

ПЛАНЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Композиционные планы Бокса-
Уилсона

Линейная математическая модель, описывающая зависимость отклика «у» от факторов x_j , довольно часто оказывается неадекватной эксперименту. В этом случае линейность зависимости теряется. Тогда следует переходить к полиномиальной модели второго порядка.

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_k x_k + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + \dots + b_{(k-1)k} x_{k-1} x_k + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + \dots + b_{kk} x_k^2$$

или в свернутом виде:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{z=1}^k b_{jz} x_j x_z + \sum_{j=1}^k b_{jj} x_j^2 \quad \text{где } k\text{-число факторов } 1 \leq j < z \leq k \quad (1)$$

Для построения такой модели для каждого из факторов надо провести

Число коэффициентов l в полиноме второго порядка

$$l = k + 1 + k + C_k^2 \quad (2)$$

, k - коэффициенты при x_j в первой степени,

k - коэффициенты при квадратичных членах,

C_k^2 - количество сочетаний из k факторов по 2, равное числу эффектов парного взаимодействия

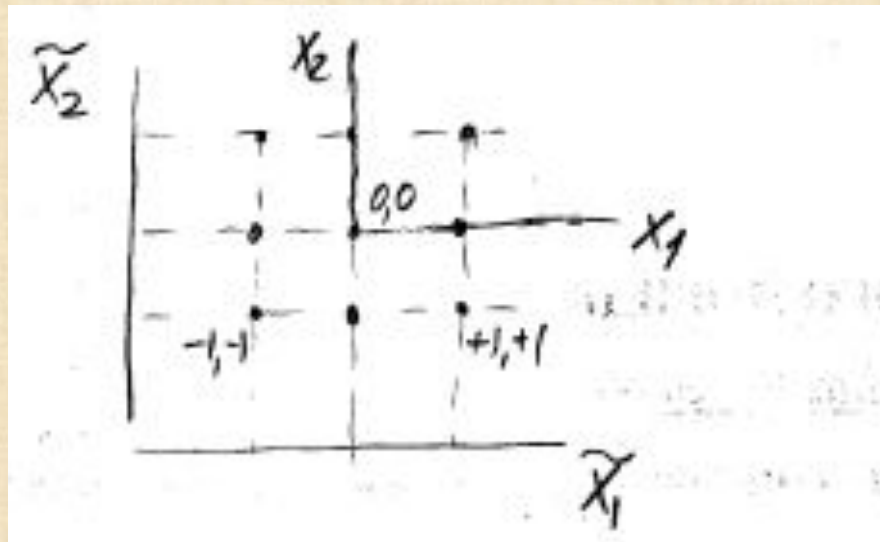
$$l = \frac{(k+1)(k+2)}{2}$$

Если факторов всего два, т.е. две переменных на трех уровнях, то число опытов $N = 3^2 = 9$. Число членов в модели $I = (2+1)(2+2) / 2 = 6$

Вид
модели:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2$$

геометрическим образом является квадрат, экспериментальные точки располагаются в его вершинах, по центрам граней и в центре.



Форма матрицы планирования ПФЭ

3²

ПФЭ 3²

	X ₁	X ₂		X ₁	X ₂
1	0	0	1	-	-
2	+	0	2	+	-
3	-	0	3	-	+
4	0	+	4	+	+
5	+	+	5	-	0
6	-	+	6	+	0
7	0	-	7	0	-
8	+	-	8	0	+
9	-	-	9	0	0

или

Форма матрицы планирования ПФЭ 3^2 приведена в таблице

№опыта	x_1	x_2	y	№опыта	x_1	x_2	y
1	—	—	y_1	6	—	0	y_6
2	+	—	y_2	7	0	+	y_7
3	—	+	y_3	8	0	—	y_8
4	+	+	y_4	9	0	0	y_9
5	+	0	y_5				

