Методология научных исследований

Планирование экспериментов

Планирование эксперимента и его задачи.
Виды экспериментов

Планирование эксперимента –
это процедура выбора числа и условий проведения опытов, необходимых и достаточных для решения поставленной задачи с требуемой точностью

При этом необходимо придерживаться следующих ограничений:

1. общее число опытов должно быть по возможности минимальным;

2. необходимо одновременно изменять все переменные, определяющие(влияющие)процесс, по определенным правилам–алгоритмам;

3. при описании исследований необходимо использовать математический аппарат, формализующий действия экспериментатора;

КЛАССИФИКАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

В зависимости от условий эксперименты делятся на несколько видов:

1) промышленный –это эксперимент, поставленный в условиях предприятия с целью улучшения производства;

2) научно-исследовательский –эксперимент, поставленный в научно-исследовательских лабораториях с целью исследования нового или улучшения существующего процесса, явления;

3) лабораторный - эксперимент, поставленный в научно исследовательских лабораториях с целью изучения хорошо известного, существующего процесса, явления;

4) оптимальный (экстремальный) – эксперимент, поставленный с целью поиска наиболее оптимальных условий его реализации. С математической точки зрения, это эксперимент по поиску экстремумов некоторой функции, отсюда и второе название эксперимента;

5) пошаговый – эксперимент, состоящий из отдельных серий опытов. Причем условия проведения каждой следующей серии определяются результатами предыдущих.

6) активный - эксперимент, в ходе которого экспериментатор имеет возможность изменять и/или поддерживать на заданном уровне сколь угодно долго значения параметров, задающих условия проведения эксперимента;

7) пассивный - эксперимент, в ходе которого экспериментатор НЕ имеет такой возможности

Планирование оптимальных экспериментов

Факторы, параметры оптимизации и модели

Выбор факторов, параметров оптимизации и моделей осуществляется с учетом цели исследований и имеющихся условий для проведения эксперимента.

Факторы могут быть: количественными и качественными.

Количественные факторы - переменные величины, которые можно оценивать количественно — измерять, взвешивать и т. д.

Качественные — переменные, характеризующиеся качественными свойствами (разные вещества, аппараты, исполнители и т. п.).

Качественные факторы не имеют числовых измерений. Однако их изменение можно представить в виде условной числовой шкалы, устанавливая соответствие между уровнями качественного фактора и числами натурального ряда.

Факторы должны быть: совместимыми и независимыми.

Совместимость - безопасностная осуществимость всех запланированных комбинаций факторов.

Независимость - возможность установления факторов на любом уровне вне зависимости от уровней других факторов.

Параметр оптимизациии

- характеристика цели исследования (выходной параметр), заданная количественно.

Параметр оптимизации еще называют (критерием оптимизации, целевой функцией).

Из многих параметров, характеризующих объект исследования, только один может служить параметром оптимизации.

Цель исследования должна допускать количественную оценку этого параметра. Остальные же рассматриваются как ограничения.

Множество значений, которые принимает параметр оптимизации, называется областью его определения. Области определения могут быть дискретными и непрерывными.(обычно дискретные).

Классификация параметров оптимизации:

Параметр оптимизации (отклик)– величина, описывающая результат проведенного эксперимента и зависящая от факторов, влияющих на эксперимент

1Экономические:прибыль,себестоимость, рентабельность, затраты на эксперимент

2 Технико-экономические: производительность, коэффициент полезного действия; стабильность, надежность, долговечность

3 Технико-технологические : физические, механические, физико-химические, медико-биологические характеристики продукта, выход продукта.

Данная категория параметров оптимизации оценивает качество выпускаемой продукции.

4 Прочие: психологические, эстетические, статистические параметры оптимизации.

С ростом сложности объекта растет и психологическая нагрузка на исполнителя, отчего очень сильно может измениться качество продукции. Эстетические же параметры прежде всего учитываются в вопросах повышения реализации.

Требования к параметрам оптимизации.

Параметр оптимизации должен быть:

1 количественным и однозначным, т.е.задаваться одним числом и это число (значение параметра оптимизации) должно соответствовать, с точностью до ошибки эксперимента, заданному набору уровней факторов

Исследователь должен иметь возможность его измерять при любом фиксированном наборе уровней факторов. Измеряют параметр оптимизации либо соответствующим прибором, либо используют прием, называемый ранжированием (оценка баллами) , т.е. качественным величинам присваивают количественные значения.

2 эффективным ,т.е. определяться с наибольшей возможной точностью.

3 универсальным и полным, т.е. всесторонне характеризовать объект исследования.

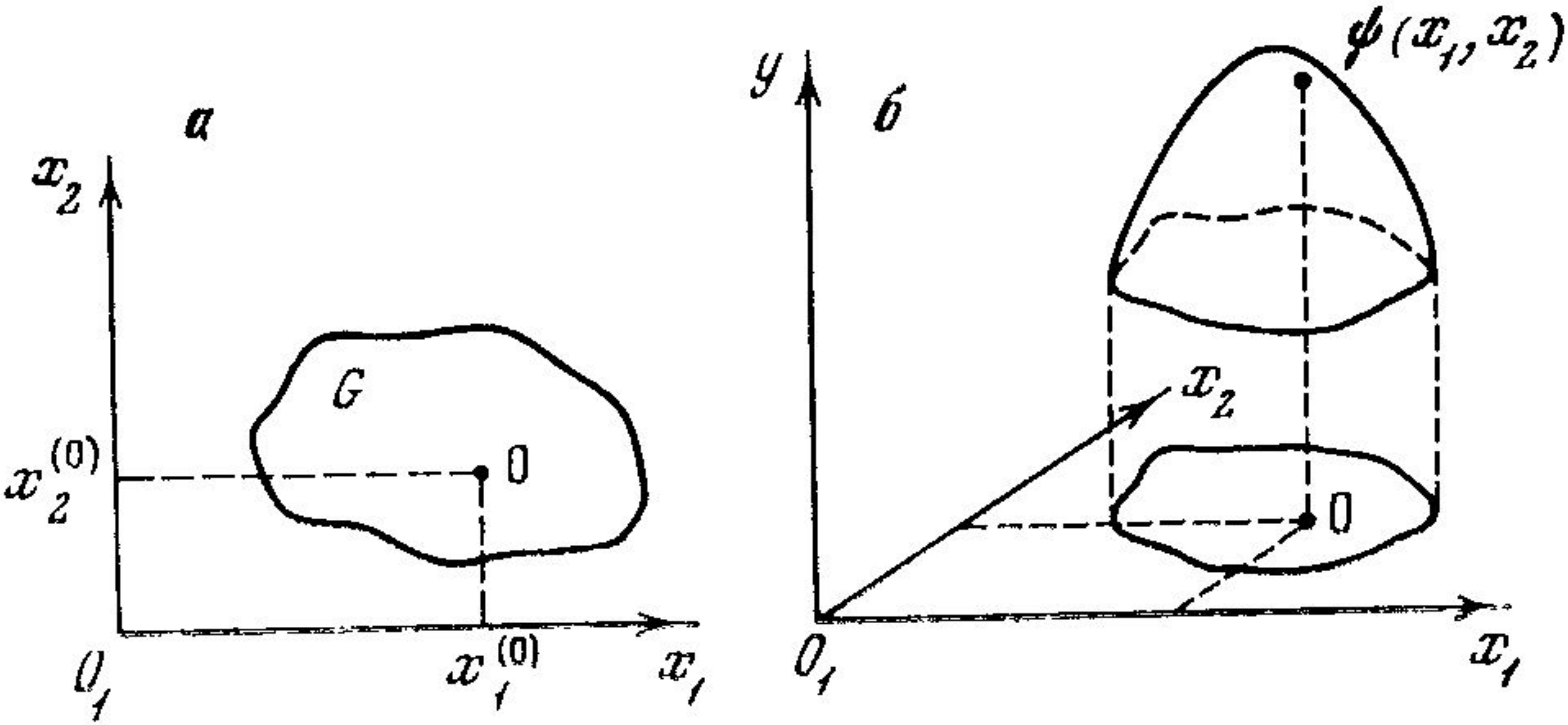
4 иметь физическим смысл, быть простым и легко вычисляемым.

