

ЛЕКЦИЯ 25
ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА В ОБЛАСТИ
ОПТИМУМА

1. Крутое восхождение

Выбор преобладающих факторов и оценка их значимости по коэффициентам регрессии линейной модели позволяют спланировать последующие эксперименты для достижения оптимальной области кратчайшим способом. Эта задача решается путем учета знаков при коэффициентах. Например, если

$$y = a_0 + a_1x_1 - a_2x_2,$$

то для увеличения y следует увеличивать x_1 и уменьшать x_2 . Важно правильно выбрать величину шага по x_1 и x_2 . Малые шаги могут не позволить зафиксировать изменение параметра оптимизации и удлинняют поиск, а верхний предел шага лимитируется областью определения фактора. Следует отметить, что двигаться необходимо из центра эксперимента (основного уровня), а не из какой-либо точки (например, наилучшей).

Кратчайшее расстояние к максимуму (минимуму) непрерывной однозначной функции отклика из любой точки определяется градиентом $\Delta y = \frac{\partial y}{\partial x_1} \vec{p} + \frac{\partial y}{\partial x_2} \vec{\ell} + \dots + \frac{\partial y}{\partial x_m} \vec{m}$. линиям параметра оптимизации (см. рис. 4.2):

$\partial y / \partial x$

a_j

Оценками частных производных являются коэффициенты линейной регрессии. Следовательно, для движения по градиенту необходимо менять факторы пропорционально их коэффициенту регрессии и в сторону, соответствующую знаку коэффициента. Для этого вычисляется расчетный коэффициент

$$\Delta x_{jn} = \frac{1}{|a_{j\max}|} a_j \Delta x_j = k_p a_j \Delta x_j,$$

Тогда шаг крутого восхождения по любому фактору в натуральных единицах можно вычислить по формуле

где k_p — расчетный коэффициент.

Далее последовательно составляющие градиента (шаги) прибавляются к основному уровню до тех пор, пока значения x не выйдут за область определения переменных.

Фиксируемые значения факторов называются мысленными опытами. С мысленных опытов начинается движение к наилучшей точке исследованной области, после достижения которой принимается решение о продолжении исследований либо их окончании.

По какой-либо причине эксперимент, выполняемый по составленному плану, может оказаться неудачным. Это проявляется в незначимости коэффициентов либо в неадекватности модели. Если линейная модель адекватна, но многие коэффициенты незначимы, то в зависимости от характера исследований (стоимости и продолжительности опытов, близости области оптимума и т. п.) могут быть приняты решения об изменении интервалов варьирования и повторении эксперимента, переноске центра плана, отсеивании незначимых факторов, увеличении числа параллельных опытов и доработке плана.

Когда есть уверенность, что область оптимума далека либо неизвестна, можно допустить движение по градиенту и при незначимости отдельных коэффициентов с обязательным продолжением экспериментальных работ в достигнутой в результате такого движения точке. Если незначимых коэффициентов много, рекомендуется повторить эксперимент с измененными соответствующим образом интервалами варьирования факторов, так как в противном случае при движении по градиенту оставшихся немногих факторов теряются преимущества многофакторного планирования.

Шаговый процесс движения по поверхности отклика продолжается до тех пор, пока исследователь не попадет в «почти стационарную область», где линейное приближение оказывается уже недостаточным. При переходе через оптимум (по другую сторону холма) значение параметра оптимизации вновь должно ухудшаться. Таким образом, определяется оптимальная область.

Для качественных факторов на двух уровнях фиксируется лучший уровень. Незначимые факторы стабилизируются на любом уровне в интервале. Если нет специальных соображений, то выбирают нулевой уровень. Если же по экономическим соображениям выгодно, например, поддерживать нижний уровень, то выбирают его. В движении по градиенту эти факторы не учитываются. Линейная модель неадекватна, о чем можно судить кроме критерия Фишера по значимости суммы коэффициентов регрессии при квадратичных членах $\sum a_{jj}$, которая может быть вычислена

$$\sum a_{jj} = a_0 - y_0,$$

где y_0 — значение параметра оптимизации в центре плана, то принимаются следующие решения: изменить интервалы варьирования; достроить план; перенести центр плана; включить в модель эффекты взаимодействия.

