Н.И. Сидняев, Н.Т. Вилисова

Введение в теорию планирования эксперимента

Допущено Учебно-методическим объединением вузов по университетскому политехническому образованию в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению «Машиностроительные технологии и оборудование» специальности «Реновация средств и объектов материального производства в машиностроении»

ИЗДАТЕЛЬСТВО МГТУ
Москва 2011
УДК 621.391(075.8)  
ББК 22.172  
С34  

Рецензенты:  
д-р физ.-мат. наук, проф. В.Б. Гласко;  
д-р физ.-мат. наук, проф. М.Г. Коновалов;  
д-р техн. наук, проф. А.А. Грешилов  

Сидняев Н. И.  
ISBN 978-5-7038-3365-0  

Представлены основы теории планирования эксперимента и анализа получаемых данных. Детально рассмотрены полный факторный эксперимент, дробные реплики, планирование однофакторных, факторных и оптимизационных экспериментов. Изложены методы регрессионного и дисперсионного анализов. Задачи рассмотрены с позиций статистического подхода к постановке физических задач. Материал сопровождается набором типовых примеров, наиболее широко используемых при решении задач прикладного характера.  
Содержание учебного пособия соответствует курсу лекций по «Теории планирования эксперимента», который авторы читают в МГТУ им. Н.Э. Баумана.  
Для студентов старших курсов технических университетов. Может быть полезно преподавателям, аспирантам и инженерам.  

УДК 621.391(075.8)  
ББК 22.172  

© Сидняев Н.И., Вилисова Н.Т., 2011  
© Оформление. Издательство  
ISBN 978-5-7038-3365-0  
МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011
ПРЕДИСЛОВИЕ

Цель предлагаемого учебного пособия — описать установление функциональных и статистических связей между несколькими факторами с помощью эксперимента. Для изучения систем различной степени сложности наиболее целесообразно применение статистических методов планирования эксперимента, поэтому в пособии приведены не только методы, но и их математическое содержание. Рассмотренные методы проиллюстрированы подробными примерами из практики экспериментальных исследований [1—10].

В первой главе последовательно и сжато изложены основные понятия математической статистики [1, 2]: эмпирические функции распределения, плотности распределения, гистограммы, теорема Глишенко (без доказательства), выборка, порядковые статистики. Подробно с примерами рассмотрены точечная и интервальная оценки параметров распределения, свойства точных оценок (состоятельность, несмещённость, эффективность), неравенство Рада — Крамера, функция правдоподобия, методы получения оценок, а именно: максимального правдоподобия, моментов, а также метод наименьших квадратов (МНК) и метод минимальа. Приведены асимптотические свойства оценок, доверительное оценивание, основные распределения математической статистики: распределение χ² (хи-квадрат, или χ²-распределение), распределение Стьюдента (t-распределение), распределение Фишера (F-распределение). Описано доверительное оценивание параметров биномиального, нормального и экспоненциального распределений с примерами. Введены понятия статистической гипотезы, критерии проверки гипотезы, статистики критерия. Приведена общая логическая схема построения критерия проверки гипотезы. Показана связь проверки гипотез с доверительным оцениванием, рассмотрены типы гипотез: простые, сложные, параметрические, непараметрические. Лемма Неймана — Пирсона, а также проведена проверка гипотез о параметрах биномиального, нормального, пуассоновского и экспоненциального распределений.
Вторая глава посвящена вопросам математической обработки результатов эксперимента при решении различных задач (от простой оценки отклика до построения математической модели исследуемого объекта) [11—18]. Пробно изложены элементы регрессивного анализа: простая регрессия, парная линейная регрессия, ортогональная регрессия. Представлены оценки уравнений регрессии, МНК, метод максимального правдоподобия, статистические выводы о параметрах простой регрессии, линеаризация регрессии, регрессии при случайных аргументах и функциях. Рассмотрены множественная линейная регрессия, статистические выводы о параметрах регрессии, оценка множественного коэффициента корреляции.

Для определения параметра оптимизации и выбора схемы планирования эксперимента предварительно введен объект исследования на основе априорной информации, которую получают, изучая литературные данные и анализируя результаты ранее проведенных исследований [19—27].

В третьей главе введены основные понятия теории планирования эксперимента и рассмотрены критерии планирования. Дан анализ этапа предпланирования эксперимента, выбора факторов, области проведения эксперимента. Определены базовая точка и интервалы варьирования. Приведены примеры полного факторного эксперимента (ПФЭ) типа 2^n, линейных моделей второго порядка. Описаны полные и дробные факторные планы, а также планы эксперимента для квадратичных моделей [4—9]. Рассмотрены пути сокращения числа опытов путем проведения дробного факторного эксперимента (ДФЭ). Дано описание методов выделения существенных факторов, которые необходимо учитывать при построении математических моделей [26—34]. Рассмотрены проблемы планирования эксперимента и расчета оценок параметров, входящих в модели нелинейно [24—30]. Даны рекомендации для формирования линейных эффектов, которые следует смещивать прежде всего с теми взаимодействиями, которые, согласно априорной информации, незначимы.

В четвертой главе приведены композиционные планы Бокса, ротатабельные центральные композиционные планы (РЦКП), планы типа Bₘᵦ, D-оптимальные планы, планы Кифера и Коно на отрезке Ω = (−1, 1) [22—34]. Центральные композиционные планы второго порядка рассмотрены в совокупности с ортогональными и
Предисловие

ротатабельными планами второго порядка. Изложены основные методы получения математического описания на относительно линейных участках поверхности отклика и в области главного экстремума. Дано понятие информационного профиля плана.

Рассмотрены композиционные планы, основой которых является двухуровневый ПФЭ с добавлением экспериментов, проводимых на других уровнях как в центре плана, так и при различных значениях ±α (расстояние от ребер гиперкуба, или длина «звездного» плеча). Необходимо отметить, что проведение ПФЭ при большом числе факторов (k > 3) связано с большим числом опытов, значительно превосходящим число коэффициентов линейной модели.

