

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ОРЕНБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АГРАРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Кафедра «Математика и теоретическая механика»

**МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ
ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ**

**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ
ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ**

Направление подготовки (специальность) 27.03.04 Управление в технических системах

Профиль образовательной программы «Системы и средства автоматизации технологических процессов»

Форма обучения очная

СОДЕРЖАНИЕ

1. Организация самостоятельной работы.....	3
2. Методические рекомендации по самостоятельному изучению вопросов.....	4
3. Методические рекомендации по подготовке к занятиям.....	10
3.1 Практические занятия по теме «Основы теории планирования эксперимента»	10
3.2 Практические занятия по теме «Формализация экспериментальных данных методом наименьших квадратов»	10
3.3 Практические занятия по теме «Факторные эксперименты».....	10
3.4 Практические занятия по теме «Теория оптимальных планов»	10

1. ОРГАНИЗАЦИЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

1.1. Организационно-методические данные дисциплины

№ п.п.	Наименование темы	Общий объем часов по видам самостоятельной работы				
		подготовка курсового проекта (работы)	подготовка реферата/эссе	индивидуальные домашние задания (ИДЗ)	самостоятельное изучение вопросов (СИВ)	подготовка к занятиям (ПкЗ)
1	2	3	4	5	6	7
1	Основы теории планирования эксперимента				2	8
2	Формализация экспериментальных данных методом наименьших квадратов				3	7
3	Факторные эксперименты				2	8
4	Теория оптимальных планов				3	7

2. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО САМОСТОЯТЕЛЬНОМУ ИЗУЧЕНИЮ ВОПРОСОВ

2.1 Ранговая корреляция при обработке результатов эксперимента

При изучении вопроса необходимо обратить внимание на следующие особенности.

Допустим, что имеется n объектов (факторов, характеристик), которые нужно проранжировать по признаку x . Рангом называется место, которое занимает i -й объект (фактор, характеристика) ($i = 1, 2, \dots, n$) среди всех сравниваемых. Ранжирование – это приближенное выражение упорядоченной связи n объектов относительно некоторого признака качества или упорядоченное расположение n факторов, действующих на объект, по степени их влияния на выходной показатель качества. В нормированном уравнении регрессии, где имеются количественные коэффициенты a_i , ($i = 1, 2, \dots, n$), их можно проранжировать, например, по их абсолютной величине, тогда уравнение регрессии представимо приближенно в виде

$$\hat{v} = z_0 + nz_1 + (n-1)z_2 + \dots + 2z_{n-1} + z_n,$$

где z_i ($i = 1, 2, \dots, n$) – входной фактор, пронормированный соответствующим образом, причем z_1 – наиболее существенный, а z_n – наименее существенный фактор.

Глубина связи между двумя группами ранжированных объектов (двумя ранжировками одной группы объектов по двум признакам или ранжировками единственной группы по одному признаку, но произведенными двумя экспертами) оценивается коэффициентом ранговой корреляции.

Пусть n объектов проранжированы два раза по различным признакам x и y .

Ранжировка одной группы объектов по двум признакам

Номер объекта	1	2	3	...	i	...	l	...	n
Ранг по признаку x	x_1	x_2	x_3	...	x_i	...	x_l	...	x_n
Ранг по признаку y	y_1	y_2	y_3	...	y_i	...	y_l	...	y_n

Рассмотрим объекты с номерами i и l ($i < l$). Пусть связь между рангами x_i и x_l выражается числом a_{il} , а между рангами y_i и y_l выражается числом b_{il} . Используем условия:

$$\left. \begin{aligned} a_{il} &= -a_{li}, \text{ если } i \neq l \\ a_{il} &= 0, \text{ если } i = l \\ b_{il} &= -b_{li}, \text{ если } i \neq l \\ b_{il} &= 0, \text{ если } i = l \end{aligned} \right\}$$

