

Основы математического планирования эксперимента

Историческая справка

До середины XVIII века вопросами организации эксперимента целиком занимались **экспериментаторы**.

Уделом математиков была обработка уже проведенного эксперимента.

Постепенно стало ясно, что речь должна идти не только об обработке экспериментальных данных, а об оптимальной процедуре математико-статистического анализа.

Такие процедуры и были разработаны усилиями многих математиков.

Основные этапы становления планирования эксперимента:

- метод наименьших квадратов – (А.Лежандр, К.Гаусс, конец 18-начало 19 века);
- основы регрессионного и корреляционного анализа (Ф. Гальтон, К.Пирсон, конец 19 - начало 20 века);
- концепция малых выборок (Госсет, более известный под псевдонимом «Стьюдент», начало 20 века);
- основы математического планирования эксперимента (Р.Фишер, середина 20 века);
- разработка последовательной стратегии экспериментирования, шаговая стратегия экспериментирования (Бокс и Уилсон)

Причем получается **определенная сбалансированность между стремлением к минимизации числа опытов и уровнем точности и надежности полученных результатов.**

Хорошо **спланированный эксперимент обеспечивает оптимальную обработку результатов**, и, следовательно, возможность четких статистических выводов.

Однако, в основе статистических методов обработки данных (дисперсионный и регрессионный анализ) лежат определенные **предпосылки о свойствах законов распределения случайных величин, их независимости, однородности дисперсий** и т.д., что в реальных задачах выполняется далеко не всегда.

Совокупность таких предпосылок принято называть **моделью ситуации.**

Возникает вопрос: зачем оптимально планировать эксперимент, если нет уверенности в том, выполняются ли предпосылки принятой модели ситуации?

В конце 70-х годах 20 века центр тяжести переместился на проблему принятия **решения при выборе модели ситуации и обработке данных.**

Так возникло новое направление, известное под названием **анализа данных.**

Здесь можно выделить такие основные этапы, как

- проверка выполнимости предпосылок модели ситуации;
- использование априорной информации (байесовские методы);
- применение устойчивых (робастных) процедур в случае нарушения тех или иных предпосылок или невозможности их проверки.

Все это стимулирует в последнее время развитие робастных и непараметрических методов анализа.

Таким образом, **экспериментатор должен наилучшим образом выбрать модель ситуации, план эксперимента и метод обработки.**

Основные понятия и определения

Под экспериментом будем понимать совокупность операций совершаемых над объектом исследования с целью получения информации об его свойствах

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.

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.

Планирование эксперимента – выбор плана эксперимента, удовлетворяющего заданным требованиям, совокупность действий направленных на разработку стратегии экспериментирования (от получения априорной информации до получения работоспособной математической модели или определения оптимальных условий).

Это целенаправленное управление экспериментом, реализуемое в условиях неполного знания механизма изучаемого явления.

В процессе измерений, последующей обработки данных, а также формализации результатов в виде математической модели, **возникают погрешности и теряется часть информации, содержащейся в исходных данных.**

Применение методов планирования эксперимента позволяет определить погрешность математической модели и судить о ее адекватности.

Если точность модели оказывается недостаточной, то применение методов планирования эксперимента позволяет модернизировать математическую модель с проведением дополнительных опытов без потери предыдущей информации и с минимальными затратами.

Цель планирования эксперимента – нахождение таких условий и правил проведения опытов, при которых удастся 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.

Пусть интересующее нас свойство (Y) объекта зависит от нескольких (n) независимых переменных ($X_1, X_2, \dots, X_n$) и мы хотим выяснить характер этой зависимости - $Y=F(X_1, X_2, \dots, X_n)$, о которой мы имеем лишь общее представление.

Величина Y – отклик, а сама зависимость $Y=F(X_1, X_2, \dots, X_n)$ – функция отклика.

Независимые переменные $X_1, X_2, \dots, X_n$ – факторы.

Диапазоны изменения факторов задают область определения Y .

Если принять, что каждому фактору соответствует координатная ось, то полученное **пространство называется факторным пространством.**

При $n=2$ область определения Y представляется собой прямоугольник, при $n=3$ – куб, при $n > 3$ - гиперкуб.

При выборе диапазонов изменения факторов нужно учитывать их совместимость, т.е. контролировать, чтобы в этих диапазонах любые сочетания факторов были бы реализуемы в опытах и не приводили бы к абсурду.

Для каждого из факторов указывают граничные значения

$$X_{i \min} \leq X_i \leq X_{i \max}, i = 1, \dots, n.$$

Регрессионный анализ функции отклика предназначен для получения ее математической модели в виде уравнения регрессии

$$Y = F(X_1, X_2, \dots, X_n; B_1, B_2, \dots, B_m) + e$$

$B_1, B_2, \dots, B_m$ – некоторые коэффициенты;

e – погрешность.

Среди основных методов планирования, применяемых на разных этапах исследования, используют:

- планирование **отсеивающего эксперимента**, основное значение которого выделение из всей совокупности факторов группы существенных факторов, подлежащих дальнейшему детальному изучению;
- планирование **эксперимента для дисперсионного анализа**, т.е. составление планов для объектов с качественными факторами;
- планирование *регрессионного эксперимента*, позволяющего получать регрессионные модели (полиномиальные и иные);
- планирование **экстремального эксперимента**, в котором главная задача – экспериментальная оптимизация объекта исследования;
- планирование при **изучении динамических процессов** и т.д.

