**1. История возникновения планирования эксперимента**

Планирование эксперимента – продукт нашего времени, однако истоки его теряются в глубине веков.

Истоки планирования эксперимента уходят в глубокую древность и связаны с числовой мистикой, пророчествами и суевериями.

Это собственно не планирование физического эксперимента, а планирование числового эксперимента, т.е. расположение чисел так, чтобы выполнялись некоторые строгие условия, например, на равенство сумм по строкам, столбцам и диагоналям квадратной таблицы, клеточки которой заполнены числами натурального ряда.

Такие условия выполняются в магических квадратах, которым, по-видимому, принадлежит первенство в планировании эксперимента.

Согласно одной легенде примерно в 2200 г. до н.э. китайский император Ю выполнял мистические вычисления с помощью магического квадрата, который был изображен на панцире божественной черепахи.

Квадрат императора Ю

4 9 2

3 5 7

8 1 6

Клетки этого квадрата заполнены числами от 1 до 9, и суммы чисел по строкам, столбцам и главным диагоналям равны 15.

В 1514 г. немецкий художник Альбрехт Дюрер изобразил магический квадрат в правом углу своей знаменитой гравюры-аллегории «Меланхолия». Два числа в нижнем горизонтальном ряду A5 и 14) составляют год создания гравюры. В этом состояло своеобразное «приложение» магического квадрата.

Квадрат Дюрера

16 3 2 13

5 10 11 8

9 6 7 12

4 15 14 1

В течение нескольких веков построение магических квадратов занимало умы индийских, арабских, немецких, французских математиков.

В настоящее время магические квадраты используются при планировании эксперимента в условиях линейного дрейфа, при планировании экономических расчетов и составлении рационов питания, в теории кодирования и т.д.

Построение магических квадратов является задачей комбинаторного анализа, основы которого в его современном понимании заложены Г. Лейбницем. Он не только рассмотрел и решил основные комбинаторные задачи, но и указал на большое практическое применение комбинаторного анализа: к кодированию и декодированию, к играм и статистике, к логике изобретений и логике геометрии, к военному искусству, грамматике, медицине, юриспруденции, технологии и к комбинации наблюдений. Последняя область применения наиболее близка к планированию эксперимента.

Одной из комбинаторных задач, имеющей прямое отношение к планированию эксперимента, занимался известный петербургский математик Л. Эйлер. В 1779 г. он предложил задачу о 36 офицерах как некоторый математический курьез.

Он поставил вопрос, можно ли выбрать 36 офицеров 6 рангов из 6 полков по одному офицеру каждого ранга от каждого полка и расположить их в каре так, чтобы в каждом ряду и в каждой шеренге было бы по одному офицеру каждого ранга и по одному от каждого полка. Задача эквивалентна построению парных ортогональных 6x6 квадратов. Оказалось, что эту задачу решить невозможно. Эйлер высказал предположение, что не существует пары ортогональных квадратов порядка п=1 (mod 4).

Задачей Эйлера, в частности, и латинскими квадратами вообще занимались впоследствии многие математики, однако почти никто из них не задумывался над практическим применением латинских квадратов.

В настоящее время латинские квадраты являются одним из наиболее популярных способов ограничения на рандомизацию при наличии источников неоднородностей дискретного типа в планировании эксперимента. Группировка элементов латинского квадрата, благодаря своим свойствам (каждый элемент появляется один и только один раз в каждой строке и в каждом столбце квадрата), позволяет защитить главные эффекты от влияния источника неоднородностей. Широко используются латинские квадраты и как средство сокращения перебора в комбинаторных задачах.

Возникновение современных статистических методов планирования эксперимента связано с именем Р. Фишера.

С 1918 г. он начал свою известную серию работ на Рочемстедской агробиологической станции в Англии. В 1935 г. появилась его монография «Design of Experiments», давшая название всему направлению.

Среди методов планирования первым был дисперсионный анализ (кстати, Фишеру принадлежит и термин «дисперсия»). Фишер создал основы этого метода, описав полные классификации дисперсионного анализа (однофакторный и многофакторный эксперименты) и неполные классификации дисперсионного анализа без ограничения и с ограничением на рандомизацию. При этом он широко использовал латинские квадраты и блок-схемы. Вместе с Ф. Йетсом он описал их статистические свойства. В 1942 г. А. Кишен рассмотрел планирование по латинским кубам, которое явилось дальнейшим развитием теории латинских квадратов.

Затем Р. Фишер независимо опубликовал сведения об ортогональных гипер-греко-латинских кубах и гипер-кубах. Вскоре после этого 1946–1947 гг.) Р. Рао рассмотрел их комбинаторные свойства. Дальнейшему развитию теории латинских квадратов посвящены работы X. Манна A947–1950 гг.).

Исследования Р. Фишера, проводившиеся в связи с работами по агробиологии, знаменуют начало первого этапа развития методов планирования эксперимента. Фишер разработал метод факторного планирования. Йегс предложил для этого метода простую вычислительную схему. Факторное планирование получило широкое распространение. Особенностью полного факторного эксперимента является необходимость ставить сразу большое число опытов.

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

В 1951 г. работой американских ученых Дж. Бокса и К. Уилсона начался новый этап развития планирования эксперимента.

Эта работа подытожила предыдущие. В ней ясно сформулирована и доведена до практических рекомендаций идея последовательного экспериментального определения оптимальных условий проведения процессов с использованием оценки коэффициентов степенных разложений методом наименьших квадратов, движения по градиенту и отыскания интерполяционного полинома (степенного ряда) в области экстремума функции отклика («почти стационарной» области).

