

ЛЕКЦИЯ 8

5. ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

План лекции

- 5.1. Планирование эксперимента как наука
- 5.2. Основные понятия теории планирования эксперимента
- 5.3. Метод наименьших квадратов

5.1. Планирование эксперимента как наука

На современном этапе развития науки и техники пристальное внимание ученых и инженеров уделяется тому, как лучше и эффективнее проводить эксперимент. Этот этап характеризуется существенным усложнением объектов исследования и используемого экспериментального оборудования; тенденцией к удлинению среднего времени экспериментирования и удорожанию исследований; необходимостью всемерного увеличения эффективности и улучшения качества проводимых исследований.

Долгое время считалось, что математик может вмешиваться в работу экспериментатора только на последнем этапе – при обработке результатов законченного опыта. Выбор стратегии эксперимента целиком определялся интуицией исследователя – этот процесс оставался неформализованным, лишь совсем недавно задача была сформулирована иначе. Было показано, что эффективность исследования может быть резко повышена, если математик примет участие в самом начале работы, планируя эксперимент. Теперь часто даже утверждается, что мало полезной информации можно извлечь из результатов эксперимента, если он был поставлен без консультации с математиком-специалистом по планированию эксперимента.

Теория планирования эксперимента началась с работ английского ученого Р. Фишера в 30-х годах XX столетия, использовавшего ее для решения агробиологических задач.

Планирование эксперимента состоит в выборе числа и условий проведения опытов, позволяющих получить необходимые знания об объекте исследо-

вания с требуемой точностью. Это целенаправленное управление экспериментом, реализуемое в условиях неполного знания механизма изучаемого явления.

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.

Эксперименты обычно ставятся небольшими сериями по заранее составленному алгоритму, оптимальному в некотором строго сформулированном смысле. После каждой небольшой серии опытов производится обработка результатов наблюдений и принимается строго обоснованное решение о том, что делать дальше. При выборе алгоритма планирования эксперимента, естественно, учитывается цель исследования, так и априорная информация о механизме изучаемого явления. Эта информация всегда бывает неполной, за исключением, может быть, тривиального случая – демонстрационных опытов. Критерий оптимальности планирования выбирается так, чтобы он хорошо соответствовал интуитивным представлениям экспериментаторов.

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

При этом важнейшим условием научно поставленного эксперимента является минимизация общего числа опытов, а следовательно, и затрат материальных, трудовых и временных ресурсов. Уменьшение числа опытов, конечно, не должно существенно отражаться на качестве полученной информации. Общая направленность теории планирования эксперимента может быть сформу-

лирована следующим образом – «меньше опытов – больше информации – выше качество результатов».

Таким образом, использование теории планирования эксперимента обеспечивает:

- 1) минимизацию, т.е. предельное сокращение необходимого числа опытов;
- 2) одновременное варьирование всех факторов;
- 3) выбор четкой стратегии, что позволяет принимать обоснованные решения после каждой серии опытов;
- 4) минимизацию ошибок эксперимента за счет использования специальных проверок.

5.2. Основные понятия теории планирования эксперимента

Как правило, любой объект исследования (носитель некоторых неизвестных и подлежащих изучению свойств или качеств) можно представить в виде «черного ящика» с определенным количеством входов и выходов (рис. 5.1.).

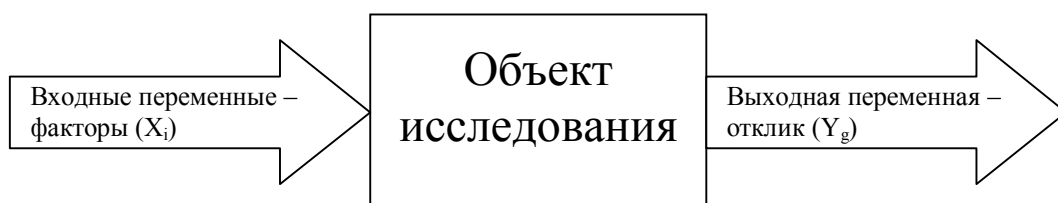


Рис. 5.1. Структурная схема объекта исследования

Входные переменные X_i , $i = 1, 2, \dots, k$ (где k – число переменных), определяющие состояние объекта называются *факторами*. Фиксированное значение фактора называют *уровнем фактора*. Основное требование к факторам – достаточная управляемость, под которой понимается возможность установить нужный уровень фактора и стабилизировать его в течение всего опыта.

