

ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ



Цель

Целью настоящей главы является рассмотрение методов планирования и планов многофакторного эксперимента. Излагаются вопросы, связанные с выбором плана, а также с оценкой ошибок предсказания аппроксимирующими формулами.

***Постановка вопроса
планирования
экспериментов***

Если имеется ли математическая модель явления или процесса, достаточно хорошо описывающая его в определенных границах изменения главных факторов, то задача сводится к определению опытных коэффициентов при нескольких заданных значениях переменных, т.е. чаще всего к стандартным статистическим процедурам.

В этом случае от исследователя требуется знакомство с простыми планами, а также алгоритмами и программами обработки результатов наблюдений и экспериментов.

чаще на этапе планирования
эксперимента такие модели еще
неизвестны, а в их качестве принимается
аппроксимирующая функция —
многочлен

$$y = (x_i, a_k) \approx a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_{11}^2 x_1^2 + \\ + a_{12} x_1 x_2 + \dots + a_{22} x_2^2 + \dots + a_{111} x_1^3 + a_{112} x_1^2 x_2 + \dots$$

при линейной аппроксимации

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3$$

***В качестве следующей
аппроксимации может быть
использована зависимость***

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3 + a_{11} x_1^2 + a_{12} x_1 x_2 + a_{13} x_1 x_3$$

для которой $n_k = 7$, а матрица индексов имеет вид

$$MI[7,2] = 0,0; 0,1; 0,2; 0,3; 1,1; 1,2; 1,3.$$

Если аппроксимация неадекватная, т.е. вариация Var % слишком большая, при всех допустимых вариантах полинома, то нужно уменьшить размеры поля экспериментирования в два-три раза.

**Легко заметить, что
коэффициенты аппроксимации
при эффектах взаимодействия
с четвертым фактором
систематически уменьшаются
при каждом последующем
упрощении.**

В целях более компактного представления результатов опыта можно выдвинуть гипотезу о том, что 4-й фактор не влияет существенно в пределах данной экспериментальной области. Действительно, последнее представление при $nf=3$ выражается уравнением:

$$y = 106,02 - 1,27x_1 + 5,21x_1x_2^2 + 9,62x_3$$

при $Sa=1,52$ и $Va=1,45\%$, что находится в допустимых пределах ($Va < V_\infty$).

Оценка качества планов

Достаточно часто для оценки качества планов используются критерии D, E, G, A,... — оптимальности [11].

эти критерии основаны на статистической оценке распределения "ошибок" опытов по полю планирования.

ошибки несоответствия
статистической модели (многочлена)
истинному физическому закону
требуют от экспериментатора резкого
уменьшения поля
экспериментирования.

План должен давать при его реализации достаточное количество информации при минимальном числе опытов.

Количество информации можно считать достаточным, если полученная статистическая аппроксимация дает "правдоподобные" прогнозы, в смысле вышесказанного по F-критерию.

План должен обеспечивать целесообразное для поставленной задачи расположение опытных точек и их частоту по экспериментальному полю. Если это возможно, число уровней в плане должно быть максимальным, а в идеальном варианте равным числу опытов.

Необходимо, чтобы корреляция между факторами была пренебрежимо малой. Т.о., в качестве одного из критериев оптимальности может использоваться минимальный коэффициент парной корреляции.

Корреляция между членами статистической зависимости (в частности, многочлена) также должна быть малой для того, чтобы информационная матрица не получалась плохо обусловленной. Последнее особенно важно, когда число определяемых коэффициентов очень большое.

Как известно, ортогональная матрица — диагональная, корреляционная же от ортогональной матрицы — единичная. План, приводящий к единичной матрице, при прочих равных условиях, является идеальным планом. Следует подчеркнуть, что именно при прочих равных условиях, т.е. при наличии нескольких целесообразных планов, предпочтительным оказывается тот, у которого корреляционная матрица ближе к единичной.

Такой план принято называть квазиортогональным, а численно эта близость выражается индексом качества обратной корреляционной матрицы

$$IC = \left(\sum_i a_{ii} / (nk - 1) \right)^{1/2} \quad i \in (2, nk)$$

Корреляционная матрица имеет $nk-1$ строк и столько же столбцов.

В литературе [11] используется и в дальнейшем мы будем применять аналогичный критерий — след обратный нормированной информационной матрицы.