Введено понятие разрешающей способности как числа несмешанных линейных эффектов в дробной реплике. Приведены примеры, на которых показано, что выбор некоторого универсального критерия оптимальности планирования, оценивающего планы с различных точек зрения, является весьма сложной задачей [28—32].

Подробно рассмотрено центральное композиционное планирование, предложенное Г. Боксом и Р. Уильсоном, для случая, когда число факторов k = 3 [4]. Приведены данные, необходимые для построения матриц центрального композиционного ротатабельного планирования. Показано, как разбиваются планы на ортонормальные блоки. Разобраны примеры применения ротатабельного планирования. Предложено несколько способов построения ротатабельных планов второго порядка. Рассмотрено центральное композиционное планирование как одна из возможных композиций, удовлетворяющих условию ротатабельности. Подробно изложен способ построения ротатабельных планов второго порядка. Доказано, что ортогональные планы первого порядка являются одновременно ротатабельными планами. Дана геометрическая интерпретация ортогональных планов первого порядка. Рассмотрены примеры для различных матриц, задающих координаты экспериментальных точек в факторном пространстве ортогональных планов первого порядка с минимальным числом экспериментов.

В пятой главе показано, как дисперсионный и регрессионный анализ, базирующиеся на планировании эксперимента, переплетаются весьма сложным образом, поэтому трудно провести четкую границу между этими разделами математической статистики. Основная идея дисперсионного анализа заключается в разложении
суммы квадратов отклонений на составные части, каждая из которых характеризует действительный или предполагаемый источник изменения выхода. Термин «дисперсионный анализ» в литературе означает сопоставление дисперсий, специальное планирование и обработку экспериментов, позволяющих учесть влияние на функцию отклика количественных и качественных факторов [19]. Например, можно попытаться оценить влияние различных сортов сырья или вспомогательных материалов на качество продукции. Многофакторный дисперсионный анализ (МДА) является одним из качественных методов активного эксперимента [18—20]. В главе показано, как с помощью МДА можно дать сравнительную оценку силе влияния одного, двух или нескольких входных качественных факторов изменчивости на выход объекта. В частности, рассмотрено движение по методу кругового восхождения с использованием симплексных решеток, когда исследователь попадает в почти стационарную область, которая не может быть описана с помощью линейного приближения, и в этой части поверхности отклика доминирующими становятся коэффициенты регрессии, характеризующие эффекты взаимодействия.

Приведены последовательная методика расчета оценок параметров модели данного вида и метод последовательного планирования эксперимента для моделей, линейных и нелинейных по параметрам. Дано описание методов экспериментального поиска значений факторов, при которых целевая функция достигает экстремума [32, 33]. Рассмотрены примеры и методы анализа стационарной области, описываемой квадратичным полиномом, которые позволяют установить характер поверхности отклика.

В пособии содержится материал по введению в теорию планирования эксперимента, включающий лишь основные разделы, необходимые для начального изучения предмета. Наибольшее внимание уделено детальному изучению идей и основ предмета. Особое значение придается изучению объектов исследований, анализу многофакторных экспериментов и многомерных функций отклика, теории проверки гипотезы адекватности моделей и другим задачам, актуальным в теории и практике эксперимента.
ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время возрастает необходимость рационального использования в науке и технике труда ученых и инженеров, а также средств производства — технической оснастки и оборудования. Одно из направлений повышения производительности научного труда заключается в применении современных математических методов и вычислительных средств, таких как планирование эксперимента, исследование операций, математическое моделирование и др. [5].

Практическая польза от научных исследований в значительной степени зависит от методов их проведения и формы, в которой представляются результаты. Применение эффективной технологии исследований позволяет существенно сократить период внедрения результатов, что приводит к экономии времени и средств [4, 6, 9].

С помощью традиционных методов исследования [4, 10, 16] не удается обеспечить требуемую модернизацию или проектирование производственных мощностей. Поэтому в науке, технике и производстве при решении разнообразных задач применяются новые эффективные методы исследования. При этом особое внимание уделяется моделям процессов и способам их построения.

Для эффективного анализа механизма явлений и управления процессами необходимо выявить взаимосвязи между факторами, определяющими динамику процесса, и представить их в количественной форме, т. е. в виде математической модели. Математическая модель является математическим отображением наиболее существенных сторон процесса. Модель представляет собой совокупность уравнений, условий и алгоритмических правил (рис. В.1) и позволяет:

• получать информацию о процессах, протекающих в объекте;
• рассчитывать системы, т. е. анализировать и проектировать их;
• получать информацию, которую можно использовать для управления моделируемым объектом.
В зависимости от источника информации, используемого при построении математической модели (см. рис. В.1), различают физико-химические модели, статистические теоретические и эмпирические модели. В первом случае за основу берут физико-химические закономерности моделируемых процессов, например в виде уравнений баланса или кинетических уравнений превращений вещества [23]. Построение теоретических моделей сопряжено с проведением обширных и длительных исследований, поскольку необходимо выяснить природу микропроцессов, протекающих в объекте, и описать их математически. Как правило, модели процессов представляют в виде сложных систем уравнений (системы алгебраических, обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) или уравнений в частных производных). Они позволяют очень точно описать процессы, происходящие в объекте, и допускают экстраполяцию в точки факторного пространства, в которых невозможно непосредственное наблюдение этих процессов. Статистические модели получают в результате статистической обработки экспериментальных данных, собранных на исследуемом объекте. Структура статистической модели может выбираться относительно произвольно [24—27]. Соответствие модели объекту ограничивается лишь количественным аспектом.