Инициатором применения планирования эксперимента является Рональд А. Фишер, другой автор известных первых работ – Френк Йетс.

Далее идеи планирования эксперимента формировались в трудах Дж. Бокса, Дж. Кифера, Г.К. Круга, Е.В. Маркова и др.

В настоящее время методы планирования эксперимента заложены в специализированных пакетах программных продуктов, например: **StatGrapfics**, **Statistica**, **SPSS**, **SYSTAT** и др.

Представление результатов экспериментов

При использовании методов планирования эксперимента необходимо найти ответы на 4 вопроса:

1. • Какие сочетания факторов и сколько таких сочетаний необходимо взять для определения функции отклика?
2. • Как найти коэффициенты $B_0, B_1, \dots, B_m$?
3. • Как оценить точность представления функции отклика?
4. • Как использовать полученное представление для поиска оптимальных значений Y ?

Геометрическое представление функции отклика в факторном пространстве $X_1, X_2, \dots, X_n$ (рис.1).

При трех и более факторах задача становится неразрешимой. Если и будут найдены решения, то использовать совокупность выражений достаточно трудно, а часто и не реально

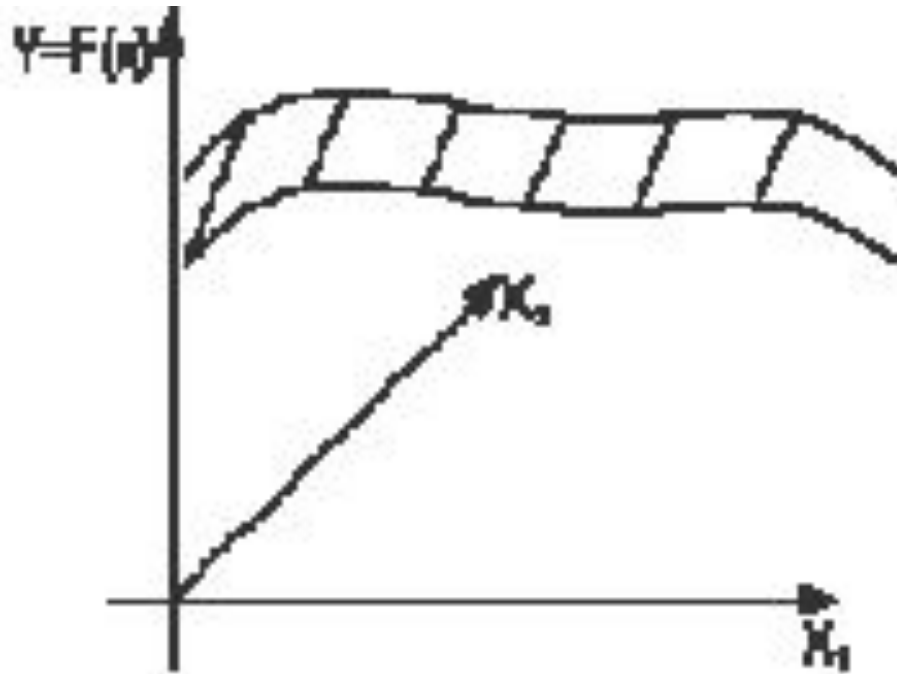


Рис. 1. Поверхность отклика

Например, пусть необходимо исследовать влияние движущейся жидкости и внутреннего диаметра на потери давления и расход жидкости проектировании гидравлической сети (рис. 2).



Если в диапазоне изменения каждого фактора взять хотя бы по шесть точек для того чтобы выполнить опыты при всех возможных сочетаниях значений факторов (их три) необходимо выполнить опытов и сформировать по $6^2=36$ кривых для каждой из двух функций отклика.

Если мы хотим хотя бы продублировать опыты чтобы снизить погрешность, то число опытов пропорционально возрастает, поэтому произвольное выполнение опытов при числе факторов более двух и использование их результатов – практически нереально.

v	м/с	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
ρ	кг/м ³	800	900	1000	1100	1200	1300
d	м	0,05	0,075	0,1	0,125	0,15	0,175

Разложение функции отклика в степенной ряд, кодирование факторов

Если заранее не известно аналитическое выражение функции отклика, то можно рассматривать не саму функцию, а ее разложение, например, в степенной ряд в виде полинома