Очевидно, что коэффициент ранговой корреляции, как и коэффициент парной корреляции, должен удовлетворять следующим условиям: 1) при полном соответствии ранжировок по признакам x и y равняться +1; 2) при полном несоответствии ранжировок, когда ранжировка по признаку y является обратной по сравнению с ранжировкой по признаку x , равняться -1; 3) при полной независимости двух ранжировок равняться 0; 4) в остальных промежуточных ситуациях должен лежать в пределах от -1 до +1. Тогда обобщенный коэффициент ранговой корреляции можно выразить формулой

$$K = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{l=1}^n a_{il} b_{il}}{\sqrt{\left(\sum_{i=1}^n \sum_{l=1}^n a_{il}^2 \right) \left(\sum_{i=1}^n \sum_{l=1}^n b_{il}^2 \right)}}.$$

М. Кэндэл предложил формировать числа a_{il} по следующему принципу:

Если ранг $x_i < x_l$, то $a_{il} = +1$;

Если ранг $x_i > x_l$, то $a_{il} = -1$;

Если ранг $x_i = x_l$, то $a_{il} = 0$.

Тот же принцип применяется для формирования чисел b_{il} :

Если ранг $y_i < y_l$, то $b_{il} = +1$;

Если ранг $y_i > y_l$, то $b_{il} = -1$;

Если ранг $y_i = y_l$, то $b_{il} = 0$.

Если знак произведения $a_{il} b_{il}$ - положительный, то это вклад в положительную корреляцию, если отрицательный - то в отрицательную. Общий коэффициент ранговой корреляции, его знак и величина будут зависеть от того, каких вкладов больше: положительных P или отрицательных Q . Подсчитывают суммы:

$$P = \sum_{i,l=1}^n (a_{il} b_{il} = +1); \quad Q = \sum_{i,l=1}^n (a_{il} b_{il} = -1), \quad i < l.$$

Далее рассчитывается коэффициент ранговой корреляции по Кэндэлу:

$$K_k = \frac{P - Q}{P + Q} = \frac{P - Q}{\frac{1}{2} n(n-1)}.$$

2.2 Обработка результатов дублированных опытов

При изучении вопроса необходимо обратить внимание на следующие особенности.

Рассмотрим случай, когда проводятся повторные опыты (при одних и тех же значениях факторов), что на практике для компенсации влияния случайных погрешностей обычно имеет место. Обычно число n повторных опытов принимают равным $2 \div 3$ или $4 \div 5$. При исследованиях приходится иметь дело с тремя вариантами дублирования опытов в эксперименте: равномерное; неравномерное; без дублирования.

При равномерном дублировании все строки матрицы планирования имеют одинаковые числа параллельных опытов. В случае неравномерного дублирования числа параллельных опытов неодинаковы. Наиболее предпочтительным из трех вариантов дублирования является первый. При этом варианте эксперимент отличается повышенной точностью, а математическая обработка экспериментальных данных – простотой. Характер дублирования опытов влияет на содержание математической обработки результатов наблюдений.

Необходимым условием применения МНК для расчета оценок коэффициентов модели является однородность оценок дисперсии воспроизводимости среднего значения функции отклика во всех точках плана. Поэтому обязательным этапом обработки должна быть проверка статистической гипотезы об однородности совокупности дисперсий воспроизводимости. В зависимости от количества опытов в точках плана применяют критерии Кохрена, Фишера или Бартлетта.

Для каждой строки матрицы планирования по результатам n параллельных опытов вычисляется среднее арифметическое значение отклика

$$\bar{y}_j = \frac{1}{n} \sum_{u=1}^n y_{ju}.$$

Опыт считается воспроизводимым, если дисперсия s_j^2 функции отклика в каждой точке факторного пространства однородна:

$$s_j^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{u=1}^n (y_{ju} - \bar{y}_j)^2.$$

При равном числе повторов каждого эксперимента проверка однородности для дисперсии функции отклика осуществляется с помощью критерия Кохрена. Если отношение дисперсии функции отклика в точке факторного пространства, где она максимальна s_{\max}^2 , к сумме дисперсий во всех точках

$$G = \frac{s_{\max}^2}{s_1^2 + s_2^2 + \dots + s_N^2} = \frac{s_{\max}^2}{\sum_{j=1}^N s_j^2}$$

меньше критического, то дисперсия считается однородной. То есть при $G \leq G_{кр}$ опыты воспроизводимы, где $G_{кр}$ - критерий Кохрена уровня значимости α и с числами степеней свободы $n-1$ и N .