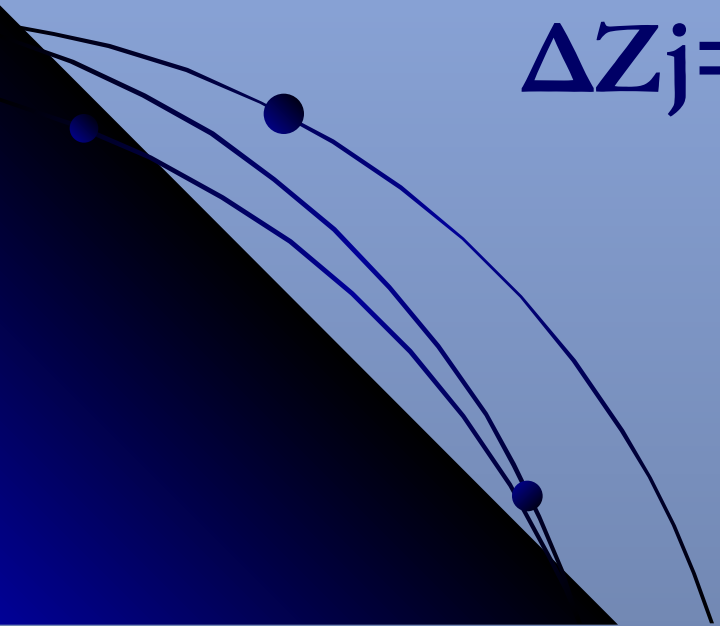
$$tr = tr(M_n^{-1}) / nk$$

Отметим, что оба критерия
хорошо характеризуют
обратимость матрицы при
использовании МНК.

Нормирование факторов

Нормирование осуществляется
делением области варьирования
факторов на $k = 2, 4, 6$ или более
участков так, чтобы

$$\Delta Z_j = (Z_j \text{ max} - Z_j \text{ min}) / k$$



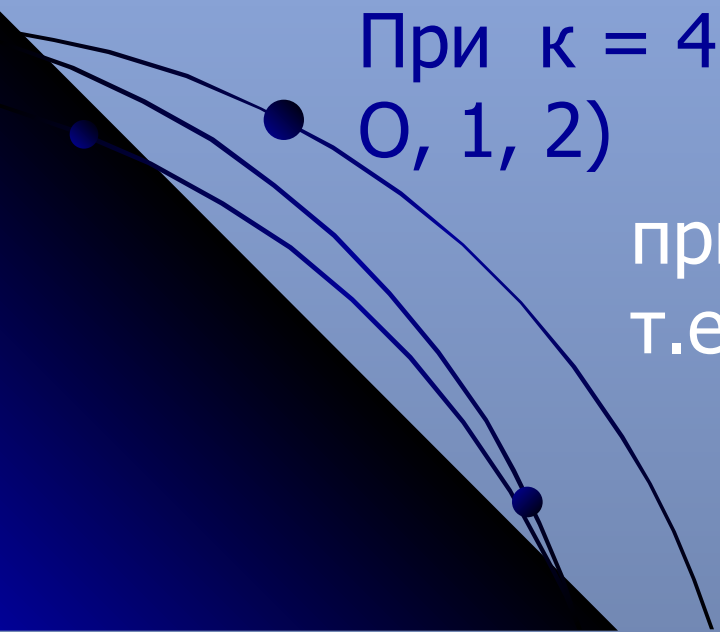
При

$$Z_{jcp} = \frac{Z_{j\max} - Z_{j\min}}{2} \quad \text{и} \quad Z_j = Z_j + x_j \Delta Z_j$$

При $k=2$ имеем три уровня варьирования, т. е. $x_j \in (-1, 0, 1)$.

При $k = 4$ — пять уровней, т.е. $X_j \in (-2, -1, 0, 1, 2)$

при $k = 6$ — семь уровней, т.е. $x.e(-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3)$.



В СТАТИСТИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ,
ПОЛУЧЕННЫХ НА ОСНОВЕ,
НОРМИРОВАННЫХ ПЛАНОВ, ЛЕГКО
ОТЛИЧИТЬ ЗНАЧИМЫЕ
КОЭФФИЦИЕНТЫ ОТ НЕЗНАЧИМЫХ.