5 существовать для всех состояний системы.

.

Факторное пространство и поверхность отклика

Каждому фиксированному набору уровней факторов соответствует определенная точка в многомерном пространстве факторов, называемом факторным пространством, а набор значений параметра оптимизации в пространстве– поверхность отклика



Факторное пространство (а) и поверхность отклика (б)

Математические модели

Связь между уровнями факторов и реакцией (откликом) системы описывают математическими моделями вида:

$$yi = Фi(x1+x2+\ldots+xl)$$

Функцию Фi называют функцией отклика, а ее геометрический образ — поверхностью отклика.

Цель эксперимента – найти функцию отклика.

Т.к. вид этой функции неизвестен, то получают приближенные уравнения.

Эксперимент необходимо поставить так, чтобы при минимальном количестве опытов, варьируя значения независимых переменных по специальным правилам, построить математическую модель системы и найти оптимальные значения свойств системы.

Требования к модели:

адекватность, содержательность, простота и др.

Адекватность - способность модели предсказывать результаты эксперимента в некоторой области с требуемой точностью.

Содержательность – способность хорошо объяснять уже известные факты, выявлять неизвестные и выдвигать перед исследователями новые проблемы.

Одним из главных достоинств модели должна быть ее **простота.**

В зависимости от постановки задачи могут применяться различные модели (полиномиальные, неполиномиальные, модели дисперсионного анализа и др.)

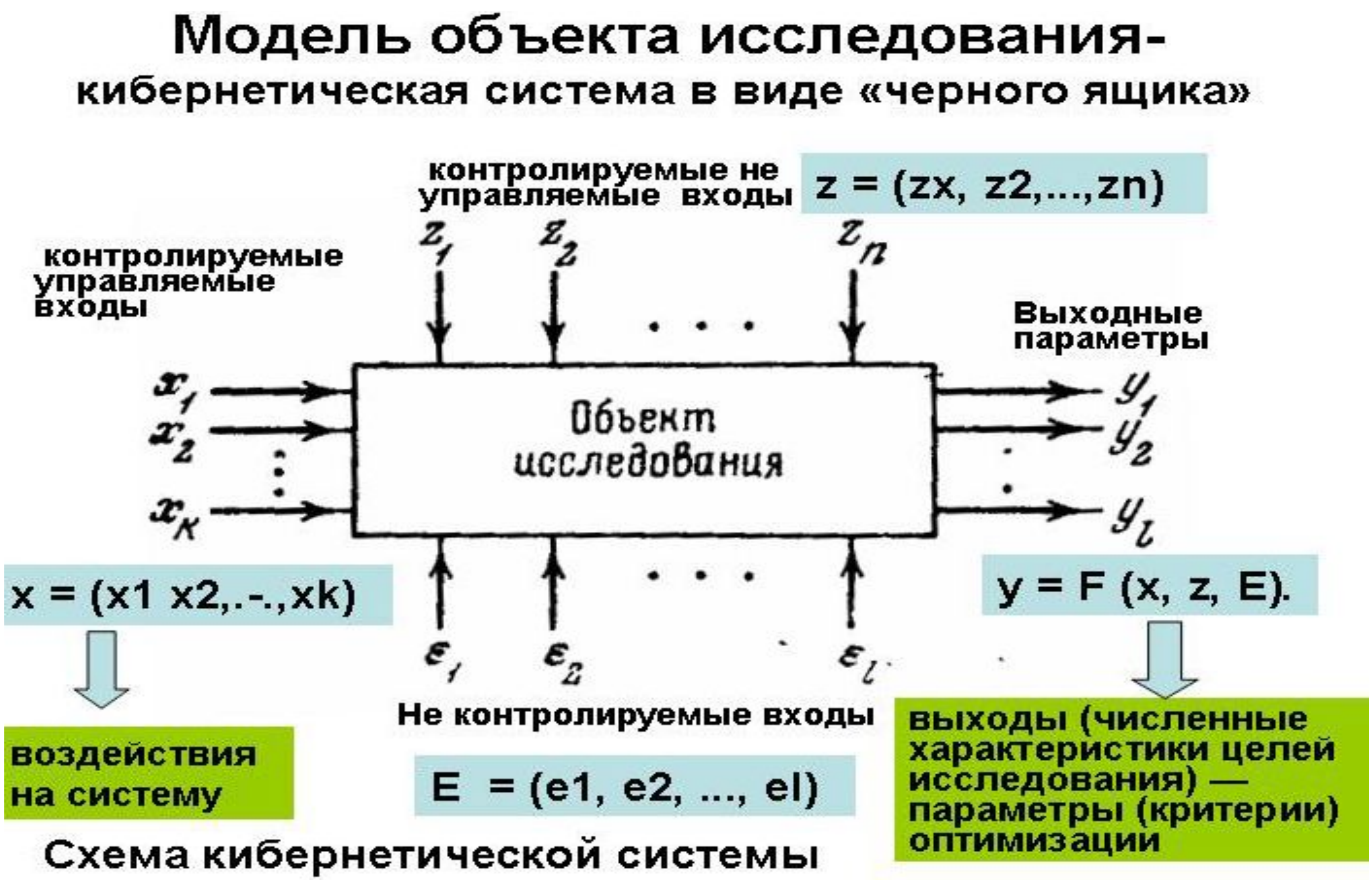
Для экстремального эксперимента в виде **алгебраических полиномов** степени **d** от **к** переменных:

$$\eta = \tilde{b}_0 + \sum_{1 \leqslant i \leqslant k} \tilde{b}_i x_i + \sum_{1 \leqslant i \leqslant j \leqslant k} \tilde{b}_{ij} x_i x_j + \ldots$$

$$\ldots + \sum_{\substack{i_1,\, i_2, \ldots,\, i_k \\ \sum i_j = d}} \tilde{b}_{i_1 i_2 \ldots i_k} x_1^{i_1} x_2^{i_2} \ldots x_k^{i_k},$$

Основные понятия
математического планирования эксперимента (МПЭ)

Основа МПЭ - представление объекта исследования как кибернетической системы, моделью которой является схема, изображенная на рисунке и называемая «черным ящиком».



Планирование эксперимента

Поскольку полином* содержит C^d_{k+d} коэффициентов, подлежащих определению, план D должен содержать по крайней мере C^d_{k+d} различных экспериментальных точек

$$D = \left\| \begin{matrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{k1} \\ x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{k2} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ x_{1N} & x_{2N} & \cdots & x_{kN} \end{matrix} \right\| ,$$

где x_{iu} — значения, которые принимает i-я переменная в u-м опыте (i- 1,2, ..., к; и u - 1,2,..., N).

Реализовав опыты в N точках, получим вектор наблюдений, следующего вида, где Уu — отклик, соответствующий u-той точке плана .

$$Y = \left\| \begin{matrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{matrix} \right\| ,$$

Планирование эксперимента для линейного приближения по-поверхности отклика.