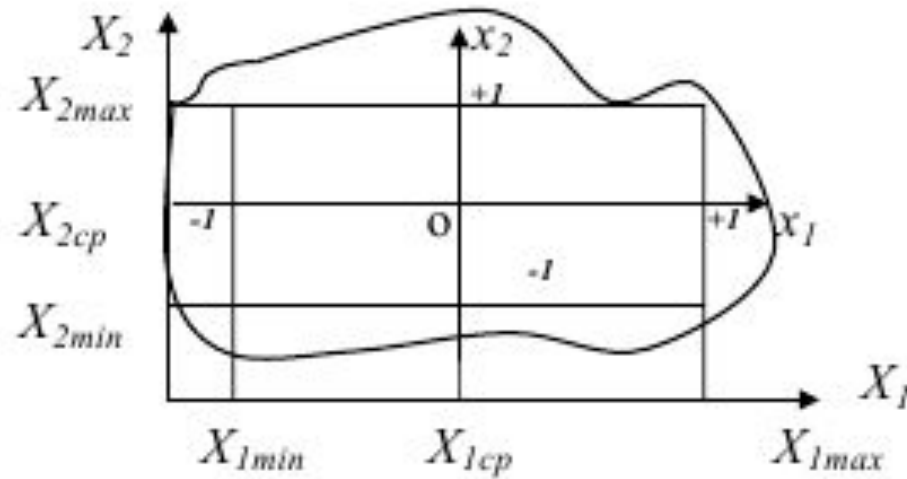
$$Y = B_0 + B_1 X_1 + \dots + B_n X_n + B_{12} X_1 X_2 + \dots + B_{nn-1} X_n X_{n-1} + B_{11} X_{12} + \dots + B_{nn} X_{n2} + \dots$$

Разложение в степенной ряд функции возможно в том случае, если сама функция является непрерывной. На практике обычно ограничиваются числом членов степенного ряда и аппроксимируют функцию полиномом некоторой степени.

Факторы могут иметь разные размерности (А, В, Вт, об/мин) и резко отличаться количественно.

В теории планирования эксперимента используют кодирование факторов.

Рис. 3. Пространство кодированных факторов



Эта операция заключается в выборе нового масштаба для кодированных факторов (рис. 3), причем такого, чтобы минимальное значение кодированных факторов соответствовало “-1”, а максимальное значение “+1”, а также в переносе начала координат в точку с координатами X_{1cp} , X_{2cp} , ..., X_{ncp}

$$X_{icp} = \frac{x_{i \min} + x_{i \max}}{2}.$$

Текущее значение кодированного фактора

$$x_i = \frac{x_i - x_{icp}}{x_{icp} - x_{imin}} = \frac{x_i - x_{icp}}{x_{imax} - x_{icp}} = \frac{2x_i - x_{imax} - x_{imin}}{x_{imax} - x_{imin}} \quad (4).$$

где X_i – именованное (абсолютное) значение фактора; x_i – кодированное значение фактора;

$X_{icp} - X_{imin} = X_{imax} - X_{icp}$ – интервал варьирования фактора.

Граница совместимости факторов указана на рис. 3 в виде кривой линии.

Если фактор изменяется дискретно, например он является качественным, то каждому уровню этого кодированного фактора присваиваются числа в диапазоне от +1 до -1.

Так при двух уровнях это +1 и -1, при трех уровнях +1, 0, -1 и т.д.

Функция отклика может быть выражена через кодированные факторы $Y=f(x_1, \dots, x_n)$ и записана в полиномиальном виде

$$Y=b_0+b_1x_1+b_2x_2+\dots+b_nx_n+b_{12}x_1x_2+\dots+b_{nn-1}x_{n-1}x_n+b_{11}x_{12}+\dots+b_{nn}x_{n2}+\dots \quad (4)$$

Очевидно, что $B_i \neq b_i$

НО

$$Y=F(X_1, \dots, X_n)=f(x_1, \dots, x_n)$$

Для полинома, записанного в кодированных факторах, степень влияния факторов или их сочетаний на функцию отклика определяется величиной их коэффициента b_i .

Для полинома в именованных факторах величина коэффициента B_i еще не говорит однозначно о степени влияния этого фактора или их сочетаний на функцию отклика.

Задача определения коэффициентов уравнения регрессии.

Для определения $m+1$ коэффициента полинома необходимо не менее $m+1$ уравнений (опытов).

Полученные коэффициенты B позволяют сформировать уравнение функции отклика при $m+1$ членах уравнения.

Если **точность** этого уравнения оказалась недостаточной, то требуется взять уравнение с большим числом членов и начать все заново так как все коэффициенты B оказываются зависимыми друг от друга.

Это возникает при использовании пассивного эксперимента. Однако если целенаправленно использовать активный эксперимент и особым образом построить матрицу сочетаний факторов в опытах X , использовать планирование эксперимента, то коэффициенты полинома определяются независимо друг от друга.

Стратегия применения планов заключается в принципе постепенного планирования – **постепенного усложнения модели.**

Начинают с простейшей модели, находят для нее коэффициенты, определяется ее точность. Если точность не удовлетворяет, то планирование и модель постепенно усложняются.

Полный факторный эксперимент

Эксперимент, в котором реализуются **все** возможные сочетания уровней факторов, называют полным факторным экспериментом (ПФЭ).

При двух уровнях имеем ПФЭ типа 2^k . Число опытов для данного случая будет равно $N = 2^k$

Условие эксперимента записываются в виде таблицы.

Строки её соответствуют различным опытам (вектор-строка), столбцы - значениям факторов в кодированном виде (вектор-столбцы).

Такие таблицы называются матрицами планирования эксперимента (МПЭ).

