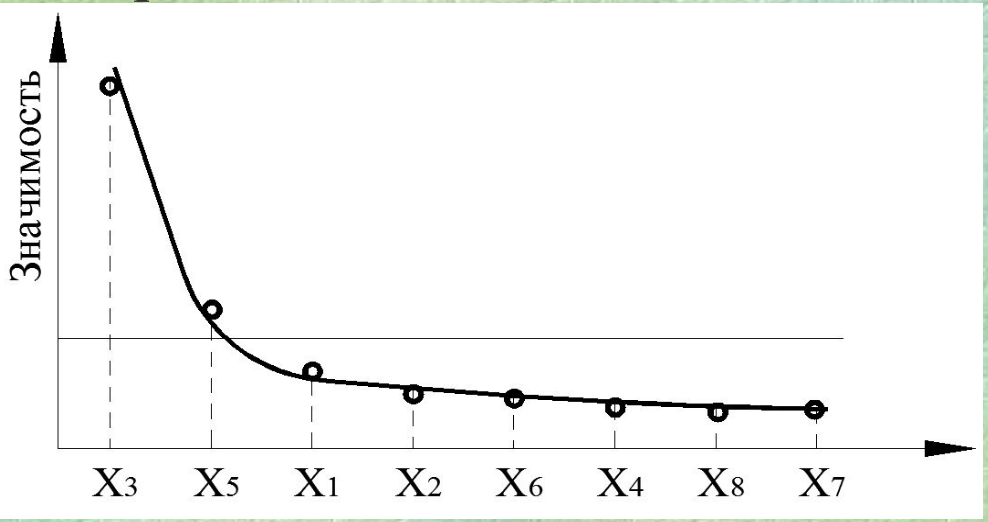
Дисперсионный анализ

Назначение дисперсионного анализа

Дисперсионный анализ (ДА) (от латинского Dispersio – рассеивание / на английском Analysis Of Variance - ANOVA) применяется для оценки влияния одного или нескольких входных параметров на выходной параметр (функцию).
ДА позволяет ранжировать входные параметры по степени их прямого и взаимного влияния на функцию.



Чем больше параметров требуется учитывать, тем дороже проведение эксперимента.

Согласно закону Парето (принцип 20/80), значимых факторов немного, т.е. примерно *20% параметров дают 80% результата, а остальные 80% параметров — лишь 20% результата.*

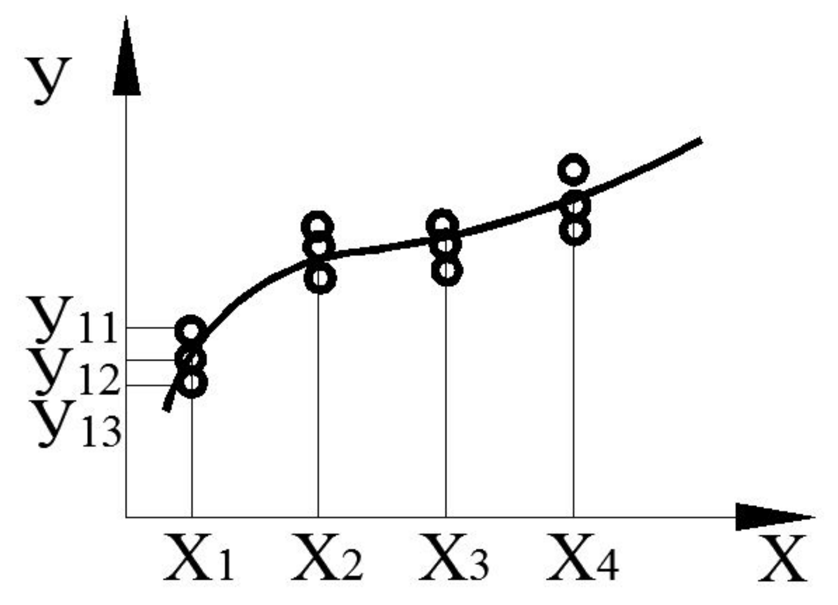
Особенности дисперсионного анализа, дисперсионные модели одно-, двух- и трех факторного эксперимента

Дисперсионный анализ предназначен **для качественного исследования модели процесса**: $y = f(x1, x2, \ldots, xk)$ на предмет **оценки значимости каждого входного параметра на функцию У**.