Необходимость использования метода математического моделирования определяется тем, что непосредственно исследовать многие объекты (или проблемы, относящиеся к этим объектам) или вовсе невозможно, или это исследование требует много времени и средств.
Процесс моделирования включает три элемента:  
1) субъект (исследователь);  
2) объект исследования;  
3) модель, характеризующую отношения познающего субъекта и познаваемого объекта.  
Предположим, что имеется некоторый объект $A$, или что его необходимо создать. Мы конструируем (материально или мысленно) или находим в реальном мире другой объект $B$ — модель объекта $A$. Процесс моделирования включает четыре этапа. Первый этап — это этап построения модели, который предполагает наличие некоторых знаний об объекте-оригинале. Познавательные возможности модели обусловлены тем, что она отражает некоторые существенные черты объекта-оригинала. Вопрос о необходимости и достаточной мере сходства оригинала и модели требует конкретного анализа.  
На втором этапе модель выступает как самостоятельный объект исследования. Одной из форм такого исследования является проведение «модельных» экспериментов, при которых сознательно изменяются условия функционирования модели и систематизируются данные о ее поведении. Конечным результатом этого этапа является получение множества знаний о модели.  
На третьем этапе осуществляется перенос знаний с модели на оригинал, т. е. формирование множества знаний об объекте. Этот процесс проводится по определенным правилам. Знания о модели должны быть скорректированы с учетом тех свойств объекта-оригинала, которые не нашли отражения или были изменены при построении модели. Мы можем с достаточным основанием переносить какой-либо результат с модели на оригинал, если этот результат связан с признаками сходства оригинала и модели. Если же определенный результат исследования модели связан с отличием модели от оригинала, то этот результат переносить неправомерно.  
Четвертый этап заключается в практической проверке получаемых с помощью моделей знаний и их использования для построения обобщающей теории объекта, его преобразования или управления им. Чтобы понять сущность моделирования, важно не упускать из виду, что моделирование — не единственный источник знаний об объекте. Процесс моделирования «погружен» в более общий процесс познания. Это обстоятельство учитывается не только на этапе построения модели, но и на завершающей стадии,
когда происходит объединение и обобщение результатов исследования, получаемых на основе многообразных средств познания.

Моделирование — циклический процесс. Это означает, что за первым четырехэтапным циклом может следовать второй, третий и т. д. При этом знания об исследуемом объекте расширяются и уточняются, а исходная модель постепенно совершенствуется. Недостатки, обнаруженные после первого цикла моделирования, обусловленные малым знанием объекта и ошибками в построении модели, можно исправить в последующих циклах. Таким образом, в методологии моделирования заложены большие возможности для саморазвития [5, 9, 10, 12, 14].

Большинство объектов, изучаемых наукой, может быть охарактеризовано кибернетическим понятием «сложная система». Сложность системы определяется числом входящих в нее факторов, связями между этими факторами, а также взаимоотношениями между системой и средой. Многие объекты обладают всеми признаками очень сложной системы. Они объединяют огромное число факторов, отличающихся многообразием внутренних связей и связей с другими системами (природная среда, экономика других стран и т. д.). В науке взаимодействуют природные, технологические, социальные процессы, объективные и субъективные факторы. Разумеется, потенциальная возможность математического моделирования любых объектов и процессов не означает успешной реализации модели при данном уровне развития вычислительной техники и математических знаний. И хотя нельзя указать абсолютные границы математической формализуемости проблем, всегда будут существовать еще неформализованные проблемы, а также ситуации, где математическое моделирование недостаточно эффективно.

Длительное время главным тормозом практического применения математического моделирования в науке является недостаточное наполнение разработанных моделей конкретной и качественной информацией. Точность и полнота первичной информации, реальные возможности ее сбора и обработки во многом определяют выбор типов прикладных моделей. В то же время математическое моделирование выдвигает новые требования к системе информации. В зависимости от моделируемых объектов и назначения моделей используемая в них исходная информация имеет существенное различие. Она может быть разделена на две категории:
1) прошлое и современное состояние объектов (наблюдения и обработка данных наблюдений);
2) будущее развитие объектов, включающих данные об ожидаемых изменениях их внутренних параметров и внешних условий (прогнозы).

Вторая категория информации является результатом самостоятельных исследований, которые также могут выполняться посредством математического моделирования. Познание количественных отношений физических процессов и явлений опирается на измерения. Точность измерений в значительной степени предопределяет и точность конечных результатов количественного анализа посредством моделирования. Поэтому необходимым условием эффективного использования математического моделирования является совершенствование физических измерителей.

В соответствии с общей классификацией математические модели подразделяются на структурные и функциональные, которые включают промежуточные формы (структурно-функциональные).

В исследованиях чаще применяют структурные модели, поскольку для планирования и управления большое значение имеют взаимосвязи подсистемы. Типичными структурными моделями являются модели межотраслевых связей. Функциональные модели широко применяют при физическом моделировании, когда на поведение объекта («выход») воздействуют путем изменения исходных параметров («вход»). Примером может служить модель поведения потребителей в условиях товарно-денежных отношений [12]. Один и тот же объект может описываться одновременно и структурной, и функциональной моделью. Так, например, для планирования отдельной отраслевой системы используется структурная модель, а на народно-хозяйственном уровне каждая отрасль может быть представлена функциональной моделью [24, 26, 27].

По способам отражения факторов времени математические модели делятся на статические и динамические. В статических моделях все зависимости относятся к одному моменту или периоду времени. Динамические модели характеризуют изменения физических процессов во времени. По длительности рассматриваемого периода времени различают модели краткосрочного (до года), среднесрочного (до 5 лет) и долгосрочного (10—15 лет и более) прогнозирования и планирования. Само время в математических моделях может изменяться либо непрерывно, либо дискретно. Мо-
дели физических процессов чрезвычайно разнообразны по форме математических зависимостей [28—34]. Особенно важно выделить класс линейных моделей, наиболее удобных для анализа и вычислений. Различия между линейными и нелинейными моделями существенны не только с математической точки зрения, поскольку многие зависимости в физике, технике и экономике носят принципиально нелинейный характер: эффективность использования ресурсов при увеличении мощности, изменение напряжения и потребления объекта при увеличении нагрузки, изменение спроса и потребления населения при росте доходов и т. д.