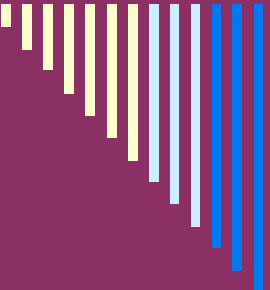
Не менее важно и то, что
информационная матрица
при нормировании факторов
точнее обращается — т.о.,
лучше коэффициент качества
плана.

увеличение числа разных точек в
плане позволяет получать при
необходимости кубическую
зависимость или аппроксимацию
более высокого порядка, а также
определять область
экстремальных значений
выходной функции y .

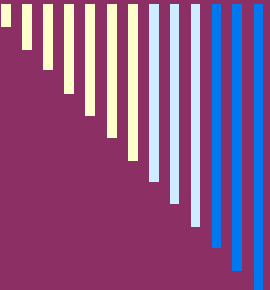


The background of the image is a close-up, high-contrast photograph of a red fabric, possibly silk or satin, that is heavily crumpled and folded. The lighting creates deep shadows and bright highlights, emphasizing the texture and the fluid, chaotic nature of the folds. The color is a rich, slightly dark red.

***Построение
детерминированных
планов***

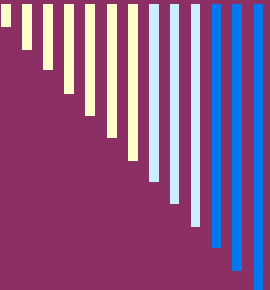


Существует множество способов построения планов эксперимента - случайных и детерминированных. Однако независимо от способа необходимо получать матрицу МНК с малой корреляцией между строками. Предельным случаем является ортогональная матрица, но ее можно получить лишь для простых случаев



Для построения почти всех ортогональных планов, приведенных в каталоге, использовалась система ортогональных тригонометрических функций. В частности, используя соотношение ортогональности

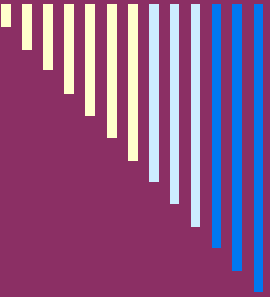
$$\int_0^{2\pi} \sin(n\alpha) \cdot \sin(m\alpha) d\alpha = 0$$



и заменяя интеграл на
интегральную сумму,
получают

$$\sum_{i=1}^N \sin(n\alpha_i) \cdot \sin(m\alpha_i) \Delta f \Rightarrow 0$$

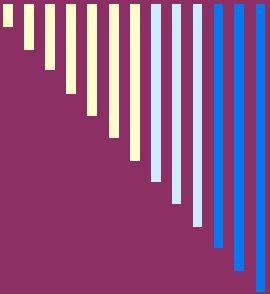
$$\Delta f \rightarrow 0, N \rightarrow \infty$$



Полагая $\Delta f \neq 0$ можно записать

$$\sum_{i=1}^N \sin(n\alpha_i) \cdot \sin(m\alpha_i) \approx 0$$

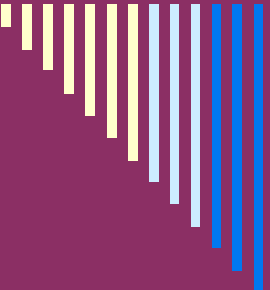
где N - количество разбиений на отрезке $[0, 2\pi]$.
Левая часть приведенного выражения тем точнее приближается к нулю, чем на большее число частей разбит отрезок $[0, 2\pi]$.



Предлагаемый алгоритм предназначен для построения симметричных и несимметричных многоуровневых планов с заданным числом опытов N (N - простое число). На начальном этапе он сводится к вычислению элементов

$$\alpha_i = \frac{2\pi(i-1)}{N}, \quad (i = 1, 2, 3, \dots, N)$$

вспомогательного одномерного массива $\{\alpha_i\}_{i=1}^N$

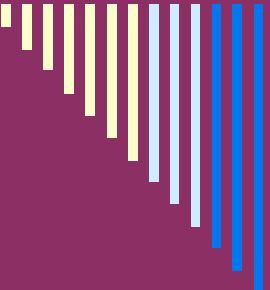


Далее, используя заданный

массив $\{\alpha_i\}_{i=1}^M$ максимальных
значений уровней факторов,
вычисляют элементы.

$$Z_{ij} = a_j \sin(i\alpha_i)$$

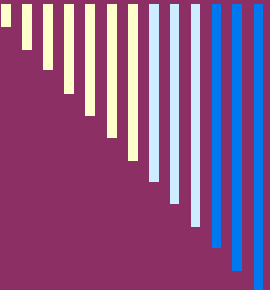
вспомогательной матрицы $\|Z\|$, где
 $M=(N-1)/2$ - количество факторов.



