ПРИМЕНЕНИЕ СРЕДСТВ ЭВМ ПРИ ОБРАБОТКЕ ДАННЫХ АКТИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Методы активного эксперимента занимают важное место в деятельности инженера. Их применение позволяет получать математические модели, описывающие свойства широкого класса объектов исследований.

При этом не возникает необходимость в оценке процессов, протекающих внутри объекта. Получение математической модели обеспечивается четким выполнением алгоритма исследований и надежным определением значений функции отклика объекта.

В этом случае задачей исследователя является реализация алгоритма активного эксперимента с помощью различных средств обработки данных.

Выполнение этой задачи позволяет реализовать все этапы работы с математической моделью эксперимента

Цель и задачи работы

Целью работы является ознакомление студентов с использованием вычислительной техники для обработки экспериментальных данных, полученных в результате проведения активного эксперимента при исследовании технологических процессов.

В ходе лабораторной работы студенты должны приобрести навыки использования вычислительной техники и специального программного обеспечения, а именно программных пакетов MathCad, Microsoft Excel, для обработки экспериментальных данных, полученных при проведении полного факторного эксперимента и при ортогональном планировании эксперимента.

При выполнении работы студенты должны научиться работать с полученными математическими моделями.

Перед студентами стоит задача изучения использования средств ЭВМ при проведении методов планирования активного эксперимента применительно к технологическим задачам.

Студенты должны освоить принципы составления матрицы планирования полного факторного эксперимента, проводить расчет коэффициентов регрессии, использовать статистические критерии для оценки однородности, нормальности экспериментальных данных, значимости коэффициентов и адекватности полученной математической модели, а также проводить ее оптимизацию с использованием программных средств.

Теоретическая часть

Планирование эксперимента - это оптимальное (наиболее эффективное) управление ходом эксперимента с целью получения максимально возможной информации на основе минимально допустимого количества опытных данных.

Под экспериментом будем понимать систему операций, воздействий и (или) наблюдений, направленных на получение информации об объекте при исследовательских испытаниях.

Эксперимент, в котором исследователь по своему усмотрению может изменять условия его проведения, называется активным экспериментом.

Эксперимент, при котором уровни факторов в каждом опыте регистрируются исследователем, но не задаются им, является пассивным .

Перед проведением планирования активного эксперимента необходимо собрать дополнительную информацию об исследуемом объекте.

Для получения дополнительной информации можно использовать результаты пассивного эксперимента, осуществлявшегося в предыдущих исследованиях или описанного в литературе.

Планирование эксперимента позволяет варьировать все факторы и получать одновременно оценки их влияния.

При этом важно учитывать следующее:

- стремление к минимизации числа опытов;
- одновременное варьирование всех переменных, определяющих процесс;
- выбор четкой стратегии, позволяющей принимать обоснованные решения после каждой серии экспериментов.

Активные эксперименты обладают следующими достоинствами:

1) результаты наблюдений $y_1, y_2, \ldots, y_n$ представляют собой независимые, нормально распределенные случайные величины;

)дисперсии равны друг другу (выборочные оценки однородны);

3) независимые переменные $x_1, x_2, \ldots, x_p$ измеряются с пренебрежимо малой погрешностью по сравнению с погрешностью в определении y;

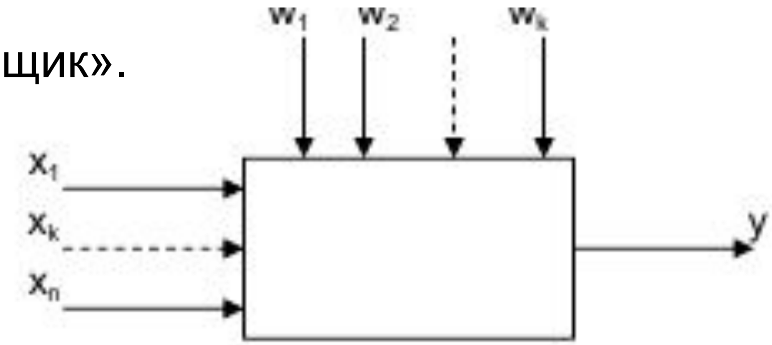
4) активный эксперимент лучше организован: оптимальное использование факторного пространства позволяет при минимальных затратах получить максимум информации об изучаемых явлениях.