Математический аппарат, который занимается **исследованием значимости входных параметров**, называется **дисперсионным анализом**. В его основе лежит **анализ вкладов каждого фактора в общую дисперсию эксперимента.**

Рассмотрим однофакторный эксперимент: $y = f(x_1)$. Дисперсионную модель этого эксперимента можно представить в виде: $y = A + \varepsilon$,

где **У** - общий вклад в общую дисперсию, который вносят все факторы; **А** - эффект фактора X_1, ε - эффект ошибки воспроизводимости.



ε рассчитывается в случае, если хотя бы в одной точке Xi проведено более одного эксперимента ($У_{i1}$, $У_{i2}$, $У_{i3}$). Если в каждой точке Xi проведен только один эксперимент, то $\varepsilon = 0$.

Дисперсионная модель двухфакторного эксперимента $y = f(x_1, x_2)$ **строится с учетов эффекта совместного влияния факторов** X_1 **и** X_2:

$$y = A + B + AB + \varepsilon ,$$

где A и B – эффекты факторов X_1 и X_2;
AB – эффект совместного влияния (взаимодействия) факторов X_1 и X_2 (AB=0, если функции сепарабельные);
ε – эффект ошибки воспроизводимости.

Дисперсионная модель трехфакторного эксперимента строится по аналогии и будет содержать не только **эффекты парных** (***AB, AC и BC)*** , но и **тройного взаимодействия** (***ABC)***:

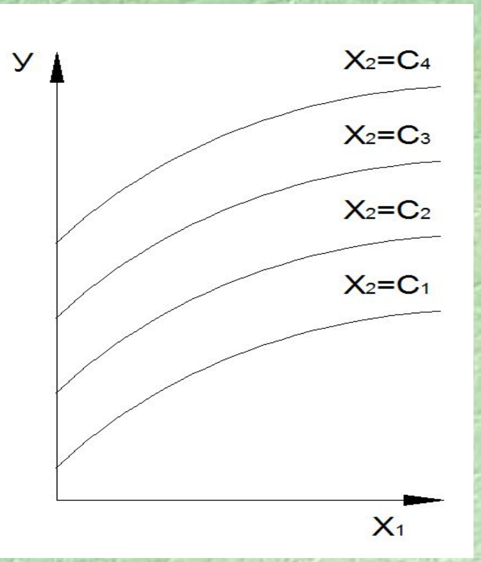
$$y = A + B + C + AB + AC + BC + ABC + \varepsilon$$

Вспомним о **сепарабельных функциях**:

Для первого случая:

$У = A + f(X_1) + f(X_2)$

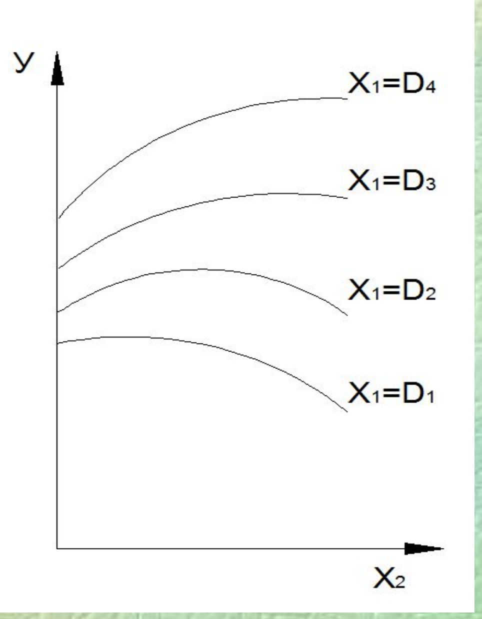
Каждая функция $f(X_1)$ и $f(X_2)$ зависят только от одной переменной, а сами переменные (X_1 и X_2) независимы друг от друга. Семейство функций $У = A + f(X_1) + f(X_2)$ называется **сепарабельными функциями**.