2. Планирование экспериментов в области оптимума

Несмотря на возможность достижения экстремума поисковым путем, во многих случаях, особенно при проведении лабораторных опытов, окрестность экстремума (почти стационарная область) целесообразно описать с помощью математической модели. Математическая модель помогает образно представить характер экстремальной области, что позволяет с большой уверенностью судить о том, действительно ли достигнут оптимум или целесообразен поиск в других областях варьирования факторов. Математическое описание почти стационарных областей позволяет избежать многих трудностей поиска в условиях сильных помех и окончательно выбрать значения, соответствующие экстремуму целевой функции.

Несмотря на большое разнообразие возможных гиперповерхностей, локальную зону экстремума во многих случаях удается описать полиномами второго порядка, что резко сужает необходимый круг планов и методов описания.

Для того чтобы найти коэффициенты параболы общего вида

$$y = a_0 + a_1x + a_{11}x^2,$$

необходимо поставить минимум три опыта на трех различных уровнях x , например, $x - \Delta x$, x и $x + \Delta x$, после чего, используя систему уравнений

$$\begin{cases} y_1 = a_0 + a_1(x - \Delta x) + a_{11}(x - \Delta x)^2; \\ y_2 = a_0 + a_1x + a_{11}x^2; \\ y_3 = a_0 + a_1(x + \Delta x) + a_{11}(x + \Delta x)^2; \end{cases}$$

$$a_0, a_1, a_{11}$$

можно найти неизвестные коэффициенты.

Факторный план достраивается нулевой точкой (центр факторного пространства) и звездными точками на осях факторного пространства (рис.1).

Рис. 1. Центральное композиционное планирование в трехмерном факторном пространстве

Ортогональное центрально-композиционное планирование. Пусть, например, ПФЭ для трех факторов изображен в виде куба (вершины — координаты опытов). Добавим шесть звездных точек $((\pm\alpha, 0, 0), (0, \pm\alpha, 0), (0, 0, \pm\alpha))$, которые теперь образуют октаэдр, и поставим дополнительные опыты в центре. Звездные точки имеют координаты по одной оси и 0 — по остальным. Величина α зависит от числа факторов k (табл. 1.1).

Например, для трех факторов матрица центрально-композиционного планирования имеет вид (табл. 1.2).

Естественно, уравнение второго порядка можно получить и путем постановки эксперимента 3^k , однако композиционный план более экономичен. Так, для четырех факторов эксперимента типа 3^k нужно поставить 81 опыт, а для композиционного плана $N = 2^k + 2k + n_0 = 16 + 8 + 1 = 25$ опытов

n_0 — число опытов в центре плана, принимается равным единице). Важным свойством планов является их ортогональность. В композиционном же плане ортогональность в общем случае нарушается, так как

$$\sum_{i=1}^N x_{0i} x_{ji}^2 \neq 0 \text{ и } \sum_{i=1}^N x_{ji}^2 x_{ui}^2 \neq 0.$$

Чтобы план стал ортогональным $x_j' = x_j^2 - \frac{\sum_{i=1}^N x_{ji}^2}{N} = x_j^2 - \bar{x}_j^2$, выбрать плечо α . Введем преобразование:

$$\text{Тогда скалярные произведения } \sum_{i=1}^N x_{0i} x_{ji}' = \sum_{i=1}^N x_{0i} x_{ji}^2 - \sum_{i=1}^N x_{0i} \bar{x}_j^2 = \sum_{i=1}^N x_{ji}^2 - N \bar{x}_j^2 = 0.$$

При этом весовой план разобьется как бы на две части: первая по известной методике позволяет определить коэффициенты a_0, a_j, a_j' , вторая позволяет вычислить коэффициенты при квадратичных членах. Найденные при этих условиях значения приведены в табл. 1.3.

