Планирование эксперимента

Полный факторный эксперимент

Основные определения

- Под экспериментом понимают **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.

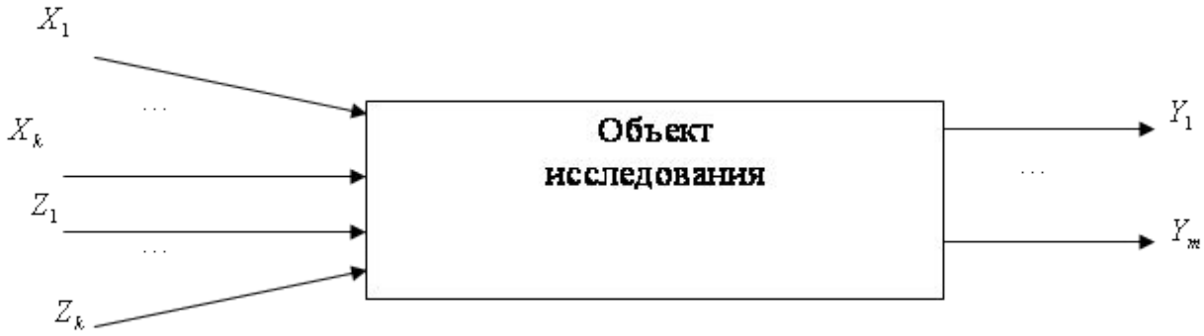
Основные определения

- 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.**

Основные определения

- **Планирование эксперимента – это процедура выбора числа и условий проведения опытов, необходимых и достаточных для решения поставленной задачи с требуемой точностью.**
- Задачи, для решения которых может использоваться планирование эксперимента, чрезвычайно разнообразны (выбор оптимального компонента смесей, повышение производительности действующих установок, повышение качества продукции и т.д.).
- Цель планирования эксперимента –**при нахождение таких условий и правил проведения опытов 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.**

- При планировании эксперимента исследуемый объект представляется «черным ящиком», на который воздействуют факторы х.



- Стрелки справа изображают численные характеристики целей исследования (параметры оптимизации). Для проведения эксперимента **необходимо иметь возможность воздействовать на поведение «черного ящика». Все способы такого воздействия мы называем факторами. Их также называют входами «черного ящика».**

Факторы должны быть совместимыми и независимыми. Совместимость предполагает допустимость любой комбинации факторов, а независимость - отсутствие между факторами корреляционной связи.

К исследуемым параметрам предъявляют ряд требований. Они должны быть:

- **Управляемыми**: экспериментатор, выбрав нужное значение фактора, может его поддерживать постоянным в течение всего опыта;
- **Операциональными:** необходимо указывать последовательность действий, с помощью которых устанавливаются конкретные значения;
- **Точными:** степень точности определяется диапазоном изменения факторов;
- **Однозначными**: должны быть непосредственными воздействиями на объект.

Принятие решений перед планированием эксперимента

- При выборе области эксперимента прежде всего надо **оценить границы областей определения факторов.** При этом должны учитываться ограничения нескольких типов. Первый тип – **принципиальные ограничения для значений факторов, которые не могут быть нарушены ни при каких обстоятельствах**. Второй тип – ограничения, связанные **с технико – экономическими соображениями. Третий тип – определяется конкретными условиями проведения процесса.**
- **Оптимизация обычно начинается в условиях, когда объект уже подвергался некоторым исследованиям информацию,** содержащуюся в результатах предыдущих исследований называют априорной (т.е. полученной до начала эксперимента).
- Выбор экспериментальной области факторного

Выбор основного уровня

- **Наилучшими условиями, определенными из анализа априорной информации, соответствует комбинация уровней факторов**. Каждая комбинация является многомерной точкой в факторном пространстве. **Ее можно рассматривать как исходную точку для построения плана эксперимента. Ее называют основным (нулевым) уровнем**.