Основные этапы процесса моделирования уже рассматривались выше. В различных отраслях знаний, в том числе и в технике, они приобретают свои специфические черты. Проанализируем последовательность и содержание этапов одного цикла математического моделирования.

1-й этап. Постановка проблемы и ее качественный анализ. На этом этапе главное — четко сформулировать сущность проблемы, принимаемые допущения и те вопросы, на которые требуется получить ответы. Этап включает выделение важнейших черт и свойств моделируемого объекта и абстрагирование от второстепенных; изучение структуры объекта и основных зависимостей, связывающих его элементы; формулирование гипотез (хотя бы предварительных), объясняющих поведение и развитие объекта.

2-й этап. Построение математической модели. Это этап формализации проблемы, выражения ее в виде конкретных математических зависимостей и отношений (функций, уравнений, неравенств и т. д.). Обычно сначала определяют основную конструкцию (тип) математической модели, а затем уточняют детали этой конструкции (конкретный перечень переменных и параметров, форма связей). Таким образом, построение модели подразделяется, в свою очередь, на несколько стадий.

Неправильно полагать, что чем больше факторов включает модель, тем она лучше «работает» и дает лучшие результаты. Из-за сложности и громоздкости модели затрудняют процесс исследования. Нужно учитывать не только реальные возможности информационного и математического обеспечения, но и сопоставлять затраты на моделирование с получаемым эффектом (при возрастании сложности модели затраты не должны превышать эффект) [5].
Введение

Одна из важных особенностей математических моделей — потенциальная возможность их использования для разрешения различных проблем. Поэтому, даже сталкиваясь с новой задачей, не нужно стремиться изобретать модель — вначале необходимо попытаться применить для решения этой задачи уже известные модели. В процессе построения модели осуществляется сопоставление двух систем научных знаний — физических и математических. Естественно стремиться к получению модели, принадлежащей к хорошо изученному классу математических задач. Часто это удаётся сделать путем некоторого упрощения исходных предпосылок модели, не искажающих существенных черт моделируемого объекта. Однако возможна и такая ситуация, когда формализация проблемы приводит к неизвестной ранее математической модели. Потребности экономической науки и практики в середине XX в. способствовали развитию математического программирования, теории игр, функционального анализа, вычислительной математики.

3-й этап. Математический анализ модели. Цель этого этапа — выяснение общих свойств модели. При этом используют чисто математические приемы исследования. Наиболее важный момент — доказательство существования решений в сформулированной модели (теорема существования). Если удается доказать, что математическая задача не имеет решения, то необходимость в последующей работе над первоначальной моделью отпадает и следует скорректировать либо постановку задачи, либо способы ее математической формализации.

При аналитическом исследовании модели выявляются такие вопросы, как, например, единственно ли решение, какие переменные (неизвестные) могут входить в решение, каковы будут соотношения между ними, в каких пределах и в зависимости от каких исходных условий они изменяются, каковы тенденции их изменения и т. д. Аналитическое исследование модели по сравнению с эмпирическим (численным) имеет то преимущество, что получаемые выводы сохраняют свою силу при различных конкретных значениях внешних и внутренних параметров модели. Знание общих свойств модели имеет столь важное значение, что часто ради доказательства подобных свойств исследователи сознательно идут на идеализацию первоначальной модели. И все же модели сложных объектов с большим трудом поддаются аналитическому исследованию. В тех случаях, когда аналитическими методами не
удается выяснить общие свойства модели, а упрощения модели приводят к недопустимым результатам, переходят к численным методам исследования.

4-й этап. Подготовка исходной информации. Моделирование предъявляет жесткие требования к системе информации. В то же время реальные возможности получения информации ограничивают выбор моделей, предназначенных для практического использования. При этом принимается во внимание не только принципиальная возможность подготовки информации (за определенные сроки), но и затраты на подготовку соответствующих информационных массивов. Эти затраты не должны превышать эффект от использования дополнительной информации [5, 19].

В процессе подготовки информации широко применяют методы теории вероятностей, теоретической и математической статистики. При системном математическом моделировании исходная информация, используемая в одних моделях, является результатом функционирования других моделей.

5-й этап. Численное решение. Этот этап включает разработку алгоритмов для численного решения задачи, составления программ на ЭВМ и непосредственное проведение расчетов. Трудности данного этапа обусловлены прежде всего большой размерностью физических задач, необходимостью обработки значительных массивов информации [14, 15].

Обычно расчеты по математической модели носят многовариантный характер. Благодаря высокому быстродействию современных ЭВМ удается проводить многочисленные «модельные» эксперименты, изучая «поведение» модели при различных изменениях некоторых условий. Исследование путем численных методов может существенно дополнить результаты аналитического исследования, а для многих моделей оно является единственным осуществимым. Класс физических задач, которые можно решать численными методами, значительно шире, чем класс задач, доступных аналитическому исследованию [33].

6-й этап. Анализ численных результатов и их применение. На этом, заключительном, этапе цикла встает вопрос о правильности и полноте результатов моделирования, о степени практической применимости последних. Математические методы проверки могут выявить некорректные способы построения модели и тем самым сужать класс потенциально правильных моделей. Нефор-
мальный анализ теоретических выводов и численных результатов, полученных на основании модели, а также сопоставление их с имеющимися знаниями и фактами действительности также позволяют обнаруживать недостатки постановки задачи, сконструированной математической модели, ее информационного и математического обеспечения.

Рассмотрим взаимосвязи этапов. На рис. В.2 изображены связи между этапами одного цикла математического моделирования.

Рис. В.2. Схема построения математической модели

Обратим внимание на возвратные связи этапов, возникающие вследствие недостатков предшествующих этапов моделирования.