Выходная переменная Y_g (обычно $g = 1$) – это реакция объекта на входные воздействия; она носит название *отклика*, а зависимость

$$Y = f(X_1, X_2, \dots, X_i, \dots, X_k) \quad (5.1)$$

называется *функцией отклика* или *цели*. Обычно о характере этой зависимости имеется лишь общее представление. Выбор функции отклика определяется целью исследования, которая может представлять собой оптимизацию экономической (стоимость, производительность), технологической (точность, быстродействие), конструктивной (габариты, надежность) или другой характеристики объекта.

Геометрическое представление функции отклика в факторном пространстве X_1, X_2, \dots, X_k называется *поверхностью отклика*

Если исследуется влияние на Y лишь одного фактора X_1 , то нахождение функции отклика – достаточно простая задача. Задавшись несколькими значениями этого фактора, в результате опытов получаем соответствующие значения Y и график $Y = F(X)$ (рис. 5.2).

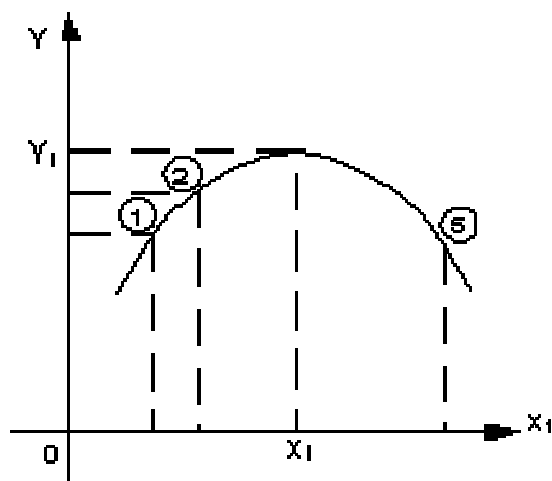


Рис. 5.2. Построение функции отклика одной переменной по опытным данным

По его виду можно подобрать математическое выражение функции отклика. Если нет уверенности, что опыты хорошо воспроизводятся, то обычно опыты повторяют несколько раз и получают зависимость с учетом разброса опытных данных.

Если факторов два, то необходимо провести опыты при разных соотношениях этих факторов. Полученную функцию отклика в 3^x -мерном пространстве (рис. 5.3) можно анализировать, проводя ряд сечений с фиксированными

значениями одного из факторов (рис. 5.3). Вычлененные графики сечений можно аппроксимировать совокупностью математических выражений.

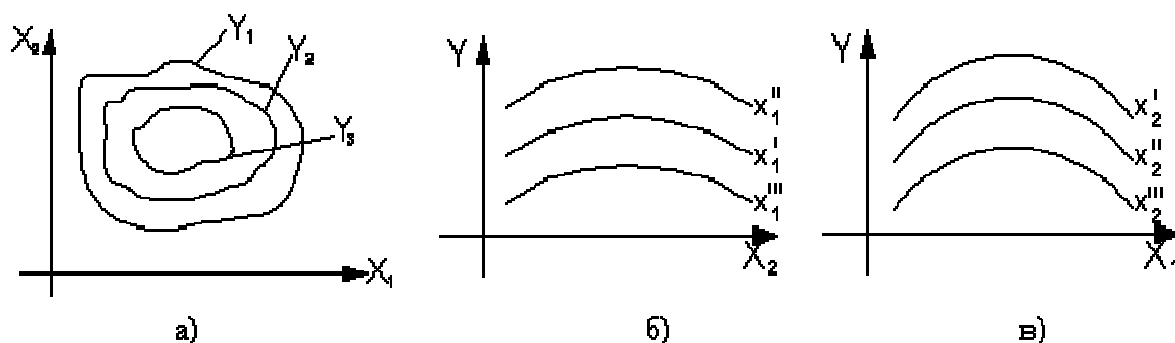


Рис. 5.3. Сечения поверхности отклика при фиксированных откликах (а) и переменных (б, в)