В 1954–1955 гг. Дж. Бокс, а затем Дж. Бокс и П. Юл показали, что планирование эксперимента можно использовать при исследовании физико-химических механизмов процессов, если априори высказаны одна или несколько возможных гипотез. Здесь планирование эксперимента пересекалось с исследованиями по химической кинетике. Интересно отметить, что кинетику можно рассматривать как метод описания процесса с помощью дифференциальных уравнений, традиции которого восходят к И. Ньютону. Описание процесса дифференциальными уравнениями, называемое детерминистическим, нередко противопоставляется статистическим моделям.

Бокс и Дж. Хантер сформулировали принцип ротатабельности для описания «почти стационарной» области, развивающейся в настоящее время в важную ветвь теории планирования эксперимента. В той же работе показана возможность планирования с разбиением на ортогональные блоки, указанная ранее независимо де Бауном.

Дальнейшим развитием этой идеи было планирование, ортогональное к неконтролируемому временному дрейфу, которое следует рассматривать как важное открытие в экспериментальной технике – значительное увеличение возможностей экспериментатора.

**2. Математическое планирование эксперимента в научных исследованиях**

**2.1 Основные понятия и определения**

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

Важнейшей задачей методов обработки полученной в ходе эксперимента информации является задача построения математической модели изучаемого явления, процесса, объекта. Ее можно использовать и при анализе процессов и при проектировании объектов. Можно получить хорошо аппроксимирующую математическую модель, если целенаправленно применяется активный эксперимент. Другой задачей обработки полученной в ходе эксперимента информации является задача оптимизации, т.е. нахождения такой комбинации влияющих независимых переменных, при которой выбранный показатель оптимальности принимает экстремальное значение.

Опыт – это отдельная экспериментальная часть.

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

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

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

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

Пусть интересующее нас свойство *(Y)* объекта зависит от нескольких (*n*) независимых переменных (*Х1, Х2, …, Хn*) и мы хотим выяснить характер этой зависимости – *Y=F(Х1, Х2, …, Хn)*, о которой мы имеем лишь общее представление. Величина *Y* – называется «отклик», а сама зависимость *Y=F(Х1, Х2, …, Хn)* – «функция отклика».

Отклик должен быть определен количественно. Однако могут встречаться и качественные признаки *Y*. В этом случае возможно применение рангового подхода. Пример рангового подхода – оценка на экзамене, когда одним числом оценивается сложный комплекс полученных сведений о знаниях студента.

Независимые переменные *Х1, Х2, …, Хn* – иначе факторы, также должны иметь количественную оценку. Если используются качественные факторы, то каждому их уровню должно быть присвоено какое-либо число. Важно выбирать в качестве факторов лишь независимые переменные, т.е. только те которые можно изменять, не затрагивая другие факторы. Факторы должны быть однозначными. Для построения эффективной математической модели целесообразно провести предварительный анализ значимости факторов (степени влияния на функцию), их ранжирование и исключить малозначащие факторы.

Диапазоны изменения факторов задают область определения *Y*. Если принять, что каждому фактору соответствует координатная ось, то полученное пространство называется факторным пространством. При n=2 область определения Y представляется собой прямоугольник, при n=3 – куб, при n >3 – гиперкуб.

При выборе диапазонов изменения факторов нужно учитывать их совместимость, т.е. контролировать, чтобы в этих диапазонах любые сочетания факторов были бы реализуемы в опытах и не приводили бы к абсурду. Для каждого из факторов указывают граничные значения

, *i*=*1,… n*.

Регрессионный анализ функции отклика предназначен для получения ее математической модели в виде уравнения регрессии

,

где *В1, …, Вm* – некоторые коэффициенты; *е* – погрешность.

Среди основных методов планирования, применяемых на разных этапах исследования, используют:

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

Инициатором применения планирования эксперимента является Рональд А. Фишер, другой автор известных первых работ – Френк Йетс. Далее идеи планирования эксперимента формировались в трудах Дж. Бокса, Дж. Кифера. В нашей стране – в трудах Г.К. Круга, Е.В. Маркова и др.

В настоящее время методы планирования эксперимента заложены в специализированных пакетах, широко представленных на рынке программных продуктов, например: StatGrapfics, Statistica, SPSS, SYSTAT и др.

**2.2 Представление результатов экспериментов**

При использовании методов планирования эксперимента необходимо найти ответы на 4 вопроса:

* Какие сочетания факторов и сколько таких сочетаний необходимо взять для определения функции отклика?
* Как найти коэффициенты *В0, В1, …, Bm*?
* Как оценить точность представления функции отклика?
* Как использовать полученное представление для поиска оптимальных значений *Y*?

Геометрическое представление функции отклика в факторном пространстве *Х1, Х2, …, Хn* называется поверхностью отклика (рис. 1).

Рис. 1. Поверхность отклика

Если исследуется влияние на *Y* лишь одного фактора *Х1*, 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. 2).

Рис. 2. Построение функции отклика одной переменной по опытным данным

По его виду можно подобрать математическое выражение функции отклика. Если мы не уверены, 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 3х-мерном пространстве (рис. 1) можно анализировать, проводя ряд сечений с фиксированными значениями одного из факторов (рис. 3). Вычлененные графики сечений можно аппроксимировать совокупностью математических выражений.

Рис. 3. Сечения поверхности отклика при фиксированных откликах (а) и переменных (б, в)

При трех и более факторах задача становится практически неразрешимой. Если и будут найдены решения, то использовать совокупность выражений достаточно трудно, а часто и не реально.