- **Построение плана эксперимента сводится к выбору экспериментальных точек, симметричных относительно нулевого уровня.**

Выбор интервалов варьирования

- Требуется исследовать влияние легирующих элементов (Cr – хрома, Nb – ниобия, W – вольфрама) на предел прочности литейного сплава ЖС6К. Номинальное содержание элементов: Cr=8,0%, Nb=1%, W=7,0%.
- Поставим ПФЭ при трех сериях опытов в точках: Cr=8,0±1,5%, Nb=1±1%, W=7,0±1,5%. Для стандартизации масштабов факторов условия проведения опыта сведем в таблицу

Характеристика плана	$z_{1(Nb)}$	$z_{2(W)}$	$z_{3(Cr)}$
Нулевой уровень	1%	7,0%	8,0%
Интервал варьирования	1%	1,5%	1,5%
Верхний уровень	2%	8,5%	9,5%
Нижний уровень	0%	5,5%	6,5%

План проведения экспериментов записывается в виде матрицы планирования, в которой в определенном порядке перечисляются различные комбинации факторов на двух уровнях. Например, в таблице приведена матрица планирования ПФЭ 2 для трех факторов: *x1*, *x2*, *x3*. Знак «+» говорит о том, что во время опыта значение фактора устанавливают на верхнем уровне, а знак «-» показывает, что значение фактора устанавливают на нижнем уровне.

№ эксперимента	Факторы			Взаимодействия				Результаты опытов		
	$x_{1(\mathrm{Nb})}$	$x_{2(\mathrm{W})}$	$x_{3(\mathrm{Cr})}$	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y_1	y_2	y_3
1	+	+	+	+	+	+	+	511	555	545
2	-	+	+	-	-	+	-	429	542	448
3	+	-	+	-	+	-	-	460	408	440
4	-	-	+	+	-	-	+	394	430	370
5	+	+	-	+	-	-	-	722	646	678
6	-	+	-	-	+	-	+	603	600	606
7	+	-	-	-	-	+	+	595	588	605
8	-	-	-	+	+	+	-	476	522	478

- **При проведении экспериментов получают значения исследуемой величины** *y* для каждого опыта (или серии опытов). Затем переходят к построению математической модели.
- Под моделью понимается вид функции $y = f(x1, x2,...,xk)$, которая связывает изучаемый параметр со значениями факторов, лежащих в интервале между верхним и нижним уровнями. **Эту функцию называют уравнением регрессии**. По накопленному разными исследователями опыту работы с различными моделями можно считать, что самыми простыми моделями являются алгебраические полиномы.

Работу выполняем в следующем порядке:

- кодируем переменные;
- достраиваем матрицу планирования в кодированных переменных с учетом парных взаимодействий и дополняем столбцом средних значений отклика;
- вычисляем коэффициенты уравнения регрессии;
- проверяем вычисленные коэффициенты на значимость, предварительно определив дисперсию воспроизводимости, и получаем уравнение регрессии в кодированных переменных
- проверяем полученное уравнение на адекватность;
- проводим интерпретацию полученной модели;
- выписываем уравнение регрессии в натуральных переменных
- оптимизация параметров.

- Для каждого фактора находим центр, интервал варьирования и зависимость кодированной переменной *xi* от натуральной *zi* по формулам. Оформляем результаты в таблице

Характеристика плана	$z_{1(Nb)}$	$z_{2(W)}$	$z_{3(Cr)}$
Нулевой уровень	1%	7,0%	8,0%
Интервал варьирования	1%	1,5%	1,5%
Верхний уровень	2%	8,5%	9,5%
Нижний уровень	0%	5,5%	6,5%
Зависимость кодированной переменной от натуральной	$x_1 = \frac{z_1 - 1}{1}$	$x_2 = \frac{z_2 - 7}{1{,}5}$	$x_3 = \frac{z_3 - 8}{1{,}5}$

- Рассчитываем средние выборочные результатов для каждого эксперимента. Строим матрицу планирования с учетом всех взаимодействий и средних значений отклика