При разных количествах повторов каждого эксперимента проверка однородности дисперсии функции отклика осуществляется с помощью критериев Фишера или Бартлетта. Применение критерия Фишера сводится к проверке гипотезы о равенстве дисперсий двух нормально распределенных случайных величин. Из совокупности оценок дисперсии среднего значения функции отклика выбираются s_{\min}^2 и s_{\max}^2 значения с числом степеней свободы соответственно $\varphi_{\min} = n_{\min} - 1$ и $\varphi_{\max} = n_{\max} - 1$. Вычисляется значение

$F = \frac{s_{\min}^2}{s_{\max}^2}$, которое сравнивается с критическим значением $F_{кр} = F(\alpha; \varphi_{\min}; \varphi_{\max})$, где α –

уровень значимости.

Если не выявлена неоднородность дисперсии воспроизводимости, то обработку результатов экспериментов можно продолжать дальше. В противном случае следует выявить и устранить причины неоднородности.

Все коэффициенты, их дисперсии, оценки дисперсии коэффициентов вычисляются по формулам

$$\hat{\beta}_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_{ij} \bar{y}_j, \quad D(\hat{\beta}_i) = \frac{\sigma^2}{nN}, \quad s^2(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{nN} s_y^2,$$

где $s_y^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N s_j^2$ - несмещенная оценка дисперсии функции отклика (дисперсия воспроизводимости). В случае различного дублирования опытов дисперсия воспроизводимости функции отклика определяется как

$$s_y^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (n_j - 1) s_j^2 / \sum_{j=1}^N (n_j - 1).$$

Значимость коэффициента определяется с помощью критерия Стьюдента. Если

$$|\hat{\beta}_i| \leq t_{kp} s(\hat{\beta}_i),$$

где t_{kp} по выбранному уровню значимости α и числу степеней свободы $T(n-1)$ находится по таблицам, то коэффициент незначим.

После проверки значимости коэффициентов может оказаться, что все они незначимы. Эти выводы являются следствием того, что достигнута область оптимума функции отклика. Поэтому следует перейти к построению функции на основе полных полиномов второго порядка.

Необходимо добавить, что при равномерном дублировании опытов на практике можно использовать эквивалентную схему обработки результатов, учитывающую усреднение непосредственно.

1. Определяются коэффициенты регрессии $\beta_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \bar{y}_j x_{ji}$.

Матрица X в этом случае содержит только отличающиеся вектор-строки, а матрица $P = nE$.

2. Находится дисперсия адекватности $s_{ad}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{N - (k+1)}$.

3. Оценивается дисперсия среднего по строкам $s_i^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{n(n-1)}$.

4. Проверяется гипотеза об однородности дисперсий и после ее принятия

находится общая дисперсия среднего $s_{\bar{y}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N s_i^2}{N}$.

5. Вычисляется дисперсии оценок коэффициентов регрессии $s_{\beta_j}^2 = \frac{s_{\bar{y}}^2}{N}$.

6. Проверяется гипотеза адекватности модели $F = \frac{s_{ad}^2}{s_{\bar{y}}^2}$.

2.3 Линейные планы

При изучении вопроса необходимо обратить внимание на следующие особенности.