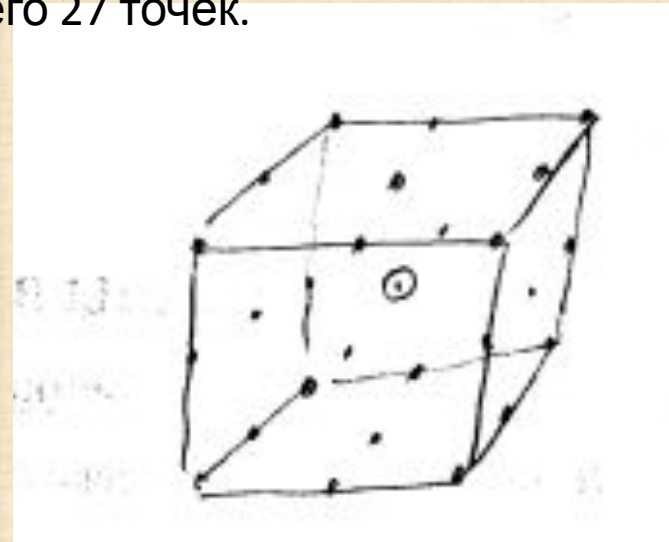
ПФЭ 3^3

	X_1	X_2	X_3
1	0	0	0
2	+	0	0
3	-	0	0
4	0	+	0
5	+	+	0
6	-	+	0
7	0	-	0
8	+	-	0
9	-	-	0
10	0	0	+
11	+	0	+
12	-	0	+
13	0	+	+
14	+	+	+
15	-	+	+
16	0	-	+
17	+	-	+
18	-	-	+
19	0	0	-
20	+	0	-
21	-	0	-
22	0	+	-
23	+	+	-
24	-	+	-
25	0	-	-
26	+	-	-
27	-	-	-

Матрица ПФЭ 3^3 состоит из 27 опытов

геометрический образ – куб;

планируемые точки расположены в его вершинах, в центрах ребер, в центрах граней и одна – в центре куба. Всего 27 точек.



ПФЭ, начиная с $k = 3$ имеет избыточное количество опытов, намного превышающее число определяемых коэффициентов уже при $k > 2$.

Число факторов, k	Число опытов, N	Число членов модели	Число точек композиционного плана, N_B
2	9	6	9
3	27	10	15
4	81	15	25
5	243	21	27
6	729	28	45

Сократить число опытов можно, если воспользоваться так называемым *композиционным* или последовательным планом, предложенным Боксом и Уилсоном.

Ядро такого плана составляет ПФЭ 2^k при $k < 5$ или полуреплика от него при $k > 5$

Возможность использования в качестве ядра плана полуреплики при $k > 5$ обусловлена тем, что уже полуреплика обеспечивает получение несмешанных оценок для линейных эффектов и эффектов парных взаимодействий.

ПФЭ 2^k или его полуреплика дополняются определенным числом так называемых «*звездных точек*», расположенных на координатных осях факторного пространства и точками в центре плана.

$$N_B = N_I + N_\alpha + N_0,$$

N_I - число точек ПФЭ 2^k ;

N_α - число «звездных» точек, равное $2k$;

N_0 - число точек в центре плана.