Уже на этапе построения модели может выясниться, что постановка задачи противоречива или приводит к слишком сложной математической модели, тогда исходная постановка задачи должна быть скорректирована. Далее математический анализ модели (3-й этап) может показать, что небольшая модификация постановки задачи или ее формализации дает интересный аналитический результат.

Найболее часто необходимость возврата к предшествующим этапам моделирования возникает при подготовке исходной ин-
формации (4-й этап). Может обнаружиться, что необходимая информация отсутствует или же затраты на ее подготовку слишком велики. Тогда приходится возвращаться к постановке задачи и ее формализации, изменения их так, чтобы приспособиться к имеющейся информации. Поскольку задачи могут быть сложны по своей структуре, иметь большую размерность, часто случается, что известные алгоритмы и программы для ЭВМ не позволяют решить задачу в первоначальном виде. Если невозможно в короткий срок разработать новые алгоритмы и программы, исходную постановку задачи и модель упрощают: снимают и объединяют условия, уменьшают число факторов, нелинейные соотношения заменяют линейными, усиливают детерминизм модели и т. д (см. рис. В.2).

Недостатки, которые не удается исправить на промежуточных этапах моделирования, устраняют в последующих циклах. Но результаты каждого цикла имеют и вполне самостоятельное значение. Начав исследование с построения простой модели, можно быстро получить полезные результаты, а затем перейти к созданию более совершенной модели, дополняемой новыми условиями, включающими уточненные математические зависимости.

По мере развития и усложнения математического моделирования его отдельные этапы обособляются в специализированные области исследований, усиливаются различия между теоретико-аналитическими и прикладными моделями, происходит дифференциация моделей по уровням абстракции и идеализации. Можно выделить по крайней мере три аспекта применения математических методов в решении практических проблем.

1. Совершенствование системы информации. Математические методы позволяют упорядочить систему информации, выявить недостатки в имеющейся информации и выработать требования для подготовки новой информации или ее корректировки. Разработка и применение математических моделей указывают пути совершенствования информации, ориентированной на решение определенной системы задач планирования и управления. Прогресс в информационном обеспечении планирования и управления опирается на бурно развивающиеся технические и программные средства информатики.

2. Интенсификация и повышение точности расчетов. Формализация задач и применение ЭВМ многократно ускоряют типовые
и массовые расчеты, повышают точность и сокращают трудоемкость, позволяют проводить многовариантные обоснования сложных мероприятий.

3. Углубление количественного анализа проблем. Благодаря применению математического моделирования значительно повышается результативность конкретного количественного анализа.

После установления структуры модели необходимо численно оценить по экспериментальным данным изменяемые параметры модели. В зависимости от влияния параметров на модель различают линейные и нелинейные параметры.

Эксперимент занимает центральное место в науке. Однако возникает вопрос, насколько эффективно он используется? Следует отметить, что научные исследования организуют и проводят настолько хаотично, что их коэффициент полезного действия может быть оценен примерно в 2 %. Чтобы повысить эффективность исследований необходимо применение математических методов и построение математической теории планирования эксперимента [9—18].

Эксперименты и наблюдения являются основой для открытия законов природы и для проверки теоретических гипотез. По мере роста сложности исследуемых процессов и явлений очень быстро возрастают также затраты на аппаратуру и проведение эксперимента. За последние годы была создана последовательная и достаточно строгая теория регрессионного анализа, базирующаяся на современных теоретико-вероятностных представлениях [21—34]. Эта теория позволила значительно глубже понять и оценить результаты, получаемые МНК. Опыт показал, что классический регрессионный анализ, несмотря на хорошо разработанную теорию, не нашел широкого применения для решения экстремальных задач в физике, химии и металлургии. При решении подобного рода задач приходится иметь дело с очень большим числом независимых переменных. В этом случае метод становится крайне громоздким и возникают практически непреодолимые трудности, связанные, с одной стороны, с необходимостью ставить очень большое число экспериментов, с другой стороны, с интерпретацией уравнения регрессии (все коэффициенты регрессии оказываются корреляционно связанными между собой) [10—20].

Большие возможности открылись после того, как в регрессионный анализ были привнесены идеи планирования эксперимента [5, 14, 15]. В 1935 г. Р. Фишер опубликовал монографию «Планиро-
ванное эксперимента» («Design of Experiments»), давшую название новому направлению исследований [6, 19]. Планирование эксперимента применялось им в задачах с дискретными факторами, решаемых с помощью аппарата дисперсионного анализа [17—20]. Большая часть методов планирования эксперимента относится к задачам исследования поверхности отклика и изучения механизма явлений. Эти методы получили особенно широкое распространение, когда появилась работа Г. Бокса и Р. Уильсона (1951). Развитие современных идей планирования эксперимента для оценки параметров регрессионных уравнений и констант теоретических моделей связано с именем американского математика Ю. Кифера.

Отметим следующие новые возможности, которыми обладает исследователям теория планирования эксперимента.

— Статистическое представление об эксперименте является основой для исследования сложных объектов и систем. Эти сложные объекты характеризуются большим числом факторов, воздействующих на результаты эксперимента. При классическом подходе к экспериментам исследование влияния совокупности факторов на результаты эксперимента проводится при условии, что изменяется только один из факторов, а значения всех остальных лишь фиксируются. В сложных системах с большим числом неконтролируемых воздействий это условие не выполняется. Статистическая концепция учитывает влияние неконтролируемых факторов иным образом. Воздействие этих факторов рассматривается как дополнительный стохастический шум, наложенный на истинные результаты экспериментов. Для того чтобы воздействие сделать случайным, применяют специальные методы. Благодаря этому удается надежно отделить факторы, интересующие экспериментатора, от шумового фона, обусловленного неконтролируемыми воздействиями.

— Математическая статистика предоставляет в распоряжение экспериментатора методы анализа данных и принятия решений относительно исследуемого объекта на основании обработанных результатов эксперимента. Эти методы учитывают стохастический характер результатов и основываются на статистической проверке гипотез [1—3].