Составим МПЭ для двумерной модели на двух уровнях 2^2 (табл.1). Число опытов $N=2^2=4$

Таблица 4.1

Опы	x_1	x_2	y
1	-1	-1	y_1
2	+1	-1	y_2
3	-1	+1	y_3
4	+1	+1	y_4

План эксперимента можно представить геометрически (рис.4.).

Для плана 2^2 каждая комбинация факторов представляет собой вершину квадрата.

В области определения факторов находят точку соответствующую основному уровню, Через эту точку проводят новые оси координат, параллельно осям натуральных значений факторов. Затем выбирают масштабы по новым осям для каждого фактора согласно выражению (1).

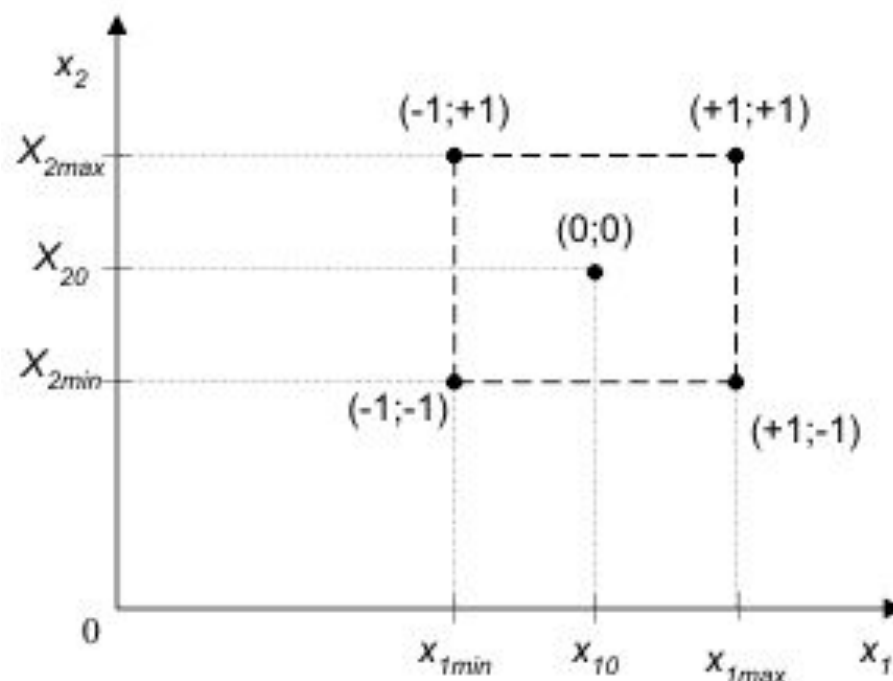


Рис. 4. Геометрическое представление ПФЭ

В матрицу ПФЭ вводится фиктивный столбец x_0 для учета свободного члена b_0 .

Коэффициенты b_0, b_1, b_2 **оцениваются** согласно выражений

$$b_0 = \frac{\sum y_i}{N}, b_1 = \frac{\sum x_{1i} y_i}{N}, b_2 = \frac{\sum x_{2i} y_i}{N}.$$

Свойства полного факторного эксперимента 2^k

К свойствам МПЭ относятся те, которые определяют качество модели, т.е. эти **свойства делают оценки коэффициентов модели наилучшими.**

Первые два свойства вытекают из построения матрицы.

Симметричность относительно центра эксперимента.

Алгебраическая сумма элементов столбца каждого фактора равно нулю 0

где j - номер фактора, N - число опытов.

$$\sum_{i=1}^N x_{ji} = 0,$$

Условие **нормировки**. Сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу опытов

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

Ортогональность матрицы. Сумма почленных произведений любых двух векторов-столбцов матрицы равна нулю 0

$$\sum_{i=1}^N x_{ji} x_{ui} = 0,$$

$$j \neq u; j, u = 0, 1, \dots, k.$$

Ортогональные планы делают эксперимент более **эффективным**.

Ортогональность плана позволяет получить оценки для коэффициентов уравнения регрессии **независимые друг от друга**.

Иными словами ортогональность характеризует **отсутствие корреляции** между факторами.

Однако, если имеет место **нелинейность**, то столбцы взаимодействий **окажутся неразличимы**, закоррелированными с некоторыми столбцами линейных эффектов.

Это приводит к тому, что по результатам данного эксперимента становится **невозможным разделить коэффициенты регрессии между линейными и нелинейными факторами**.

Рототабельные планы - это такие планы, для которых дисперсия $\hat{y}$ одинакова для всех точек пространства переменных x , лежащих на одинаковых расстояниях от центра (все точки плана лежат на окружности (сфере, гиперсфере), центр которой совпадает с центром плана).

Выбор модели при проведении полного факторного эксперимента

Планируя эксперимент на первом этапе, всегда стремятся получить **линейную модель**.

Для двух факторов модель представляют в виде выражения (2). Однако не всегда экспериментатор имеет гарантии, что в выбранных интервалах варьирования процесс описывается линейной моделью.

Часто встречающийся вид нелинейности связан с эффектом взаимодействия между факторами.

ПФЭ позволяет оценить кроме коэффициентов при линейных эффектах коэффициенты взаимодействия.

Для этого **перемножают** соответствующие столбцы.