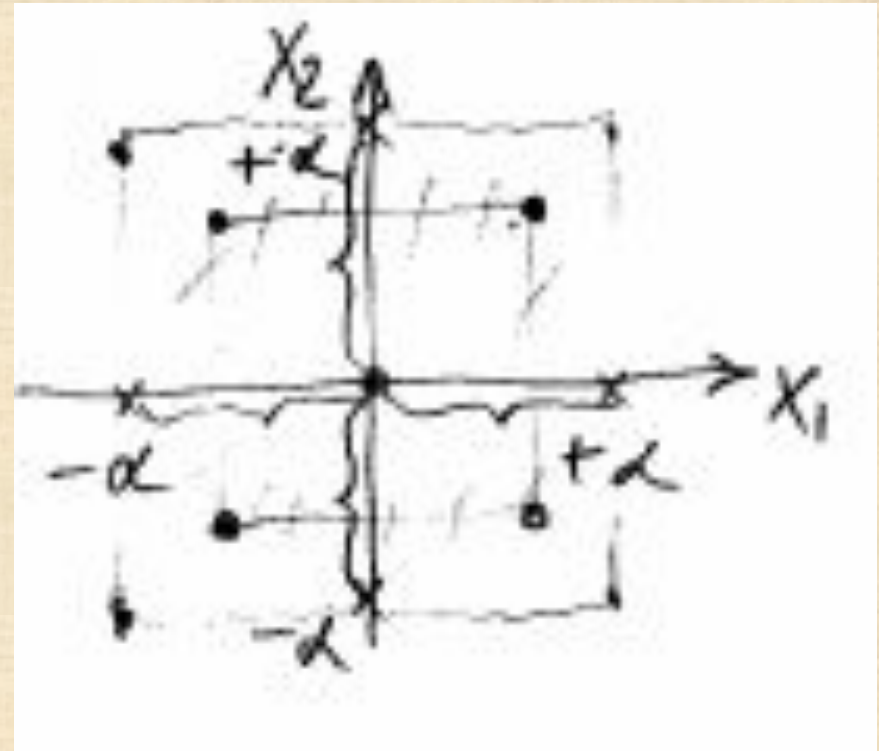
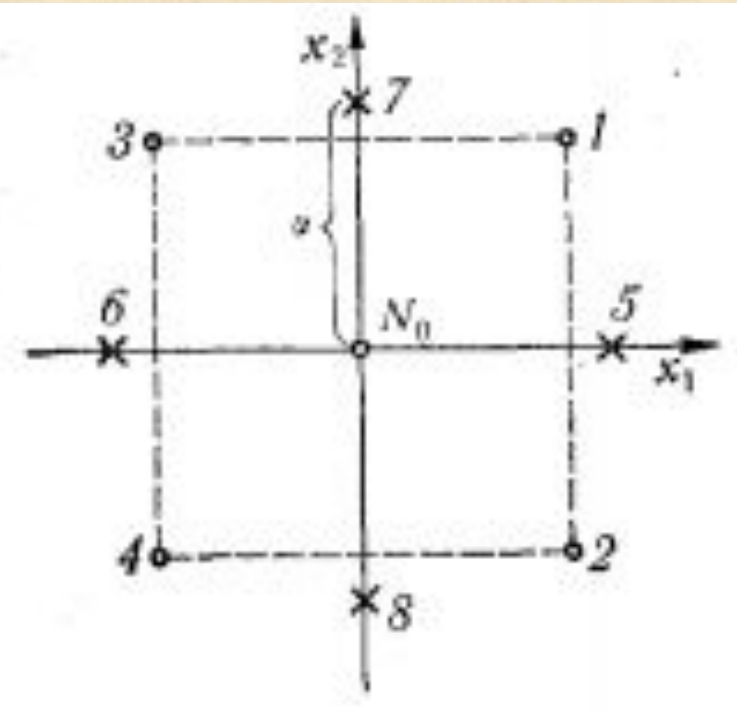
Число опытов в матрице композиционного плана второго порядка при k факторах составляет

$$N_B = 2^k + 2k + N_0 \text{ при } k < 5$$

$$N_B = 2^{k-1} + 2k + N_0 \text{ при } k > 5$$

Геометрический образ плана второго порядка для $k = 2$:

Звездные точки располагаются на осях факторного пространства (осях координат). Расстояние от центра плана до звездной точки – *звездное плечо*.



Значение α выбирается определенным образом в зависимости от числа опытов в центре плана. Для $k = 2$ и $N_0 = 1$ $\alpha = \pm 1$ и композиционный план второго порядка совпадает с ПФЭ 3^2 ($9 = 9$).

Матрица планирования композиционного плана второго порядка

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x_1^2	x_2^2	y
1	+	—	—	+	+	+	y_1
2	+	+	—	—	+	+	y_2
3	+	—	+	—	+	+	y_3
4	+	+	+	+	+	+	y_4
5	+	$+\alpha$	0	0	α^2	0	y_5
6	+	$-\alpha$	0	0	α^2	0	y_6
7	+	0	$+\alpha$	0	0	α^2	y_7
8	+	0	$-\alpha$	0	0	α^2	y_8
9	+	0	0	0	0	0	y_9

$$\text{Если } k = 3, N_b = 2^3 + 2 \cdot 3 + 1 = 15$$

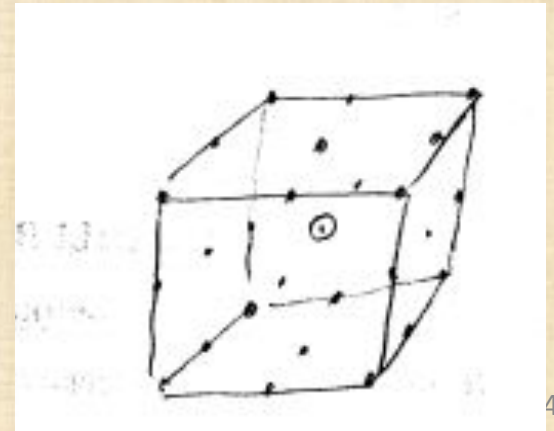
$$k = 4, N_b = 2^4 + 2 \cdot 4 + 1 = 25$$

$$k = 5 \quad N_b = 2^5 + 2 \cdot 5 + 1 = 43$$

начиная с $k > 5$ в основу плана кладется дробный факторный эксперимент – полуреплика от ПФЭ 2^k .