№ эксперимента	Факторы			Взаимодействия				Результаты опытов			
	$x_{1(\mathrm{Nb})}$	$x_{2(\mathrm{W})}$	$x_{3(\mathrm{Cr})}$	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y_1	y_2	y_3	$y_{ср}$
1	+	+	+	+	+	+	+	511	555	545	537
2	-	+	+	-	-	+	-	429	542	448	473
3	+	-	+	-	+	-	-	460	408	440	436
4	-	-	+	+	-	-	+	394	430	370	398
5	+	+	-	+	-	-	-	722	646	678	682
6	-	+	-	-	+	-	+	603	600	606	603
7	+	-	-	-	-	+	+	595	588	605	596
8	-	-	-	+	+	+	-	473	520	480	491

- Линейное уравнение регрессии относительно новых переменных имеет вид:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \ldots + b_k x_k$$

- Если требуется изучить влияние парных взаимодействий различных факторов на исследуемый параметр, то уравнение регрессии записывают в виде

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + \ldots + b_{k-1} x_{k-1} x_k$$

- Или

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^{k} b_i x_i + \sum_{i<j} b_{ij} x_i x_j$$

- Если надо учесть другие взаимодействия, то число слагаемых увеличивают.

- Обычно проводят несколько серий опытов для каждого эксперимента. Это необходимо для проверки уравнения на адекватность.
- Адекватность - это способность модели предсказывать результаты эксперимента в некоторой области с требуемой точностью. Результаты опытов в каждом j-ом эксперименте *(j=1,..., n)* записывают в правые столбцы матрицы планирования. В последнем столбце записывают средние выборочные значения полученных результатов для каждой серии опытов (см. таблицу 2). Если каждый эксперимент повторяли *m* раз, то в матрице будет записано *m* столбцов *y1, y2, ..., ym.*
- Если обозначить за *yji* значение результата, полученного в *i-ом* опыте (*i=1,...,m*) для j-ого эксперимента *(j=1,...,n),* то выборочное среднее для каждого эксперимента вычисляют по известной формуле:

$$\overline{y_j} = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} y_{ji}$$

- Коэффициенты уравнения регрессии находят с помощью метода наименьших квадратов.
- Так как матрица планирования ПФЭ *2k* должна удовлетворять определенным требованиям (такие матрицы с заданными требованиями уже построены), то формулы, определяющие коэффициенты уравнения регрессии, достаточно просты:

$$b_0 = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} y_{ji}$$

$$b_i = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} x_{ji}\,\overline{y}_j, \quad i = \overline{1,k},$$

$$b_{r,p} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} x_{jr} x_{jp}\,\overline{y}_j, \quad r < p, \quad r = \overline{1,k}, p = \overline{1,k},$$

Вычисляем коэффициенты уравнения регрессии. Составляем для наглядности таблицу, в которую заносим найденные коэффициенты уравнения регрессии.

Свойства сплава	bo	b1	b2	b3	b1,2	b1,3	b2,3	b1,2,3
Предел прочности	527	35,75	46,75	-66	0	-10,25	-2,75	6,5

Записываем линейное уравнение регрессии относительно новых переменных:

$$y = 527 + 35{,}75x_1 + 46{,}75x_2 - 66x_3 - 10{,}25x_1x_3 - 2{,}75x_2x_3 + 6{,}5x_1x_2x_3$$

- Полученные коэффициенты необходимо проверить на значимость. Это можно сделать с помощью критерия Стьюдента: если $|b| > t_{кр} \cdot S_{коэф}$, то *b* значим; если $|b| < t_{кр} \cdot S_{коэф}$, то *b* незначим и его полагают равным нулю в уравнении регрессии.

- Критическую точку *tкр.* находят из таблиц распределения Стьюдента по числу степеней свободы *n(m - 1)* и с заданным уровнем значимости *α* для случая двусторонней критической области.