Вначале выбирают локальную область факторного пространства (область определения).
Здесь нужно: оценить границы областей определения факторов, либо по ограничениям значений факторов, либо технико-экономическими соображениями (стоимость сырья, время ведения процесса и др.), либо условиями проведения процесса (существующая аппаратура, технология и др.) на основе анализа априорной информации об изменении параметра оптимизации и о кривизне поверхности отклика.

После выбора области определения G (рис. 3,а) необходимо найти локальную подобласть для планирования эксперимента.

Процедура выбора этой подобласти включает выбор основного (нулевого) уровня фактора (соответствующего наилучшим условиям) и интервалов варьирования.

На выбор интервалов варьирования накладываются естественные ограничения (верхний или нижний уровни не должны выходить за область определения).

Первый этап планирования эксперимента для получения линейной модели основан на варьировании факторов на двух уровнях: xiв и xiн , симметрично расположенных относительно нулевого (основного) уровня xi0 (рис. 4, а).или в безразмерном виде - кодах: +1,0,-1
Переход от исходных (натуральных) переменных xi к безразмерным кодированным, осуществляют по формуле

$$\tilde{x}_i = \frac{x_i - x_i^{(0)}}{p_i} \qquad (i = 1, 2, \ldots, k),$$

где x_i — значение натуральной независимой переменной; $x_i^{(0)}$ — нулевой уровень; $p_i = (x_i^{(\text{в})} - x_i^{(\text{н})})/2$ — интервал варьирования

Расположение экспериментальных точек с координатами +1 и -1 при полном факторном эксперименте (ПФЭ) для двух исследуемых факторов приведено на рис. 4, а для трех — на рис. 5. точки

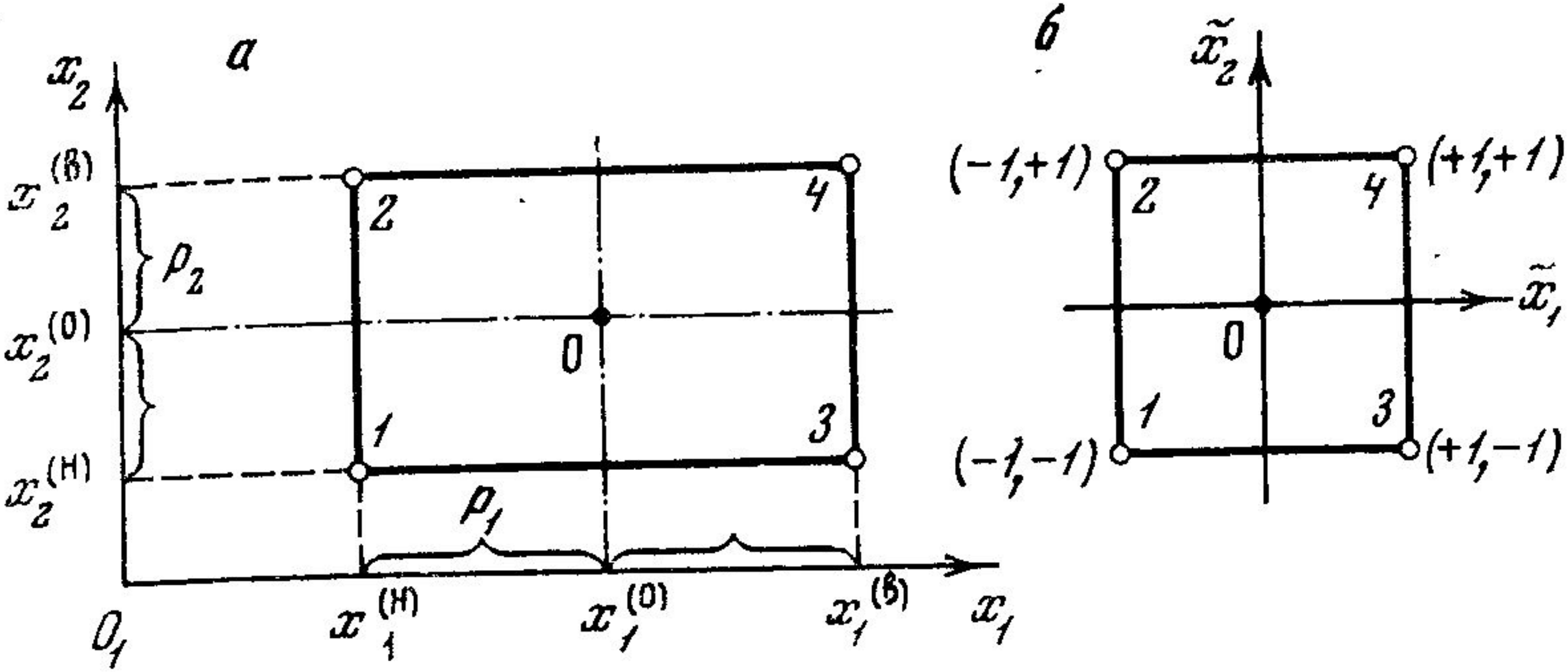


Рис. 4. Геометрическая интерпретация полного факторного эксперимента 2^2

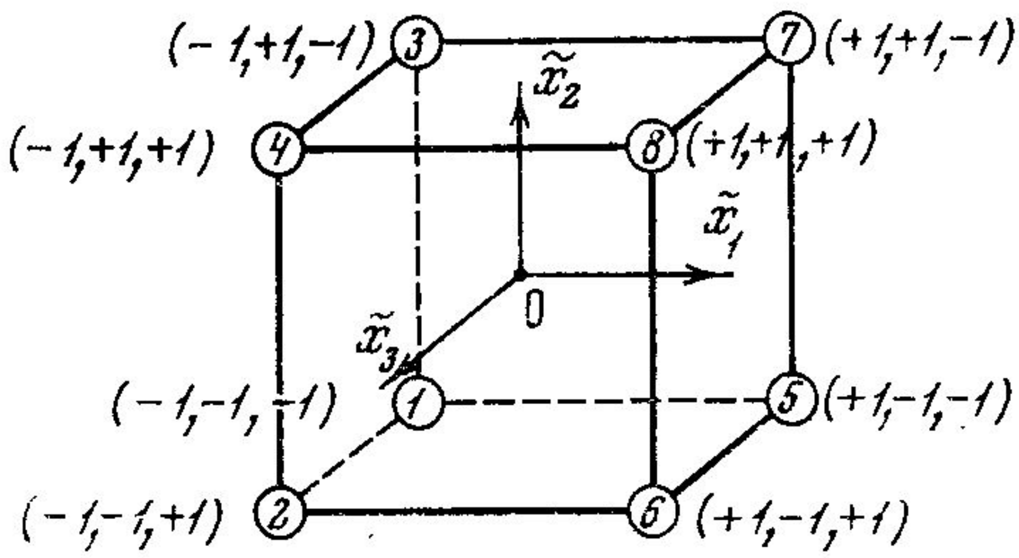


Рис. 5. Геометрическая интерпретация полного факторного эксперимента 2^3

Выписывая комбинации уровней факторов для каждой экспериментальной точки квадрата, изображенного на рис. 4, б, получим план D полного факторного эксперимента(ПФЭ) типа 2^2 (табл. 1.1) и для куба — план D типа 2^3 (рис. 5, табл. 1.2).