$$k = 5 \quad N_b = 2^{5-1} + 2 \cdot 5 + 1 = 27$$

Для $k = 3$ $N_b = 15$ вместо 27 (см слайд 8) нет точек на серединах ребер, только вершины куба, центры граней и центр самого куба.



КОМПОЗИЦИОННЫЕ ПЛАНЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА НЕОРТОГОНАЛЬНЫ:

$$\sum_{i=1}^N x_{0i} x_{ji}^2 \neq 0 \quad j = 1, 2, \dots, K \text{ (факторы)}$$

$$u \sum_{i=1}^N x_{ji}^2 x_{ui}^2 \neq 0 \quad u, j = 1, 2, \dots, K \quad u \neq j'$$

Композиционные планы приводятся к ортогональному виду выбором соответствующего звездного плеча α .

в зависимости от числа опытов в центре плана N_0 и числа факторов k можно выбрать величину звездного плеча α таким образом, чтобы матрица планирования стала ортогональной.

В зависимости от N_0 и k α должны иметь следующие значения:

	k			
	2	3	4	5
Ядро плана	2^2	2^3	2^4	2^{5-1}
$N_0=1$	1,000	1,215	1,414	1,547

Значения α для различного числа факторов и одного опыта в центре плана

Значения α^2 для различного числа факторов и количества опытов в центре плана

N ₀	k			
	2	3	4	5*
1	1,000	1,476	2,000	2,390
2	1,160	1,650	2,164	2,580
3	1,317	1,831	2,390	2,77
4	1,475	2,000	2,580	2,950
5	1,606	2,164	2,770	3,140

* - для $k = 5$ в ДФЭ 2^{5-1} используется полуреплика

$$X_5 = X_1 X_2 X_3 X_4$$

Выбрав α из таблицы и проведя следующее линейное преобразование квадратичных столбцов x_j^2

$$x_j' = x_j^2 - \bar{x}_j^2 = x_j^2 - \frac{\sum_{i=1}^n x_{ji}^2}{N}$$

получим ортогональную матрицу

Построим ортогональный план второго порядка для $k=2$ и $n_0=1$.
 В отличие от ранее приведенной матрицы планирования ПФЭ 3^2 ,
 вектор-столбцы, соответствующие x_1^2 и x_2^2 , заменяются новыми
 переменными x_1' x_2' , которые определяются по формуле

$$x_1' = x_1^2 - \bar{x}_1^2 = x_1^2 - \frac{\sum_{i=1}^N x_{1i}^2}{N}$$

Для ортогонального плана второго порядка, если $N_0 = 1$ $\alpha^2 (k=2) = 1$; $\alpha=1$ $N=9$

$$\bar{x}_1^2 = \frac{6}{9} = \frac{2}{3}, \text{ тогда для всех } x_{1i} = \pm 1$$

$$x_{1i}' = 1 - \frac{2}{3} = \frac{1}{3}, \text{ для } x_{1i} = 1 \quad x_{1i}' = -\frac{2}{3}$$

Те же значения будет принимать и x_2'

Ортогональный план второго порядка для $k = 2$

<u>№опыта</u>	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x_1'	x_2'
1	+	—	—	+	+1/3	+1/3
2	+	+	—	—	+1/3	+1/3
3	+	—	+	—	+1/3	+1/3
4	+	+	+	+	+1/3	+1/3
5	+	$+(+\alpha)$	0	0	+1/3	-2/3
6	+	$-(-\alpha)$	0	0	+1/3	-2/3
7	+	0	$+(+\alpha)$	0	-2/3	+1/3
8	+	0	$-(-\alpha)$	0	-2/3	+1/3
9	+	0	0	0	-2/3	-2/3

Другой вариант построения

Таблица 49. Композиционный план ортогонального эксперимента ($n = 2$)

