

Вычислительная процедура построения линейной по параметрам регрессионной модели сводится к использованию соотношения $\mathbf{B} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}$.

Это соотношение позволяет только найти параметры модели безотносительно к вопросам корректности исходных данных и соответствия построенной модели исходным данным.

Статистические процедуры становятся возможны только тогда, когда в каждом u -м из $u = \overline{1, N}$ экспериментов измерение отклика повторяется $m_u > 1$ раз. Эти m_u измерений, соответствующие одной точке факторного пространства, называют *параллельными* измерениями.

Пусть в u -й точке выполнено M параллельных измерений. Оценки средних и дисперсий находятся по известным правилам:

$$\bar{y}_u = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M y_{ui}, \quad s_u^2 = \frac{1}{M-1} \sum_{i=1}^M (y_{ui} - \bar{y}_u)^2, \quad u = \overline{1, N}.$$

Число $f = M - 1$ – *число степеней свободы* оценки дисперсии. Первый индекс u в обозначении отклика y_{ui} является номером эксперимента, второй индекс i – номером параллельного испытания в этом эксперименте.

В предположении о равной точности найденные оценки дисперсий позволяют вычислить *дисперсию воспроизводимости (дисперсию эксперимента)* как среднее арифметическое всех выборочных дисперсий:

$$s_e^2 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N s_u^2.$$

Число $f_e = N(M - 1)$ является числом степеней свободы дисперсии воспроизводимости – это полное число измерений, включая параллельные, за вычетом числа измерений в различных точках.

Удобным способом сравнительного анализа точности в каждой серии параллельных измерений является применение *S-критерия (критерий Кохрена)*. Данный критерий позволяет сделать суждение о наличии серии, точность измерений в которой существенно ниже средней точности всего эксперимента (проверить *однородность дисперсий*). Вычисляется статистика

$$C = \max \left\{ s_u^2 \right\} / \sum_{u=1}^N s_u^2,$$

равная отношению максимальной из оценок дисперсий к сумме всех оценок. Эмпирическое значение статистики сравнивается с критическим значением:

$$C_\alpha = \left(1 + \frac{N+1}{F_{\alpha/N}(M-1, (N-1)(M-1))} \right)^{-1},$$

где $F_\beta(a, b)$ – β -квантиль распределения Фишера для чисел степеней свободы α и β . При выполнении неравенства $C < C_\alpha$ гипотеза о равной точности измерений не отвергается.

После проверки однородности дисперсий параллельных опытов и отыскания параметров регрессионной модели для каждого из найденных параметров необходимо проверить гипотезу о равенстве истинного значения параметра нулю. Если в условиях эксперимента отвергать данную гипотезу нет оснований, то говорят, что параметр *статистически незначим*.

Для проверки значимости параметров β_j , $j = \overline{1, L}$ находят L значений статистик

$$t_j = \frac{\beta_j}{\sqrt{s_e^2 c_{jj}}},$$

где s_e^2 – дисперсия воспроизводимости, c_{jj} – диагональный элемент матрицы ошибок. Во многих случаях можно принять, что эти статистики подчинены распределению Стьюдента с $f = f_e = N(M-1)$ степенями свободы. Гипотеза о равенстве нулю неизвестного истинного значения j -го параметра должна быть отвергнута в пользу двусторонней альтернативы (т.е., параметр должен быть признан *статистически значимым*), если вероятность

$$p_j = \int_{-\infty}^{-|t_j|} f(x) dx + \int_{|t_j|}^{\infty} f(x) dx = 1 - 2 \int_0^{|t_j|} f(x) dx$$

критического события, состоящего в том, что при указанной гипотезе будет получено значение β_j , не меньшее найденного в эксперименте, оказывается меньше заданного уровня значимости α .

Все незначимые параметры модели обнуляются; это соответствует отбрасыванию некоторых слагаемых модели (изменению ее вида). Если ковариационная матрица для исходной модели не являлась диагональной, то параметры модели необходимо найти вновь и повторить для них процедуру проверки на значимость.

Заключительным шагом анализа является проверка *адекватности* полученной регрессионной модели результатам эксперимента. Вычисляется *остаточная дисперсия*, или *дисперсия адекватности*:

$$s_{ad}^2 = \frac{M}{N - L} \sum_{u=1}^N (y_u - f(\mathbf{x}_u))^2,$$

где N – число экспериментов (число различных точек плана эксперимента), L – число искомых параметров модели (число слагаемых).

Затем вычисляется значение статистики

$$F = \frac{s_{ad}^2}{s_e^2},$$

где s_e^2 – дисперсия воспроизводимости. Эта статистика подчинена распределению Фишера с $f_{ad} = N - L$ и $f_e = N(M - 1)$ степенями свободы. Гипотеза адекватности модели эксперименту отвергается, если вероятность

$$p = \int_F^{\infty} f(x) dx = 1 - \int_0^F f(x) dx$$

критического события, состоящего в том, что при адекватной модели значение F будет не меньшим, чем реально обнаруженное, окажется меньше выбранного уровня значимости.