- Среднее квадратическое отклонение коэффициентов *Sкоэф.* зависит от дисперсии воспроизводимости результатов по всем проведенным опытам *S2{y}* и вычисляется по формуле:

$$S_{коэф} = \sqrt{\frac{S^2\{y\}}{n \cdot m}}$$

- Дисперсия воспроизводимости *S2{y}* характеризует ошибку всего эксперимента. В случае равномерного дублирования опытов (т.е. при одинаковом числе наблюдений в каждом эксперименте) для расчета *S2{y}* используют формулу:

$$S^2_{\{y\}} = \frac{1}{n \cdot (m-1)} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{m} \left(y_{ji} - \bar{y}_j \right)^2,$$

- где *n* - число экспериментов (число строк в матрице ПФЭ);
- *m* - число опытов (наблюдений) в каждом эксперименте;
- *yji* - результат отдельного i-го наблюдения в j-ом эксперименте;
- $\bar{y}_j$ - среднее выборочное значение наблюдений для j-ого эксперимента, которое определяется по формуле.

- Находим дисперсию воспроизводимости *S2{y}*. Для облегчения расчетов запишем формулу в другом виде

$$S^2_{\{y\}} = \frac{1}{n \cdot (m-1)} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{m} \left(y_{ji} - \bar{y}_j \right)^2 = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^{m} (y_{ji} - \bar{y}_j)^2 \right) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} S_j^2 ,$$

- здесь внутренние суммы являются выборочными дисперсиями результатов опытов для j-го эксперимента (*j=1,..., n*). Для удобства оформляем расчеты в виде таблицы

j	y_1	y_2	y_3	$\bar{y}_j$	$(y_{j1} - \bar{y}_j)^2$	$(y_{j2} - \bar{y}_j)^2$	$(y_{j3} - \bar{y}_j)^2$	S_j^2
1	511	555	545	537	676	324	64	532
2	429	542	448	473	1936	4761	625	3661
3	460	408	440	436	576	784	16	688
4	394	430	370	398	16	1024	784	912
5	722	646	678	682	1600	1296	16	1456
6	603	600	606	603	0	9	9	9
7	595	588	605	596	1	64	81	73
8	473	520	480	491	324	841	121	643

- Суммируя элементы последнего столбца таблицы 2.5, получаем:

$$\sum_{j=1}^{8} S_j^2 = 7974$$

- Отсюда получаем дисперсию воспроизводимости:

$$S_{\{y\}}^2 = \frac{1}{8}\sum_{j=1}^{8} S_j^2 = \frac{1}{8} S_j^2 = \frac{1}{8} \cdot 7974 = 996{,}75$$

- Определяем среднее квадратическое отклонение коэффициентов:

$$S_{коэф} = \sqrt{\frac{S_{\{y\}}^2}{n \cdot m}} = \sqrt{\frac{996.75}{8 \cdot 3}} = 6{,}45$$

- Из таблиц распределения Стьюдента по числу степеней свободы *n(m-1)=8*2=16* при уровне значимости *α*=0,05 находим *tкр*=2,12. Следовательно, tкр*S*коэф* =2,12*6,45=13,67

- Сравнивая полученное значение tкр*S*коэф*=13,67 с коэффициентами уравнения регрессии, представленными в таблице, видим, что все коэффициенты взаимодействия меньше по абсолютной величине 13,67. Следовательно, коэффициенты взаимодействия незначимы. Получаем уравнение регрессии в кодированных переменных:
- $y = 527 + 35{,}75x1 + 46{,}75x2 - 66x3$
- Проверка на адекватность полученного уравнения регрессии со значимыми коэффициентами осуществляется с помощью критерия Фишера: если *Fрасч. < Fтабл*, то уравнение адекватно, в противном случае - неадекватно.
- Расчетное значение критерия *Fрасч* определяют по формуле:

$$F_{расч} = \frac{S^2_{ост}}{S^2_{\{y\}}}$$

- где *S2{y}* - дисперсия воспроизводимости, найденная по формуле, а *S2ост* - остаточная дисперсия (или дисперсия адекватности).