В отношении статистических выводов необходимо всегда иметь в виду следующее обстоятельство: положительные резуль-
Введение

Ленинградские авторы предложили некоторую статистическую гипотезу о важности того, что она поступила в научную гипотезу и не противоречит результатам эксперимента. Результаты проверки гипотезы никогда не могут служить доказательством абсолютной справедливости и правильности гипотезы.

Аналогичная ситуация возникает при построении математических моделей процессов. Исследователь может постулировать целый ряд гипотез в виде модели и экспериментальным путем выбрать среди этих моделей ту, которая наилучшим образом соответствует результатам экспериментов.

Планирование эксперимента — это новый подход к исследованию, в котором математическим методам отводится активная роль. Основываясь на априорных сведениях об изучаемом процессе, исследователь выбирает некоторую оптимальную стратегию управления экспериментом. Процесс исследования обычно разбивается на отдельные этапы. После каждого этапа исследователь получает новую информацию, позволяющую изменять стратегию исследования.

На математическом языке задача планирования эксперимента формулируется следующим образом: нужно выбрать оптимальное, в некотором смысле, расположение точек в факторном пространстве, чтобы получить некоторое представление о поверхности отклика. Выбор критерия оптимальности в значительной степени произведен.

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.

Задачи поиска оптимальных условий являются одними 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. Так, например, у химика возникла гипотеза о том, что при взаимодействии двух веществ должен получиться некоторый интересующий его продукт [23]. Требуется так подобрать концентрации реагирующих веществ, температуру, давление, время реакции и другие факторы, чтобы
Выход был близким к 100 %. В данном примере находят 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, задача минимизации себестоимости продукта или задача минимизации количества вредных примесей. Следует подчеркнуть, что всегда необходимо четко формулировать, в каком смысле условия должны быть оптимальными, чтобы правильно выбрать цель исследования [10]. Точная формулировка цели в значительной мере определяет успех исследования.

Задачи, сформулированные аналогичным образом, называются задачами оптимизации, а процесс их решения — процессом оптимизации или просто оптимизацией. Выбор оптимального состава многокомпонентных смесей или сплавов, повышение производительности действующих установок, повышение качества продукции, снижение затрат на ее получение — вот примеры задач оптимизации. Эксперимент, который ставится для решения задач оптимизации, называется экспериментальным.

В пособии подробно рассмотрены статистические методы обработки экспериментальных данных, предназначенные для построения эмпирических зависимостей. Это дает возможность переходить к рассмотрению принципиально нового подхода к экспериментированию, который состоит в том, что в каждом опыте варьируются одновременно все независимые переменные (факторы) по специальному плану. Эксперименты, поставленные таким образом, называют активными в отличие от обычных, традиционных, пассивных экспериментов, при постановке которых в каждом отдельном опыте варьируется только один фактор. Активные эксперименты обладают следующими преимуществами:

1) многомерный регрессионный анализ чувствителен к соблюдению исходных предпосылок [15]:

   а) результаты наблюдений \( y_1, y_2, ..., y_n \) представляют собой независимые, нормально распределенные случайные величины;

   б) дисперсии равны друг другу (выборочные оценки одно родны) или, другими словами, если проводить многократные повторные наблюдения над величиной \( y_i \) при некотором определенном наборе значений \( x_{i1}, x_{i2}, ..., x_{ip} \), то дисперсия не будет отличаться от дисперсии, полученной при повторных
наблюдениях для любого другого набора значений независимых переменных \( x_{i1}, x_{i2}, \ldots, x_{ip} \);

в) независимые переменные \( x_1, x_2, \ldots, x_p \) измеряются с пренебрежимо малой погрешностью по сравнению с погрешностью при определении \( y \).

Ясно, что эти требования могут быть выполнены только при проведении активного эксперимента, кроме того, активный эксперимент просто лучше организован [28];

2) поскольку план экспериментов составляют заранее, перед началом опытов, то ничто не мешает составить этот план так, чтобы максимально упростить последующую обработку экспериментов для построения регрессионных моделей;

3) оптимальное использование факторного пространства при проведении активного эксперимента позволяет при минимальных затратах (минимальном числе экспериментов) получить максимум информации об изучаемых явлениях. Однако следует отметить, что вопрос использования факторного пространства — один из самых сложных в планировании экспериментов. Планы строят на \( p \)-мерных кубах, сферах, симплексах и других фигурах. При планировании, например, на сфере, вписанной в куб, не используются угловые участки факторного пространства;

4) при планировании экстремальных экспериментов кроме аппроксимации функции отклика (построении эмпирической зависимости) попутно можно решить порой более важные для исследования задачи — поиск экстремума (максимума или минимума) в \( p \)-мерном факторном пространстве и задачу оптимального управления процессами;

5) методы планирования экспериментов позволяют опытным путем проранжировать факторы по степени их влияния на функцию отклика;

6) планируемые эксперименты позволяют получить математическое описание технологических процессов, которое ранее было затруднительным (например, при изучении диаграмм состав — свойство), и формализовать методами дисперсионного анализа изучение явлений, зависящих от качественных факторов;

7) планирование эксперимента позволяет изучать и математически описывать процессы и явления при неполном знании их механизма.
Введение

Большая заслуга в дальнейшем развитии идей и методов планирования экспериментов принадлежит Г. Боксу, его сотрудникам, ученикам и последователям (Р. Уильсону, У. Хантру, В.С. Бенкину и др.). В нашей стране большой вклад в популяризацию и дальнейшее развитие новых методов постановки и обработки экспериментов внес В.В. Наимов [7]. Ему же принадлежит первая в нашей стране статья по этому вопросу. Область применения планируемых экспериментов распространяется на все явления, зависящие от управляемых факторов, т.е. факторов, которые можно изменять и поддерживать на определенных уровнях. Такие эксперименты проводят при изучении физических, химических и медико-биологических явлений, а также технических и инженерных дисциплин.