При планировании эксперимента удается избежать корреляции между коэффициентами уравнения регрессии.
В случае статистического подхода математическая модель объекта или процесса представляется в виде полинома, т.е. отрезка ряда Тейлора, в который разлагается неизвестная функция

$$y(x_1, \ldots x_k) = b_0 + \sum_{i=1}^{k} b_i x_i + \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{k} b_{ij} x_i x_j + \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j \neq u}}^{k} b_{iju} x_i x_j x_u + \sum_{i=1}^{k} b_{ii} x_i^2 + \ldots$$

где b_0- свободный член; b_i — линейные эффекты; b_{ij} — эффекты парного взаимодействия; b_{ii} — квадратичные эффекты; b_{iju} — эффекты тройного взаимодействия.

Система «Черный ящик».



Объект исследования можно представить в виде системы «черный ящик» (рис.).

Суть системы «черный ящик» состоит в изучении зависимости отклика системы Y на изменение входных измеряемых и управляемых параметров $X(x_1, x_2,\dots, x_n)$ при действии случайных факторов $W(w_1,w_2,\dots, w_k)$, которые называют «шумом» объекта.
Комплекс параметров X называют основным, он определят условия эксперимента.

Выходным параметром Y может являться любые технологические или технические показатели исследуемого процесса.

Случайным будет считаться любой фактор, не вошедший в основной комплекс входных параметров

Полный факторный эксперимент

При полном факторном эксперименте полученное уравнение регрессии принимает вид полинома первой степени

$$y(x_1,\ldots\ x_k) = b_0 + \sum_{i=1}^{k} b_i x_i + \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq j}}^{k} b_{ij} x_i x_j + \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq j\neq\ldots\neq n}}^{k} b_{ijn} x_i x_j \ldots\ x_n$$

Уровни факторов для ПФЭ представляют собой границы исследуемой области по выбранному параметру (минимальное и максимальное значение фактора).

Зная максимальное z^i_{max} и минимальное z^i_{min} значения технологического параметра (фактора) можно определить координаты центра плана, так называемый основной уровень z^i_0, а также интервал (шаг) варьирования Δz_i :

$$z_i^0 = \frac{z_i^{max} + z_i^{min}}{2}, z_i = \frac{z_i^{max} - z_i^{min}}{2}$$

где i=1, 2, 3, … , k,

где k – число факторов.

От систем координат $z_1, \ldots, z_k$ необходимо перейти к новой безразмерной системе координат $x_1, \ldots, x_k$ с помощью линейного преобразования:

$$x_i = \frac{z_i - z_i^0}{\Delta z_i}, \qquad \text{где } i=1, 2, 3, \ldots, k.$$

При планировании по схеме полного факторного эксперимента (ПФЭ) реализуются все возможные комбинации факторов на всех выбранных для исследования уровнях.

Количество опытов N при ПФЭ определяется по формуле:

$N=n^k$, где n- количество уровней.

В таблице представлена расширенная матрица планирования для двухфакторного полнофакторного эксперимента с использованием безразмерной системой координат.

Любой коэффициент уравнения регрессии b_j определяется скалярным произведением столбца y на соответствующий столбец x_j, отнесенным к числу опытов в матрице планирования N:

$$b_j = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_{ij} y_j$$

Расширенная матрица планирования полного факторного эксперимента 2^2

Номер опыта	x0	x1	x2	x1x2	y
1	2	3	4	6	10
1	1	-1	-1	1	У1
2	1	1	-1	-1	У2
3	1	-1	1	-1	У3
4	1	1	1	1	У4

Расширенная матрица планирования полного факторного эксперимента 2^2

Номер опыта	x0	x1	x2	x1x2	y
1	2	3	4	6	10
1	1	-1	-1	1	У1
2	1	1	-1	-1	У2
3	1	-1	1	-1	У3
4	1	1	1	1	У4

Для изучения зависимости соотношения между теплотой сгорания угля от зольности и содержания серы был проведен полный факторный эксперимент 2^2.

Каждый опыт повторялся два раза. Определить уравнение регрессии в безразмерном масштабе.

1.Ввод начальных данных — минимальные и максимальные значения входящих параметров, в данном случае — зольности (z1) и содержания серы (z2), вычисление основного уровня (z0) и интервала варьирования (Δz).(рис.)

	A	B	C	D	E
1	Вычисление основного уровня				
2					
3	Z1 max	80	Z1-0	50	(B3+B4)/2
4	Z1 min	20	Δz1	30	B3-D3
5	Z1 max	11,34	Z2-0	10,545	
6	Z2 min	9,75	Δz2	0,795	
7					
8					

- Расчет основного уровня и интервала варьирования.