Для второго случая:

$У = A + f(X_1) + f(X_2) + f(X_1)*f(X_2)$

Член уравнения **$f(X_1)*f(X_2)$** показывает **степень взаимодействия** параметров X_1 и X_2 на функцию У.



В качестве количественного показателя, применяемого для сравнения эффектов факторов X_1, X_2 и др., используется **критерий Фишера:**

$$F_i = \frac{S_i^2}{S_0^2} = \frac{SS_i/f_i}{SS_0/f_0} \le F_T(p; f_i; f_0),$$

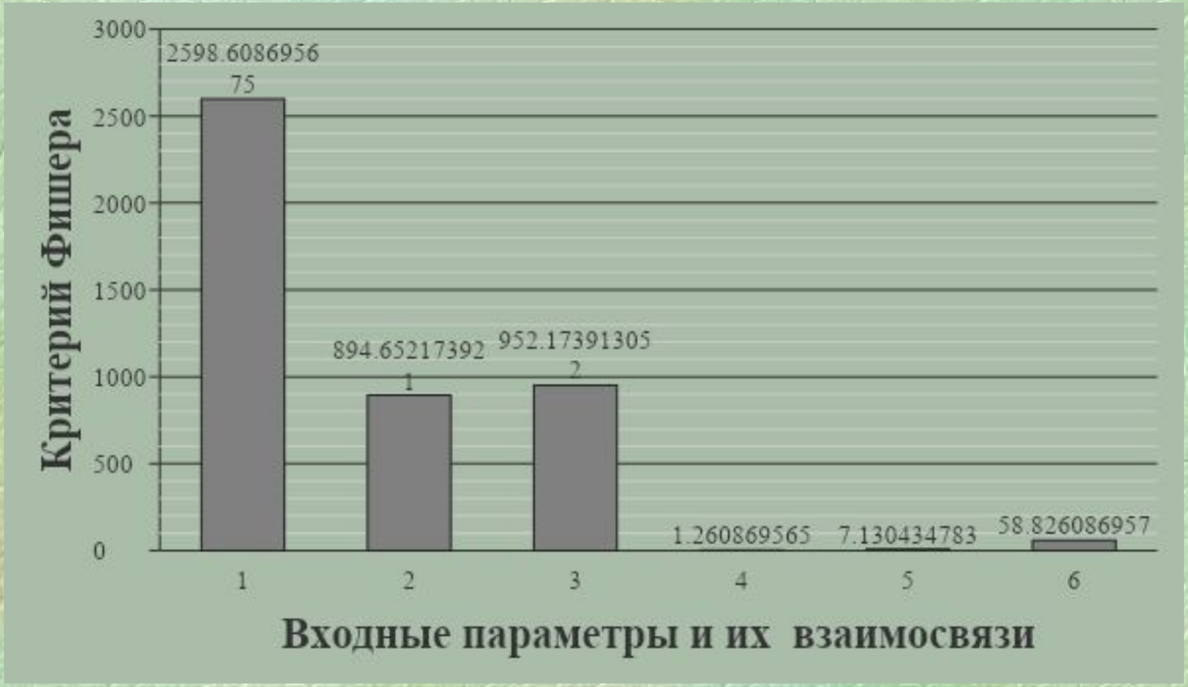
где S_i^2, S_0^2 – дисперсии соответственно i-того и наименее значимого фактора (обычно от эффекта ошибки воспроизводимости **ε**);

F_T – табличное (критическое) значение критерия Фишера;

f_i и f_0 – степени свободы i-того и 0-го факторов;

р – доверительная вероятность (обычно р=0,95).