Таблица 1.1

План полного факторного эксперимента 2^2

Номер опыта	$\tilde{x}_1$	$\tilde{x}_2$	Обозначение строк
1	—1	—1	(1)
2	—1	+1	b
3	+1	—1	a
4	+1	+1	ab

Таблица 1.2

План полного факторного эксперимента 2^3

Номер опыта	$\tilde{x}_1$	$\tilde{x}_2$	$\tilde{x}_3$	Обозначение строк
1	—1	—1	—1	(1)
2	—1	—1	+1	c
3	—1	+1	—1	b
4	—1	+1	+1	bc
5	+1	—1	—1	a
6	+1	—1	+1	ac
7	+1	+1	—1	ab
8	+1	+1	[illegible]	[illegible]

Для оценки свободного члена bo (ожидаемого отклика в центре плана) и определения эффектов взаимодействия b_{12}, b_{13}, ..., b_{123}, ... план эксперимента D расширяют до так называемой матрицы планирования X добавлением соответствующего «фиктивной переменной» единичного столбца X0 и столбцов произведений X_1X_2, X_1X_3, X_2,X_3, $X_1X_2X_3$….. (см., например, табл. 1.3).

Таблица 1.3

Матрица полного факторного эксперимента 2^3

Номер опыта	$\tilde{x}_0$	План			$\tilde{x}_1\tilde{x}_2$	$\tilde{x}_1\tilde{x}_3$	$\tilde{x}_2\tilde{x}_3$	$\tilde{x}_1\tilde{x}_2\tilde{x}_3$	**Y** Отклик
		$\tilde{x}_1$	$\tilde{x}_2$	$\tilde{x}_3$					
1	+1	—1	—1	—1	+1	+1	+1	—1	y_1
2	+1	—1	—1	+1	+1	—1	—1	+1	y_2
3	+1	—1	+1	—1	—1	+1	—1	+1	y_3
4	+1	—1	+1	+1	—1	—1	+1	—1	y_4
5	+1	+1	—1	—1	—1	—1	+1	+1	y_5
6	+1	+1	—1	+1	—1	+1	—1	—1	y_6
7	+1	+1	+1	—1	+1	—1	—1	—1	y_7
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	[illegible]	[illegible]

Реализация эксперимента

1 Подсчитывают количество исходного сырья и его подготавливают. Сырье должно быть однородным. Если нет однородности , то сырье разбивают на партии, а матрицу планирования на соответствующие блоки или применяют планы для условий неоднородности.

2 Приступают непосредственно к проведению эксперимента.

Реализуют в каждой точке плана несколько параллельных опытов. При этом параллельные результаты будут не идентичны из-за ошибки опыта (ошибки воспроизводимости). Знание ошибки воспроизводимости необходимо для анализа данных эксперимента. Дисперсия воспроизводимости, характеризующая ошибку опыта, определяется по формуле

$$s\{y\} = \sqrt{s^2\{y\}} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{r_v} (y_{vj} - \bar{y}_v)^2}{r_v - 1}}.$$

$$f = (r_v - 1)$$

— число степеней свободы, равное количеству опытов минус единица.

$$\bar{y}_v = \frac{\sum_{j=1}^{r_v} y_{vj}}{r_v}$$

среднее арифметическое значений параметров оптимизации в v-ой точке плана;

Результат (r + 1)-го опыта отбрасывается, если

$$y_{r+1} - \bar{y} \geqslant t' s^2 \{y\}.$$

Значения дпя t' для различных α и ρ приведены в специальных таблицах

Значения *t*-критерия

Фрагмент таблицы

Число степеней свободы	Уровень значимости				
	0,10	0,05	0,02	0,01	0,001
1	6,31	12,71	31,82	63,66	636,62
2	2,92	4,30	6,97	9,93	31,60
3	2,35	3,18	4,54	5,84	12,94
4	2,13	2,78	3,75	4,60	8,61
5	2,02	2,57	3,37	4,03	6,86

Реализовав параллельные опыты в точках плана и определив соответствующие значения s2 {y}, следует убедиться в однородности дисперсий, т. е. в том, что среди всех дисперсий нет таких, которые бы значительно превышали все остальные.
Требование однородности дисперсий является одним из требований регрессионного анализа, и поэтому проверке однородности дисперсий следует уделять должное внимание.
Для сравнения двух дисперсий применяется F-критерий (критерий Фишера), представляющий отношение большей дисперсии к меньшей. Согласно критерию Фишера гипотеза об однородности двух дисперсий s21 {y} и s22 {y} (s21 {y} > s22 {y}) определенных с f1 и f2 степенями свободы соответственно, не отвергается, если расчетное отношение Fp = s21 {y} / s22{y} не превышает табличного значения Fτ для числа степеней свободы f1 и f2 и для уровня значимости α (обычно α= 0,05).
Таблица F-критерия приводятся в справочной литературе, а для уровня значимости α= 0,05 приведена ниже.

Значения F-критерия для уровня значимости α=0,05 (фрагмент)

Число степеней свободы для знаменателя	Число степеней свободы для числителя														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	15	20	24
1	161	200	216	225	230	234	237	239	241	242	243	244	246	248	249
2	18,5	19,0	19,2	19,2	19,3	19,3	19,4	19,4	19,4	19,4	19,4	19,4	19,4	19,4	19,5
3	10,1	9,55	9,28	9,12	9,10	8,94	8,89	8,85	8,81	8,79	8,76	8,74	8,70	8,66	8,64
4	7,71	6,94	6,59	6,39	6,26	6,16	6,09	6,04	6,00	5,96	5,94	5,91	5,86	5,80	5,77
5	6,61	5,79	5,41	5,19	5,05	4,95	4,88	4,82	4,77	4,74	4,71	4,68	4,62	4,56	4,53
6	5,99	5,14	4,76	4,53	4,39	4,28	4,21	4,15	4,10	4,06	4,03	4,00	3,94	3,87	3,84
7	5,59	4,74	4,35	4,12	3,97	3,87	3,79	3,73	3,68	3,64	3,60	3,57	3,51	3,44	3,41
8	5,32	4,46	4,07	3,84	3,69	3,58	3,50	3,44	3,39	3,35	3,31	3,28	3,22	3,15	3,12
9	5,12	4,26	3,86	3,63	3,48	3,37	3,29	3,23	3,18	3,14	3,10	3,07	3,01	2,94	2.90
10	4,96	4,10	3,71	3,48	3,33	3,22	3,14	3,07	3,02	2,98	2,94	2,91	2,85	2,77	2,74
11	4,84	3,98	3,59	3,36	3,20	3,09	3,01	2,95	2,90	2,85	2,82	2,79	2,72	2,65	2,61
12	4,75	3,89	3,49	3,26	3,11	3,00	2,91	2,85	2,80	2,75	2,72	2,69	2,62	2,54	2,51
13	4,67	3,81	3,41	3,18	3,03	2,92	2,83	2,77	2,71	2,67	2,63	2,60	2,53	2,46	2,42
14	4,60	3,74	3,34	3,11	2,96	2,85	2,76	2,70	2,65	2,60	2,57	2,53	2,46	2,39	2,35
15	4,54	3,68	3,29	3,06	2,90	2,79	2,71	2,64	2,59	2,54	2,51	2,48	2,40	2,33	2,29
16	4,49	3,63	3,24	3,01	2,85	2,74	2,66	2,59	2,54	2,49	2,46	2,42	2,35	2,28	2,24
17	4,45	3,59	3,20	2,96	2,81	2,70	2,61	2,55	2,49	2,45	2,41	2,38	2,31	2,23	2,19
18	4,41	3,55	3,16	2,93	2,77	2,66	2,58	2,51	2,46	2,41	2,37	2,34	2,27	2,19	2,15
19	4,38	3,52	3,13	2,90	2,74	2,63	2,54	2,48	2,42	2,38	2,34	2,31	2,23	2,16	2,11
20	4,35	3,49	3,10	2,87	2,71	2,60	2,51	2,45	2,39	2,35	2,31	2,28	2,20	2,12	2,08
22	4,30	3,44	3,05	2,82	2,66	2,55	2,46	2,40	2,34	2,30	2,26	2,23	2,15	2,07	2,03
24	4,26	3,40	3,01	2,78	2,62	2,51	2,42	2,36	2,30	2,25	2,21	2,18	2,11	2,03	1,98