Тогда уравнение принимает вид $y = \beta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \beta_{12} x_1 x_2 + \varepsilon$

Матрица полнофакторного эксперимента с учетом фактора взаимодействия для ПФЭ 2² показана в табл. 2

Таблица 2

Опы	x ₀	x ₁	x ₂	x ₁ x ₂	y
1	+1	-1	-1	+1	y ₁
2	+1	+1	-1	-1	y ₂
3	+1	-1	+1	-1	y ₃
4	+1	+1	+1	+1	y ₄

Коэффициенты уравнений регрессии оцениваются следующим образом:

$$\beta_0 \rightarrow b_o = \frac{\sum y_i}{N}, \beta_j \rightarrow b_j = \frac{\sum x_{ji} y_i}{N}, \beta_{12} \rightarrow b_{12} = \frac{\sum x_{ji} x_{ui} y_i}{N}, j \neq u.$$

По столбцам x_1 и x_2 осуществляют планирование, что же касается столбцов x_0 и x_1x_2 , то они служат только для расчета.

Нахождение модели методом ПФЭ состоит из следующих этапов:

- Выбор модели
- Планирование эксперимента
- Экспериментирование.
- Проверка однородности дисперсии (воспроизводимости).
- Проверка значимости коэффициентов.
- Проверка адекватности модели.

При составлении матрицы ПФЭ руководствуются следующими правилами:

- **располагают**, если имеется соответствующая информация, факторы в матрице в **порядке убывания степени их влияния** на целую функцию;
- стремятся выполнить требования **рандомизации варьирования** уровней;
- при составлении матрицы **уменьшают частоту чередования уровней** при переходе от x_1 к x_2 , от x_2 к x_3 и т.д. каждый раз вдвое.

Рассмотрим пример составления МПЭ для трех факторного полного эксперимента.

В качестве уравнения регрессии берем неполную квадратичную модель.

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^3 b_i x_i + \sum_{i<j}^3 b_{ij} x_i x_j + b_{123} x_1 x_2 x_3$$

Введем обозначение переменных x через z , тогда $\boxtimes$
 $y = \sum_i^N b_i z_i$

$$\sum_i^N b_i x_i = \sum_i^N b_i z_i, \quad \sum_{i<j}^N b_{ij} x_i x_j = \sum_{i=N+1}^{2N} b_i z_i, \quad b_{123} x_1 x_2 x_3 = b_7 x_7.$$

Составим МПЭ. $N = 2^3 = 8$ (табл. 3).

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	Код. обозначение
	z_0	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5	z_6	z_7	
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	+1	y_8

Таблица 3

В зависимости от соотношения от числа неизвестных коэффициентов уравнения регрессии числа строк в плане ПФЭ 2^n может являться **насыщенным**, при выборе числа членов уравнения $m+1=N$, **ненасыщенным**, при выборе числа членов уравнения и соответственно числа столбцов плана $m+1 < N$ и **сверхнасыщенным** $m+1 > N$.

Дробный факторный эксперимент

Во многих реальных процессах некоторые факторы взаимодействия могут отсутствовать. И тогда ПФЭ будет обладать избыточностью опытов.

Рассмотрим пути минимизации числа опытов.

Обратимся к уравнению (2). Если мы располагаем сведениями о том, что в выбранных интервалах варьирования процесс может быть описан линейной моделью, то достаточно определить три коэффициента b_0, b_1, b_2 .

В результате остается одна степень свободы, т.к. имеем четыре опыта, а количество констант три. Используем эту степень свободы для минимизации числа опытов.

При линейном приближении $b_{12} \rightarrow 0$ и тогда вектор-столбец $x_1 x_2$ может быть использован для нового фактора x_3 .

Таблица 4

Опыт	x_0	x_1	x_2	x_3	y
1	+1	+1	+1	+1	y_1
2	+1	-1	+1	-1	y_2
3	+1	+1	-1	-1	y_3
4	+1	-1	-1	+1	y_4

При этом эксперименте появляются смешанные оценки т.е. столбцы.

$$b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23}, b_2 \rightarrow \beta_2^{(5)} + \beta_{13}, b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12}.$$

Пример. Допустим x_1 и x_2x_3 между собой неразличимы. Однако парные взаимодействия в линейной модели незначительны.

Зато вместо восьми опытов для изучения влияния трех факторов можно поставить только четыре опыта, т.е. вместо ПФЭ 2^3 мы имеем 2^{3-1} . В теории эксперимента 2^{3-1} называют **полуреplikой**.

В общем случае имеют дело с дробной репликой. А факторный эксперимент называют дробным (ДФЭ).

Для составления МПЭДФЭ вводится понятие **определяющего контраста**, который позволяет определить какие оценки смешаны друг с другом, не изучая МПЭ для выявления совпадающих столбцов.

Для этого используется символическое обозначение произведения столбцов равного $+1$ или -1 . Это и называют контрастом. Чтобы определить какой эффект смешан с данным, нужно помножить обе части определяющего контраста на столбец, соответствующий данному эффекту.

Пример. Пусть имеем три фактора x_1, x_2, x_3 . При построении полуреплики 2^{3-1} имеется только две возможности приравнять x_3 либо к « $+x_1x_2$ », либо к « $-x_1x_2$ » (табл.5).