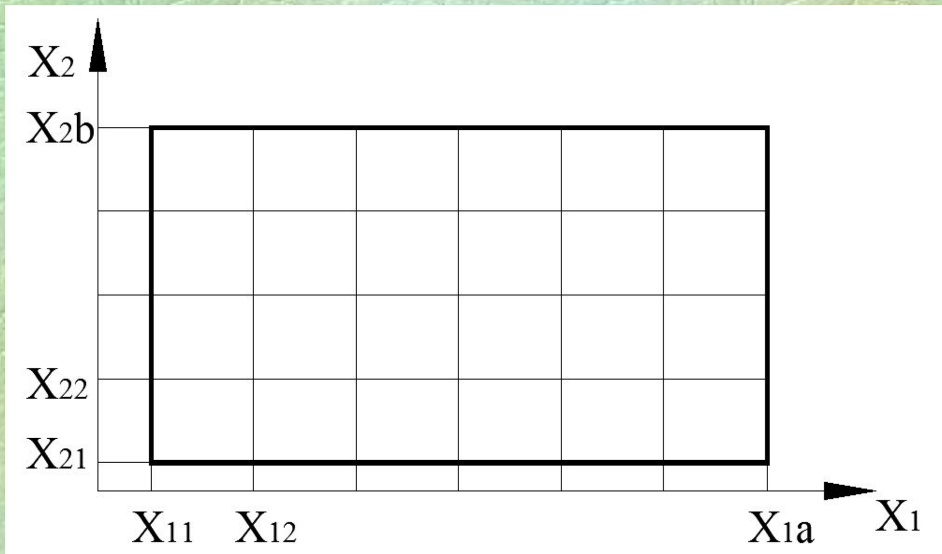
Дисперсионную модель наиболее удобно представлять в виде гистограммы:



Таким образом, для проведения ДА нужно уметь рассчитывать **критерии Фишера**, т.е. уметь определять значения дисперсий $\mathbf{S^2_i}$, среднеквадратических отклонений $\mathbf{SS_i}$ и степеней свободы $\mathbf{f_i}$.

Основные уравнения ДА

Рассмотрим **двухфакторный** эксперимент.



Уровни входных параметров (факторов) X_1 и X_2 откладываются по осям координат.

Фактор $\mathbf{X_1}$ измеряется на **a** равностоящих уровнях.

Счетчик уровней для X_1:

i = 1, 2, …a.

Фактор $\mathbf{X_2}$ измеряется на **b** равностоящих уровнях.

Счетчик уровней для X_2: **j = 1, 2, …b.**

В каждой узловой точке эксперимента проводится по **n** опытов.

n также является фактором, от которого зависит эффект ошибки воспроизводимости **ε**. Счетчик уровней по **n: k = 1, 2, …, n**

Таким образом, **полный факторный эксперимент (ПФЭ)** будет содержать **$Nn = a*b*n$** опытов. Если в каких-то точках опыты не проводятся, то эксперимент называется **дробным факторным (ДФЭ).**

Для ПФЭ **выходной параметр У** будет иметь **три индекса: i, j, k.** Т.е. обозначение **$У_{ijk}$ будет определять значение выходного параметра в ijk узловой точке, согласно ПФЭ.**

Определим **общее число степеней свободы $f_{общ}$** эксперимента:

$$f_{общ} = abn - 1.$$

Число степеней свободы каждого из факторов X_1 и X_2:

$$fx_1 = f_1 = a - 1 ; \qquad fx_2 = f_2 = b - 1 .$$

Число степеней свободы взаимодействия:

$$f_{12} = (a - 1)(b - 1) .$$

Число степеней свободы ошибки воспроизводимости по *ab* *точкам:*

$$fo = ab(n - 1).$$

Согласно **первому основному уравнению дисперсионного анализа:** $f_{общ} = f_1 + f_2 + f_{12} + f_o$.