. Проверим полученное уравнение на адекватность по критерию Фишера. Так как дисперсия воспроизводимости найдена в предыдущем пункте, то для определения расчетного значения критерия *Fрасч* необходимо вычислить остаточную дисперсию *S2ост..*
Для этого найдем значения изучаемого параметра по полученному уравнению регрессии *yj* *(j=1,...,* 8), подставляя +1 или -1 вместо *xi* в соответствии с номером *j* эксперимента
Остаточную дисперсию *S2ост* вычисляем по формуле:

$$S^2_{ост} = \frac{3}{8-7}\sum_{j=1}^{8}\left(\tilde{y}_j - \bar{y}_j\right)^2 = 3\cdot\left[\left(543{,}5-537\right)^2 + (472-473)^2 + (450-436)^2 + (378{,}5-398)^2 \ldots\right] = 3717$$

Расчетное значение критерия Фишера *Fрасч* определяем по формуле:

$$F_{расч} = \frac{S^2_{ост}}{S^2_{\{y\}}} = \frac{3717}{996{,}75} = 3{,}73$$

- Табличное значение критерия *Fтабл.* находим из таблиц критических точек распределения Фишера при уровне значимости α=0,05 по соответствующим степеням свободы $k1= n — r= 8 - 7 =1$ и $k2= n(m-1)= 8\text{-}2 = 16$, *Fтабл*=4,49.
- Так как *Fрасч=3*,73 < *Fтаблj*= 4,49, то уравнение регрессии адекватно.
- Проведем интерпретацию полученной модели

  $y = 527 + 35{,}75x1 + 46{,}75x2 - 66x3$
- По уравнению видно, что наиболее сильное влияние оказывает фактор x3 – содержание хрома в сплаве, так как он имеет наибольший по абсолютной величине коэффициент.
- Так как коэффициенты при x1 и x2 положительны, то с увеличением этих факторов увеличивается отклик, т. е. увеличивается прочность.

- Выписываем уравнение регрессии в натуральных переменных, подставляя вместо *xi* их выражения через *zi*, которые берем из последнего столбца таблицы:

  y = 527 + 35,75+ 46,75 – 66

  Преобразовав это уравнение, окончательно получаем его вид в натуральных переменных:

  $y = 528{,}375 + 35{,}75z1 + 70{,}125z2 - 99z3.$

Оптимизация параметров

Оптимизация – процесс поиска максимума или минимума (поиск наилучшего значения параметра).

Оптимизация бывает двух типов: 1) оптимизация параметров, в процессе которой ищут такие значения параметров, при которых целевая функция имеет экстремальное значение при заданной структуре; 2)оптимизация структуры, когда ищется структура системы, при которой целевая функция имеет максимальное значение (функциональное преобразование при заданных параметрах)

Сначала выбирается начальное значение $x1$,$x2$ и $x3$, затем интервалы варьирования и , составляется МПЭ.

Наименование величин	$z_{1(\mathrm{Nb})}$	$z_{2(\mathrm{W})}$	$z_{3(\mathrm{Cr})}$
z_{0j}	1%	7,0%	8,0%
Δ_j	1%	1,5%	1,5%
b_j	35,75	70,125	99
$\Delta_j b_j$	35,75	105,1875	148,5
$e\,\Delta_j b_j$	1	1,5	1,5

№ эксперимента	Координаты точек крутого восхождения		
	x_1	x_2	x_3
9	2	8,5	6,5
10	3	10	5
11	4	11,5	3,5
12	5	13	2
13	6	14,5	0,5

Таблицу опыта обычно рассчитывают до наступления нереализуемого шага. В данном случае следующий шаг дает отрицательное значение $z3$.

- Проведем расчет для новых опытов крутого восхождения. Необходимо в первую очередь перевести натуральные значения таблицы в кодированные. Кодированные величины получаются с помощью известной формулы:

$$x_i = \frac{x_i - x_{io}}{I_i}$$

№ эксперимента	Координаты точек крутого восхождения			y
	x_1	x_2	x_3	
9	1	1	-1	675,5
10	2	2	-2	824
11	3	3	-3	972,5
12	4	4	-4	1121
13	5	5	-5	1269,5

- Расчеты (мысленные эксперименты) используются только для сокращения объема эксперимента. Параллельно с мысленными опытами проводится эксперимент, но он проводится не в каждой точке, и производится сравнение *y*расч и *y*эксп. Когда это расхождение становится значительным, то переходят к проведению эксперимента.