Одной из важнейших характеристик плана, влияющем с одной стороны, на стоимость и длительность исследования, а с другой - на точность результатов, является число экспериментов. По соотношению между количеством оцениваемых неизвестных параметров модели и количеством точек плана эксперимента все планы подразделяются на три класса: ненасыщенные - количество параметров меньше числа точек плана, насыщенные - обе величины одинаковы, сверхнасыщенные - количество параметров больше числа точек плана. МНК применяют только при ненасыщенном и насыщенном планировании, так как он неприменим для сверхнасыщенного планирования.

Заметим, что план с минимально возможным числом экспериментов $N = k + 1$ (насыщенный план) не позволяет проверить адекватность модели, поэтому обычно выбирают $N > k + 1$, где $k + 1$ – число оцениваемых параметров модели. Также важное значение для оценки качества плана эксперимента имеет информационная матрица. Матрица X должна быть невырожденной, т.е. $|X| \neq 0$, поскольку только в этом случае система линейных уравнений, к которой приводит МНК, имеет единственное решение.

Кроме рассмотренных критериев в ТПЭ вполне естественно применяется критерий минимума числа экспериментов, т.е. среди всех планов желательно выбирать такой, который требует минимального числа опытов при соблюдении требований к качеству оценки функции или ее параметров. Все перечисленные критерии связаны с предположением, что вид модели известен. Однако на практике часто возникает такая ситуация, когда исследователь не знает истинного вида модели. В таком случае эксперимент обычно сначала планируется исходя из простейшего предположения о линейности модели относительно варьируемых переменных. После проведения опытов проверяется адекватность линейной модели. Если она неадекватна, делается попытка построить квадратичную модель. При этом нужно планировать и эксперимент для квадратичной модели. Оптимальный план для квадратичной модели целесообразно строить таким образом, чтобы он включал точки оптимального плана для линейной модели, а также сохранял при этом некоторые заданные свойства плана, например его ортогональность. Такое построение плана приводит к сокращению числа опытов. При этом используются ранее полученные результаты. Планы для квадратичных моделей, построенные путем добавления точек к плану для линейной модели, называются композиционными планами второго порядка. Так, например, насыщенным планом первого порядка называется план, содержащий $n + 1$ точку (опыт). Например, при $n = 4$, $N = n + 1 = 5$. То есть полином формируется в виде

$$y = b_0 + b_1x_1 + \dots + b_nx_n.$$

Таким образом, насыщенный план – это предельно минимальный план ДФЭ. Такие планы называются симплекс-планами.

Квадратичные полиномы дают поверхность отклика, которая проходит точно через все экспериментальные точки, по которым определяются коэффициенты. Так как точки планов ПФЭ располагаются на границах диапазонов варьирования факторов, то это означает, что поверхность отклика проходит через граничные точки. Возможны случаи, когда реальная поверхность отклика определяется полиномами второго и выше порядков. В этом случае поверхность плана ПФЭ, совпадая с реальной поверхностью в граничных точках, может отличаться в других точках факторного пространства, например, в центральной точке плана, т.е. $y_0 \neq \hat{y}_0$. Поэтому одним из признаков неудовлетворительной аппроксимации полиномами по плану ПФЭ является расхождение результатов функции отклика с реальной функцией в центральной точке плана.

Однако при многофакторном эксперименте возможны случаи, когда в реальности функция отклика зависит, в том числе, от квадратов факторов, у которых коэффициенты имеют разные знаки, например, для «седловидной» поверхности. Поскольку расхождения будут возникать во всех других точках плана эксперимента, нецелесообразность использования плана ПФЭ определяется нелинейностью каких-либо сечений поверхности отклика. Косвенным признаком может служить расхождение $y_0 \neq \hat{y}_0$ в центральной точке плана.

Если не удастся получить полином по плану ПФЭ, хорошо аппроксимирующей реальную поверхность, то для повышения точности полиномов предлагается следующее.

- Уменьшение диапазона варьирования факторов или его разбиение на поддиапазоны, для каждого из которых строится свой план ПФЭ и определяется свой полином. Это трудоемко, но погрешность семейства планов ПФЭ снижается.