Это уравнение легко получить, если преобразовать правую часть тождества:

$$abn - 1 = (a - 1) + (b - 1) + (a - 1)(b - 1) + ab(n - 1).$$

По аналогии можно получить первое основное уравнение для трехфакторного эксперимента:

$$f_{общ} = f_1 + f_2 + f_3 + f_{12} + f_{13} + f_{23} + f_{123} + f_o .$$

Число уровней фактора X_3 равно **c** (счетчик **s** = 1, 2, ... , **c**). Недостающие числа степеней свободы равны:

$f_3 = c - 1;$ $f_{123} = (a - 1)(b - 1)(c - 1)$; $f_o = abc(n - 1).$

Общее среднеквадратичное отклонение для двухфакторного эксперимента можно рассчитать по формуле:

$$SS_{\text{общ}} = \sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b}\sum_{k}^{n}(y_{ijk} - y_{***})^2 \qquad (2)$$

В ДА для компактности записи расчетных формул знак суммирования заменяется звездочкой, т.е.:

$$y_{***} = \sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b}\sum_{k}^{n} y_{ijk}$$

Раскрыв скобки и преобразовав уравнение (2), получим:

$$SS_{\text{общ}} = \sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b}\sum_{k}^{n}\Big[(\bar{y}_{i**} - \bar{y}_{***})^2 + (\bar{y}_{*j*} - \bar{y}_{***})^2 + (\bar{y}_{ij*} - \bar{y}_{i**} - \bar{y}_{*j*} + \bar{y}_{***})^2 + (y_{ijk} - \bar{y}_{ij*})^2\Big] \qquad (3)$$

Уравнение (3) состоит из четырех слагаемых, каждое из которых соответственно равно SS_1, SS_2, SS_{12} и SS_0.
После преобразований уравнения (2) для $SS_{общ}$ и каждого из слагаемых в уравнении (3), получим:

$$SS_{общ} = \sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b}\sum_{k}^{n} y_{ijk}^2 - \frac{y_{***}^2}{abn} \quad ;$$

$$SS_1 = \sum_{1}^{a}\frac{y_{i**}^2}{bn} - \frac{y_{***}^2}{abn} \quad ; \qquad SS_2 = \sum_{1}^{b}\frac{y_{*j*}^2}{an} - \frac{y_{***}^2}{abn} \quad ;$$

$$SS_{12} = \sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b}\frac{y_{ij*}^2}{n} - \sum_{1}^{a}\frac{y_{i**}^2}{bn} - \sum_{1}^{b}\frac{y_{*j*}^2}{an} + \frac{y_{***}^2}{abn} \quad ;$$

$$SS_0 = \sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b}\sum_{k}^{n} y_{ijk}^2 - \frac{y_{***}^2}{abn}$$

Соотношение между суммами квадратов отклонений подчиняется **второму основному уравнению ДА**:

$$SS_{общ} = SS_1 + SS_2 + SS_{12} + SS_o$$

По аналогии для трехфакторного эксперимента:

$$SS_{общ} = SS_1 + SS_2 + SS_3 + SS_{12} + SS_{13} + SS_{23} + SS_{123} + SS_o$$

Между выражениями для расчета числа степеней свободы и суммы квадратов отклонений существует аналогия.

Аналогии между выражениями для расчета SS_i и f_i

1) количество слагаемых и знаки перед ними в выражениях для числа степеней свободы и соответствующей суммы квадратов отклонений совпадают;
2) в каждом слагаемом для SS знаки Σ содержат индексы, аналогичные индексам при f;
3) эти же индексы присутствуют в числителе при y^2, а недостающие индексы числителя заменены звездочками;

4) знаменатель можно записать по недостающим индексам числителя, которые в числителе обозначаются звездочками.

Например: $f_1 = a-1$

$$SS_1 = \sum_{1}^{a} \frac{y_{i**}^2}{bn} - \frac{y_{***}^2}{abn}$$

Эту аналогию используем в качестве правила для формального написания суммы квадратов отклонений.

Для этого сначала необходимо написать выражение для числа степеней свободы и раскрыть в нем скобки. Затем, придерживаясь п.1 – 4, написать соответствующие члены искомых сумм.