**2.3 Применение математического планирования эксперимента в научных исследованиях**

В современной математической теории оптимального планирования эксперимента существует 2 основных раздела:

1. планирование эксперимента для изучения механизмов сложных процессов и свойств многокомпонентных систем.
2. планирование эксперимента для оптимизации технологических процессов и свойств многокомпонентных систем.

***Планирование эксперимента –*** это выбор числа опытов и условий их проведения необходимых и достаточных для решения поставленной задачи с требуемой точностью.

Эксперимент, который ставится для решений задач оптимизации, называется ***экстремальным.*** Примерами задач оптимизации являются выбор оптимального состава многокомпонентных смесей, повышение производительности действующей установки, повышение качества продукции и снижение затрат на её получение. Прежде чем планировать эксперимент необходимо сформулировать цель исследования. От точной формулировки цели зависит успех исследования. Необходимо также удостовериться, что объект исследования соответствует предъявляемым ему требованиям. В технологическом исследовании целью исследования при оптимизации процесса чаще всего является повышение выхода продукта, улучшение качества, снижение себестоимости.

Эксперимент может проводиться непосредственно на объекте или на его модели. Модель отличается от объекта не только масштабом, а иногда природой. Если модель достаточно точно описывает объект, то эксперимент на объекте может быть перенесён на модель. Для описания понятия «объект исследования» можно использовать представление о кибернетической системе, которая носит название *чёрный ящик.*

Стрелки справа изображают численные характеристики целей исследования и называются *выходными параметрами (y)* или *параметрами оптимизации*.

Для проведения эксперимента необходимо воздействовать на поведение чёрного ящика. Все способы воздействия обозначаются через «x» и называются ***входными параметрами или факторами****.* Каждый фактор может принимать в опыте одно из нескольких значений, и такие значения называются ***уровнями***. Фиксированный набор уровней и факторов определяет одно из возможных состояний чёрного ящика, одновременно они являются условиями проведения одного из возможных опытов. Результаты эксперимента используются для получения математической модели объекта исследования. Использование для объекта всех возможных опытов приводит к абсурдно большим экспериментам. В связи с этим эксперименты необходимо планировать.

Задачей планирования является выбор необходимых для эксперимента опытов, методов математической обработки их результатов и принятия решений. Частный случай этой задачи – планирование экстремального эксперимента. То есть эксперимента поставленного с целью поиска оптимальных условий функционирования объекта. Таким образом, планирование экстремального эксперимента – это выбор количества и условий проведения опытов, минимально необходимых для отыскания оптимальных условий. При планировании эксперимента объект исследования должен обладать обязательными свойствами:

1. управляемым

2. результаты эксперимента должны быть воспроизводимыми*.*

Эксперимент называется ***воспроизводимым****,* если при фиксированных условиях опыта получается один и тот же выход в пределах заданной относительно небольшой ошибки эксперимента (2%-5%). Эксперимент проводят при выборе некоторых уровней для всех факторов, затем он повторяется через неравные промежутки времени. И значения параметров оптимизации сравниваются. Разброс этих параметров характеризует воспроизводимость результатов. Если он не превышает заранее заданной величины, то объект удовлетворяет требованию воспроизводимости результатов.

При планировании эксперимента активное вмешательство предполагает процесс и возможность выбора в каждом опыте тех факторов, которые представляют интерес. Экспериментальное исследование влияния входных параметров (факторов) на выходные может производиться методом пассивного или активного эксперимента. Если эксперимент сводится к получению результатов наблюдения за поведение системы при случайных изменениях входных параметров, то он называется ***пассивным****.* Если же при проведении эксперимента входные параметры изменяются по заранее заданному плану, то такой эксперимент называется ***активным.*** Объект, на котором возможен активный эксперимент, называется ***управляемым.*** На практике не существует абсолютно управляемых объектов. На реальный объект обычно действуют как управляемый, так и неуправляемый факторы. Неуправляемые факторы действуют на воспроизводимость эксперимента. Если все факторы неуправляемы, возникает задача установления связи между параметром оптимизации и факторами по результатам наблюдений или по результатам пассивного эксперимента. Возможна также плохая воспроизводимость изменения факторов во времени.

**3. Параметры оптимизации**

**3.1 Виды параметров оптимизации**

**Параметр оптимизации** – это признак, по которому мы хотим оптимизировать процесс. Он должен быть количественным, задаваться числом. Множество значений, которые может принимать параметр оптимизации, называется 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 кровяных телец в пробе крови – вот примеры параметров с дискретной областью определения, ограниченной снизу.

В зависимости от объекта и цели исследования параметры оптимизации могут быть весьма разнообразными (рис. 1).

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

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

Почти во всех исследованиях приходится учитывать количество и качество получаемого продукта. Как меру количества продукта используют выход, например, процент выхода готовой продукции.

Показатели качества чрезвычайно разнообразны. В нашей схеме они сгруппированы по видам свойств. Характеристики количества и качества продукта образуют группу технико-технологических параметров.

В группе «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.

**3.2 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.

Пример: Технолог разработал новый вид продукта. Вам необходимо оптимизировать этот процесс.

Цель процесса – получение вкусного продукта, но такая формулировка цели еще не дает возможности приступить к оптимизации: необходимо выбрать количественный критерий, характеризующий степень достижения цели. Можно принять следующее решение: очень вкусный продукт получает отметку 5, просто вкусный продукт – отметку 4 и т.д.

Можно ли после такого решения переходить к оптимизации процесса? Нам важно количественно оценить результат оптимизации. Решает ли отметка эту задачу? Конечно, потому что, как мы договорились, отметка 5 соответствует очень вкусному продукту и т.д. Другое дело, что этот подход, называемый ранговым, часто оказывается грубым, нечувствительным. Но возможности такой количественной оценки результатов не должна вызывать сомнений.