Составление матрицы планирования ПФЭ.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	Вычисление основного уровня								
2									
3	Z1 max	80	Z1-0	50	(B3+B4)/2				
4	Z1 min	20	Δz1	30	B3-D3				
5	Z2 max	11,34	Z2-0	10,545					
6	Z2 min	9,75	Δz2	0,795					
7									
8									
9–10	Номер	Факторы в натуральном масштабе		факторы в безразмерной системе координат			Выходной параметр		
11	опыта	z1	z2	x0	x1	x2	y1	y2	yср
12	1	80	11,34	0	1	1	86,1	82,2	84,15
13	2	20	9,75	0	-1	-1	60,6	62,5	61,55
14	3	80	9,75	0	1	-1	71,8	73,9	72,85
15	4	20	11,34	0	-1	1	83,7	81,9	82,8

Составление матрицы планирования ПФЭ

Вычисление основного уровня				
Z1 max	80	Z1-0	50	(B3+B4)/2
Z1 min	20	Δz1	30	B3-D3
Z2 max	11,34	Z2-0	10,545	
Z2 min	9,75	Δz2	0,795	

Номер опыта	Факторы в натуральном масштабе		факторы в безразмерной системе координат			Выходной параметр		
	z1	z2	x0	x1	x2	y1	y2	yср
1	80	11,34	0	1	1	86,1	82,2	84,15
2	20	9,75	0	-1	-1	60,6	62,5	61,55
3	80	9,75	0	1	-1	71,8	73,9	72,85
4	20	11,34	0	-1	1	83,7	81,9	82,8

Номер опыта	x1	x2	x1x2	yср	x1*yср	x2*yср	x1x2yср
1	1	1	1	84,15	84,15	84,15	84,15
2	-1	-1	1	61,55	-61,55	-61,55	61,55
3	1	-1	-1	72,85	72,85	-72,85	-72,85
4	-1	1	-1	82,8	-82,8	82,8	-82,8
∑				301,35	12,65	32,55	-9,95

Вычисление коэффициентов регрессии для ПФЭ.

b0	75,3375
b1	3,1625
b2	8,1375
b12	-2,4875

$$b_j = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_{ij} y_j$$

После того как получено уравнение регрессии, построим линии равного уровня. Для этого выразим x_2 через значения x_1:

$$x_2 = (y - b_0 - b_1 \cdot x_1)/(b_2 + b_{12} \cdot x_1)/$$

Номер опыта	Факторы в натуральном масштабе		факторы в безразмерной системе координат			Выходной параметр		
	z1	z2	x0	x1	x2	y1	y2	ycp
1	80	11,34	0	1	1	86,1	82,2	84,15
2	20	9,75	0	-1	-1	60,6	62,5	61,55
3	80	9,75	0	1	-1	71,8	73,9	72,85
4	20	11,34	0	-1	1	83,7	81,9	82,8

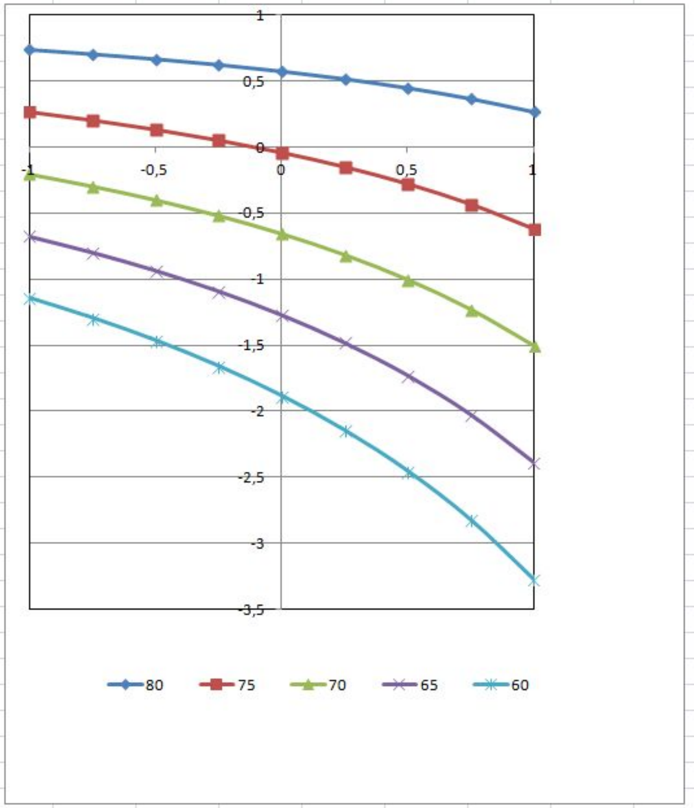
Номер опыта	x1	x2	x1x2	ycp	x1*ycp	x2*ycp	x1x2ycp
1	1	1	1	84,15	84,15	84,15	84,15
2	-1	-1	1	61,55	-61,55	-61,55	61,55
3	1	-1	-1	72,85	72,85	-72,85	-72,85
4	-1	1	-1	82,8	-82,8	82,8	-82,8
Σ				301,35	12,65	32,55	-9,95