Вывод формул для расчета суммы квадратов отклонений SSi по формальным правилам

Эффект модели	Число степеней свободы *f*	Сумма квадратов отклонений SS
A (фактор X_1)	*a - 1*	$\sum_{i}^{a} \frac{y_{i**}^2}{bn} - \frac{y_{***}^2}{abn}$
B (фактор X_2)	*b -1*	$\sum_{j}^{b} \frac{y_{*j*}^2}{an} - \frac{y_{***}^2}{abn}$
AB (Взаимодействие X_1X_2)	*(a - 1)(b -1) = ab - a - b + 1*	$\sum_{i}^{a} \sum_{j}^{b} \frac{y_{ij*}^2}{n} - \sum_{i}^{a} \frac{y_{i**}^2}{bn} - \sum_{j}^{b} \frac{y_{*j*}^2}{an} + \frac{y_{***}^2}{abn}$
Ошибка воспроизводимости ε	*ab*(*n* - 1) = *abn - ab*	$\sum_{i}^{a} \sum_{j}^{b} \sum_{k}^{n} y_{ijk}^2 - \sum_{i}^{a} \sum_{j}^{b} \frac{y_{ij*}^2}{n}$
Общий эффект	*abn - 1*	$\sum_{i}^{a} \sum_{j}^{b} \sum_{k}^{n} y_{ijk}^2 - \frac{y_{***}^2}{abn}$

Для трехфакторного эксперимента имеем:

f_{123} = (a -1)(b -1)(c -1) = abc - ab - ac - bc + a + b + c - 1.

$$SS_{123} = \sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b}\sum_{s}^{c}\frac{y_{ijs*}^2}{n} - \sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b}\frac{y_{ij**}^2}{cn} - \sum_{i}^{a}\sum_{s}^{c}\frac{y_{i*s*}^2}{bn}$$
$$- \sum_{j}^{b}\sum_{s}^{c}\frac{y_{*js*}^2}{an}$$
$$+ \sum_{i}^{a}\frac{y_{i***}^2}{bcn} + \sum_{j}^{b}\frac{y_{*j**}^2}{acn} + \sum_{s}^{c}\frac{y_{**s*}^2}{abn} - \frac{y_{****}^2}{abcn}$$

В ДА для компактности записи расчетных формул знак суммирования заменяется звездочкой:

$$y^2_{***}=(y_{111}+y_{112}+\ldots y_{11n}+y_{121}+\ldots y_{12n}+\ldots y_{abn})^2$$

$$\sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b}\sum_{s}^{n} y_{ijs}^2 = y^2_{111}+y^2_{112}+\ldots y^2_{11n}+y^2_{121}+\ldots y^2_{12n}+\ldots y^2_{abn}$$

$$\sum_{i}^{a} y_{i**}^2 = (y_{111}+y_{112}+\ldots+y_{11n}+y_{121}+\ldots+y_{1bn})^2+ (y_{211}+y_{212}+\ldots+y_{21n}+y_{221}+\ldots+y_{2bn})^2 +\ldots+ (y_{a11}+y_{a12}+\ldots+y_{a1n}+y_{a21}+\ldots+y_{abn})^2$$

$$\sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b} y_{ij*}^2 =(y_{111}+y_{112}+\ldots+y_{11n})^2+(y_{121}+y_{122}+\ldots+y_{1bn})^2+\ldots+ + (y_{ab1}+y_{ab2}+\ldots+y_{abn})^2$$

Рассмотрим пример двухфакторного эксперимента

Пусть уровни варьирования параметров a и b меняются от 1 до 2. В каждой точке проводится по два эксперимента (n=2). Т.е. a = 2 (i=1,2); b = 2 (j=1,2); n = 2 (s=1,2).
В каждой ijs-эксперименте зафиксированы следующие значения выходного параметра У:

<table>
<tr><td rowspan="2">s</td><td rowspan="2">j</td><td colspan="2">i</td></tr>
<tr><td>1</td><td>2</td></tr>
<tr><td rowspan="2">1</td><td>1</td><td>2</td><td>1</td></tr>
<tr><td>2</td><td>4</td><td>3</td></tr>
<tr><td rowspan="2">2</td><td>1</td><td>6</td><td>5</td></tr>
<tr><td>2</td><td>8</td><td>7</td></tr>
</table>

Рассчитать суммы квадратов для двухфакторного эксперимента.