Следующее требование: параметр оптимизации должен выражаться одним числом. Например: регистрация показания прибора.

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 выход продукта. Однако в дальнейшем, когда возможность повышения выхода исчерпана, нас начинают интересовать такие параметры, как себестоимость, чистота продукта 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.

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.

Требование физического смысла связано с последующей интерпретацией результатов эксперимента.

Таким образом, 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.

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.

**4. Факторы оптимизации**

**4.1 Определение фактора**

**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. Фактор считают заданным, если вместе с его названием указана область его определения.

Под **областью определения** понимается совокупность всех значений, которые в принципе может принимать данный фактор.

Совокупность значений фактора, которая используется в эксперименте, является подмножеством из множества значений, образующих область определения. Область определения может быть непрерывной и дискретной. Однако в основном, в задачах планирования эксперимента, 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.

Факторы классифицируют 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.

Качественным факторам не соответствует числовая шкала, и порядок уровней факторов не играет роли.

Время реакции, температура, концентрация реагирующих веществ, скорость подачи веществ, величина рН – это примеры наиболее часто встречающихся количественных факторов. Различные реагенты, адсорбенты, вулканизующие агенты, кислоты, металлы являются примером уровней качественных факторов.

**4.2 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. Планировать эксперимент можно только в том случае, если уровни факторов подчиняются воле экспериментатора.

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

Температура воздуха – фактор неуправляемый. 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.

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

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

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.

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.

Таким образом, 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.

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.

**5. Ошибки опыта**

Изучение всех влияющих на исследуемый объект факторов одновременно провести невозможно, поэтому в эксперименте рассматривается их ограниченное число. Остальные активные факторы стабилизируются, т.е. устанавливаются на каких-то одинаковых для всех опытов уровнях.

Некоторые факторы не могут быть обеспечены системами стабилизации (например, погодные условия, самочувствие оператора и т.д.), другие же стабилизируются с какой-то погрешностью (например, содержание какого-либо компонента в среде зависит от ошибки при взятии навески и приготовления раствора). Учитывая также, что измерение параметра ***у*** осуществляется прибором, обладающим какой-то погрешностью, зависящей от класса точности прибора, можно прийти к выводу, что результаты повторностей одного и того же опыта ***ук***будут приближенными и должны отличаться один от другого и от истинного значения выхода процесса. Неконтролируемое, случайное изменение и множества других влияющих на процесс факторов вызывает **случайные** отклонения измеряемой величины ***ук***от ее истинного значения – ошибку опыта.

Каждый эксперимент содержит элемент неопределенности вследствие ограниченности экспериментального материала. Постановка повторных (или параллельных) опытов не дает полностью совпадающих результатов, потому что всегда существует ошибка опыта (ошибка воспроизводимости). Эту ошибку и нужно оценить по параллельным опытам. Для этого опыт воспроизводится по возможности в одинаковых условиях несколько раз и затем берется среднее арифметическое всех результатов. Среднее арифметическое у равно сумме всех n отдельных результатов, деленной на количество параллельных опытов n:

Отклонение результата любого опыта от среднего арифметического можно представить как разность y2– , где y2 – результат отдельного опыта. Наличие отклонения свидетельствует об изменчивости, вариации значений повторных опытов. Для измерения этой изменчивости чаще всего используют дисперсию.

Дисперсией называется среднее значение квадрата отклонений величины от ее среднего значения. Дисперсия обозначается s2 и выражается формулой:

где (n-1) – число степеней свободы, равное количеству опытов минус единица. Одна степень свободы использована для вычисления среднего.

Корень квадратный из дисперсии, взятый с положительным знаком, называется средним квадратическим отклонением, стандартом или квадратичной ошибкой:

Ошибка опыта является суммарной величиной, результатом многих ошибок: ошибок измерений факторов, ошибок измерений параметра оптимизации и др. Каждую из этих ошибок можно, в свою очередь, разделить на составляющие.

Все ошибки принято разделять на два класса: систематические и случайные (рисунок 1).

Систематические ошибки порождаются причинами, действующими регулярно, в определенном направлении. Чаще всего эти ошибки можно изучить и определить количественно. ***Систематическая ошибка*** – это ошибка, которая остаётся постоянно или закономерно изменяется при повторных измерениях одной и той же величины. Эти ошибки появляются вследствие неисправности приборов, неточности метода измерения, какого либо упущения экспериментатора, либо использования для вычисления неточных данных. Обнаружить систематические ошибки, а также устранить их во многих случаях нелегко. Требуется тщательный разбор методов анализа, строгая проверка всех измерительных приборов и безусловное выполнение выработанных практикой правил экспериментальных работ. Если систематические ошибки вызваны известными причинами, то их можно определить. Подобные погрешности можно устранить введением поправок.

Систематические ошибки находят, калибруя измерительные приборы и сопоставляя опытные данные с изменяющимися внешними условиями (например, при градуировке термопары по реперным точкам, при сравнении с эталонным прибором). Если систематические ошибки вызываются внешними условиями (переменной температуры, сырья и т.д.), следует компенсировать их влияние.