Таблица 5

Опыт	x_1	x_2	x_3	$x_1x_2x_3$	Опыт	x_1	x_2	x_3	$x_1x_2x_3$
1	-1	-1	+1	+1	1	-1	-1	-1	-1
2	+1	-1	-1	+1	2	+1	-1	+1	-1
3	-1	+1	-1	+1	3	-1	+1	+1	-1
4	+1	+1	+1	+1	4	+1	+1	-1	-1

Возьмем в качестве определяющего контраста $-1 = x_1x_2x_3$. Тогда $-x_1 = x_1^2x_2x_3$. Учитывая, что $x^2 = 1$ получаем $x_1 = -x_2x_3$.

Теперь возьмем за определяющий контраст $+1 = x_1x_2x_3$.

Получаем: $x_1 = x_2x_3$, $x_2 = x_1x_3$, $x_3 = x_1x_2$,

Эти выражения показывают, что коэффициенты линейного уравнения будут оценками (5).

Соотношение, показывающее с какими из эффектов смешан данный эффект, называется генерирующим соотношением.

При выборе полуреплики 2^{4-1} возможны восемь генерирующих соотношений:

$$x_4 = x_1 x_2$$

$$x_4 = -x_1 x_2$$

$$x_4 = x_2 x_3$$

$$x_4 = -x_2 x_3$$

$$x_4 = x_1 x_3$$

$$x_4 = -x_1 x_3$$

$$x_4 = x_1 x_2 x_3$$

$$x_4 = -x_1 x_2 x_3$$

Разрешающая способность этих полуреplik различна.

Реплики 1-6 имеют по три фактора и **носят название планов с расширяющей способностью III** (по наибольшему числу факторов в определяющем контрасте).

Реплики 7-8 имеют по четыре фактора и обладают максимальной разрешающей способностью. Их называют главными репликами. Всегда стремятся выбрать реплику с наибольшей разрешающей способностью, т.к. чем больше эффектов взаимосвязано, тем точнее окажется полученная модель.

Однако, если имеется информация об эффектах взаимодействия, то реплики нужно выбирать с ее учетом.

Реализация МПЭДФЭ ничем не отличается от реализации МПЭПФЭ. Методика оценки значимости коэффициентов и проверка адекватности модели проводится также как и в ПФЭ.

Обобщающий определяющий контраст

Рассмотрим на примере исследование модели с пятью факторами. Возьмём реплику 2^{5-2} . Получаем 8 опытов вместо 32.

Возможны 12 решений, если приравнять x_4 парному взаимодействию, а x_5 - тройному.

$x_4 = x_1 x_2$	$x_5 = x_1 x_2 x_3$
$x_4 = x_1 x_2$	$x_5 = -x_1 x_2 x_3$
$x_4 = -x_1 x_2$	$x_5 = x_1 x_2 x_3$
$x_4 = -x_1 x_2$	$x_5 = -x_1 x_2 x_3$
$x_4 = x_1 x_3$	$x_5 = x_1 x_2 x_3$
$x_4 = x_1 x_3$	$x_5 = -x_1 x_2 x_3$
$x_4 = -x_1 x_3$	$x_5 = x_1 x_2 x_3$
$x_4 = -x_1 x_3$	$x_5 = -x_1 x_2 x_3$
$x_4 = x_2 x_3$	$x_5 = x_1 x_2 x_3$
$x_4 = x_2 x_3$	$x_5 = -x_1 x_2 x_3$
$x_4 = -x_2 x_3$	$x_5 = x_1 x_2 x_3$
$x_4 = -x_2 x_3$	$x_5 = -x_1 x_2 x_3$

Допустим, выбран первый вариант.

Тогда определяющими контрастами будут: $1=x_1x_2x_4$, $1=x_1x_2x_3x_5$.

Перемножим эти определяющие константы, получим третье соотношение:
 $1=x_3x_4x_5$.

Для того чтобы полностью охарактеризовать разрешающую способность реплики, вводят понятие обобщающего определяющего контраста : $1= x_1x_2x_4= x_3x_4x_5=x_1x_2x_3x_5$.

Система смешивания столбца определяется умножением обобщающего определяющего контраста последовательно на x_1, x_2, x_3 :

$$X_1=X_2X_4=X_1X_3X_4X_5=X_2X_3X_5;$$

$$X_2=X_1X_4=X_2X_3X_4X_5=X_1X_3X_5;$$

$$X_3 = X_1X_2X_3X_4= X_4X_5X_1X_2X_5;$$

$$X_4=X_1X_2=X_3X_5=X_1X_2X_3X_4X_5;$$

$$X_5=X_1X_2X_4X_5=X_3X_4=X_1X_2X_3;$$

$$X_1X_2=X_4=X_1X_2X_3X_4X_5=X_3X_5.$$

Если при выбранной реплике некоторые коэффициенты получаются отличными от нуля, например:

$$b_{21} \rightarrow \beta_{21} + \beta_4 + \beta_{35} + \beta_{12345}$$

то ставят вторую серию опытов с другой репликой, например берут вариант 4.