Расчет сумм квадратов

s	j	i	
		1	2
1	1	2	1
	2	4	3
2	1	6	5
	2	8	7

Сумма	Порядок расчета	Значение	Число опытов	
y^2_{***}	$(2+4+6+8+1+3+5+7)^2$	1296	abc	8
$\sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b}\sum_{s}^{c} y^2_{ijs}$	$2^2+4^2+6^2+8^2+1^2+3^2+5^2+7^2$	204		1
$\sum_{j}^{b}\sum_{s}^{c} y^2_{*js}$	$(2+1)^2+(4+3)^2+(6+5)^2+(8+7)^2$	404	a	2
$\sum_{i}^{a}\sum_{s}^{c} y^2_{i*s}$	$(2+4)^2+(6+8)^2+(1+3)^2+(5+7)^2$	392	b	2
$\sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b} y^2_{ij*}$	$(2+6)^2+(4+8)^2+(1+5)^2+(3+7)^2$	344	c	2
$\sum_{i}^{a} y^2_{i**}$	$(2+4+6+8)^2+(1+3+5+7)^2$	656	bc	4
$\sum_{j}^{b} y^2_{*j*}$	$(2+6+1+5)^2+(4+8+3+7)^2$	680	ac	4
$\sum_{s}^{c} y^2_{**s}$	$(2+1+4+3)^2+(6+5+8+7)^2$	776	ab	4

Эффект модели	Степени свободы fi		Сумма квадратов отклонений SSi		
	Формула	Значение	Формула	Значение	S^2_i
A	$f_1=a-1$	1	$SS_1=\sum_{i}^{a}\frac{y_{i**}^2}{bn}-\frac{y_{***}^2}{abn}$	2	2
B	$f_2=b-1$	1	$SS_2=\sum_{j}^{b}\frac{y_{*j*}^2}{an}-\frac{y_{***}^2}{abn}$	8	8
AB	$f_{12}=(a-1)(b-1)=ab-a-b+1$	1	$SS_{12}=\sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b}\frac{y_{ij*}^2}{n}-\sum_{i}^{a}\frac{y_{i**}^2}{bn}-\sum_{j}^{b}\frac{y_{*j*}^2}{an}+\frac{y_{***}^2}{abn}$	0	0
Ошибка ε	$f_0=ab(n-1)=abn-ab$	4	$SS_0=\sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b}\sum_{s}^{n}y_{ijs}^2-\sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b}\frac{y_{ij*}^2}{n}$	32	8
Общий эффект	$f_{общ}=abn-1$	7	$SS_{общ}=\sum_{i}^{a}\sum_{j}^{b}\sum_{s}^{n}y_{ijs}^2-\frac{y_{***}^2}{abn}$	42	6

Проверка: $f_{общ.}=f_1+f_2+f_{12}+f_0=1+1+1+4=7$

$SS_{общ.}=SS_1+SS_2+SS_{12}+SS_o=2+8+0+32=42$

Формулы для расчета средних значений:

$$\bar{y}_{ij*} = y_{ij*}/n \qquad \bar{y}_{*j*} = y_{*j*}/an$$

$$\bar{y}_{i**} = y_{i**}/bn \qquad \bar{y}_{***} = y_{***}/abn$$

ДА проводится в несколько этапов:

1. **Расчет сумм и средних значений внутригрупповых и межгрупповых выборок.**
2. **Расчет степеней свободы факторов.**
3. **Расчет суммы квадратов отклонений SSi.**
4. **Расчет дисперсий.**
5. **Оценка значимости факторов по критерию Фишера.**

$$F_i = \frac{S_i^2}{S_0^2} = \frac{SS_i/f_i}{SS_0/f_0} \leq F_T(p; f_i; f_0)$$