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: где k-число факторов

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{j=1}^{k} b_j x_j + \sum_{z=1}^{k} b_{jz} x_j x_z + \sum_{j=1}^{k} b_{jj} x_j^2 \quad 1 \le j < z \le k \qquad (1)$$

Число коэффициентов l в полиноме второго порядка

$$l = k + 1 + k + C^2_k \qquad (2)$$

, k - коэффициенты при x_j в первой степени,
k - коэффициенты при квадратичных членах,
C^2_k - количество сочетаний из k факторов по 2, равное числу эффектов парного взаимодействия

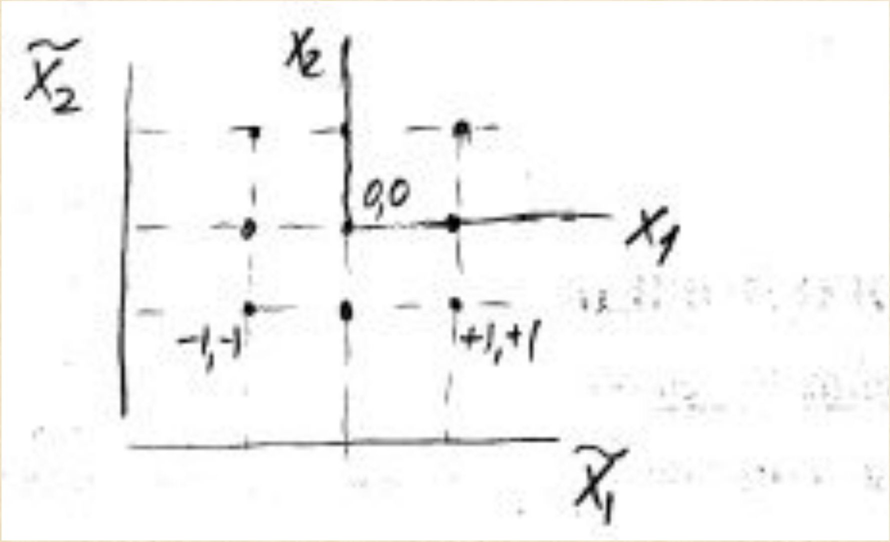
$$\ell = \frac{(k+1)(k+2)}{2}$$

Если факторов всего два, т.е. две переменных на трех уровнях, то число опытов N = 3^2 = 9 . Число членов в модели l = (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 3^2

ПФЭ 3^2

	x_1	x_2
1	0	0
2	+	0
3	−	0
4	0	+
5	+	+
6	−	+
7	0	−
8	+	−
9	−	−

или

	x_1	x_2
1	−	−
2	+	−
3	−	+
4	+	+
5	−	0
6	+	0
7	0	−
8	0	+
9	0	0

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.

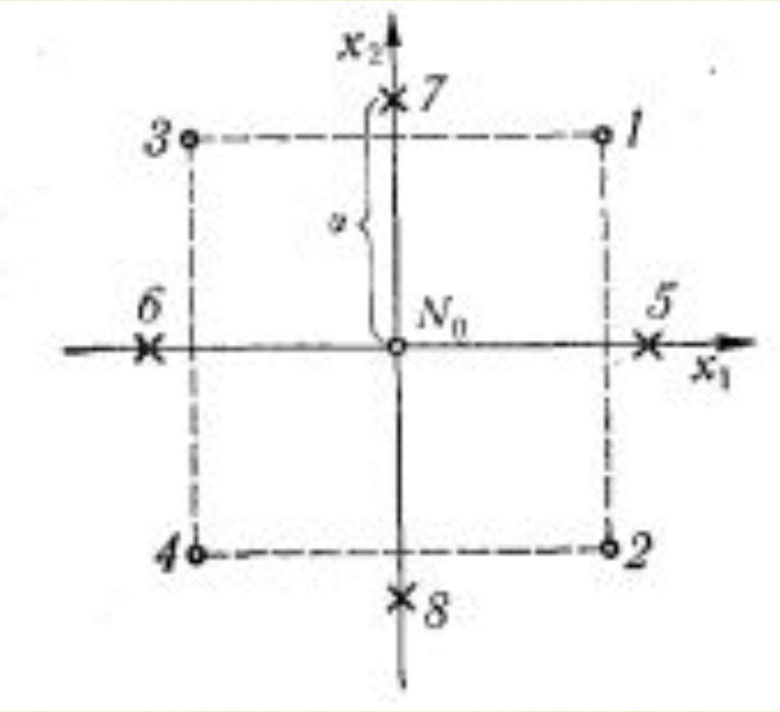
Число опытов в матрице композиционного плана второго порядка при k факторах составляет