Проверка значимости отличия откликовYmax и Ymin

Вычислив средние значения откликов для каждой точки плана, можно проверить, значимо ли отличаются друг от друга Ymax и Ymin.
Значимость различия двух средних можно проверить с помощью t-критерия (критерия Стьюдента) по формуле:

$$t_p = (\bar{y}_{max} - \bar{y}_{min})/(s^2\{y\}\sqrt{1/r_{max} + 1/r_{min}}).$$

Средние значимо не отличаются, если экспериментальное значение t -критерия не превосходит табличного t_T (см.таблицу) для f = r max + r min степеней свободы и обычно 5%-ного уровня значимости, т. е. вероятность того, что при f = r max + r min степенях свободы значение величины t будет больше по абсолютной величине, чем t_T, уровня значимости равного 0,05. Если значение t меньше табличного, то с вероятностью Р ~ 1 — а = 0,95 можно считать, что разницы между результатами двух опытов нет.

Обработка результатов эксперимента

Метод наименьших квадратов — эффективный и простой способ получения оценок коэффициентов регрессии, если независимые переменные x достаточно точно поддерживаются на определенных уровнях, а наблюдаемые значения отклика –y_1, y_2, ..., y_N по данным N опытов плана D представляют собой независимые и нормально распределенные случайные величины.

Полученный в результате опытов ограниченный статистический материал дает возможность определить лишь оценки b_0, b_l .. ..., $b_к$' теоретических коэффициентов регрессии b_0, b_1 ..., $b_к$ в уравнении (*), справедливых для некоторой гипотетической совокупности, состоящей из всех мыслимых опытов. Тогда уравнение регрессии,полученное на основании N опытов, запишется следующим образом:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + \dots + b_{k'} x_{k'}, \quad **$$

где y — значение выхода, предсказанное уравнением для ряда входных условий.

Согласно методу наименьших квадратов находятся такие значения оценок bi величин $\tilde{b}_i$, которые минимизируют сумму квадратов отклонений (невязок) εи опытных точек от величин, предсказанных регрессионным уравнением (**), т. е. минимизирующие функцию

$$G = \sum_{u=1}^{N} \varepsilon_u^2 = \sum_{u=1}^{N} \left(y_u - \sum_{i=0}^{k} b_i x_{iu}\right)^2.$$

Пример. Получение математической модели, описывающей зависимость средних значений площадей поперечных сечений единичных срезов   от условий реализации операции шлифования (интенсивности съема Q=vд□t, характеризуемой углом атаки □; структуры шлифовального круга - № структуры; зернистости круга -№ зернистисти).

Предположим, что для описания зависимости выходного параметра Y от трех независимых факторов X1, X2, X3 достаточно неполного полинома третьей степени:

$$y = b0\ x0 + b1\ x1 + b2\ x2 + b3\ x3 + b12\ x1\ x2 + b13\ x1\ x3 + b23\ x2\ x3 + b123\ x1\ x2\ x3;$$

где b0 – свободный член, а b0, b1, b2… b123 -коэффициенты регрессионного уравнения;

x1, x2, x3 – псевдокоординаты факторных переменных X1, X2, X3 соответственно, принимающие значения -1 или +1, под которыми закодировано максимальное и минимальное значение фактора

После проведения эксперимента в точках плана и получения всех значений выходного параметра (Y_1, … Y_8) коэффициенты b_0, b_1 …b_{123} рассчитываются как среднее значение выходных параметров, взятых со знаком столбца сочетания факторов, соответствующих вычисляемому коэффициенту. Так, например, коэффициент b_{12} определяется по формуле:

Для проверки адекватности полученной матмодели ставятся эксперименты в дополнительных одной-трех точках плана (на рис. 6 это точки 9 и 10), называемых проверочными. Полученные в этих точках экспериментальные значения выходного параметра сравниваются по известному алгоритму с рассчитанными для этих же условий по регрессионному уравнению и делается заключение о пригодности данной матмодели для дальнейшего исследования.

Матрица планирования эксперимента 2^3

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1 x_2 *	X_1 * x_3	x_2 x_3 *	x_1 x_2 * x_3	Y	Scp, мкм
1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	y_1	67,4
2		+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	Y_2	421,4
3		-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	Y_3	81,2
4		+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	Y_4	507,7
5		-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	Y_5	4,8
6		+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	Y_6	30,6
7		-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	Y_7	6,0
8		+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	Y_8	37,0

Значения площадей сечения единичного среза

№* зернистости	№ структуры*	“Угол атаки” □				
		0,0004º	0,0053 º	0,0102 º	0,0151 º	0,0200 º
16(160)	6(0,5)	4,8	25,0	42,2	53,4	67,4
	9(0.44)	5,2	27,2	43,0	58,2	73,3
	12(0,38)	6,0	30,1	50,9	66,4	81,2
25(250)	6(0,5)	11,6	61,1	103,1	130,5	164,6
	9(0.44)	13,1	66,4	112,0	142,1	178,9
	12(0,38)	14,4	73,6	124,2	162,2	198,3
40(400)	6(0,5)	30,6	156,4	263,9	334,6	421,4
	9(0.44)	33,5	170,0	286,8	363,7	458,0
	12(0,38)	37,0	188,4	317,9	415,2	507,7

** В скобках указаны: размеры зерен dз (мкм), соответствующие № зернистости и объемные доли зерна Кз в круге, соответствующие номеру № его структуры* план эксперимента.

Факторы: зернистость круга dз – X**1**; № структуры круга – X**2**; угол атаки ω –X**3** и составим матрицу плана полнофакторного

№ опыта	x_0	Значения факторов в кодах			Натуральные значения факторов			Значение отклика Y(Scp)
		x_1	x_2	x_3	dз	№	ω	
1	+1	-1	-1	+1	16	6	0,02	67,4
2		+1	-1	+1	40	6	0,02	421,4
3		-1	+1	+1	16	12	0,02	81,2
4		+1	+1	+1	40	12	0,02	507,7
5		-1	-1	-1	16	6	0,0004	4,8
6		+1	-1	-1	40	6	0,0004	30,6
7		-1	+1	-1	16	12	0,0004	6,0
8		+1	+1	-1	40	12	0,0004	37,0
9		0	0	0	25	9	0,102	112,0/144

Значения коэффициентов полинома

Коэффициенты	b_0	b_1	b_2	b_3	b_{12}	b_{13}	b_{23}	b_{123}
Значения	144,5	104,7	13,5	125	9,7	90,5	11,6	8,4

полином

$$y = 144{,}5\,x_0 + 104{,}7x_1 + 13{,}5x_2 + 125\,x_3 + 9{,}7\,x_1\,x_2 + 90{,}5x_1\,x_3 + 11{,}6x_2\,x_3 + 8{,}4x_1\,x_2\,x_3;$$

