем с определения.

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

Так же, как и параметр оптимизации, каждый фактор имеет область определения. Мы будем считать фактор заданным, если вместе с его названием указана область его определения.

Под ***областью определения*** понимается совокупность всех значений, которые в принципе может принимать данный фактор. Ясно, что совокупность значений фактора, которая используется в эксперименте, является подмножеством из множества значений, образующих область определения.

Область определения может быть непрерывной и дискретной. Однако в тех задачах планирования эксперимента, которые мы собираемся рассматривать, всегда используются 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 в 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 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.

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.

Представьте себе, что вы изучаете процесс торможения автомобиля на дороге. Является ли температура воздуха фактором, который можно включить в планирование эксперимента?

Температура воздуха — фактор неуправляемый. Мы еще не научились делать погоду по заказу. 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.

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

С операциональным определением связаны выбор размерности фактора и точность его фиксирования. Мы привыкли считать, что выбор размерности фактора не представляет особой трудности. Экспериментатор хорошо ориентируется в том, какую размерность нужно использовать. Это действительно так в тех случаях, когда существует устоявшаяся традиция, построены измерительные шкалы, приборы, созданы эталоны и т.д. Так обстоит дело при измерении температуры, времени, давления и т.д. Но бывает, что выбор размерности превращается в весьма трудную проблему выбора измерительных шкал, сложность которой далеко выходит за рамки нашего рассмотрения.

Замена одной измерительной шкалы другой называется преобразованием шкал. Оно может быть использовано для упрощения модели объекта.

Точность замера факторов должна быть возможно более высокой. Степень точности определяется диапазоном изменения факторов. При изучении процесса, который длится десятки часов, нет необходимости учитывать доли минуты, а в быстрых процессах необходимо учитывать, быть может, доли секунды. Если факторы измеряются с большой ошибкой или особенность объекта исследования такова, что значения факторов трудно поддерживать на выбранном уровне (уровень фактора «плывет»), то экспериментатору следует обратиться к конфлюэнтному анализу.

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

Требования к совокупности факторов

При планировании эксперимента обычно одновременно изменяется несколько факторов. Поэтому очень важно сформулировать требования, которые предъявляются к совокупности факторов. Прежде всего выдвигается требование ***совместимости***. Совместимость факторов означает, что все их комбинации осуществимы и безопасны. Это очень важное требование. Представьте себе, что вы поступили легкомысленно, не обратили внимания на требование совместимости факторов и запланировали такие условия опыта, которые могут привести к аварии и другим последствиям. Согласитесь, что такой результат очень далек от целей оптимизации.

Несовместимость факторов может наблюдаться на границах областей их определения. Избавиться от нее можно сокращением областей.

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

Подведем итоги сегодняшней темы.

Итак, мы установили, что факторы — это переменные величины, соответствующие способам воздействия внешней среды на объект. Они определяют как сам объект, так и его состояние. Требования к факторам: управляемость и однозначность.

Управлять фактором — это значит установить нужное значение и поддерживать его постоянным в течение опыта или менять по заданной программе. В этом состоит особенность «активного» эксперимента. Планировать эксперимент можно только в том случае, если уровни факторов подчиняются воле экспериментатора.

Факторы должны непосредственно воздействовать на объект исследования. Трудно управлять фактором, если он является функцией других переменных, но в планировании эксперимента могут участвовать сложные факторы. Факторы должны быть определены операционально.

Требования к совокупности факторов: совместимость и отсутствие линейной корреляции. Выбранное множество факторов должно быть достаточно полным. Если какой-либо существенный фактор пропущен, это приведет к неправильному определению оптимальных условий или к большой ошибке опыта. Факторы могут быть количественными и качественными.

Точность фиксации факторов должна быть высока. Степень точности определяется диапазоном изменения факторов.

Выбор факторов — очень ответственный этап при подготовке к планированию эксперимента. От удачного выбора зависит успех оптимизации.

Лекция № 6:
Активный эксперимент.
Полный факторный
эксперимент

Принятие решений перед планированием эксперимента

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

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

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

Теперь в области определения надо найти локальную подобласть для планирования эксперимента. Процедура выбора этой подобласти включает два этапа: выбор основного уровня и выбор интервалов варьирования.