***Случайными*** ошибками называются те, которые появляются нерегулярно, причины, возникновения которых неизвестны и которые невозможно учесть заранее. Случайные ошибки вызываются и объективными причинами и субъективными. Например, несовершенством приборов, их освещением, расположением, изменением температуры в процессе измерений, загрязнением реактивов, изменением электрического тока в цепи. Когда случайная ошибка больше величины погрешности прибора, необходимо многократно повторить одно и тоже измерение. Это позволяет сделать случайную ошибку сравнимой с погрешностью вносимой прибором. Если же она меньше погрешности прибора, то уменьшать её нет смысла. Такие ошибки имеют значение, которое отличается в отдельных измерениях. Т.е. их значения могут быть неодинаковыми для измерений сделанных даже в одинаковых условиях. Поскольку причины, приводящие к случайным ошибкам неодинаковы в каждом эксперименте, и не могут быть учтены, поэтому исключить случайные ошибки нельзя, можно лишь оценить их значения. При многократном определении какого-либо показателя могут встречаться результаты, которые значительно отличаются от других результатов той же серии. Они могут быть следствием грубой ошибки, которая вызвана невнимательностью экспериментатора.

Систематические и случайные ошибки состоят из множества элементарных ошибок. Для того чтобы исключать инструментальные ошибки, следует проверять приборы перед опытом, иногда в течение опыта и обязательно после опыта. Ошибки при проведении самого опыта возникают вследствие неравномерного нагрева реакционной среды, разного способа перемешивания и т.п.

При повторении опытов такие ошибки могут вызвать большой разброс экспериментальных результатов.

Очень важно исключить из экспериментальных данных грубые ошибки, так называемый брак при повторных опытах. ***Грубые ошибки*** легко обнаружить. Для выявления ошибок необходимо произвести измерения в других условиях или повторить измерения через некоторое время. Для предотвращения грубых ошибок нужно соблюдать аккуратность в записях, тщательность в работе и записи результатов эксперимента. Грубая ошибка должна быть исключена из экспериментальных данных. Для отброса ошибочных данных существуют определённые правила.

Например, используют критерий Стьюдента t (Р; f): Опыт считается бракованным, если экспериментальное значение критерия t по модулю больше табличного значения t (Р; f).

Если в распоряжении исследователя имеется экспериментальная оценка дисперсии S2(yk) с небольшим конечным числом степеней свободы, то доверительные ошибки рассчитываются с помощью критерий Стьюдента t (Р; f):

ε() = t (Р; f)\* S(yk)/= t (Р; f)\* S()

ε(yk) = t (Р; f)\* S(yk)

**6. Результат прямого измерения – случайная величина, подчиняющаяся нормальному закону распределения**

Результаты, которые получаются при экспериментальном исследовании какого-либо технологического процесса, зависят от целого ряда факторов. Поэтому результат исследования является случайной величиной, распределённой по нормальному закону распределения. Оно названо нормальным, т. к. именно это распределение для случайной величины является обычным и называется *гаусовским* или *лапласским.* Под ***распределением случайной величины*** понимают совокупность всех возможных значений случайной величины и соответствующих им вероятностей.

***Законом распределения случайной величины*** называется всякое соотношение, устанавливающее связь между возможными значениями случайной величины и соответствующим им вероятностям.

При экспериментальном исследовании какого-либо технологического процесса измеряемый результат последнего является случайной величиной, на которую оказывает влияние огромное число факторов (изменение погодных условий, самочувствие оператора, неоднородность сырья, влияние износа измерительной и стабилизирующей аппаратуры и т.д. и т.п.). Именно поэтому результат исследования является случайной величиной, распределенной по нормальному закону. Однако если исследователь какой-либо активный фактор не заметил или отнес его к неактивным, а неконтролируемое изменение этого фактора может вызвать несоразмерно большое изменение эффективности процесса и параметра, характеризующего эту эффективность, то распределение вероятности последнего может нормальному закону не подчиниться.

Точно так же приведет к нарушению нормальности закона распределения наличие в массиве экспериментальных данных грубых ошибок. Именно поэтому в первую очередь проводят анализ на наличие в экспериментальных данных грубых ошибок с принятой доверительной вероятностью.

Случайная величина будет распределена по нормальному закону, если она представляет собой сумму очень большого числа взаимно зависимых случайных величин, влияния каждой из которых ничтожно мало. Если измерения искомой величины y проведены много раз, то результат можно наглядно представить, построив диаграмму, которая показывала бы, как часто получались те или иные значения. Такая диаграмма называется ***гистограммой.*** Что бы построить гистограмму нужно разбить весь диапазон измеренных значений на равные интервалы. И посчитать сколько раз каждая величина попадает в каждый интервал.

Если измерения продолжать до тех пор, пока число измеренных значений n не станет очень большим, то ширину интервала можно сделать очень малой. Гистограмма перейдёт в непрерывную прямую, которая называется ***кривой распределения***.

В основе теории случайных ошибок лежат два предположения:

1. при большом числе измерений случайные погрешности одинаково велики, но с разными знаками встречаются одинаково часто;

2. большие (по абсолютной величине) погрешности встречаются реже, чем малые. Т. е. вероятность появления погрешности уменьшается с ростом её величины.

Согласно закону больших чисел при бесконечно большом числе измерений n, истинное значение измеряемой величины y равно среднеарифметическому значению всех результатов измерений ỹ

Для всех m-повторностей можно записать:

Разделив это уравнение на число повторностей m, получим после подстановки:

За экспериментальную оценку истинного значения (математического ожидания) критерия оптимальности *у* принимается **среднеарифметическая оценка** результатов всех ***т*** повторностей:

Если число m велико (m→∞), то будет справедливо равенство:

Таким образом, при бесконечно большом числе измерений истинное значение измеряемой величины y равно среднеарифметическому значению ỹ всех результатов произведённых измерений: y═ỹ, при m→∞.

При ограниченном числе измерений (m≠∞) среднеарифметическое значение y будет отличаться от истинного значения, т.е. равенство y═ỹ будет неточным, а приближённым: y≈ỹ и величину этого расхождения необходимо оценить.