Опыты	x_0	План					Переменная состоя- ния y
		x_1	x_2	x_1x_2	x'_1	x'_2	
1	+1	+1	+1	+1	1/3	1/3	y_1
2	+1	+1	-1	-1	1/3	1/3	y_2
3	+1	-1	+1	-1	1/3	1/3	y_3
4	+1	-1	-1	+1	1/3	1/3	y_4
5	+1	+1	0	0	1/3	-2/3	y_5
6	+1	-1	0	0	1/3	-2/3	y_6
7	+1	0	+1	0	-2/3	1/3	y_7
8	+1	0	-1	0	-2/3	1/3	y_8
9	+1	0	0	0	-2/3	-2/3	y_9

для трех факторов

Таблица 50. Композиционный план ортогонального эксперимента ($n = 3$)

Опыты	x_0	План						x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	Переменная состояния y
		x_1	x_2	x_3	x_1'	x_2'	x_3'				
1	+1	+1	+1	+1	0,27	0,27	0,27	+1	+1	+1	y_1
2	+1	-1	+1	+1	0,27	0,27	0,27	-1	-1	+1	y_2
3	+1	+1	-1	+1	0,27	0,27	0,27	-1	+1	-1	y_3
4	+1	-1	-1	+1	0,27	0,27	0,27	+1	-1	-1	y_4
5	+1	+1	+1	-1	0,27	0,27	0,27	+1	-1	-1	y_5
6	+1	-1	+1	-1	0,27	0,27	0,27	-1	+1	-1	y_6
7	+1	+1	-1	-1	0,27	0,27	0,27	-1	-1	+1	y_7
8	+1	-1	-1	-1	0,27	0,27	0,27	+1	-1	+1	y_8
9	+1	1,215	0	0	0,746	-0,73	-0,73	0	0	0	y_9
10	+1	-1,215	0	0	0,746	-0,73	-0,73	0	0	0	y_{10}
11	+1	0	1,215	0	-0,73	0,746	-0,73	0	0	0	y_{11}
12	+1	0	-1,215	0	-0,73	0,746	-0,73	0	0	0	y_{12}
13	+1	0	0	1,215	-0,73	-0,73	0,746	0	0	0	y_{13}
14	+1	0	0	1,215	-0,73	-0,73	0,746	0	0	0	y_{14}
15	+1	0	0	0	-0,73	-0,73	-0,73	0	0	0	y_{15}

Благодаря ортогональности матрицы планирования, все коэффициенты модели определяются независимо друг от друга по формуле

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^N x_{ji} y_i}{\sum_{i=1}^N x_{ji}^2}$$

Дисперсии коэффициентов равны s_{bj}^2

$$s_{bj}^2 = s_{\text{воспр.}}^2 / \sum_{i=1}^N x_{ji}^2$$

В результате расчетов по матрице с преобразованными столбцами для квадратичных эффектов получим уравнение

$$\hat{y} = b_0' + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_k x_k + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + \dots + b_{(k-1)k} x_{k-1} x_k + b_{11} (x_1^2 - \bar{x}_1^2) + b_{22} (x_2^2 - \bar{x}_2^2) + \dots + b_{kk} (x_k^2 - \bar{x}_k^2)$$

Чтобы перейти к обычной записи, определяют b_0 по формуле

$$b_0 = b_0' - b_{11} \bar{x}_1^2 - b_{22} \bar{x}_2^2 - \dots - b_{kk} \bar{x}_k^2$$

После замены b_0' на b_0 (без штриха) уравнение имеет обычный вид

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + \dots + b_k x_k + b_{12} x_1 x_2 + \dots + b_{(k-1)k} x_{(k-1)} x_k + \\ + b_{11} x_1^2 + \dots + b_{kk} x_k^2$$

Хотя формулы для определения дисперсий коэффициентов в общем виде выглядят одинаково

$$S_{b_j}^2 = \frac{S_{\text{воспр.}}^2}{\sum_{i=1}^N x_{ji}^2}$$

однако для разных столбцов матрицы планирования

$$\sum_{i=1}^N x_{ji}^2$$

будет иметь разные численные значения.

Следовательно, коэффициенты регрессии для ортогональных планов второго порядка будут определяться с разной точностью.

Ортогональные планы второго порядка не обладают свойством рототабельности, т.к. на равных расстояниях от центра плана дисперсия для «у» будет различной.