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

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

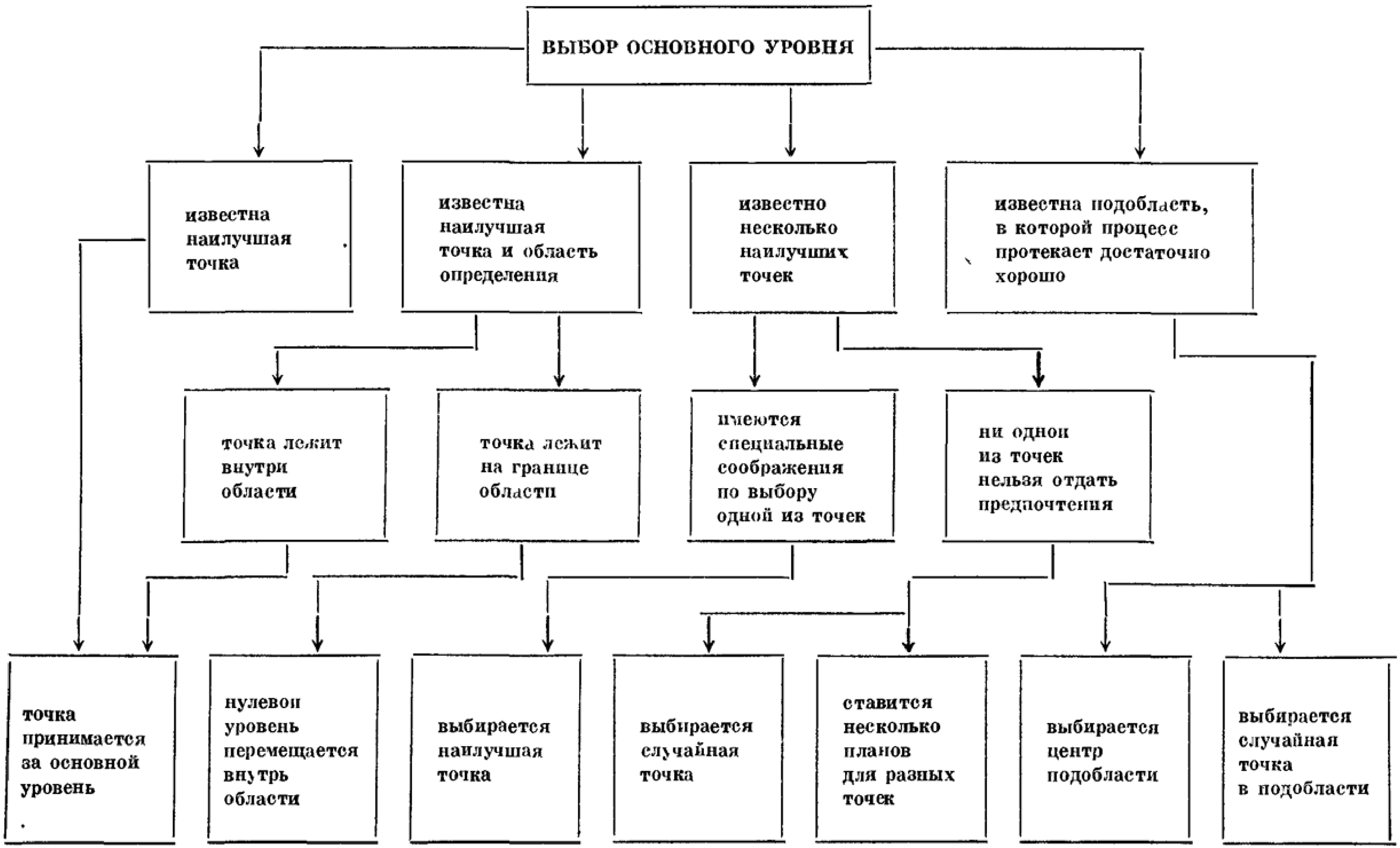
Положение, усложняется, если эта точка лежит на границе (или весьма близко к границе) области. Тогда приходится основной уровень выбирать с некоторым сдвигом от наилучших условий.

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

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

Резюмируем наши рассуждения о принятии решений при выборе основного уровня в виде блок-схемы (см. следующий слайд).