Количество уровней по каждому фактору выбирается нечетным, а их значения симметрично располагаются относительно нуля.

Например, устанавливая пять уровней варьирования $(-2, -1, 0, 1, 2)$ для первых трех факторов и три уровня $(-1, 0, 1)$ для четвертого фактора, элементы исходного массива $\{\alpha_i\}_{i=1}^M$

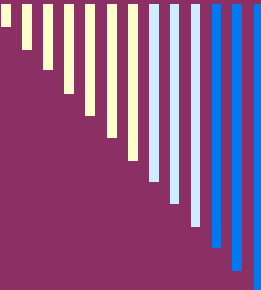
будут представлены числами 2,2,2,1. Для симметричных планов значения элементов α_i одинаковы.



Задаваясь значениями константы B на отрезке $0,1 \div 0,9$, получают элементы квазиортогональных векторов

$$X_{ij} = \left[|Z_{ij}| + B \right] \operatorname{sgn} Z_{ij}$$

искомой матрицы плана $\|X\|$, в которой при $B < 0,5$ большинство точек плана концентрируется около центра.



Следующий шаг при построении плана состоит в нахождении такого сочетания вектор столбцов, которое обеспечило бы хорошие качества информационной матрицы в частности, чтобы след матрицы был близок к единице. Поиск осуществляется в два этапа таким образом, что на первом этапе перебираются многочисленные сочетания и выбираются между ними те, у которых малое значение коэффициентов корреляции r_{ij} между членами многочлена. При этом допускается, что величину $r_{ij} \leq 0,40$ можно полагать пренебрежимо малой.

Планы для смесей

Имеется ряд рекомендаций для построения планов при $nf=2 - 3$ компонентов. Здесь излагается общий метод построения планов при любом количестве факторов.

Построение планов для смесей предполагает добавление к алгоритму программы "Полином" подпрограммы, реализующей следующие операции:

Вычисление nf равномерно распределенных случайных чисел ($0 \leq p \leq 1$) и их суммы

$$S = \sum_{j=1}^{nf} p_j$$

Нахождение значений факторов, как доли этой суммы

$$X[i, j] = p_j / S$$

После возврата в основную программу вычисляются соответствующие значения стандартизированных факторов

$$X_{ст}[i, j] = \frac{X[i, j] - \bar{x}_j}{\sigma_{xj}}$$

и значение критерия качества t_r

Процедура повторяется несколько раз (10+20), а из полученных планов выбирается тот, у которого величина t_r наименьшая и который лучше всего подходит по технологическим соображениям.

При применении программы «ПОЛИНОМ» надо учитывать, что значение одного из факторов определено остальными, поэтому при определении исходных данных вводим соответственно полином составляется для $n \cdot f - 1$ значений n на единицу меньше числа факторов. Например, при $n \cdot f = 3$ получаем: соответственно полином составляется для $n \cdot f - 1$ факторов. Например, при $n \cdot f = 3$ получаем

$$Y_p = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + x_1^2 + a_{12} x_1 x_2 + a_{12} x_2^2$$

Выбор $nf - 1$ факторов из общего числа nf производится произвольно, т.е., например, для x_1 и x_2 матрица MI имеет вид:

$$MI[nk, nf] = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 2 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

Для x_1 и x_3 ее вид уже будет следующим:

$$MI[nk, nf] = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 3 \\ 1 & 1 \\ 1 & 3 \\ 3 & 3 \end{bmatrix}$$

Предлагаемый метод позволяет ввести ограничивающие условия. Например, пусть требуется получить план для смеси из трех компонентов, для которых $\sum_{nt} x_j = 1$ при ограничении

$$q_{\min} \leq x_1 / x_2 \leq q_{\max}$$

т.е. отношение x_1/x_2 должно находиться в определенных пределах. Такая ситуация имеет место, например, при выборе компонентов бетона. Водоцементное отношение В/Ц, т.е. отношение количества воды к количеству цемента должно оставаться в заданном промежутке $q_{\max} - q_{\min}$