При трех и более факторах задача становится практически неразрешимой рассматриваемым графическим методом. В этом случае для нахождения и анализа функции отклика используются математические методы.

Истинный вид функции отклика (5.1) до эксперимента чаще всего неизвестен, в связи с чем, для математического описания поверхности отклика используется статистическая модель процесса

$$Y_p = f(X_1, X_2, \dots, X_i, \dots, X_k). \quad (5.2)$$

Уравнение (5.2) получают в результате эксперимента и называют аппроксимирующей функцией или регрессионной моделью процесса. Под аппроксимацией понимают замену точных аналитических выражений приближенными. В качестве уравнения регрессии обычно используют полином некоторой степени. Причем наибольшее распространение в инженерных расчетах получили полиномы первого и второго порядка, так как необходимая точность расчетов обычно весьма невелика (порядка 5 – 15 %).

Например, при $k = 1$ полином n -ой степени имеет вид

$$Y_p = a_0 + a_1X + a_2X^2 + a_3X^3 + \dots + a_nX^n,$$

при $k = 2$ и $n = 1$, обычно записывается в виде

$$Y_p = a_0 + a_1X_1 + a_2X_2 + a_3X_1X_2,$$

где $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ – неизвестные коэффициенты регрессии, которые вычисляются на основании результатов эксперимента. Члены, содержащие произведения

X_1X_2 , X_2X_3 и т.д., называют членами, отражающими попарное взаимодействие факторов, члены $X_1X_2X_3$ – членами тройного взаимодействия, и т.д.

Каждый коэффициент характеризует роль соответствующей переменной в процессе или силу влияния факторов. Чем больше численная величина коэффициента, тем большее влияние оказывает этот фактор. Если коэффициент имеет знак плюс, то с увеличением значения фактора отклик увеличивается, а если минус – уменьшается.

Задавшись некоторым сочетанием факторов X_{ij} (здесь $i = 1, 2, \dots, k$ – номер фактора, $j = 1, 2, \dots, N$ – номер опыта), проведем первый опыт ($j = 1$) и получим функцию отклика $Y_j = Y_1$ при принятых значениях факторов (см. табл. 5.1).

Таблица 5.1

№ опыта	Значения функции отклика	Значения факторов					
1	Y_1	X_{11}	X_{21}	...	X_{i1}	...	X_{k1}
2	Y_2	X_{12}	X_{22}	...	X_{i2}	...	X_{k2}
...
j	Y_j	X_{1j}	X_{2j}	...	X_{ij}	...	X_{kj}
...
$N-1$	Y_{N-1}	$X_{1,N-1}$	$X_{2,N-1}$...	$X_{i,N-1}$...	$X_{k,N-1}$
N	Y_N	$X_{1,N}$	$X_{2,N}$...	$X_{i,N}$...	$X_{k,N}$

Затем возьмем другое сочетание факторов и вновь поставим опыт. В результате зафиксируем отклик Y_2 , соответствующий этому сочетанию и т.д. По результатам каждого опыта путем подстановки X_{ij} и Y_j в уравнение регрессии можно записать одно уравнение, в котором коэффициенты аппроксимирующего полинома неизвестны. Если число опытов совпадает с числом коэффициентов в аппроксимирующем полиноме, можно составить систему уравнений, решение которой дает значения искомых коэффициентов. В этом случае значения отклика Y , вычисленные по уравнению регрессии в точках эксперимента точно совпадают с их экспериментальными значениями. Кроме того, в силу конечного числа членов аппроксимирующего полинома расхождение между истинным и приближенным значениями функции отклика вне экспериментальных точек может быть значительным. В связи с изложенным возникает задача нахождения

