Математическое моделирование

Задачи оптимизации

ПЛАНЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Если описать процессы в объекте линейным уравнением не удается, то переходят к планам второго порядка.

Для получения коэффициентов регрессии в этом случае варьирования факторами на двух уровнях недостаточно (в случае одного фактора для построения прямой необходимо две точки, для построения параболы – три точки). При небольшом количестве факторов можно варьировать каждый фактор на трех уровнях – верхнем, нижнем и нулевом. Полнофакторный эксперимент в таком случае обозначается как 3^k.

Этот эксперимент содержит 9 опытов. Уравнение, для получения которого он предназначен, имеет 6 членов и записывается как

$$y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_{12} X_1 X_2 + b_{11} X_1^2 + b_{22} X_2^2$$

.

ПЛАНЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Матрица ПФЭ 3^2

Номер опыта	X_0	X_1	X_2	X_1X_2	X_1^2	X_2^2	y
1	+1	–1	–1	+1	+1	+1	y_1
2	+1	0	–1	0	0	+1	y_2
3	+1	+1	–1	-1	+1	+1	y_3
4	+1	–1	0	0	+1	0	y_4
5	+1	0	0	0	0	0	y_5
6	+1	+1	0	0	+1	0	y_6
7	+1	–1	+1	-1	+1	+1	y_7
8	+1	0	+1	0	0	+1	y_8
9	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_9

В общем случае ПФЭ 3^k содержит $N=3^k$ опытов. С ростом числа факторов количество опытов резко возрастает. Так при k=3 их 27, а число коэффициентов b — 10, при k=5 число опытов 243, а коэффициентов 21.
В связи с этим осуществить ПФЭ для планов второго порядка не только сложно, но и нецелесообразно.

ЦЕНТРАЛЬНО КОМПОЗИЦИОННЫЕ ПЛАНЫ (ЦКП)

Сократить число опытов можно воспользовавшись так называемым композиционным или последовательным планом, разработанным Боксом и Уилсоном.

Они обосновали возможность использования схем, в которых план типа ПФЭ 2^k (при $k<5$) или ДФЭ 2^{k-1} (при $k\geq5$) используемый в качестве «ядра», дополняется 2k «звездными» точками (по две на каждый фактор), и n_0 опытами в центре плана (если ранее проведены параллельные опыты, n_0 можно принять равным 1).

Расстояние от центра плана до звездной точки называется звездным плечом.

Общее количество опытов с использованием звездных точек составляет

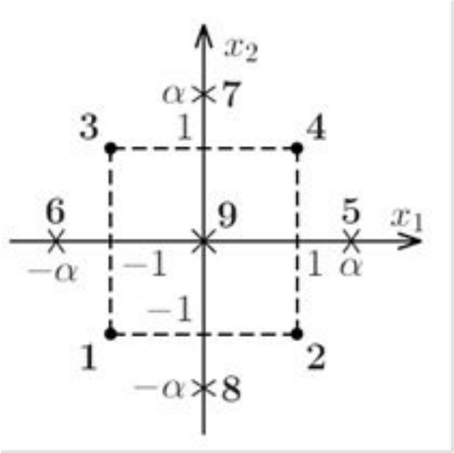
$$N = N_1 + 2k + n_0$$

где $N_1 = 2^{k-p}$ – число опытов в ядре плана

ЦЕНТРАЛЬНО КОМПОЗИЦИОННЫЕ ПЛАНЫ (ЦКП)

На рисунке показано расположение точек факторного пространства такого плана для двух входных переменных: 1…4 – точки «ядра»; 5…8 – «звездные» точки; 9 – центральная точка

Номер опыта	X_0	X_1	X_2	X_1X_2	X_1^2	X_2^2	y	Примечание
1	+1	–1	–1	+1	+1	+1	y_1	Ядро плана ПФЭ 2^2
2	+1	+1	–1	–1	+1	+1	y_2	
3	+1	–1	+1	–1	+1	+1	y_3	
4	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_4	
5	+1	–α	0	0	α^2	0	y_5	Звездные точки
6	+1	+α	0	0	α^2	0	y_6	
7	+1	0	–α	0	0	α^2	y_7	
8	+1	0	+α	0	0	α^2	y_8	
9	+1	0	0	0	0	0	y_9	Центр плана