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

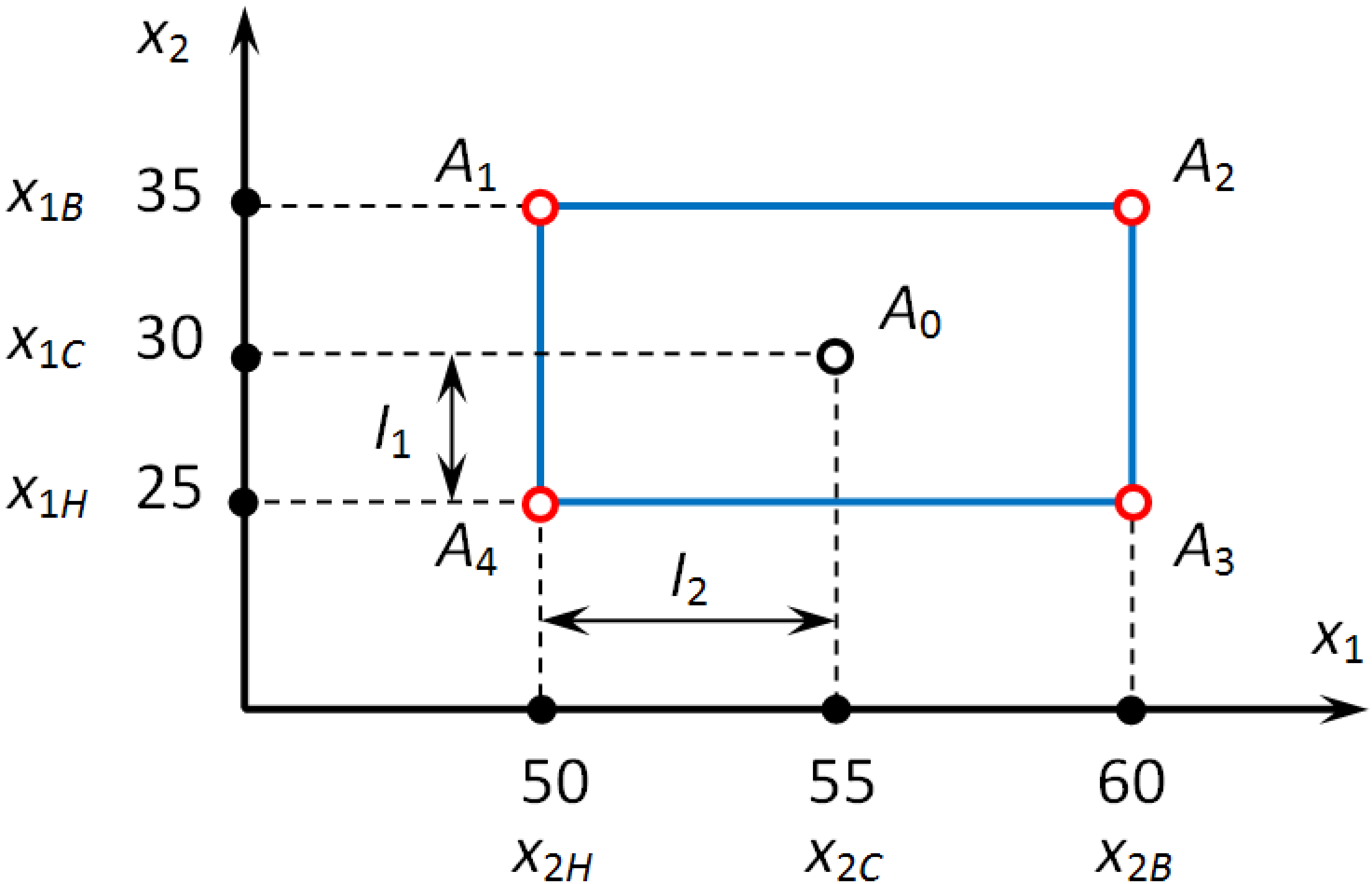


Блок-схема принятия решений при выборе основного уровня

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

Представьте себе координатную ось, на которой откладываются значения данного фактора, для определенности — температуры. Пусть основной уровень уже выбран и равен 100°С. Это значение изображается точкой. Тогда два интересующих нас уровня можно изобразить двумя точками, симметричными относительно первой. Будем называть один из этих уровней *верхним*, а второй — *нижним*. Обычно за верхний уровень принимается тот, который соответствует большему значению фактора, хотя это не обязательно, а для качественных факторов вообще безразлично. *Интервалом варьирования факторов* называется некоторое число (свое для каждого фактора), прибавление которого к основному уровню дает верхний, а вычитание — нижний уровни фактора.

Другими словами, интервал варьирования — это расстояние на координатной оси между основным и верхним (или нижним) уровнем. Таким образом, задача выбора уровней сводится к более простой задаче выбора интервала варьирования.



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

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

где x_j — кодированное значение фактора, $\tilde{x}_j$ — натуральное значение фактора, $\tilde{x}_{j0}$ — натуральное значение основного уровня, I_j — интервал варьирования, j — номер фактора.

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

Пусть процесс определяется четырьмя факторами. Основной уровень и интервалы варьирования выбраны следующим образом:

	$\tilde{x}_1$	$\tilde{x}_2$	$\tilde{x}_3$	$\tilde{x}_4$
Основной уровень	3	30	1,5	15
Интервал варьирования	2	10	1	10

Остановимся на первом факторе. Отметим на координатной оси три уровня: нижний, основной и верхний.

Нужно найти кодированное значение для $\tilde{x}_1$ = 2,0. Это значение лежит между 1,0 и 3,0, т.е. между -1 и 0 в кодированном масштабе. Так как в натуральном масштабе 2,0 лежит посередине между 1,0 и 3,0, то ему соответствует -0,5 в кодированном масштабе. (Для $\tilde{x}_1$ = 2,5 будет x_1 = -0,25, для $\tilde{x}_1$ = 1,5 будет x_1 = = -0,75 и т.д.).

Натуральные значения	1	2	3	5	$\tilde{x}_1$
	·	×	·	·	→
Кодированные значения	-1		0	+1	x_1

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

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

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

Точность фиксирования факторов определяется точностью приборов и стабильностью уровня в ходе опыта. Для упрощения схемы принятия решений мы введем приближенную классификацию, полагая, что есть низкая, средняя и высокая точности.