- Выделение фактора, порождающего нелинейность, и построение для оставшихся $n-1$ факторов k планов ПФЭ, в каждом из которых выделенный фактор зафиксирован при некотором значении. На основе полученных k полиномов можно попытаться сформировать общий полином, коэффициенты которого являются функциями выделенного фактора. Этот путь также достаточно трудоемок.

- Переход к плану ПФЭ с большим числом уровней варьирования факторов, например к планам с варьированием факторов на трех уровнях. В этом случае происходит резкое увеличение количества точек по сравнению с планом ПФЭ 2^n . Так при $n=2$ для ПФЭ 2^n $N=4$, для ПФЭ 3^n $N=9$, при $n=3$ для ПФЭ 2^n $N=8$, для ПФЭ 3^n $N=27$, и т.д.

- Достраивание планов ПФЭ 2^n до планов более высокого порядка (чаще всего второго) и построение полных квадратичных полиномов (с наличием квадратов факторов).

- Преобразование метрики матричного пространства, т.е. переход к новым факторам, функционально связанным с прежними факторами, но не порождающими нелинейности.

Если эффекты взаимодействий факторов незначимы или вообще отсутствуют, то при получении модели можно ограничиться линейным приближением, т.е. получить адекватную модель в виде полинома

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_k x_k.$$

При большом числе факторов проведение ПФЭ связано с увеличением количества опытов, значительно превосходящим число коэффициентов линейной модели. Число опытов можно резко сократить в результате использования ДФЭ, содержащих подходящее число опытов и сохраняющих основные свойства матрицы планирования.

План, которому соответствует функция отклика и который позволяет получить несмещенные (раздельные) МНК-оценки параметров β_i , называется линейным. Линейный план будет насыщенным, если число опытов в матрице независимых переменных равно числу оцениваемых коэффициентов модели. Применение насыщенных планов требует минимального числа опытов, но гипотезу адекватности модели в этом случае проверить невозможно, так как число степеней свободы равно нулю.

Матрица независимых переменных для линейного плана имеет вид

$$X = \begin{pmatrix} x_{01} & x_{11} & \dots & x_{k1} \\ x_{02} & x_{12} & \dots & x_{k2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{0N} & x_{1N} & \dots & x_{kN} \end{pmatrix}.$$

2.4 Точные и непрерывные D-оптимальные планы

При изучении вопроса необходимо обратить внимание на следующие особенности.

Суть используемого критерия D -оптимальности состоит в требовании выбора таких планов, которые обеспечивают минимальный объем эллипсоида рассеяния оценок коэффициентов рассеяния. D -оптимальный план позволяет получить оценки, имеющие минимально возможное рассеяние относительно центра распределения.

План, заданный с помощью матрицы D размером $N \times k$, где k – число варьироваемых переменных, а N – количество экспериментов, называется точным планом.

В плане D не обязательно все точки различные, т.е. могут быть повторяющиеся строки. Предположим, что план D сосредоточен в r различных точках x^i причем каждая из них встречается в плане h_i раз. Тогда план D может быть представлен

$$\begin{pmatrix} x^1 & x^2 & \dots & x^r \\ h_1 & h_2 & \dots & h_r \end{pmatrix}, \text{ причем } \sum_{i=1}^r h_i = N.$$

Точный план, заданный с помощью совокупности величин

$$\begin{pmatrix} x^1 & x^2 & \cdots & x^r \\ l_1 & l_2 & \cdots & l_r \end{pmatrix},$$

где $l_i = h_i / N$ и $\sum_{i=1}^r l_i = 1$ называется нормированным планом.

Очевидно, что l_i – доля наблюдений, приходящаяся на i -ю точку. Величина l_i называется частотой i -й точки плана.

План, заданный с помощью совокупности величин $\begin{pmatrix} x^1 & x^2 & \cdots & x^r \\ l_1 & l_2 & \cdots & l_r \end{pmatrix}$, где $\sum_{i=1}^r l_i = 1$, а величины l_i могут принимать любые значения между нулем и единицей, называется непрерывным.