Дробные реплики находят широкое применение при получении линейных моделей, причем, целесообразность применения их возрастает с ростом количества факторов. Эффективность применения дробных реплик зависит от выбора системы смешивания линейных эффектов с эффектами взаимодействия.

Планирование экспериментов при построении квадратичной модели

В уравнениях (3),(4) учитывались только линейные эффекты и эффекты взаимодействия.

В некоторых случаях существенными могут оказаться коэффициенты при квадратных переменных, их кубов и т.д.

Для двухфакторного эксперимента модель может быть представлена выражением

$$y = b_0x_0 + b_1x_1 + b_2x_2^{(5)} + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2$$

Полученные вектор - столбцы x_1^2 и x_2^2 являются единичными столбцами, совпадающие друг с другом и с фиктивным столбцом x_0 .

Эти столбцы неразличимы, поэтому нельзя сказать за счет чего получилась величина b_0 . Очевидно, она включает в себя значения свободного члена β_0 и вклады квадратичных членов.

Символически это можно записать:

$$b_0 \rightarrow \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_{ii}.$$

Для квадратичной модели получается следующая система смешивания:

$$b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23}, b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{13}, b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12}.$$

Следовательно, планирование эксперимента на двух уровнях не дает возможности получить отдельные оценки коэффициентов при квадратичных членах и фиктивной переменной x_0 .

Согласно теории интерполяции, для решения задачи нахождения отдельных оценок число уровней каждой из независимых переменных должно быть на единицу больше степени интерполяционного полинома. Для полинома второй степени число уровней должно быть равно трем.

Однако применение методов ПФЭ плана 3^n не является рациональным из-за резкого увеличения опытов эксперимента.

Поэтому разработаны специальные методы построения планов второго порядка.

Например, в качестве двухфакторных планов второго порядка могут служить планы, представляемые вершинами и, по крайней мере, одной центральной точкой любого $(n-1)$ мерного правильного многоугольника (который можно вписать в круг).

Пример. Имеем восьмиугольный план (рис.5, табл.6).

Этот пример можно обобщить на случай получения планов второго порядка. Для этого к ПФЭ типа 2^n добавляется центральная точка с координатами $(0,0,...,0)$ и, так называемые, звёздные точки с координатами $(0,0,..., \pm \alpha,...,0)$, лежащие на сфере диаметра 2α .

Т.е. план ПФЭ достраивается до плана второго порядка. Такой план называется композиционным планом.

Рис.5. Восьмиугольный план эксперимента

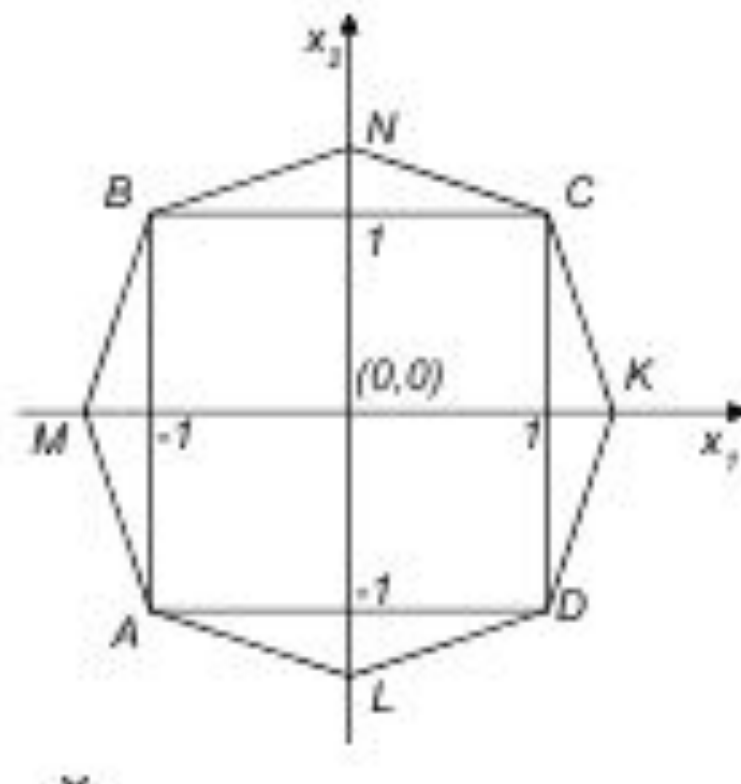


Таблица 6

Опыт	x_1	x_2	Описание
1	-1	-1	План 2^2 представлен квадратом ABCD
2	+1	-1	
3	-1	+1	
4	+1	+1	
5	$\sqrt{2}$	0	План представлен звёздными точками MNKL
6	$-\sqrt{2}$	0	
7	0	$\sqrt{2}$	
8	0	$-\sqrt{2}$	
9	0	0	Центральная точка

Добавление двух сфер, образованных звездными точками и центральной точкой, к ПФЭ позволяет получить отдельные оценки b_0 и b_{ii} . Все три сферы образуют композиционный план второго порядка.

В зависимости от критерия оптимальности плана, различают ортогональное, композиционное планирование и рототабельное композиционное планирование.

План, приведенный в табл. 6, является рототабельным и обеспечивает получение отдельных оценок b_0 и b_{ii} .