Планируемые эксперименты можно подразделить следующим образом:
отсеивающие эксперименты, предназначенные для ранжирования факторов;
экстремальные эксперименты;
эксперименты для дисперсионного анализа;
эксперименты для специальных случаев (изучение диаграмм состав — свойство и др.).

Именно поэтому в последние десятилетия происходит неуклонное расширение сферы приложения методов математического планирования эксперимента. Эти методы успешно используются для повышения эффективности экспериментальных исследований, поиска оптимальных технологических режимов производственных процессов, выбора конструктивных параметров изделий, состава многокомпонентных систем и т.д. В развитии отечественной школы по планированию эксперимента большую роль сыграли В.В. Наимов, В.В. Федоров, Г.К. Круг, Е.В. Маркова, Ю.П. Адлер и другие ученые [1—16].
Глава 1. ЭЛЕМЕНТЫ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ СТАТИСТИКИ

1.1. Выборка и ее характеристики

1.1.1. Эмпирическая функция распределения

Исходным материалом для любого статистического исследования является совокупность из \( n \) наблюдений, в результате которых случайная величина \( X \) принимает значение \( x_1, x_2, \ldots, x_n \). Предположим, что испытания взаимно независимы и проведены в неизменных условиях. Функция распределения \( F(x) \) случайной величины \( X \) неизвестна. Известно лишь, что \( F(x) \) принадлежит некоторому классу распределений \( G \).

Набор наблюдений \( x_1, x_2, \ldots, x_n \) называется выборкой объема \( n \) из совокупности \( G \). При решении статистических задач будем использовать различные функции от наблюдений [1—3].

Определение 1.1. Любая функция от результатов наблюдения называется статистикой.

Если статистика используется (или хотя бы претендует на использование) для оценивания, то о ней говорят как об оценке.

Рассмотрим выборку \( x_1, x_2, \ldots, x_n \). Перегруппировав элементы выборки путем расстановки их в возрастающем порядке таким образом, что

\[
x_{(1)} \leq x_{(2)} \leq \ldots \leq x_{(n)},
\]

получим упорядоченную выборку, которая называется вариационным (или статистическим) рядом, величины \( x_{(i)} \) называют порядковыми статистиками.

Обозначим через \( v_n(x) \) число выборочных значений, меньших \( x \). Функция

\[
F_n^*(x) = \frac{v_n(x)}{n}
\]

является упорядоченной выборкой, которая называется вариационным рядом с порядковыми статистиками.
Глава 2. НАБЛЮДЕНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТ КАК ОСНОВЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

2.1. Обработка результатов измерений

2.1.1. Прямые равноточные измерения

Задача обработки результатов измерений заключается в нахождении приближенного значения или оценки измеряемой величины \( X \) и определении ее среднего квадратичного отклонения \( \sigma \). Если измерения проводились по одной и той же методике средствами измерения одинаковой точности при постоянных внешних условиях, то такие измерения называются равноточными. Для них справедливо равенство всех членов ряда. При таких измерениях для значений \( x_1, x_2, \ldots, x_n \)

\[
\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \ldots = \sigma_n^2 = \text{const}.
\]

В этом случае можно определить:
среднее арифметическое значение \( \bar{x} \) и среднее квадратичное отклонение \( \sigma \):

\[
M(X) \approx \bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n} \quad \text{или} \quad M(X) \approx \bar{x} = x_0 + \frac{\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i}{n},
\]

\[
\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}{n - 1}},
\]

где \( \varepsilon_i = x_i - x_0 \).
Глава 3. ПОЛНЫЕ ФАКТОРНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ ТИПА $2^k$ И ДРОБНЫЕ РЕПЛИКИ

3.1. Полные факторные эксперименты

3.1.1. Интервал варьирования и кодированные переменные

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

Цель планирования эксперимента — нахождение таких условий и правил проведения опытов, при которых удастся получить надежную и достоверную информацию об объекте с наименьшей затратой труда, а также представить эту информацию в компактной и удобной форме с количественной оценкой точности.

Теория планирования эксперимента (ТПЭ) охватывает практически все встречающиеся на практике варианты исследования объектов. В ТПЭ исследуемый объект (реальный объект, модель объекта) рассматривается как «черный ящик», имеющий входы $x_1, x_2, \ldots, x_n$ (управляемые независимые параметры) и выход $y$ (рис. 3.1). Пусть интересующее нас свойство $y$ объекта зависит от $n$ независимых переменных $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ и мы хотим выяснить характер этой зависимости — $y = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, о которой имеем лишь общее представление. Величина $y$ называется откликом, а
Глава 4. ЦЕНТРАЛЬНЫЕ КОМПОЗИЦИОННЫЕ ПЛАНЫ

4.1. Планы второго порядка

Планы второго порядка позволяют сформировать функцию отклика в виде полного квадратичного полинома, который содержит большое число членов, чем неполный квадратичный полином, сформированный по планам первого порядка. Поэтому планы второго порядка требуют большего числа $N$ выполняемых опытов. Полный квадратичный полином при $n = 2$ содержит шесть членов:

$$
\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2,
$$

при $n = 3$ — одиннадцать членов:

$$
\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{33} x_3^2.
$$

Известно, что для получения квадратичной зависимости каждый фактор должен фиксироваться как минимум на трех уровнях. У планов второго порядка область планирования может характеризоваться следующими особенностями:

1) быть естественной, т. е. включать область построения планов первого порядка и дополнительные точки (такие планы называются композиционными). Дополнительные точки могут выходить за область плана первого порядка — единичного гиперкуба. В этом случае опыты в планах реализуются при установлении факторов за пределами варьирования, что необходимо учитывать при определении области совместимости факторов;

2) не выходить за пределы единичного гиперкуба, т. е. для всех точек плана выполняется условие $|x_i| \leq 1$;
Глава 5. РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ
И ОПТИМАЛЬНОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ

5.1. Линейная регрессия

На практике часто встречаются задачи с двумя и более переменными. Между ними существует характерная связь, природу которой необходимо исследовать. Например, в химическом процессе выход продукта реакции связан с рабочей температурой, в этом случае может представлять интерес построение модели, связанной с выходом продукта с температурой. Такая модель поможет при прогнозировании, оптимизации процесса или управлении им.