Далее осуществляется проверка адекватности полинома

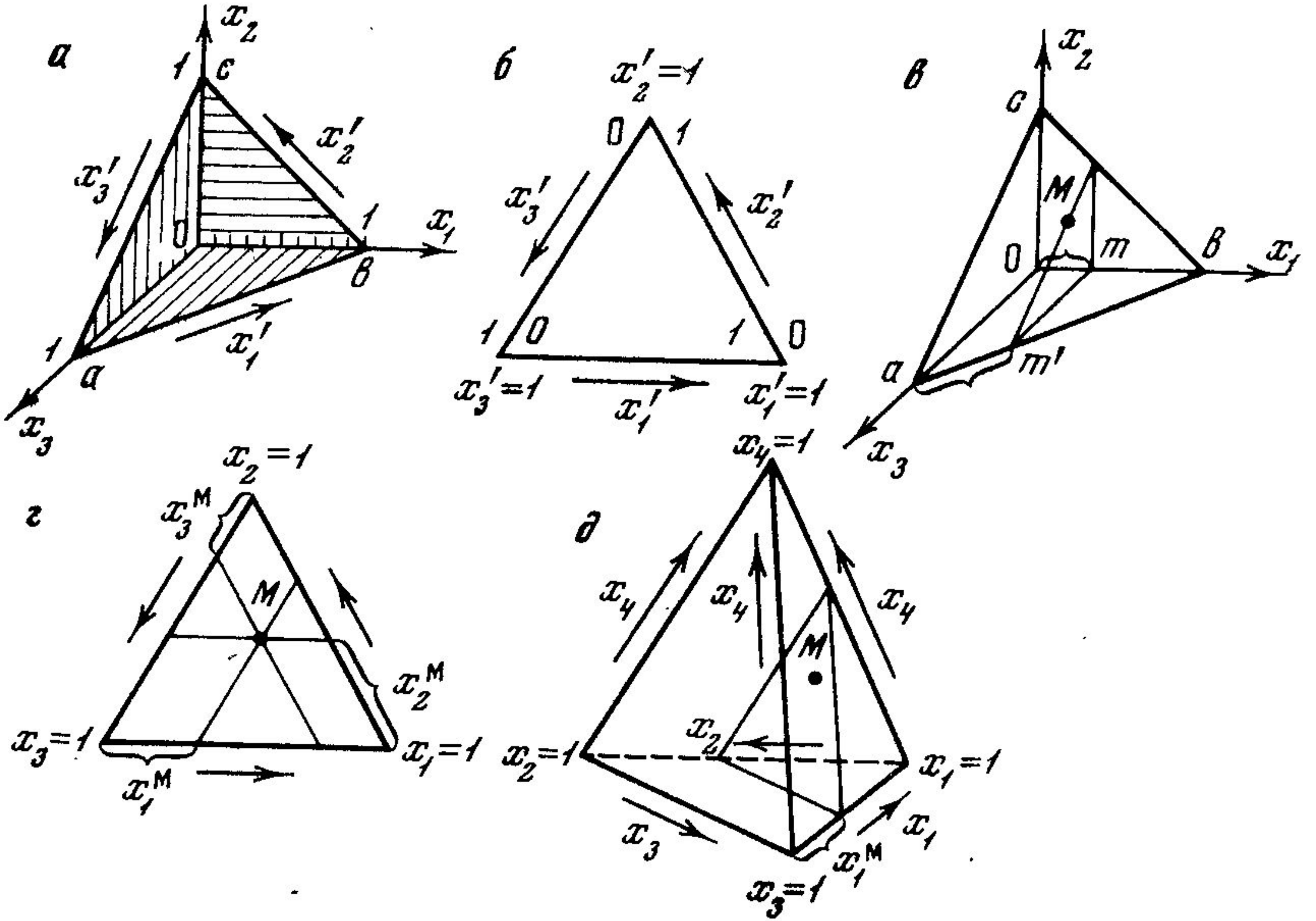
Планирование эксперимента на диаграммах состав—свойство

Переменные xi (i = 1, 2, . . ., q) таких систем являются пропорциями (относительным содержанием) i-х компонентов смеси и удовлетворяют условию

$$*** \quad \sum_{1 \leqslant i \leqslant q} x_i = 1 \qquad (x_i \geqslant 0).$$

Геометрическое место точек, удовлетворяющих условию нормированности суммы переменных (***), представляет собой (q — 1)- мерный правильный симплекс (треугольник для q = 3, тетраэдр для q = 4 и т. д.). Каждой точке такого симплекса соответствует смесь определенного состава.

Переход к симплексной системе координат



Каноническая форма полинома степе- степени n (Шеффе)

$$\hat{y} = \sum_{1 \leqslant i \leqslant q} \beta_i x_i + \sum_{m=2}^{n} \left\{ \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \beta_{ij}^{(m)} x_i x_j (x_i - x_j)^{m-2} \right\} +$$

$$+ \sum_{m=3}^{n} \left\{ \sum_{1 \leqslant i_1 < i_2 < \ldots < i_m \leqslant q} \beta_s x_{i_1}^{s_1} x_{i_2}^{s_2} \ldots x_{i_m}^{s_m} \right\},$$

где $s_2 + \ldots + s_m = n.$

Полиномы такого вида (так называемые приведенные полиномы) получаются из обычных полиномов * соответствующей степени для q переменных введением соотношения **

*

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{1 \leqslant i \leqslant k} b_i x_i + \sum_{1 \leqslant i \leqslant j \leqslant k} b_{ij} x_i x_j + \ldots$$

$$\ldots + \sum_{\substack{i_1, i_2, \ldots, i_k \\ \Sigma i_j = d}} b_{i_1 i_2 \ldots i_k} x_1^{i_1} x_2^{i_2} \ldots x_k^{i_k},$$

**

$$\boxed{\sum_{1 \leqslant i \leqslant q} x_i = 1}$$

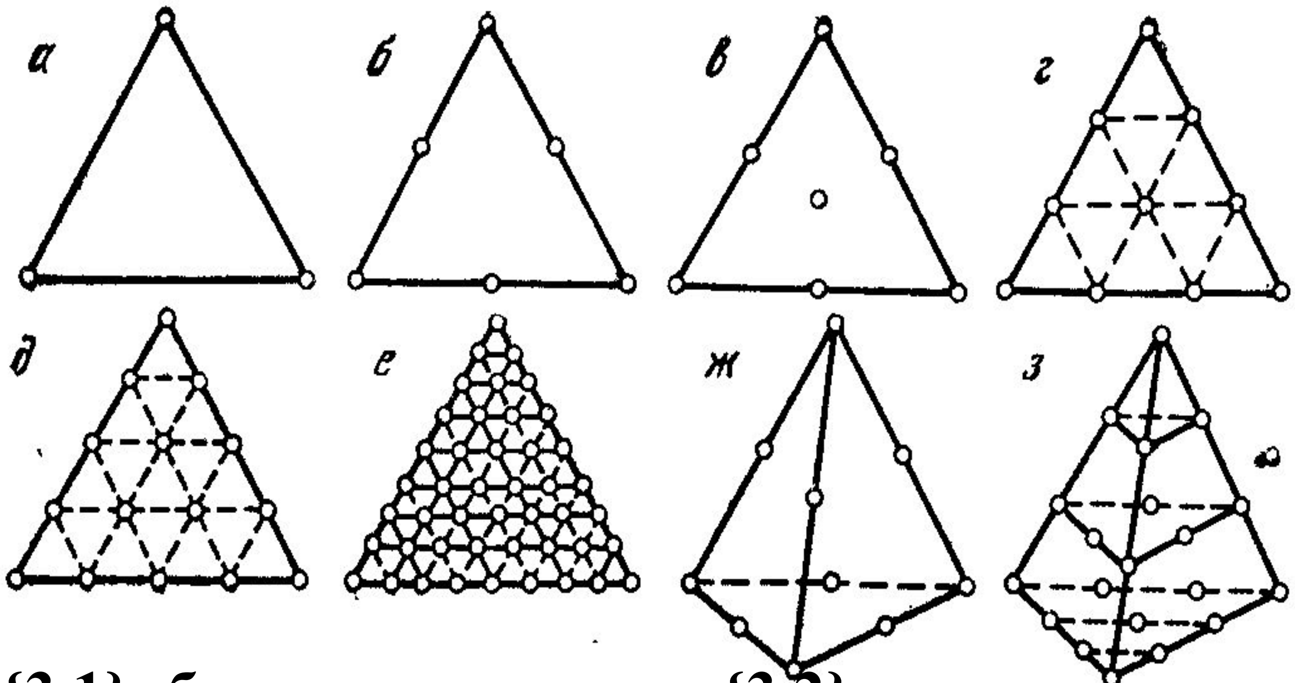
например, полином второй степени в общем случае имеющий вид