ЦЕНТРАЛЬНО КОМПОЗИЦИОННЫЕ ОРТОГОНАЛЬНЫЕ ПЛАНЫ (ЦКОП)

В общем виде такой план ***неортогонален***, так как, например

$$\sum_{j=1}^{n} X_{ij} X_{ij}^2 \neq 0$$

Приведём его к ортогональному виду, для чего введём новые переменные (преобразования для квадратичных эффектов) - **вместо квадратичных членов вводят новые переменные**

$$X_j' = X_j^2 - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} X_{ji}^2 = X_j^2 - \frac{N_1 + 2\alpha^2}{N}$$

Таким образом, вместо квадратичного уравнения получим

$$y = b_0' + \sum_{j=1}^{k} b_j X_j + \sum_{j<t} b_{jt} X_j X_t + \sum_{j=1}^{k} b_{jj}' X_{jj}'$$

ЦЕНТРАЛЬНО КОМПОЗИЦИОННЫЕ ОРТОГОНАЛЬНЫЕ ПЛАНЫ (ЦКОП)

Для получения ортогонального плана величину звездного плеча *α* определяют по формуле

$$\alpha = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\sqrt{NN_1} - N_1\right)}$$

Некоторые значения звёздных плеч в ортогональных планах второго порядка приведены в данной таблице

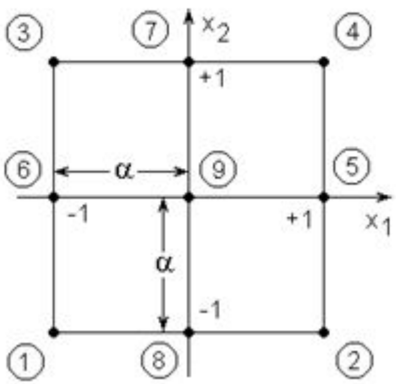
Число опытов в центре плана n_0	Звёздное плечо α при различном числе факторов k			
	$k = 2$	$k = 3$	$k = 4$	$k = 5^*$
1	1,000	1,215	1,414	1,546
2	1,077	1,285	1,471	1,606
3	1,148	1,353	1,546	1,664
4	1,214	1,414	1,606	1,718
5	1,267	1,471	1,664	1,772
6	1,320	1,525	1,718	1,819
7	1,369	1,575	1,772	1,868
8	1,414	1,623	1,819	1,913
9	1,454	1,668	1,868	1,957
10	1,498	1,711	1,913	2,000

* В ядре полуреплики.

ЦЕНТРАЛЬНО КОМПОЗИЦИОННЫЕ ОРТОГОНАЛЬНЫЕ ПЛАНЫ (ЦКОП)

Ортогональный план второго порядка для $k = 2$ и $n_0 = 1$

Номер опыта	X_0	X_1	X_2	X_1X_2	X_1^2	X_2^2	X_1'	X_2'	y	Примечание
1	+1	–1	–1	+1	+1	+1	+1/3	+1/3	y_1	Ядро плана ПФЭ 2^2
2	+1	+1	–1	–1	+1	+1	+1/3	+1/3	y_2	
3	+1	–1	+1	–1	+1	+1	+1/3	+1/3	y_3	
4	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1/3	+1/3	y_4	
5	+1	α=–1	0	0	+1	0	+1/3	-2/3	y_5	Звездные точки
6	+1	α=+1	0	0	+1	0	+1/3	-2/3	y_6	
7	+1	0	α=–1	0	0	+1	-2/3	+1/3	y_7	
8	+1	0	α=+1	0	0	+1	-2/3	+1/3	y_8	
9	+1	0	0	0	0	0	-2/3	-2/3	y_9	Центр плана



ЦЕНТРАЛЬНО КОМПОЗИЦИОННЫЕ ОРТОГОНАЛЬНЫЕ ПЛАНЫ (ЦКОП)