Если в распоряжении исследователя имеется только единичный результат измерения yk, то оценка истинного значения измеряемой величины будет менее точной. чем среднеарифметическая оценка при любом числе повторностей: |y─ỹ|<|y-yk|.

Появление того или иного значения yk в процессе измерения является случайным событием. Функция плотности нормального распределения случайной величины характеризуется двумя параметрами:

* истинным значением y;
* среднеквадратичным отклонением σ.

а) б)

Рисунок – 1а – кривая плотности нормального распределения; 1б – кривая плотности вероятности нормально распределенной случайной величины при различных дисперсиях

Плотность нормального распределения (рис. 1а) симметрична относительно y и достигает максимального значения при yk= y, стремится к 0 при увеличении.

Квадрат среднеквадратичного отклонения называется дисперсией случайной величины и является количественной характеристикой разброса результатов вокруг истинного значения y. Мера рассеяния результатов отдельных измерений yk от среднего значения ỹ должна выражаться в тех же единицах, то и значения измеряемой величины. В связи с этим в качестве показателя разброса гораздо чаще используют величину σ:

Значения этой величины определяют форму кривой распределения py. Площади под тремя кривыми одинаковы, но при малых значения σ кривые идут более круто и имеют большее значение py. С увеличением σ значение py уменьшается и кривая распределения растягивается вдоль оси y. Т.о. кривая 1 характеризует плотность распределения случайной величины, воспроизводимость которой в повторных измерениях лучше, чем воспроизводимость случайных величин имеющих плотность распределения 2, 4. На практике не возможно произвести слишком много замеров. Поэтому нельзя построить нормальное распределение, чтобы точно определить истинное значение y. В этом случае хорошим приближением к истинному значению можно считать ỹ, а достаточно точной оценкой ошибки выборочную дисперсию ρ²n, вытекающую из закона распределения, но относящуюся к конечному числу измерения. Такое название величины ρ²n объясняется тем, что из всего множества возможных значений yk, т.е. из генеральной совокупности выбирают лишь конечное число значений равное m, называемых выборкой, которая характеризуется выборочным средним значением и выборочной дисперсией.

**7. Экспериментальные оценки истинных значений измеряемой случайной величины и её среднеквадратичного отклонения**

Если в распоряжении исследователя находится конечное число независимых результатов повторности одного и того же опыта, то он может получить лишь экспериментальные оценки истинного значения и дисперсии результата опыта.

Оценки должны обладать следующими свойствами:

1. Несмещённости, проявляющейся в том, что теоретическое среднее совпадает с истинным значением измеряемого параметра.

2. Состоятельности, когда оценки при неограниченном увеличении числа измерений могут иметь сколь угодно малый доверительный интервал при доверительной вероятности.

3. Эффективности, проявляющейся в том, что из всех несмешанных оценок данная оценка будет иметь наименьшее рассеяние (дисперсию).

Экспериментальная оценка среднеквадратичного отклонения обозначается S с указанием в скобках символа анализируемой величины, т.е.

S (yk) – среднеквадратичного отклонение единичного результата.

S (y) – среднеквадратичное отклонение среднего результата.

Квадрат экспериментальной оценки среднеквадратичного отклонения S² является экспериментальной оценкой дисперсии:

Для обработки результатов наблюдения можно использовать следующую схему:

 Определение среднего значения полученных результатов:

 Определение отклонения от среднего значения для каждого результата:

Эти отклонения характеризуют абсолютную ошибку определения. Случайные ошибки имеют разные знаки, когда значение результата опыта превышает среднее значение, ошибка опыта считается положительной, когда значение результата опыта меньше среднего значения, ошибка считается отрицательной.

Чем точнее произведены измерения, тем ближе значение отдельных результатов и среднее значение.

Если по **m** результатам рассчитывают оценку истинного значения , а затем, используя те же результаты, рассчитывают оценки абсолютных отклонений:

то оценку дисперсии единичного результата находят по зависимости:

Разность между числом ***т*** независимых результатов ***ук***и числом уравнений, в которых эти результаты уже были использованы для расчета неизвестных оценок, называют **числом степеней свободы f**:

f=m –1.

Для оценки дисперсии эталонного процесса f=m.

Поскольку средняя оценка  является более точной, чем единичная *ук,* дисперсия средних будет меньше дисперсииединичных результатов в m раз, если рассчитано по всем *m* единичным результатам *ук*:

Если в распоряжении исследователя имеется экспериментальная оценка дисперсии S2 (yк) с небольшим конечным числом степеней свободы, то доверительные ошибки рассчитывают с помощью **критерия Стьюдента** t (P; f):

,

где Р – доверительная вероятность (Р=1-q, q – уровень значимости).

Проверка надёжности полученных результатов по критерию Стьюдента для проведенного числа опытов m при избранной доверительной вероятности (надёжности) Р=0,95; 0,99. Это значит, что 95% или 99% абсолютных отклонений результатов лежит в указанных пределах. Критерий t (P; f) с доверительной вероятностью Р показывает во сколько раз модуль разности между истинным значением определённой величины y и средним значением ỹ больше стандартного отклонения среднего результата.

**8. Определение грубых ошибок среди результатов повторностей опыта**

При статистическом анализе экспериментальных данных для процессов, негативный результат которых не создает ситуаций, опасных для жизни людей или утраты больших материальных ценностей, доверительная вероятность обычно принимают равной Р=0,95

Среди результатов yk повторностей опыта могут быть результаты, значительно отличающиеся от других. Это может быть связано либо с какой-то грубой ошибкой, либо с неизбежным случайным влиянием неучтенных факторов на результат данной повторности опыта.