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + \\ + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{33}x_3^2,$$

в приведенной форме с учетом условия $x_1 + x_2 + x_3 = 1$

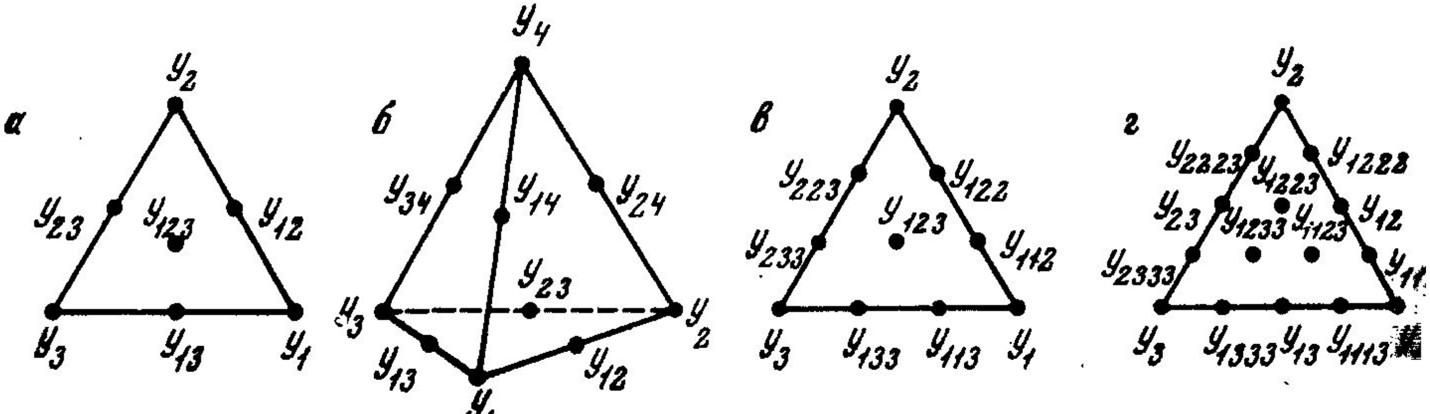
запишется $\hat{y} = \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \beta_3x_3 + \beta_{12}x_1x_2 + \beta_{13}x_1x_3 + \beta_{23}x_2x_3.$

Для оценки коэффициентов приведенного полинома были предложены планы Точками таких планов являются узлы {q, n}-симплексных реше-решеток



q **= 3: а — линейная {3,1}; б — квадратичная {3,2}; в — неполно-кубическая; г — кубическая 3,3); 9 — четвертой степени {3,4};**

Для оценки коэффициентов аппроксимирующего полинома степени n во всех точках плана, соответствующих узлам {q, n}-решетки, реализуются опыты и определяются отклики системы y.



Обозначение откликов в точках симплексных решеток

Номер опыта	План			Отклик	Номер опыта	План			Отклик
	x_1	x_2	x_3			x_1	x_2	x_3	
1	1	0	0	y_1	6	0	$1/3$	$2/3$	y_{233}
2	0	1	0	y_2	7	$2/3$	$1/3$	0	y_{112}
3	0	0	1	y_3	8	$2/3$	0	$1/3$	y_{113}
4	$1/3$	$2/3$	0	y_{122}	9	0	$2/3$	$1/3$	y_{223}
5	$1/3$	0	$2/3$	y_{133}	10	$1/3$	$1/3$	$1/3$	y_{123}

Обозначение откликов в матрице планирования для {3, 3}-ре

формулы для оценки коэффициентов приведенных полиномов

Для n ≤ 4 они имеют вид: Модель первого порядка:

для трехкомпонентной смеси:

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3,$$

где $\beta_1 = y_1, \ \beta_2 = y_2, \ \beta_3 = y_3;$

для q-компонентной смеси $\hat{y} = \sum_{1 \leqslant i \leqslant q} \beta_i x_i,$ **где** $\beta_i = y_i.$

Модель второго порядка: Для трехкопонентной смеси

$$\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3,$$

где $\beta_1 = y_1; \quad \beta_2 = y_2; \quad \beta_3 = y_3;$

$\beta_{12} = 4y_{12} - 2y_1 - 2y_2, \ \beta_{13} = 4y_{13} - 2y_1 - 2y_3; \ \beta_{23} = 4y_{23} - 2y_2 - 2y_3;$

для q -компонентной смеси

где $\hat{y} = \sum_{1 \leqslant i \leqslant q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant q} \beta_{ij} x_i x_j,$

$\beta_i = y_i,$

$\beta_{ij} = 4y_{ij} - 2y_i - 2y_j.$

Формулы для расчета дисперсии значений исследуемого свойства :

для квадратичной модели

$$\sigma^2\{\hat{y}\} = \sigma^2\{y\}\left[\sum_{1\leqslant i\leqslant q}\frac{a_i^2}{r_i} + \sum_{1\leqslant i<j\leqslant q}\frac{a_{ij}^2}{r_{ij}}\right],$$

где

$$a_i = x_i(2x_i - 1), \qquad a_{ij} = 4x_ix_j.$$

для неполной кубической модели

$$\sigma^2\{\hat{y}\} = \sigma^2\{y\}\left[\sum_{1\leqslant i\leqslant q}\frac{b_i^2}{r_i} + \sum_{1\leqslant i<j\leqslant q}\frac{b_{ij}^2}{r_{ij}} + \sum_{1\leqslant i<j<k\leqslant q}\frac{b_{ijk}^2}{r_{ijk}}\right],$$