Пусть в общем случае есть одна зависимая переменная, или отклик $y$, которая зависит от $n$ независимых переменных, например $x_1, x_2, ..., x_n$. Связь между этими переменными характеризуется математической моделью, которая называется уравнением регрессии. Точнее, мы говорим о регрессии $y$ по $x_1, x_2, ..., x_n$. Регрессионная модель должна аппроксимировать совокупность экспериментальных данных. В некоторых случаях исследователю известен точный вид истинной функциональной зависимости между $y$ и $x_1, x_2, ..., x_n$, скажем, $y = \psi(x_1, x_2, ..., x_n)$. Однако чаще всего истина функциональная связь неизвестна, и экспериментатор приходится выбирать подходящую функцию для аппроксимации $\psi$. Регрессионные методы часто используются при анализе данных не-планируемых экспериментов.

Предположим, что истинная связь между $y$ и $x$ линейна и наблюдение $y$ на каждом уровне $x$ — случайная величина. Тогда математическое ожидание $y$ для каждого значения $x$ имеет вид $M(y/x) = \beta_0 + \beta_1x$, где параметры $\beta_0$ и $\beta_1$, определяющие прямую линию, — неизвестные постоянные. Допустим, что каждое наблюдение $y$ описывается моделью

$$y = \beta_0 + \beta_1x + \epsilon,$$  \hspace{1cm} (5.1)
ЛИТЕРАТУРА

34. Венедиктов В.Д., Колесов А.И. Использование регрессионных моделей при анализе результатов «разрозненного» эксперимента: Труды ЦИАМ, 1981. № 973. С. 213—238.
ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие ................................................................. 3
Введение ................................................................. 7
Глава 1. Элементы математической статистики ............... 23
  1.1. Выборка и ее характеристики .................................. 23
  1.2. Точечные оценки ...................................................... 28
  1.3. Методы нахождения оценок ...................................... 42
  1.4. Критерии согласия ...................................................... 49
  1.5. Интервальные оценки .................................................. 61
  1.6. Проверка статистических гипотез ............................. 72

Глава 2. Наблюдение и эксперимент как основы математического моделирования ........................................ 80
  2.1. Обработка результатов измерений ........................ 80
  2.2. Принципы моделирования систем на эмпирическом уровне .................................................. 95
  2.3. Элементы матричной алгебры в регрессионном анализе .... 105
  2.4. Использование регрессионных моделей при анализе результатов «разрозненного» эксперимента ................ 148

Глава 3. Полные факторные эксперименты типа $2^k$ и дробные реплики ............................................................... 159
  3.1. Полные факторные эксперименты ................................ 159
  3.2. Дробный факторный эксперимент ................................ 182
  3.3. Выбор дробных реплик ................................................. 193
  3.4. Анализ факторных экспериментов ............................. 210
  3.5. Линейные планы ......................................................... 225
  3.6. Критерии оптимальности планов ............................... 228

Глава 4. Центральные композиционные планы .................... 247
  4.1. Планы второго порядка ............................................ 247
  4.2. Ортогональный центральный композиционный план второго порядка .................................................. 248
  4.3. Планы Бокса ............................................................. 252
  4.4. Планы Хартли ............................................................ 254
4.5. Структура ортогональных центральных композиционных планов второго порядка ........................................ 256
4.6. Произвольный симметричный центральный композиционный план ................................................................. 266
4.7. Многомерные ортогональные центральные композиционные планы второго порядка ........................................ 272
4.8. Многомерные модели ротатабельных центральных композиционных планов .................................................... 301
4.9. Моменты ротатабельного плана ............................................. 313
4.10. Проверка адекватности модели ......................................... 324

Глава 5. Регрессионный анализ и оптимальное планирование ... 337
5.1. Линейная регрессия ............................................................ 337
5.2. Проверка гипотез при линейной регрессии ...................... 342
5.3. Интервальные оценки линейной регрессии ....................... 346
5.4. Многофакторная линейная регрессия ............................... 351
5.5. Проверка гипотез при использовании множественной линейной регрессии ....................................................... 358
5.6. Другие модели линейной регрессии .................................. 365
5.7. Исследование уравнения регрессии. Анализ остатков .... 367
5.8. Многофакторный дисперсионный анализ .......................... 369
5.9. Исследование поверхности отклика .................................. 380
5.10. Канонические модели второго порядка ............................ 397
5.11. Планы для подбора модели второго порядка .................. 409
5.12. Планы для изучения поверхности отклика ...................... 412

Литература ............................................................................. 444

Приложения ........................................................................... 446
Учебное издание

Сидяев Николай Иванович
Вилисова Нина Трофимовна

ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

Редактор Н.Г. Ковалевская
Технический редактор Э.А. Кулагова
Художник С.С. Водчик
Корректор О.В. Калининова
Компьютерная графика В.А. Филатовой
Компьютерная верстка Н.А. Марковой

Оригинал-макет подготовлен в Издательстве МГТУ им. Н.Э. Баумана.
Санитарно-эпидемиологическое заключение № 77.99.60.953.Д.003961.04.08 от 22.04.2008 г.
Подписано в печать 22.12.2011. Формат 60х90 1/16.
Усл. печ. л. 29,0. Тираж 1000 экз.
Заказ

Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана.
http://www.baumanpress.ru
E-mail: press@bmstu.ru
105005, Москва, 2-я Бауманская, 5.

Отпечатано в типографии МГТУ им. Н.Э. Баумана.
105005, Москва, 2-я Бауманская, 5.
E-mail: mgtupress@mail.ru