Признаком наличия «выделяющегося» результата среди других является большая величина отклонения │▲yk│= yk – yˉ.

Если ▲yk>yпред, то такие результаты относятся к грубым ошибкам. Предельное абсолютное отклонение определяют в зависимости от сложившейся ситуации различными методами. Если, например, проводиться статистический анализ экспериментальных данных опыта с эталонным процессом (известно истинное значение результата опыта и ▲yk=yk-y) и если исследователь имеет в своем распоряжении оценку дисперсии S2(yk) с таким большим числом степеней свободы, то может принять f→∞ и S2(yk)=σ2, то для определения грубых ошибок можно применить **правило «2-х сигм»:** все результаты, абсолютные отклонения которых по модулю превышают величину двух среднеквадратичных отклонений с надежностью 0,95 считаются грубыми ошибками и исключаются из массива экспериментальных данных (вероятность исключения достоверных результатов равна уровню значимости q=0,05).

Если доверительная вероятность отличается от 0,95 то пользуются **правилом «одной сигмы»** (Р=0,68) или **правилом «трех сигм»** (Р=0,997), или по заданной вероятности Р=2Ф(t) – 1 находят Ф(t) по справочным данным и параметр t, по которому и рассчитывают абсолютное отклонение:

Если в распоряжении исследователя имеется лишь приближенная оценка дисперсии с небольшим (конечным) числом степеней свободы, то применение правила «сигм» может привести либо к необоснованному исключению достоверных результатов либо к необоснованному оставлению ошибочных результатов.

В этой ситуации для определения грубых ошибок можно применить **критерий максимального отклонения** rmax(P, m), взятый из соответствующих таблиц. Для этого rmax сравнивают с величиной r, равной

 (22)

Если r > rmax, то данный результат должен исключаться из дальнейшего анализа, оценка yˉ должна быть пересчитана, изменяются абсолютные отклонения ▲yk и соответственно оценка дисперсии S2(yk) и S2(yˉ). Анализ на грубые ошибки повторяют при новых значениях оценок yˉ и S2(yk), прекращают его при r <= rmax.

При пользовании формулой (22) следует применять оценку дисперсии, полученную по результатам повторностей опыта, среди которых находится сомнительный результат.

Для определения грубых ошибок существуют и другие методы, среди которых наиболее быстрым является метод **«по размаху»**, основанный на оценке максимальных различий полученных результатов. Анализ по этому методу проводят в такой последовательности:

1) располагают результаты yk в упорядоченный ряд, в котором максимальному результату присваивается номер первый (y1), а максимальному – наибольший (ym).

2) Если результатом, вызывающим сомнение, будет ym, рассчитывают отношение

 (23)

если сомнительным результатом будет y1 – отношение

 (24)

3) при заданном уровни значимости q и известном числе повторностей m по приложению 6 находят табличное значение критерия αТ.

4) если α > αТ, то подозреваемый результат является ошибочным и его следует исключить.

После исключения грубой ошибки находят по таблице новую величину αТ и решают судьбу следующего «подозреваемого» результата, сравнивая αТ и рассчитанный для него α.

Если есть основание предполагать, что 2 наибольших (2 наименьших) результата являются «промахами», то их можно выявить в один прием, используя соответствующий столбец таблицы приложения 6 для определения αТ и рассчитывая α по формуле:

 (25)

или

 (26)

Средневзвешенные оценки дисперсии. Анализ однородности исходных оценок дисперсии

Если в распоряжении экспериментатора имеются результаты многократных измерений величин критерия оптимальности в опытах при различных условиях ведения процесса, то появляется возможность расчета **средневзвешенной оценки дисперсии** единичного результата, единой для всех опытов эксперимента.

В каждом из N опытов (номер опыта *и* = *1+N)* оценка дисперсии единичного результата равна

*где ти – число повторностей и-го опыта.*

Средневзвешенная оценка дисперсии единичного результата рассчитывается по всем оценкам дисперсии единичного результата опытов:

а) при различных *ти*

*где* - *число степеней свободы средневзвешенной оценки дисперсии; ти* – 1 = *fu – «вес» соответствующей и-ой оценки дисперсии, равный числу степеней свободы fu;*

б) при*ти = т =* const

где N (m-1)=f – число *степеней свободы средневзвешенной оценки дисперсии.*

Прежде чем пользоваться соотношениями (28) и (29) для расчета средневзвешенных уточненных оценок дисперсии (чем больше число степеней свободы, тем более точной будет оценка дисперсии), надо доказать однородность исходных оценок дисперсии.

Определение «однородные» в статистике означает «являющиеся оценкой одного и того же параметра» (в данном случае – дисперсии σ 2).

Если измеряемая случайная величина *уик* распределена по нормальному закону во всем исследуемом диапазоне, то независимо от значений *и* дисперсия σ не будет изменять своей величины и оценки этой дисперсии должны быть однородными. Однородность этих оценок проявляется в том, что они могут отличаться друг от друга лишь незначительно, в пределах, зависящих от принятой вероятности и объема экспериментальных данных.

Если *ти = т и f =* const, то однородность оценок дисперсий можно проанализировать при помощи **критерия Кохрена** *Gkp.* Вычисляют отношение максимальной дисперсии *S2(yuk)max* к сумме всех дисперсий

и сравнивают это отношение с величиной критерия Кохрена *Gkp (P; f; N).* Если *G < Gkp,* то оценки однородны.

Таблица значений критерия Кохрена в зависимости от числа степеней свободы числителя *fu,* числа сравниваемых дисперсий N и принятого уровня значимости *q* = 1 – *Р* дана в приложении.