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

Наконец, полезно знать, в каких диапазонах меняются значения параметра оптимизации в разных точках факторного пространства. Если имеются результаты некоторого множества опытов, то всегда можно найти наибольшее или наименьшее значения параметра оптимизации. Разность между этими значениями будем называть *диапазоном изменения параметра оптимизации* для данного множества опытов. Условимся различать широкий и узкий диапазоны. Диапазон будет *узким*, если он несущественно отличается от разброса значений параметра оптимизации в повторных опытах. В противном случае будем считать диапазон *широким*. Учтем также случай, когда информация отсутствует. Итак, для принятия решений используется априорная информация о точности фиксирования факторов, кривизне поверхности отклика и диапазоне изменения параметра оптимизации. Каждое сочетание градаций перечисленных признаков определяет ситуацию, в которой нужно принимать решение.

При принятых нами градациях возможно $3^3 = 27$ различных ситуаций. Они представлены на рис. 3 - 5 в виде кружочков, цифры в которых соответствуют порядковым номерам ситуаций.

Теперь мы приблизились к принятию решения о выборе интервалов варьирования. Для интервалов также введем градацию.

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

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

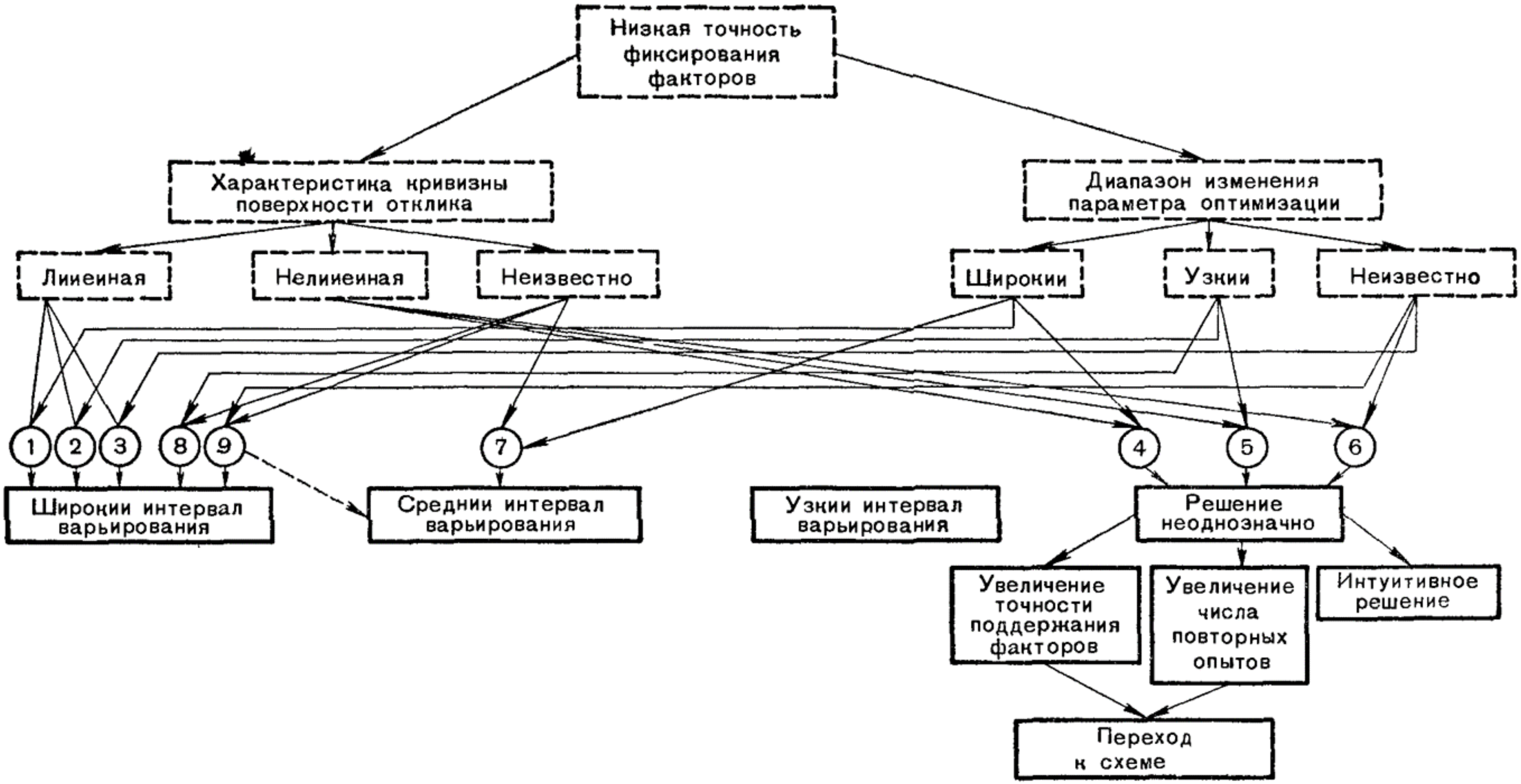


Рис. 3. Принятие решений при низкой точности фиксирования факторов

Пусть ситуация определяется следующими признаками: поверхность отклика линейна, а диапазон изменения параметра оптимизации узок. Какое решение вы бы предпочли? Эта ситуация обозначена на нашей схеме номером 2. Признаки ситуации определяются стрелками, направленными к данному кружочку. Стрелка, выходящая из кружочка, указывает решение. Низкая точность фиксирования факторов приводит к отказу от выбора узкого интервала варьирования, иначе результаты могут оказаться неразличимыми. Нам известно, что поверхность линейна. Это не налагает ограничений на расширение интервалов Кроме того, надо учитывать сведения о диапазоне изменения параметра оптимизации. Он узок, а мы стремимся получить в эксперименте различающиеся значения параметра оптимизации. Поэтому интервал следует увеличивать.