В силу ортогональности матрицы планирования все коэффициенты уравнения регрессии *с* определяются независимо один от другого по формулам.

$$b_0' = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i$$

$$b_j = \frac{1}{N_1 + 2\alpha^2}\sum_{i=1}^{N} X_{ji} y_i$$

$$b_{jt} = \frac{1}{N_1}\sum_{i=1}^{N} X_{ji} X_{ti} y_i$$

$$b_{jj}' = \frac{1}{2\alpha^4}\sum_{i=1}^{N} X_{ji}' y_i$$

ЦЕНТРАЛЬНО КОМПОЗИЦИОННЫЕ ОРТОГОНАЛЬНЫЕ ПЛАНЫ (ЦКОП)

Дисперсии коэффициентов уравнения регрессии следующие:

$$S_{bj}^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2}{\sum_{j=1}^{n}(X_{ij}^2)}$$

$$S'^2_{bj} = \frac{S_{\text{воспр}}^2}{\sum_{j=1}^{n}(X'^2_{ij})}$$

$$S_{bju}^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2}{\sum_{j=1}^{n}(X_{ij}X_{\boldsymbol{iu}})^{\mathbf{2}}}$$

Следует особо отметить, что коэффициенты уравнения регрессии, получаемые с помощью ортогональных планов второго порядка, определяются с разной точностью.

Таким образом эти планы являются ортогональными, но не ротатабельными

ЦЕНТРАЛЬНО КОМПОЗИЦИОННЫЕ ОРТОГОНАЛЬНЫЕ ПЛАНЫ (ЦКОП)

Значимость коэффициентов проверяется по критерию Стьюдента $t_i = \frac{|b_i|}{s_{bi}}$

Коэффициент значим, если $t_i > t_{\propto,m}$, где m – число степеней свободы дисперсии воспроизводимости.

Адекватность уравнения проверяется по критерию Фишера $F = \frac{s_{\text{ад}}^2}{s_{\text{воспр}}^2}$

Уравнение адекватно, если составленное таким образом F-отношение меньше теоретического: $F < F_{\alpha;m1;m2}$, где

$m_1 = n - l$ – число степеней свободы дисперсии адекватности;

m_2 – число степеней свободы дисперсии воспроизводимости для различного числа факторов k

$$l = \frac{(k+2)(k+1)}{2}$$

ПРИМЕР

Необходимо получить квадратичное уравнение регрессии химической реакции, в которой выход продукта реакции y (%) зависит от температуры реакционной смеси x_1 (°C) и концентрации реагента x_2 (%) при x_{01}= 50 °C, Δx_1= 5 °C; x_{02}= 25 %, Δx_2= 1 %.

Решение. Связь между кодированными и натуральными величинами определяется по

$$X_1 = \frac{x_1 - 50}{5} \qquad X_2 = \frac{x_2 - 25}{1}$$

Рассчитаем коэффициенты вспомогательного уравнения

$$y = b_0^{'} + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_{12} X_1 X_2 + b_{11}^{'} X_1^{'} + b_{22}^{'} X_2^{'}$$

Имеем k = 2 фактора. Число опытов в центре плана n_0=1. Общее число опытов. $N = N_1 + 2k + n_0 = 2^2 + 2 \cdot 2 + 1 = 9$

Величина звездного плеча α = 1.

ПРИМЕР

Вспомогательные переменные определим как

$$X_1' = X_1^2 - \frac{2^2 + 2 \cdot 1^2}{9} = X_1^2 - \frac{2}{3} \qquad X_2' = X_2^2 - \frac{2}{3}$$

условия проведения опытов:

Номер опыта	X_0	X_1	X_2	X_1X_2	X_1^2	X_2^2	x_1	x_2	y
1	+1	–1	–1	+1	1/3	1/3	45	24	35,5
2	+1	+1	–1	–1	1/3	1/3	55	24	38,7
3	+1	–1	+1	–1	1/3	1/3	45	26	32,6
4	+1	+1	+1	+1	1/3	1/3	55	26	36,2
5	+1	–1	0	0	1/3	–2/3	45	25	34,1
6	+1	+1	0	0	1/3	–2/3	55	25	37,0
7	+1	0	–1	0	–2/3	1/3	50	24	36,5
8	+1	0	+1	0	–2/3	1/3	50	26	36,3
9	+1	0	0	0	–2/3	–2/3	50	25	37,1