такого вида полинома и такого количества опытов, чтобы удовлетворялся некоторый критерий. Обычно в качестве критерия принимают сумму квадратов отклонений экспериментальных значений Y_j от их расчетного значения Y_{jp} . Наилучшим приближением аппроксимирующей функции к истинной считается функция, удовлетворяющая условию минимума этой суммы.

5.3. Метод наименьших квадратов

Для определения неизвестных коэффициентов регрессионной модели (5.2) обычно применяется наиболее универсальный *метод наименьших квадратов (МНК)*.

Посредством МНК значения $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ находятся из условия минимизации суммы квадратов отклонений экспериментальных значений отклика Y_j от получаемых Y_{jp} с помощью регрессионной модели, т. е. путем минимизации суммы:

$$f(a_0, a_1, a_2, \dots) = \sum_{j=1}^N [\Delta Y_j]^2 = \sum_{j=1}^N [Y_j - Y_{jp}]^2 = \min.$$

Минимизация суммы квадратов производится обычным способом с помощью дифференциального исчисления путем приравнивания к 0 первых частных производных по $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$. В итоге получается замкнутая система алгебраических уравнений, с неизвестными $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$.

Рассмотрим метод наименьших квадратов на примере линейной регрессионной модели – уравнения прямой $Y_p = a_0 + a_1 X$ ($k=1, n=1$).

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial a_1} &= -2 \sum_{j=1}^N (Y_j - a_1 X_j - a_0) X_j = 0; \\ \frac{\partial f}{\partial a_0} &= -2 \sum_{j=1}^N (Y_j - a_1 X_j - a_0) = 0, \end{aligned}$$

или

$$\begin{cases} a_1 \sum_{j=1}^N X_j^2 + a_0 \sum_{j=1}^N X_j = \sum_{j=1}^N Y_j X_j; \\ a_1 \sum_{j=1}^N X_j + a_0 \cdot N = \sum_{j=1}^N Y_j. \end{cases}$$

В итоге для линейной регрессионной модели неизвестные коэффициенты определяются по следующим формулам

$$a_0 = \frac{\sum_{j=1}^N X_j^2 \sum_{j=1}^N Y_j - \sum_{j=1}^N X_j \sum_{j=1}^N X_j Y_j}{N \sum_{j=1}^N X_j^2 - \left(\sum_{j=1}^N X_j \right)^2};$$

$$a_1 = \frac{N \sum_{j=1}^N X_j Y_j - \sum_{j=1}^N X_j \sum_{j=1}^N Y_j}{N \sum_{j=1}^N X_j^2 - \left(\sum_{j=1}^N X_j \right)^2}.$$

Т.е. для расчета a_0 , a_1 необходимо определить $\sum X_j$, $\sum Y_j$, $\sum X_j^2$, $\sum X_j Y_j$.

Коэффициент a_0 (свободный член уравнения регрессии) геометрически представляет собой расстояние от начала координат до точки пересечения линии регрессии с осью ординат, а коэффициент a_1 характеризует тангенс угла наклона линии регрессии к оси OX .

При использовании метода наименьших квадратов необходимым условием получения статистических оценок является выполнение неравенства $N > d$, т.е. количество опытов N должно быть больше, чем число неизвестных коэффициентов d .

Основной особенностью рассматриваемой статистической (регрессионной) модели является то, что подобная модель не может точно описать поведение объекта в любом конкретном опыте. Исследователь не может предсказать точное значение Y в каждом опыте, но с помощью соответствующей статистической модели может указать, вокруг какого центра будут группироваться значения Y при данном сочетании значений факторов X_{ij} .