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

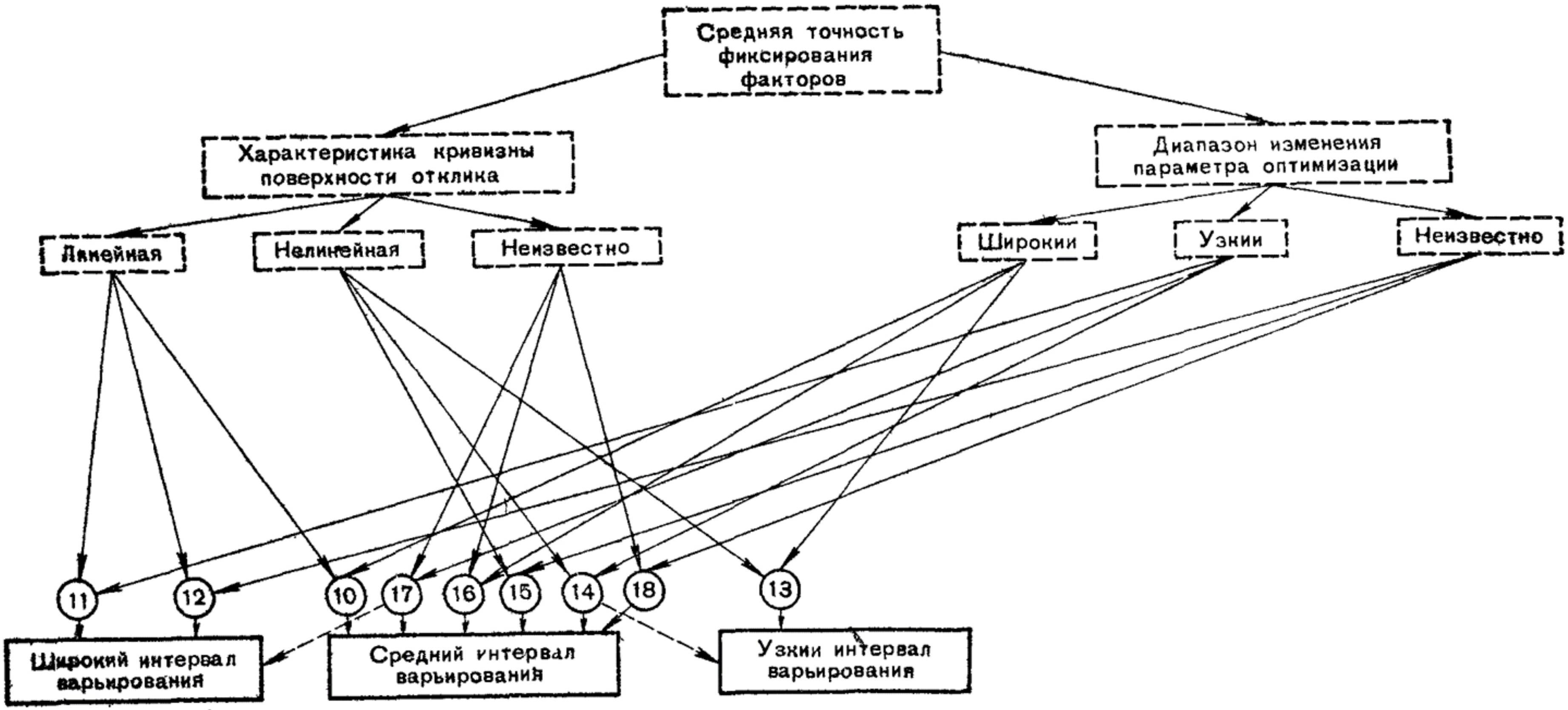


Рис. 4. Принятие решений при средней точности фиксирования факторов.