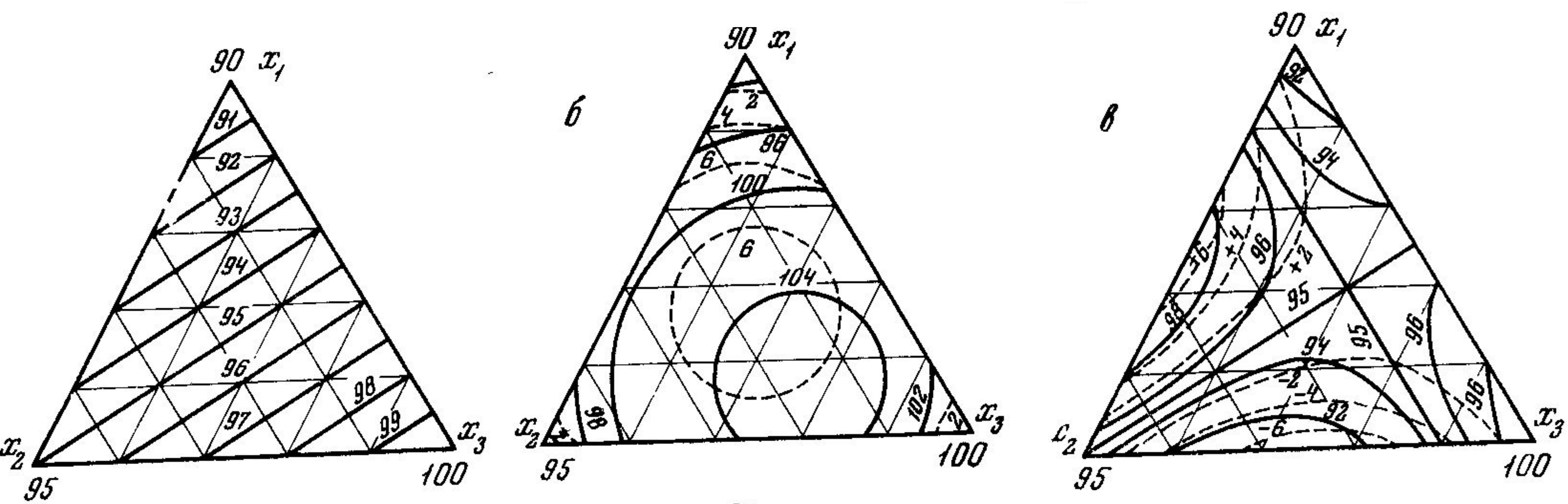
где

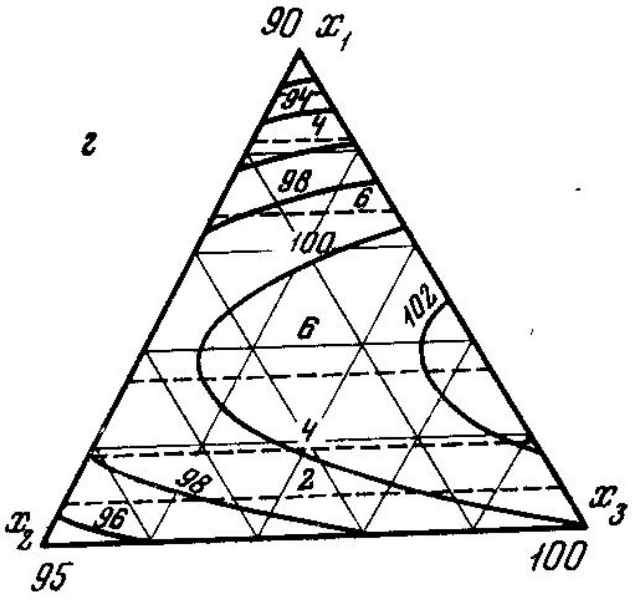
$$b_i = \frac{1}{2}x_i(6x_i^2 - 2x_i + 1) - 3\sum_{1\leqslant j\leqslant q}x_j^2,$$

$$b_{ij} = 4x_ix_j(3x_i + 3x_j - 2),$$

$$b_{ijk} = 27x_ix_jx_k,$$

Контурные кривые поверхностей отклика, описываемые моделями 2-го порядка





а — $\hat{y} = 90x_1 + 95x_2 + 100x_3$; б — $\hat{y} = 90x_1 + 95x_2 + 100x_3 + 27x_1x_2 + 27x_1x_3 + 27x_2x_3$; в — $\hat{y} = 90x_1 + 95x_2 + 100x_3 + 27x_1x_2 + 0\cdot x_1x_3 - 27x_2x_3$; г — $\hat{y} = 90x_1 + 95x_2 + 100x_3 + 27x_1x_2 + 27x_1x_3 + 0\cdot x_2x_3$;

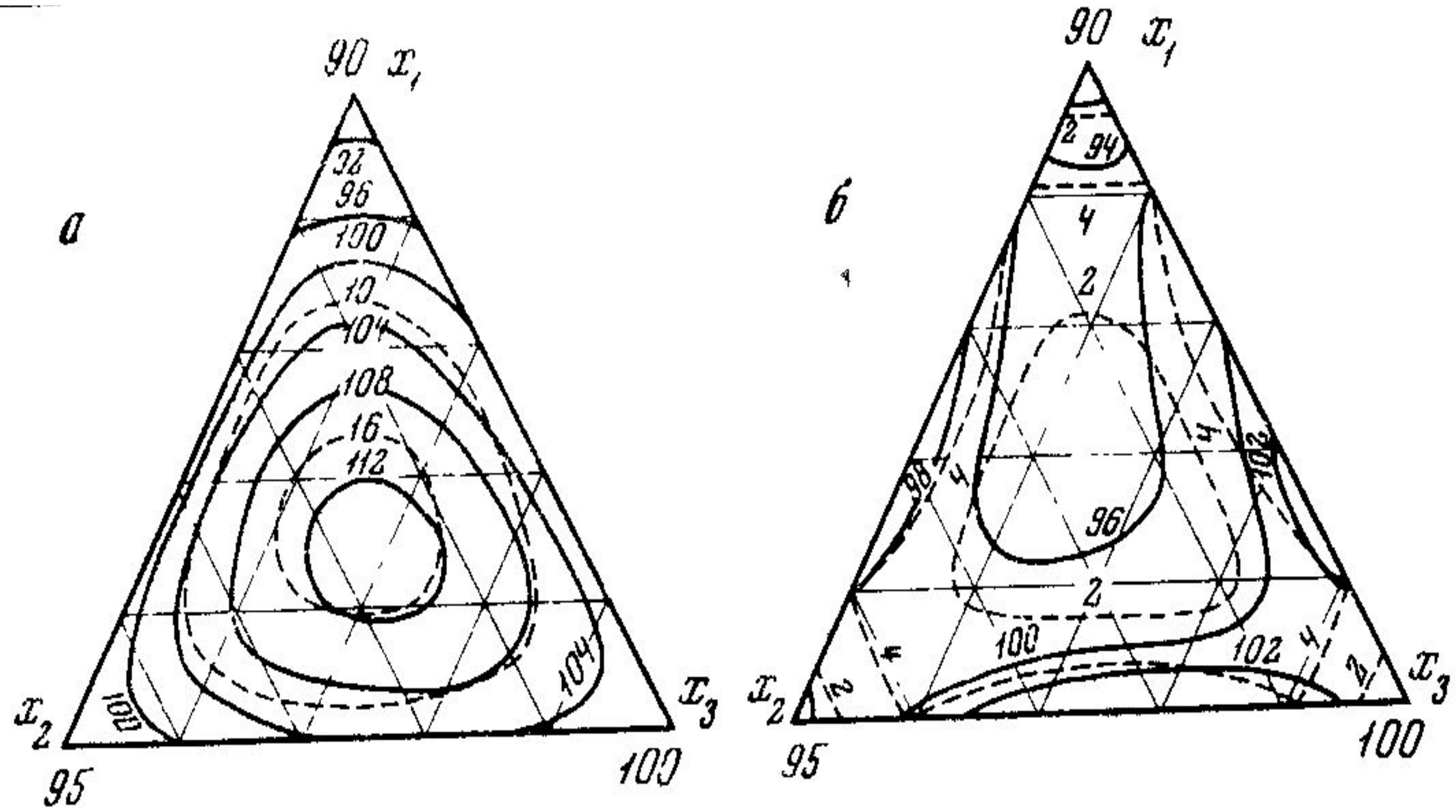


Рис. 30. Контурные кривые поверхностей отклика, описываемых неполными кубичными уравнениями [250]

$a - \hat{y} = 90x_1 + 95x_2 + 100x_3 + 27x_1x_2 + 27x_1x_3 + 27x_2x_3 + 243x_1x_2x_3;$

$б - \hat{y} = 90x_1 + 95x_2 + 100x_3 + 27x_1x_2 + 27x_1x_3 + 27x_2x_3 - 243x_1x_2x_3$

Статистическая обработка результатов и оценка адекватности модели осуществляется по обычным алгоритмам