Если число повторностей в опытах различно *(flt ≠* const), однородность оценок дисперсии можно проанализировать с помощью **критерия Фишера** *FТ.* Для этого из *N* оценок дисперсии выбирают 2: максимальную S2(yuk)max и минимальную S2(yuk)min. Если вычисленное значение *F* их отношения меньше *Ft,*

то все *N* оценок дисперсии будут однородны.

Значения критерия Фишера *FT* даны в приложении в зависимости от принятого уровня значимости *q* и числа степеней свободы *f1* и *f2* оценок S2(yuk)max и S2(yuk)min соответственно.

Если оценки дисперсии непосредственно измеряемого параметра *у* оказались неоднородными, т.е. оценками различных дисперсий, то средневзвешенная оценка не может быть рассчитана. И кроме того, величины *ук* уже нельзя считать подчиняющимися нормальному закону, при котором дисперсия может быть лишь одной и неизменной при любом *у.*

Причиной нарушения нормального закона распределения может быть наличие оставшихся грубых ошибок (анализ на грубые ошибки либо не проводился, либо проведен недостаточно тщательно).

Другой причиной может быть наличие активного фактора, ошибочно отнесенного исследователем к неактивным и не снабженного системой стабилизации. Поскольку условия изменились, этот фактор стал значимо влиять на процесс.

**9. Планирование и обработка результатов однофакторных экспериментов**

**9.1 Формализация экспериментальных данных методом наименьших квадратов**

Влияние какого-либо фактора на выход процесса может быть выражено зависимостью *у* = f(C). Если конкретному значению *Си* соответствует единственное значение *уи,* то такая зависимость называется **функциональной.** Эту зависимость получают путем строгих логических доказательств, не нуждающихся в опытной проверке. Например, площадь квадрата ω может быть представлена функциональной зависимостью от размера стороны квадрата *а:* ω = *а2.*

Если *уи* остается неизменным в то время как *Си* изменяется, то *у* не зависит от *С.* Например, угол при вершине квадрата равный π/2, не зависит от размера стороны *аи.*

Если для оценки величин *уи* и *Си* используются данные наблюдений, величины случайные, то функциональная зависимость между ними существовать не может.

Измерив отдельно сторону *а* и площадь ω квадрата, можно убедиться, что полученные результаты не могут быть представлены с абсолютной точностью зависимостью ω = *а* 2.

К формализации экспериментальных данных, т.е. построению по ним описывающей процесс зависимости, исследователь прибегает, когда не может составить **эвристическую (детерминированную) математическую модель** из-за недостаточного понимания механизма процесса или его чрезмерной сложности.

Полученная в результате формализации экспериментальных данных **эмпирическая математическая модель** имеет меньшую ценность, чем отражающая механизм процесса эвристическая математическая модель, которая может предсказать поведение объекта за пределами изученного диапазона изменения переменных.

Приступая к эксперименту с целью получения эмпирической математической модели, исследователь должен определить необходимый объем опытных данных с учетом количества принятых к исследованию факторов, воспроизводимости процесса, предполагаемой структуры модели и обеспечения возможности проверки адекватности уравнения.

Если по результатам эксперимента, состоящего из двух опытов, получено линейное однофакторное уравнение *у =* b0 *+ b1С*, то построенная по этому уравнению прямая обязательно пройдет через эти экспериментальные точки. Следовательно, для того чтобы проверить, насколько хорошо эта зависимость описывает данный процесс, надо поставить опыт хотя бы еще в одной точке. Этот дополнительный опыт дает возможность осуществить корректную процедуру проверки пригодности уравнения. Однако проверку обычно проводят не по одной дополнительной точке, которая не участвовала в определении коэффициентов уравнения, а по всем экспериментальным точкам, число которых (N) должно превышать число коэффициентов уравнения (N')

Так как *N > N',* решение такой системы требует специального подхода.

**9.2 Симметричный и равномерный план однофакторного эксперимента**

Задача в значительной степени упростится, если при планировании эксперимента, можно будет обеспечить условие:

ΣCu=0 (1)

При натуральной размерности факторов выполнить условие ΣCu=0 невозможно, т. к. в этом случае величина фактора должна иметь как положительные значения, так и отрицательные.

Если же точку отсчета величины фактора перенести в середину диапазона изменения фактора (центр эксперимента)

то появляется возможность удовлетворить условию в виде , где С'u=Сu – С0.

Для равномерного плана Сu – С(u-1) = λ = const,

где λ – интервал варьирования фактора.

Условие  может быть выполнено, если для обозначения величины фактора использовать безразмерные выражения:

xu = ,

отсюда легко увидеть, что условие  эквивалентно условию  и такие планы называют симметричными.

При составлении плана диапазон фактора ориентировочно ограничивают величинами Сmin и Сmax, назначенными после изучения литературы по теме исследования. От опыта к опыту предусматривают такое изменение величины фактора, которое позволило бы достоверно уловить имеющимися в распоряжении исследователя приборами изменение выхода процесса .

С учетом величины λ и диапазона (Сmax – Cmin) определяют число опытов, округляя его до нечетного N:

.

Затем определяют величины факторов в каждом из N опытов и уточняют исследуемый диапазон фактора СN – С1:

=,

где хu – безразмерное выражение фактора, аналогичное полученному по соотношению

Для расчета коэффициентов уравнения используем формулу:

,

множители аju и знаменатель lj берем из приложения.

Число опытов эксперимента может быть четным или нечетным, и, как правило, должно быть больше числа коэффициентов N' уравнения.

Чем больше разность (N – N'), тем с большей точностью можно получить оценки коэффициентов данного уравнения и тем в большей степени эти оценки будут освобождены от влияния случайных неуточненных факторов.