В общем случае непрерывный план может определяться некоторой непрерывной функцией $l(x)$, заданной на области Ω_x .

Всякому точному плану D соответствует некоторый нормированный, а следовательно, и непрерывный план l , который сосредоточен в точках x^1, x^2, \dots, x^r точного плана с частотами $l_1 = \frac{h_1}{N}, \dots, l_r = \frac{h_r}{N}$. Однако не для всякого N можно найти точный план, чтобы соотношение частот было точно таким же, как у непрерывного плана l . Это можно сделать лишь тогда, когда все произведения $N l_i (i = 1, 2, \dots, r)$ являются целыми числами. Нормированной информационной матрицей плана D , состоящего из N опытов, называется матрица вида

$$\Phi = \frac{1}{T} X^T X,$$

где X – матрица независимых переменных, определяемая заданным видом уравнения регрессии.

Очевидно, что Φ – информационная матрица непрерывного плана l , соответствующего D .

Нормированной дисперсионной матрицей плана D называется матрица F вида

$$F = \Phi^{-1}$$

Очевидно, что F – дисперсионная матрица непрерывного плана l .

План D^* , состоящий из N опытов, есть точный D -оптимальный план, если он на множестве всех точных планов, состоящих из N опытов, размещенных в области Ω_x , минимизирует величину определителя дисперсионной матрицы (или максимизирует определитель информационной матрицы).

План l^* есть непрерывный D -оптимальный план, если он минимизирует на множестве всех непрерывных планов в области Ω_x величину определителя матрицы F (или максимизирует величину определителя информационной матрицы Φ).

Для нахождения непрерывного D -оптимального плана необходимо определить координаты x^i точек этого плана и частоты l_i , повторения наблюдений в этих точках.

Дисперсия оценки функции отклика в точке x в случае, когда модель построена с помощью непрерывного плана l , имеет вид

$$D(\hat{y}) = \frac{\sigma^2}{N} f^T(x) F f(x).$$

3. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ПОДГОТОВКЕ К ЗАНЯТИЯМ

3.1 Практические занятия по теме «Основы теории планирования эксперимента»

При подготовке к занятию необходимо обратить внимание на следующие моменты.

1. Эксперимент, его виды.
2. План эксперимента, этапы планирования.
3. Функция отклика.
4. Прямые и косвенные измерения
5. Критерии оценки грубых погрешностей
6. Определение числа повторностей опыта

3.2 Практические занятия по теме «Формализация экспериментальных данных МНК»

При подготовке к занятию необходимо обратить внимание на следующие моменты.

1. Формализация экспериментальных данных
2. МНК и его применение для однофакторного эксперимента
3. Симметричный и равномерный план для однофакторного эксперимента
4. Проверка адекватности полученного уравнения.
5. Обобщение метода наименьших квадратов на многофакторный линейный случай

3.3 Практические занятия по теме «Факторные эксперименты»

При подготовке к занятию необходимо обратить внимание на следующие моменты.

1. Двухуровневые планы многофакторного эксперимента.
2. План ПФЭ 2^2 и его геометрическое изображение.
3. План ПФЭ 2^3 и его геометрическое изображение.
4. Многомерные ПФЭ типа 2^n .
5. Дробный факторный эксперимент. Выбор дробности плана.
6. Реплики от ПФЭ.

3.4 Практические занятия по теме «Теория оптимальных планов»

При подготовке к занятию необходимо обратить внимание на следующие моменты.

1. Типы планов эксперимента
2. Критерии оптимальности и их выбор
3. D-оптимальные планы
4. Планирование эксперимента для изучения регрессии. Линейная регрессия.
5. Проверка гипотез при использовании линейной регрессии
6. Интервальные оценки при линейной регрессии.
7. Многофакторная линейная регрессия.