Ортогональное центральное композиционное планирование

Критерием оптимальности является ортогональность столбцов матрицы планирования. В силу этого свойства все коэффициенты модели определяются независимо друг от друга.

Анализ результатов экспериментов при ортогональном композиционном планировании имеет некоторые особенности. Так оценки коэффициентов уравнения регрессии находятся с неодинаковой дисперсией.

Из-за неодинаковой дисперсии коэффициентов регрессии критерий ортогональности является недостаточно сильным критерием оптимальности для планирования второго порядка.

Поэтому точность предсказания выходной величины в различных направлениях факторного пространства неодинакова.

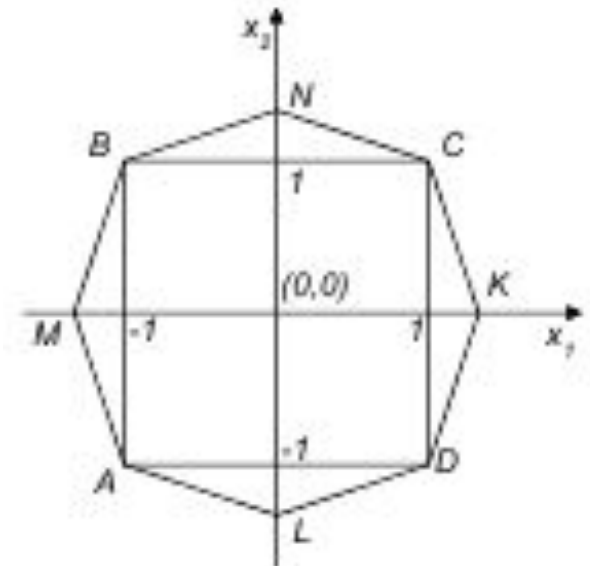
Лучшим методом планирования является такой метод, который обеспечивает одинаковую точность во всех направлениях на одинаковом расстоянии от центра. Таким методом является рототабельное композиционное планирование.

Рототабельное композиционное планирование

Критерием оптимальности в рототабельном планировании является условие $\sigma_y^2 = \text{const}$ при одинаковом удалении точек эксперимента от центра, т.е. $R = \text{const}$.

Если имеются двухфакторные планы, то, как уже было отмечено, типичными примерами рототабельных планов являются планы, представляемые вершинами и, по крайней мере, одной центральной точкой любого $(n-1)$ -мерного правильного многоугольника, который можно вписать в круг (рис.5).

Рис.5. Восьмиугольный план эксперимента



Композиционные центральные рототабельные планы также как и ортогональные состоят из трех сфер: сфера нулевого радиуса - центральные точки; сфера точек куба или гиперкуба и сфера звездных точек.

Равномерность расположения точек на сфере приводит к вырожденным матрицам. Для устранения вырожденности используют сферу нулевого радиуса с несколькими центральными точками.

Таблица 4.7

n	α	N_{α}	N_0	N_c	N
2	1,414	4	5	4	13
3	1,682	6	6	8	20
4	2	8	7	16	31

где N_{α} - число звездных точек; N_0 - число точек в центре эксперимента; N_c - количество точек куба (гиперкуба); N - общее число точек факторного пространства.

Матрица планирования рототабельного плана второго порядка для трехфакторного эксперимента будет представлена в таблице 8.

Таблица 8

[illegible]

Эксперимент проводится аналогично ПФЭ, однако оценки коэффициентов рассчитываются по своим формулам:

$$b_0 = \frac{A}{N} \left[2\lambda^2 (n+2) \sum_{j=1}^N x_{j,0} \bar{y}_j - 2\lambda C \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{j,i} \bar{x}_j \right]$$

$$b_{ii} = \frac{A}{N} \left\{ C^2 [(n+2)\lambda - n] \sum_{j=1}^N x_{j,i} \bar{y}_j + C^2 (1-\lambda) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{j,i} \bar{x}_j - 2\lambda C \sum_{j=1}^N x_{j,0} \bar{y}_j \right\}$$

$$b_i = \frac{C}{N} \sum_{j=1}^N x_{j,i} \bar{y}_i$$

$$b_{ij} = \frac{C^2}{N\lambda} \sum_{u=1}^N x_{ui} x_{uj} \bar{y}_u$$

$$C = \frac{N}{\sum_{j=1}^N x_{j,i}}, A = \frac{1}{2\lambda[(n+2)(\lambda-n)]}, \lambda = \frac{nN \sum_{w=1}^k N_w P_w}{(n+2)(\sum_{w=1}^k N_w P_w^2)^2}$$

где N_w - число точек на сфере радиуса P_w ; k - число сфер ($k=3$).

Проводится проверка значимости коэффициентов по t - критерию Стьюдента. Оценки дисперсии и коэффициентов вычисляются по формулам:

$$S_{b_0}^2 = \frac{2A\lambda^2(n+2)S_y^2}{NP}$$

$$S_{b_{ii}}^2 = \frac{A[(n+1)\lambda - (n-1)]C^2S_y^2}{NP}$$

$$S_{b_{ij}}^2 = \frac{C^2S_y^2}{NP\lambda}$$

Проверка адекватности модели проводится методом Фишера