Характеристики композиционных планов

Число факторов k	Число точек				
	планирования первого порядка	звездных	центральных	общее	α
2	2^2	4	1	9	1
3	2^3	6	1	15	1,215
4	2^4	8	1	25	1,414
5	2^{5-1}	10	1	27	1,547

В силу ортогональности все коэффициенты определяются независимо друг от друга по несколько видоизмененной формуле

$$a_j = \frac{\sum_i x_{ji} y_i}{\sum_i x_{ji}^2}.$$

В табл. 2 приведена матрица центрального композиционного планирования

Части матрицы	Номер опыта	Уровни факторов		
		x_1	x_2	x_3
Матрица планирования первого порядка	1	-	-	-
	2	+	-	-
	3	-	+	-
	4	+	+	-
	5	-	-	+
	6	+	-	+
	7	-	+	+
	8	+	+	+
Звездная точка ($\alpha = 1,215$)	9	$-\alpha$	0	0
	10	$+\alpha$	0	0
	11	0	$-\alpha$	0
	12	0	$+\alpha$	0
	13	0	0	$-\alpha$
	14	0	0	$+\alpha$
Центральная точка	15	0	0	0

Дисперсия коэффициентов регрессии оценивается по формуле

$$s_{a_j}^2 = \frac{s_B^2}{\sum x_{aj}^2}$$

Уравнения получаются в виде

$$\bar{y} = a'_0 + a_1x_1 + \dots + a_kx_k + a_{12}x_1x_2 + \dots + a_{(k-1)}x_{k-1}x_k + \\ + a_{11}(x_1^2 - \bar{x}_1^2) + \dots + a_{kk}(x_k^2 - \bar{x}_k^2).$$

Отсюда свободный член

$$a_0 = a'_0 - a_{11}\bar{x}_1^2 - \dots - a_{kk}\bar{x}_k^2;$$

$$s_{a_0}^2 = \frac{s_B^2(y)}{\sum x_{0i}^2} + \sum (\bar{x}_j^2)^2 s_{B,ajj}^2.$$

В отличие от планирования первого порядка знаменатель в формулах оценки дисперсии различен для разных коэффициентов. В связи с этим коэффициенты оцениваются с разными ошибками.

Ротатабельное центральное композиционное планирование Ортогональное центральное композиционное планирование обладает тем недостатком, что точность описания гиперповерхности в этом случае неодинакова в разных направлениях. Чтобы получить одинаковую точность модели во всех направлениях, разработаны ротатабельные планы (табл. 3).

Характеристика ротатабельного центрального
композиционного планирования

Число факторов	Число точек				α
	планирования первого порядка	звездных	центральных	общее	
2	4	4	5	13	1,414
3	8	6	6	20	1,682
4	16	8	7	31	2,000
5	32	10	10	52	2,378

Они требуют более громоздких вычислений и постановки большего числа опытов. Зато дисперсия параметра оптимизации для точек, равноудаленных от центра плана, постоянна. Величина плеча звезды $\alpha = 2^{k/4}$, где k — число факторов. Число пулевых точек также не является произвольным, а определено для $k: k = 3n_0 = 6a$. Для

Для вычисления коэффициентов регрессии используют более сложные формулы и расчеты обычно производят на ЭВМ.

Центральный ротатабельный композиционный план второго порядка для трех переменных приведен в табл. 4.

Решение нормальных уравнений:

$$a_0 = 0,166(0y) - 0,057 \sum_{j=1}^k (jy);$$

$$a_j = 0,073(jy);$$

$$a_{jj} = 0,0625(jy) + 0,0069 \sum_{j=1}^k (jy) - 0,0568(0y);$$

$$a_{ju} = 0,125(juy),$$

где

$$(0y) = \sum_i y_i;$$

$$(jy) = \sum_i x_{ji}^2 y_i;$$

$$(jy) = \sum_i x_{ji} y_i;$$

$$(juy) = \sum_i x_{ji} x_{ui} y_i;$$

Ротатабельный композиционный план для трех факторов

Матрица планирования				Матрица вычислений					
X_1	X_2	X_3	X_4	x_1^2	x_2^2	x_3^2	$X_1 X_2$	$X_1 X_3$	$X_2 X_3$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1
1	+1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
1	-1	+1	-1	1	1	1	-1	1	-1
1	+1	+1	-1	1	1	1	1	-1	-1
1	-1	-1	+1	1	1	1	1	-1	-1
1	+1	-1	+1	1	1	1	-1	1	-1
1	-1	+1	+1	1	1	1	-1	-1	1
1	+1	+1	+1	1	1	1	1	1	1
1	-1,682	0	0	2,828	0	0	0	0	0
1	+1,682	0	0	2,828	0	0	0	0	0
1	0	-1,682	0	0	2,828	0	0	0	0
1	0	+1,682	0	0	2,828	0	0	0	0
1	0	0	-1,682	0	0	2,828	0	0	0
1	0	0	+1,682	0	0	2,828	0	0	0

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Для любого плана коэффициенты нормальных уравнений можно вычислить по формулам:

$$a_0 = \frac{A}{N} \left[2\lambda^2(k+2)(0y) - 2\lambda c \sum_{i=1}^k (jy) \right];$$

$$a_j = \frac{c}{N} (jy);$$

$$a_{jj} = \frac{A}{N} \left\{ c^2[(k+2)\lambda - k](jy) + c^2(1-\lambda) \sum_{i=1}^k (jy) - 2\lambda c(0y) \right\};$$

$$a_{ju} = \frac{c^2}{N\lambda} (juy).$$

Причем

$$c = \frac{N}{\sum_i x_{ji}^2};$$

$$\lambda = \frac{k(n_1 - n_0)}{(k + 2)n_1} = \frac{kN}{(k + 2)n_1};$$

$$A = \frac{1}{2\lambda[(k + 2)\lambda - k]}$$

Здесь n_0 — число нулевых точек; n_1 — число остальных точек. Дисперсия коэффициентов регрессии подсчитывается по формулам:

$$s_{a_0}^2 = \frac{2A\lambda^2 - (k + 2)}{N} s_B^2;$$

$$s_{a_j}^2 = \frac{c}{N} s_B^2;$$

$$s_{a_0}^2 = \frac{A[(k + 1)\lambda - (k - 1)]c^2}{N} s_B^2;$$

$$s_{a_{ju}}^2 = \frac{c^2}{\lambda N} s_B^2.$$

Пример. Получить уравнение регрессии по ротатабельному центрально-композиционному плану для трех факторов, приведенных в табл. 5.

По соответствующим формулам находим суммы для расчета коэффициентов:

$$(0y) = \sum_{i=1}^N y_i;$$

$$(0y) = \sum_{i=1}^{20} y_i = (13 + 9 + 13 + \dots + 10) = 213,64;$$

$$(jy) = \sum_{i=1}^{(8+2)} x_i y_i;$$

$$(1y) = \sum_{i=1}^{10} x_1 y_i = (-13 + 9 - 13 + \dots + 1,682 \cdot 11,14) = -13,65;$$

$$(2y) = (-13 - 9 + 13 + \dots + 1,682 \cdot 11,682) = 13,65;$$

$$(3y) = (-13 - 9 - 13 + \dots + 1,682 \cdot 8,32) = -13,65;$$

$$(jjy) = \sum_{i=1}^{(8+2)} x_j^2 y_i;$$

$$(11y) = \sum_{i=1}^{10} x_1^2 y_i = (13 + 9 + \dots + 2,82 \cdot 11,14) = 162;$$

$$(22y) = (13 + 9 + \dots + 2,82 \cdot 11,68) = 144,56;$$

$$(33y) = (13 + 9 + \dots + 2,82 \cdot 8,32) = 144,56;$$

$$(juy) = \sum_{i=1}^8 x_i x_u y_i;$$

$$(12y) = \sum_{i=1}^8 x_1 x_2 y_i = (13 - 9 - 13 + \dots + 11) = 8;$$

$$(13y) = (13 - 9 + 13 - \dots + 11) = 0;$$

$$(23y) = (-13 + 9 + \dots + 11) = 0.$$

Определяем вспомогательные коэффициенты:

$$\lambda = \frac{kN}{(k+2)n_1} = \frac{3 \cdot 20}{(3+2)(20-6)} = 0,86;$$

$$c = \frac{N}{\sum_{i=1}^{10} x_i^2} = \frac{20}{(1+1+1+1+1+1+1+1+1+2,828+2,828)} = 1,465;$$

$$A = \frac{1}{2\lambda[(k+2)\lambda - k]} = \frac{1}{2 \cdot 0,86 \cdot [(3+2) \cdot 0,86 - 3]} = 0,447.$$

16	Центр плана	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17		0	0	0	0	0	0	0	0	0
18		0	0	0	0	0	0	0	0	0
19		0	0	0	0	0	0	0	0	0
20		0	0	0	0	0	0	0	0	0

Окончание таблицы 5.

Номер точки		y_1	y_2	y_3	\bar{y}	\hat{y}	$(\bar{y} - \hat{y})^2$	$(y_i - \bar{y})^2$
1	Ядро плана	13	12,8	13,2	13	13,01	$1 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-2}$
2		9,1	8,9	9,0	9	9,01	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-2}$
3		13,1	13,0	12,9	13	13,01	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-2}$
4		12,8	13,0	13,2	13	13,01	$1 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-2}$
5		10,7	11,3	11,0	11	11,01	$1 \cdot 10^{-4}$	$9 \cdot 10^{-2}$
6		6,9	7,0	7,1	7	7,01	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-2}$
7		10,7	11	11,3	11	11,01	$1 \cdot 10^{-4}$	$9 \cdot 10^{-2}$
8		11,0	10,8	11,2	11	11,01	$1 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-2}$

9	Звездные точки	14,51	14,5	14,49	14,50	14,52	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$
10		11,10	11,20	11,12	11,14	11,164	$1 \cdot 10^{-4}$	$28 \cdot 10^{-4}$
11		8,3	8,36	8,3	8,32	8,32	0	$12 \cdot 10^{-4}$
12		11,68	11,74	11,62	11,68	11,68	0	$36 \cdot 10^{-4}$
13		11,6	11,76	11,68	11,68	11,68	0	$64 \cdot 10^{-4}$
14		8,3	8,34	8,32	8,32	8,32	0	$4 \cdot 10^{-4}$
15	Центр плана	10,3	10,3	9,4	10	10,1	$1 \cdot 10^{-4}$	$27 \cdot 10^{-2}$
16		10,2	9,8	10,1	10	10,1	$1 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-2}$
17		10,1	10,1	9,8	10	10,1	$1 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-2}$
18		9,9	9,9	10,2	10	10,1	$1 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-2}$
19		9,7	9,9	10,3	10	10,1	$1 \cdot 10^{-4}$	$8 \cdot 10^{-2}$
20		9,8	9,8	10,4	10	10,1	$1 \cdot 10^{-4}$	$12 \cdot 10^{-2}$

Определяем коэффициенты модели:

$$a_0 = \frac{A}{N} \left[2\lambda^2(k+2)(0y) - 2\lambda \cdot c \sum_1^k (jy) \right] =$$
$$= \frac{0,447}{20} [2 \cdot 0,86^2(3+2) \cdot (213,64) - 2 \cdot 0,86 \cdot 1,465 \times$$
$$\times (162 + 144,56 + 144,56)] = 9,99;$$

$$a_j = \frac{c}{N} (ji);$$

$$a_1 = \frac{1,465}{20} (-13,65) = -1;$$

$$a_2 = \frac{1,465}{20} (13,65) = 1;$$

$$a_3 = \frac{1,465}{20} (-13,65) = -1;$$

$$a_{ju} = \frac{c^2}{N \cdot \lambda} (jui); \quad a_{12} = \frac{1,465^2}{20 \cdot 0,86} (8) = 1;$$