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

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

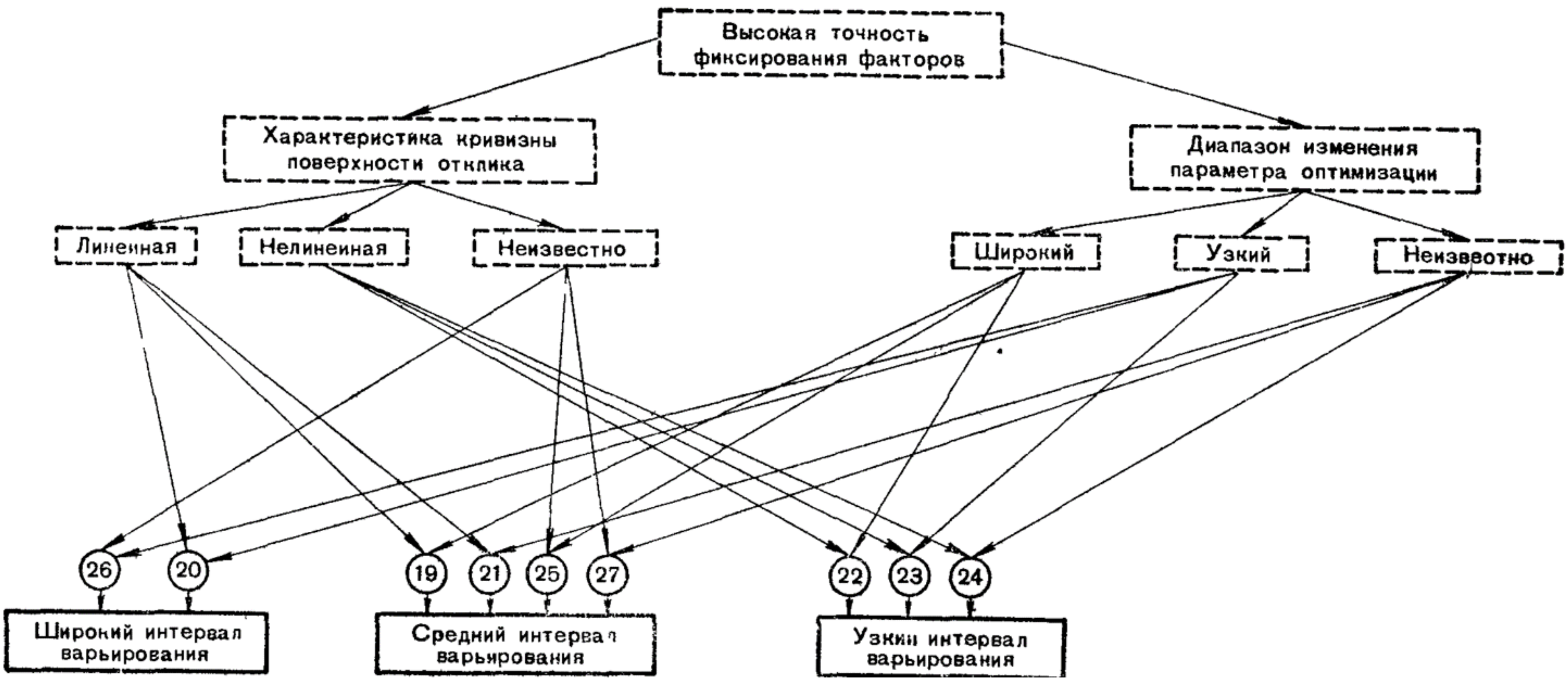


Рис. 5. Принятие решений при высокой точности фиксирования факторов.

(Продолжение в следующей лекции)

Лекция № 7:
Активный эксперимент. Полный факторный эксперимент (продолжение)

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, уже приводилась в прошлой лекции, и я её напомню: $N = 2^k$, 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.

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

Матрица планирования для двух факторов приведена в табл. 1.

Табл. 1. – Матрица планирования эксперимента 2^2

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

Каждый столбец в матрице планирования называют вектор-столбцом, а каждую строку — вектор-строкой. Таким образом, в табл. 1 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. 6). Номера вершин квадрата соответствуют номерам опытов в матрице планирования. Площадь, ограниченная квадратом, называется *областью эксперимента*.