Вычисление коэффициентов регрессии для ПФЭ.

b0	75,3375
b1	3,1625
b2	8,1375
b12	-2,4875

$$b_j = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_{ij} y_j$$

	80	75	70	65	60
-1	0,736471	0,265882	-0,20471	-0,67529	-1,14588
-0,75	0,703218	0,203374	-0,29647	-0,79631	-1,29616
-0,5	0,665556	0,132578	-0,4004	-0,93338	-1,46636
-0,25	0,622547	0,05173	-0,51909	-1,0899	-1,66072
0	0,572965	-0,04147	-0,65591	-1,27035	-1,88479
0,25	0,515177	-0,1501	-0,81538	-1,48067	-2,14595
0,5	0,446963	-0,27833	-1,00363	-1,72892	-2,45422
0,75	0,365222	-0,43199	-1,2292	-2,02641	-2,82362
1	0,265487	-0,61947	-1,50442	-2,38938	-3,27434



Ортогональное планирование

При описании области, близкой к экстремуму, чаще других применяют полиномы второго порядка, что связано в первую очередь с тем, что полиномы второго порядка легко поддаются систематизации и исследованию на экстремум.

При этом число опытов N должно быть не меньше числа определяемых коэффициентов в уравнении регрессии второго порядка для k факторов:

$$y(x_1, \ldots x_k) = b_0 + \sum_{i=1}^{k} b_i x_i + \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{k} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{k} b_{ii} x_i^2 .$$

Для описания поверхности отклика полиномами второго порядка независимые факторы должны принимать не менее трех разных значений.

С целью сокращения числа опытов используют композиционные (последовательные) планы.

Композиционный план состоит из экспериментов ПФЭ 2k ($k \le 5$), к которым добавляют эксперимент в центре плана и в 2k звездных точках, расположенных на осях фиктивного пространства, координаты которых: $(\pm\alpha,0,\ldots,0)$, $(0,\pm\alpha,0,\ldots,0)$, …, $(0,\ldots,0,\pm\alpha)$, где α - расстояние от центра плана до звездной точки – «звездного плеча».

Общее количество опытов рассчитывается по формуле :

$$N=N_0+2k+n_0,$$

где n_0- количество опытов в центре плана, k – число факторов, N_0 – число опытов полного факторного эксперимента 2k .

Композиционные планы легко приводятся к ортогональным выбором звездного плеча α. Длина «звездного плеча» α рассчитывается по формуле:

$$\alpha = \sqrt{\frac{\sqrt{N_0 N} - N_0}{2}}$$

Значение «звездного плеча» зависит от числа полных повторений эксперимента
в центре плана (N=9).

Композиционный план второго порядка для двух факторов

Номер опыта	Факторы в натуральном масштабе		Факторы в условных единицах		у
	Z_1	Z_2	X_1	X_2	
1	min Z_1	min Z_2	-1	-1	$У_1$
2	max z_1	min Z_2	+1	-1	$У_2$
3	min z_1	max Z_2	-1	+ 1	$У_3$
4	max z_1	max Z_2	+1	+ 1	$У_4$
5	0 z_1	0 Z_2	0	0	$У_5$
6	+α z_1	0 Z_2	+1	0	$У_6$
7	-α z_1	0 Z_2	-1	0	$У_7$
8	0 z_1	+α Z2	0	+1	$У_8$
9	0 Z_1	-α Z_2	0	-1	$У_9$

В таблице представлен композиционный план второго порядка для двух факторов.