$$a_{13} = \frac{1,465^2}{20 \cdot 0,86} 0 = 0;$$

$$a_{23} = \frac{1,465^2}{20 \cdot 0,86} 0 = 0;$$

$$a_{jj} = \frac{A}{N} \left\{ c^2 [(k+2)\lambda - k] (jy) + c^2 (1-\lambda) \cdot \sum_1^k (jy) - 2\lambda c (0y) \right\};$$

$$a_{11} = \frac{0,447}{20} \{ 1,465^2 [(3+2) \cdot 0,86 - 3] \cdot 162 + 1,465^2 (1 - 0,86) \times \\ \times (162 + 144,56 + 144,56) - 2 \cdot 0,86 \cdot 1,465 \cdot 213,64 \} = 1,02;$$

$$a_{22} = \frac{0,447}{20} \{ 1,465^2 [(3+2) \cdot 0,86 - 3] \cdot 144,56 + 1,465^2 (1 - 0,86) \times \\ \times (162 + 144,56 + 144,56) - 2 \cdot 0,86 \cdot 1,465 \cdot 213,64 \} = 0;$$

$$a_{33} = 0.$$

Уравнение регрессии имеет вид

$$y = 9,99 - x_1 + x_2 - x_3 + x_1 x_2 + 1,02 \cdot x_1^2.$$

Расчетные значения функции отклика y приведены в табл. 5.

Проверяем адекватность модели по критерию Фишера:

$$S_{AD}^2 = \frac{\sum_1^N (\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2}{N - \frac{(k+2)(k+1)}{2}} = \frac{22 \cdot 10^{-4}}{20 - \frac{(3+2)(3+1)}{2}} = 2,2 \cdot 10^{-4};$$

$$S_B^2 = \frac{\sum_1^N \frac{\sum_1^N (\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2}{m-1}}{N} = \frac{91,45 \cdot 10^{-2}}{20} = 4,5 \cdot 10^{-2};$$

$$F = \frac{S_{AD}^2}{S_B^2} = \frac{2,2 \cdot 10^{-4}}{4,5 \cdot 10^{-2}} = 0,49 \cdot 10^{-2}.$$

Для $f_1 = N - (k + 1) = 20 - (3 + 1) = 16$ И $f_2 = (m - 1) \cdot N = (3 + 1) \cdot 20 = 40$

при $P = 0,95$.

$F_{\text{ТАБЛ}} \approx 2,0 > F$. Следовательно, модель адекватна

Так как в центре плана (опыт №15) дисперсия существенно отличается от остальных, то проверяем результаты эксперимента на воспроизводимость по критерию Кохрена (табл. 6).

$$G = \frac{S_{15}^2}{S_B^2} = \frac{27 \cdot 10^{-2}}{4,5 \cdot 10^{-2}} = 6,0$$

при $P = 0,95$; $f_1 = 19$; $f_2 = k + 1 = 4$.

$G_{\text{ТАБЛ}} = 0,42 < G$ следовательно, отличие выделенной дисперсии значимо, поэтому необходимо установить причину этого и провести дополнительный эксперимент.

Значение критерия Кохрена при доверительной вероятности 95 %

N	f					
	1	2	3	16	36	∞
2	2	0,99	0,94	0,83	0,73	0,66
3	3	0,97	0,80	0,65	0,55	0,48
4	4	0,91	0,68	0,54	0,44	0,37
5	5	0,84	0,60	0,46	0,36	0,31
6	6	0,78	0,53	0,40	0,31	0,26
7	7	0,73	0,48	0,35	0,28	0,23
8	8	0,68	0,44	0,32	0,27	0,20
9	9	0,64	0,40	0,29	0,22	0,18
10	10	0,60	0,37	0,27	0,20	0,16
15	15	0,47	0,28	0,19	0,14	0,11
20	20	0,39	0,22	0,15	0,11	0,09
30	30	0,29	0,16	0,11	0,08	0,06
60	60	0,17	0,09	0,06	0,04	0,03
∞	0	0	0	0	0	0

Примечание, f - число степеней свободы сравниваемой дисперсии; N - число сравниваемых дисперсий.