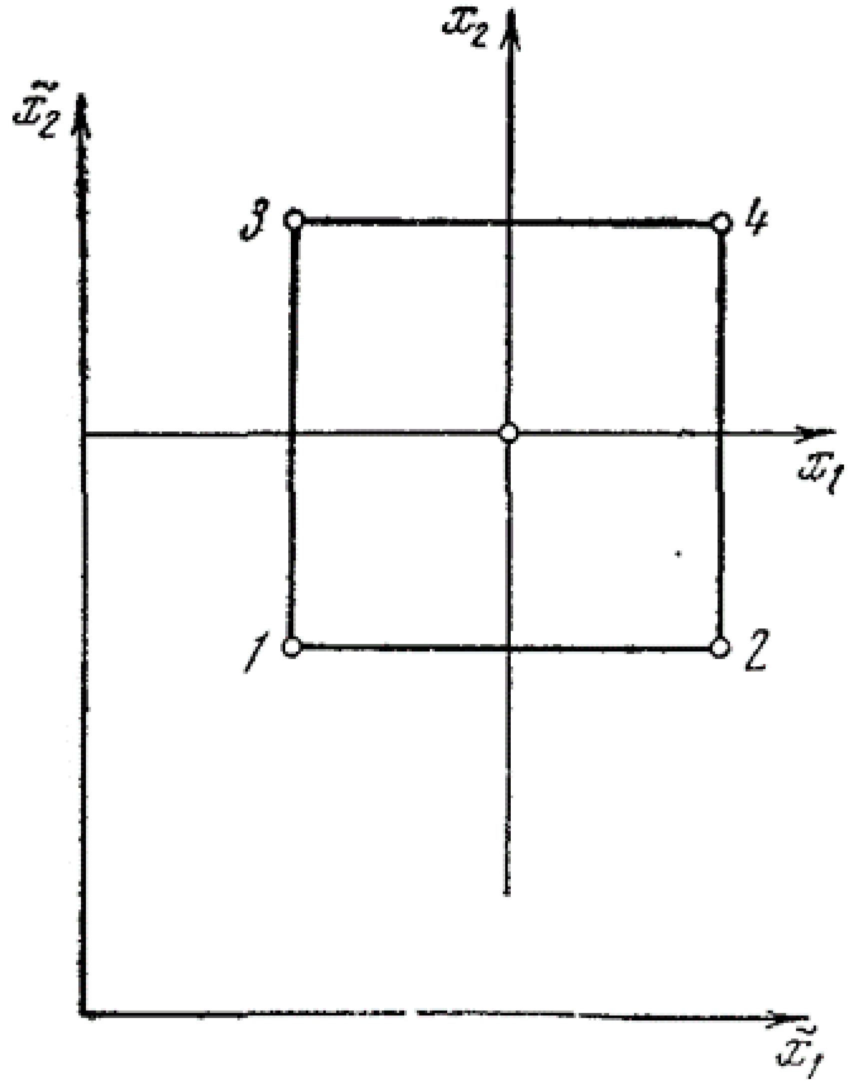


Рис. 6. Геометрическая интерпретация полного факторного эксперимента 2^2

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

Это делается следующим образом. Порядковый номер фактора ставится в соответствие строчной букве латинского алфавита: $x_1 — a$, $x_2 — b$, ... и т.д. Если теперь для строки матрицы планирования выписать латинские буквы только для факторов, находящихся на верхних уровнях, то условия опыта будут заданы однозначно. Опыт со всеми факторами на нижних уровнях условимся обозначать (1). Матрица планирования вместе с принятыми буквенными обозначениями приведена в табл. 2.

Табл. 2 – Матрица планирования эксперимента 2^2

Номер опыта	$\boldsymbol{x_1}$	$\boldsymbol{x_2}$	Буквенные обозначения строк	$\boldsymbol{y}$
1	-1	-1	(*1*)	y_1
2	+1	-1	*a*	y_2
3	-1	+1	*b*	y_3
4	+1	+1	*ab*	y_4

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

Табл. 3 – Матрица планирования эксперимента 2^3

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

Таким образом вы построили полный факторный эксперимент 2^3. Он имеет восемь опытов и включает все возможные комбинации уровней трех факторов.

Если для двух факторов все возможные комбинации уровней легко найти прямым перебором (или просто запомнить), то с ростом числа факторов возникает необходимость в некотором приеме построения матриц. Из многих возможных обычно используется три приема, основанных на переходе от матриц меньшей размерности к матрицам большей размерности-Рассмотрим первый. При добавлении нового фактора каждая комбинация уровней исходного плана встречается дважды: в сочетании с нижним и верхним уровнями нового фактора. Отсюда естественно появляется прием: записать исходный план для одного уровня нового фактора, а затем повторить его для другого уровня. Вот как это выглядит при переходе от эксперимента 2^2 к 2^3 (табл. 4):

Табл. 4 – Построение матрицы планирования эксперимента 2^3

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

Этот прием распространяется на построение матриц любой размерности.

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

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

Третий прием основан на правиле чередования знаков. В первом столбце знаки меняются поочередно, во втором столбце они чередуются через два, в третьем — через 4, в четвертом — через 8 и т. д. по степеням двойки. Если в табл. 4 поменять местами столбцы для x_1 и x_2, то получится нужная матрица.

По аналогии с полным факторным экспериментом 2^2 можно дать геометрическую интерпретацию полного факторного эксперимента 2^3. Геометрической интерпретацией полного факторного эксперимента 2^3 служит куб, координаты вершин которого задают условия опытов.

Если поместить центр куба в точку основного уровня факторов, а масштабы по осям выбрать так, чтобы интервал варьирования равнялся единице, то получится куб, изображенный на рис. 7. Куб задает область эксперимента, а центр куба является ее центром.