ПРИМЕР

Рассчитаем коэффициенты уравнения регрессии

$$b_0' = \frac{1}{9}(35{,}5 + 38{,}7 + 32{,}6 + 36{,}2 + 34{,}1 + 37{,}0 + 36{,}5 + 36{,}3 + 37{,}1) = 36;$$

$$b_1 = \frac{1}{6}(-35{,}5 + 38{,}7 - 32{,}6 + 36{,}2 - 34{,}1 + 37{,}0 + 0 + 0 + 0) = 1{,}62;$$

$$b_2 = \frac{1}{6}(-35{,}5 - 38{,}7 + 32{,}6 + 36{,}2 + 0 + 0 - 36{,}5 + 36{,}3 + 0) = -0{,}93;$$

$$b_{12} = \frac{1}{4}(35{,}5 - 38{,}7 - 32{,}6 + 36{,}2 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0) = 0{,}1;$$

$$b_{11}' = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{3}35{,}5 + \frac{1}{3}38{,}7 + \frac{1}{3}32{,}6 + \frac{1}{3}36{,}2 + \frac{1}{3}34{,}1 + \frac{1}{3}37{,}0 - \frac{2}{3}36{,}5 - \frac{2}{3}36{,}3 - \frac{2}{3}37{,}1\right) = -0{,}82$$

$$b_{22}' = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{3}35{,}5 + \frac{1}{3}38{,}7 + \frac{1}{3}32{,}6 + \frac{1}{3}36{,}2 - \frac{2}{3}34{,}1 - \frac{2}{3}37{,}0 + \frac{1}{3}36{,}5 + \frac{1}{3}36{,}3 - \frac{2}{3}37{,}1\right) = -0{,}1$$

ПРИМЕР

Уравнение регрессии примет вид

$$y = 36 + 1{,}62X_1 - 0{,}93X_2 + 0{,}1X_1X_2 - 0{,}82X_1^{'} - 0{,}1X_2^{'}$$

в квадратичной форме

$$y = 36 + 1{,}62X_1 - 0{,}93X_2 + 0{,}1X_1X_2 - 0{,}82\left(X_1^2 - \frac{2}{3}\right) - 0{,}1\left(X_2^2 - \frac{2}{3}\right)$$

в натуральных переменных

$$y = 36 + 1{,}62\frac{x_1 - 50}{5} - 0{,}93(x_2 - 25) + 0{,}1\frac{x_1 - 50}{5}(x_2 - 25) - 0{,}82\left(\left(\frac{x_1 - 50}{5}\right)^2 - \frac{2}{3}\right) -$$

$$- 0{,}1\left((x_2 - 25)^2 - \frac{2}{3}\right) = 36 + 0{,}32x_1 - 16{,}2 - 0{,}93x_2 + 23{,}25 + (0{,}02x_1 - 1)(x_2 - 25) -$$

$$- 0{,}033\left(\frac{x_1}{5} - 10\right)^2 + 0{,}55 - 0{,}1(x_2 - 25)^2 + 0{,}07 =$$

$$= 43{,}67 + 0{,}32x_1 - 0{,}93x_2 + (0{,}02x_1 - 1)(x_2 - 25) - 0{,}033\left(\frac{x_1}{5} - 10\right)^2 - 0{,}1(x_2 - 25)^2$$

ИСПОЛЬЗУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. **Математическое моделирование металлургических процессов в АСУ ТП / Н.А. Спирин, В.В. Лавров, В.Ю. Рыболовлев, Л.Ю. Гилева, А.В. Краснобаев, В.С. Швыдкий, О.П. Онорин, К.А. Щипанов, А.А. Бурыкин; под ред. Н.А. Спирина. – Екатеринбург: ООО «УИПЦ», 2014. – 558 с.**