Для того, чтобы матрица планирования обладала свойством ортогональности, необходимо ввести столбцы с корректированными значениями уровня x′, которые вычисляются по формуле :

$$\left(x_i'\right)^2 = x_i^2 - \frac{\sum x_i^2}{N}$$

Матрица расчетов коэффициентов уравнения представлена в таблице, в которой столбцы 2-7 представляют собой ортогональную матрицу планирования, столбец 8 – значения отклика системы; первые четыре опыта – это матрица полного факторного эксперимента 22.

Экспериментальные данные должны быть однородными и нормально распределенными.

В соответствии с данными таблицы рассчитывают коэффициенты уравнения регрессии. Величины коэффициентов уравнения регрессии характеризуют вклад каждого фактора в значение функции отклика.

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_1'	x_2'	x_1x_2	y
1	2	3	4	5	6	7	8
1	+1	-1	-1	+0,33	+0,33	+1	$У_1$
2	+1	+1	-1	+0,33	+0,33	-1	$У_2$
3	+1	-1	+1	+0,33	+0,33	-1	$У_3$
4	+1	+1	+1	+0,33	+0,33	+1	$У_4$
5	+1	0	0	-0,67	-0,67	0	$У_5$
6	+1	+1	0	+0,33	-0,67	0	$У_6$
7	+1	-1	0	+0,33	-0,67	0	$У_7$
8	+1	0	+1	-0,67	+0,33	0	$У_8$
9	+1	0	-1	-0,67	+0,33	0	$У_9$
X	9	6	6	2	2	4	

Коэффициенты рассчитываются по следующим формулам

$$b_1 = \frac{\sum(x_1 y)}{6} \qquad b_2 = \frac{\sum(x_2 y)}{6} \qquad b_{11} = \frac{\sum((x_1')^2 y)}{2} \qquad b_{22} = \frac{\sum((x_2')^2 y)}{2}$$

$$b_{12} = \frac{\sum(x_1 x_2 y)}{4} \qquad b_0 = \frac{\sum(x_0 y)}{9} - 0{,}67 b_{11} - 0{,}67 b_{22}$$

Пример расчета активного эксперимента при ортогональном планировании с помощью MathCad.

$$M1 := \begin{pmatrix} 20 & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\ 80 & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\ 20 & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\ 80 & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\ 50 & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\ 80 & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\ 20 & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\ 50 & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \\ 50 & \blacksquare & \blacksquare & \blacksquare \end{pmatrix}$$

[Ctrl + 6]

$x1 := M1^{\langle 3 \rangle}$

$x2 := M1^{\langle 4 \rangle}$

$$\left(x_i'\right)^2 = x_i^2 - \frac{\sum x_i^2}{N}$$

$$x1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad x2 = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$N = 9$

$$X1i := x1^2 - \frac{\sum_{i=1}^{N} \left[\prod^{j\,:=\,1} (x1)^2\right]_i}{N} \qquad X2i := x2^2 - \frac{\sum_{i=1}^{N} \left[\prod (x2)^2 1\right]_i}{N}$$

$aa1 := \left(x1^2\right)$ $\quad aa2 := \left(x2^2\right)$ $\quad aa3 := X1i^2$ $\quad aa4 := X2i^2$

$$b1 := \frac{\sum_{i=1}^{N} \left(x1_i \, Y_i\right)}{\sum_{k=1}^{N} aa1_k} \qquad b2 := \frac{\sum_{i=1}^{N} \left(x2_i \, Y_i\right)}{\sum_{k=1}^{N} aa2_k} \qquad b11 := \frac{\sum_{i=1}^{N} \left(X1i_i \, Y_i\right)}{\sum_{k=1}^{N} aa3_k} \qquad b22 := \frac{\sum_{i=1}^{N} \left(X2i_i \, Y_i\right)}{\sum_{k=1}^{N} aa4_k}$$

$b1 = -1.055$ $\quad b2 = 4.322$ $\quad b11 = -0.102$ $\quad b22 = 0.048$

$$b0 := \frac{\sum_{i=1}^{N} \left(\left(Y_i\right)\right)}{N} - 0.67 \cdot b11 - 0.67 \cdot b22$$

$$b12 := \frac{\sum_{i=1}^{N} \left(x1_i \, x2_i \cdot Y_i\right)}{\left[\sum_{k=1}^{N} \left(aa3_k\right)\right] \cdot \left[\sum_{k=1}^{N} \left(aa4_k\right)\right]}$$

$b0 = 75.408$

$b12 = 8.138$