Таблица 51. Формулы расчета по композиционному ортогональному плану второго порядка

№ п/п	Расчетная формула	Обозначения
1	$\bar{y} = \sum_i b_i x_i + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j + \sum_i b_{ii} x_i^2$ $B = (X^T X)^{-1} X^T Y; \quad b_0 = \sum_{u=1}^N y_u / N;$	$i = 0, 1, 2, \dots, n$ Суммирование от $u = 1$ до N ;
2	$b_i = \frac{\sum x_{iu} y_u}{\sum x_{iu}^2}; \quad b_{ij} = \frac{\sum x_{iu} x_{ju} y_u}{\sum (x_{iu} x_{ju})^2};$ $b_{ii} = \frac{\sum x'_{iu} y_u}{\sum (x'_{iu})^2}$	$N \rightarrow$ число опытов; Кодирование $x'_i = x_i - \bar{x}_i$

Таблица 51. Формулы расчета по композиционному ортогональному плану второго порядка

№ п/п	Расчетная формула	Обозначения
3а	Дисперсии принимаются однородными по расчетам ПФЭ и ДФЭ.	
4	$s_o^2 = \frac{1}{N_o - 1} \sum_{k=1}^{N_o} (y_{ok} - \bar{y}_o)^2$	N_o — число опытов в центре плана; s_o^2 — ошибка опыта
5	$s_{b_o}^2 = s_o^2 / N; \quad s_{b_i}^2 = s_o^2 / \sum x_{iu}^2;$ $s_{b_{ij}}^2 = s_o^2 / \sum (x_{iu} x_{ju})^2;$ $s_{b_{ii}}^2 = s_o^2 / \sum (x'_{iu})^2;$	$s_{b_o}^2, s_{b_i}^2, s_{b_{ii}}^2, s_{b_{ij}}^2$ — дисперсии коэффициентов регрессии

Таблица 51. Формулы расчета по композиционному ортогональному плану второго порядка

№ п/п	Расчетная формула	Обозначения
5а	$t_{i_p} = b_i /s_{b_i}; \quad t_{ij_p} = b_{ij} /s_{b_{ij}};$ $t_{ii_p} = b_{ii}/s_{b_{ii}}$ <p>Условие значимости коэффициентов</p> $t_{i_p}, \quad t_{ij_p}, \quad t_{ii_p} > t_{\tau}(q, f)$	$t_{i_p}, \quad t_{ij_p}, \quad t_{ii_p}$ — расчетные значения критерия Стьюдента $t_{\tau}(q, f)$ — табличное значение критерия Стьюдента для уровня значимости q и степени свободы f . l — число оставшихся членов в уравнении;
6	$0 \quad 1 \quad N$	

Таблица 51. Формулы расчета по композиционному ортогональному плану второго порядка

№ п/п	Расчетная формула	Обозначения
6	$s_{\text{ад}}^2 = \frac{1}{N-l} \sum_{u=1}^N (y_u - \tilde{y}_u)^2;$ $F_p = \frac{s_{\text{ад}}^2}{s_0^2}.$	<p>l — число оставшихся членов в уравнении;</p> <p>$s_{\text{ад}}^2$ — дисперсия адекватности;</p> <p>F_p — расчетное значение критерия Фишера.</p>
6а	<p>Условие адекватности</p> $F_p < F_T(q, l_{\text{ад}}, f_0)$	<p>F_T — табличное значение критерия Фишера.</p>

Принятие решений по планам второго порядка

Нелинейная модель адекватна. Если целью было получение интерполяционной модели (описывающей область оптимума), то исследование заканчивается.

Нелинейная модель неадекватна. Переход к моделям третьего порядка считается неэффективным из-за сложностей в планировании и вычислительных операциях.

Необходимо: ввести новые факторы; увеличить число опытов; учесть возможность временного дрейфа.

А. Г. БОНДАРЬ, Г. А. СТАТЮХА

ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

(ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ,
ПРИМЕРЫ И ЗАДАЧИ)

*Допущено Министерством
высшего и среднего
специального образования УССР
в качестве учебного пособия
для студентов
химико-технологических
специальностей вузов*

ИЗДАТЕЛЬСКОЕ ОБЪЕДИНЕНИЕ
«ВИЩА ШКОЛА»
ГОЛОВНОЕ ИЗДАТЕЛЬСТВО
КИЕВ — 1978