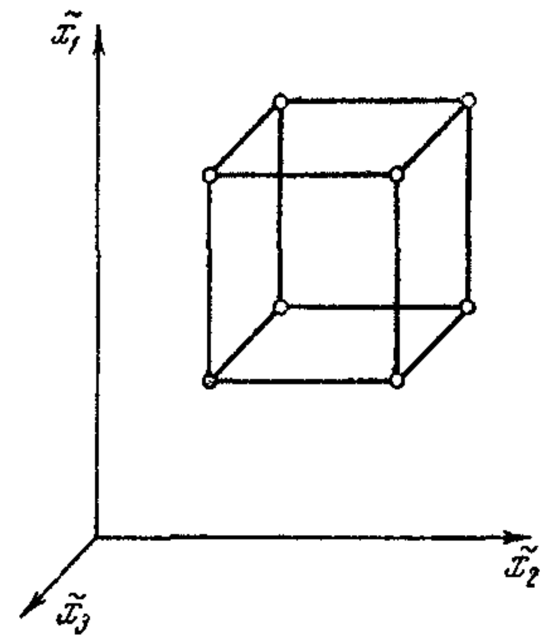


Рис. 7. Геометрическая интерпретация полного факторного эксперимента 2^3

Свойства полного факторного эксперимента типа 2^k

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

Два свойства следуют непосредственно из построения матрицы. Первое из них — *симметричность относительно центра эксперимента* — формулируется следующим, образом: алгебраическая сумма элементов вектор-столбца каждого фактора равна нулю, или $\sum_{i=1}^{N} x_{ji} = 0$, где j — номер фактора, N— число опытов, j = 1, 2,.... k.

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

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

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

Полный факторный эксперимент и математическая модель

Давайте еще раз вернемся к матрице 2^3 (табл. 3). Для движения к точке оптимума нам нужна линейная модель $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$. Наша цель — найти по результатам эксперимента значения неизвестных коэффициентов модели. 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 $y = b_0 + b_1x_1 + \ ... + b_kx_k$. Их точность и надежность зависят от свойств выборки и нуждаются в статистической проверке. Их можно вычислить по простой формуле:

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

Воспользуемся этой формулой для подсчета коэффициентов b_1 и b_2:

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

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

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: $\bar{y} = b_0 + b_1 \overline{x_1} + b_2 \overline{x_2}$. Но в силу свойства симметрии $\overline{x_1} = \overline{x_2} = 0$. Следовательно, $\bar{y} = b_0$. Мы показали, что b_0 есть среднее арифметическое значение параметра оптимизации.

Чтобы его получить, необходимо сложить все y и разделить на число опытов. Чтобы привести эту процедуру в соответствие с формулой для вычисления коэффициентов, в матрицу планирования удобно ввести вектор-столбец фиктивной переменной x_0, которая принимает во всех опытах значение $+1$. Это было уже учтено в записи формулы, где j принимало значения от 0 до k.

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

$$y = b_0 x_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 \,.$$

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

Иногда удобно оценивать вклад фактора при переходе от нижнего 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?

Один из часто встречающихся видов нелинейности связан с тем, что эффект одного фактора зависит от уровня, на котором находится другой фактор. В этом случае говорят, что имеет место эффект взаимодействия двух факторов. Полный факторный эксперимент позволяет количественно оценивать эффекты взаимодействия. Для этого надо, пользуясь правилом перемножения столбцов, получить столбец произведения двух факторов. При вычислении коэффициента, соответствующего эффекту взаимодействия, с новым вектор-столбцом можно обращаться так же, как с вектор-столбцом любого фактора. Для полного факторного эксперимента 2^2 матрица планирования с учетом эффекта взаимодействия представлена в табл. 5. Очень важно, что при добавлении столбцов эффектов взаимодействий все рассмотренные свойства матриц планирования сохраняются.

Таблица 5 - Матрица планирования эксперимента 2^2 с эффектом взаимодействия

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

Теперь модель выглядит следующим образом:

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

Коэффициент b_{12} вычисляется обычным путем

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

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

Покажем на примере еще один способ расчета коэффициентов, известный под названием *метода Йетса*. Все операции по расчету приведены в табл. 6.

Таблица 6 - Расчет коэффициентов регрессии по методу Йетса

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

Слева в этой таблице выписан вектор-столбец значений параметра оптимизации. Первая операция (2-й столбец) состоит в попарном сложении и вычитании этих значений, причем верхнее число вычитается из нижнего. Вторая операция (3-й столбец) состоит в том же действии, но уже с числами второго столбца.

Если теперь числа, оказавшиеся в третьем столбце, разделить на число опытов, то получим значения коэффициентов. Операции сложения и вычитания повторяются столько раз, сколько имеется факторов.

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

Матрица планирования 2^3 с учетом всех возможных взаимодействий приведена в табл. 7.

Таблица 7 - Полный факторный эксперимент 2^3

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y
1	$+1$	-1	-1	$+1$	$+1$	-1	-1	$+1$	y_1
2	$+1$	$+1$	-1	-1	-1	-1	$+1$	$+1$	y_2
3	$+1$	-1	$+1$	-1	-1	$+1$	-1	$+1$	y_3
4	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	y_4
5	$+1$	-1	-1	-1	$+1$	$+1$	$+1$	-1	y_5
6	$+1$	$+1$	-1	$+1$	-1	$+1$	-1	-1	y_6
7	$+1$	-1	$+1$	$+1$	-1	-1	$+1$	-1	y_7
8	$+1$	$+1$	$+1$	-1	$+1$	-1	-1	-1	y_8

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

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

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

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

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