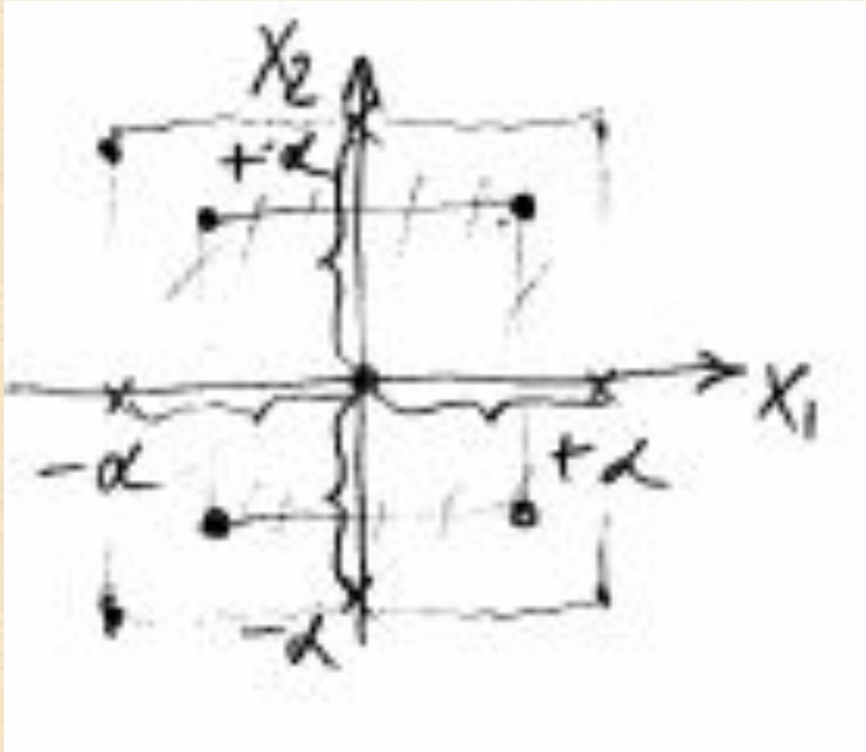
$$N_B = 2^k + 2k + N_0 \text{ при } k < 5$$

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

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^2_1	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

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

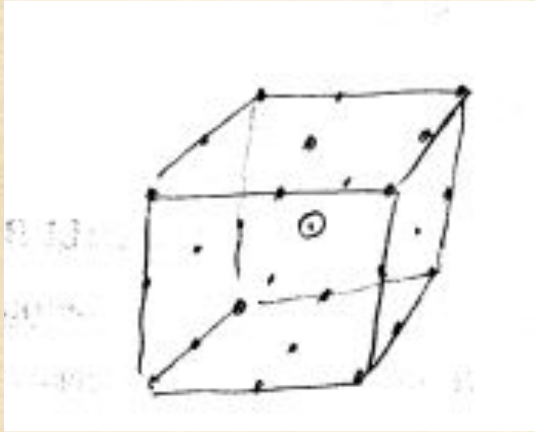
$k = 4$, $N_b = 2^4 + 2 \cdot 4 + 1 = 25$

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

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

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

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:

$$\sum_{i=1}^{N} x_{0i} x_{ji}^2 \neq 0 \qquad j = 1, 2, \ldots k \text{ (факторы)}$$

$$\text{и} \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 \cdot x_{ui}^2 \neq 0 \qquad u, j = 1, 2, \ldots k \qquad u \neq j$$

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 ДФЭ2^{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 $N_0 = 1$ $\alpha^2 (k=2) = 1;\ \alpha = 1\quad N = 9$

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

$x_{1i}' = 1 - 2/3 = 1/3$, для $x_{1i} = 0$ $x_{1i}' = -2/3$

Те же значения будет принимать и x_2'

Ортогональный план второго порядка для $k = 2$

№опыта	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 состояния 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

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

Дисперсии коэффициентов равны s^2_{bj}

$$s^2_{b_j} = s^2_{воспр.} \Big/ \sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2$$

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

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

Чтобы перейти к обычной записи, определяют b_0 по формуле

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

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

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

Хотя формулы для определения дисперсий коэффициентов в общем виде выглядят одинаково

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

однако для разных столбцов матрицы планирования $\sum\limits_{i=1}^{N} x_{ji}^2$

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 «y» будет различной.

Таблица 51. **Формулы расчета по композиционному ортогональному плану второго порядка**

№ п/п	Расчетная формула	Обозначения
1	$\tilde{y} = \sum_{i} b_i x_i + \sum_{i<j} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i} b_{ii} x_i^2$	$i = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ n$
	$B = (X^{\tau} X)^{-1} X^{\tau} Y; \quad b_0 = \sum_{u=1}^{N} y_u / N;$	Суммирование от $u = 1$ до N;
2	$b_i = \dfrac{\sum x_{iu} y_u}{\sum x_{iu}^2}; \quad b_{ij} = \dfrac{\sum x_{iu} x_{ju} y_u}{\sum (x_{iu} x_{ju})^2};$	N — число опытов;
	$b_{ii} = \dfrac{\sum x'_{iu} y_u}{\sum (x'_{iu})^2}$	Кодирование $x'_i = x_i^2 - \bar{x}_i^2$

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	$$s_0^2 = \frac{1}{N_0 - 1} \sum_{k=1}^{N_0} (y_{0k} - \bar{y}_0)^2$$	N_0 — число опытов в центре плана; s_0^2 — ошибка опыта
5	$s_{b_0}^2 = s_0^2/N$; $s_{b_i}^2 = s_0^2/\sum x_{iu}^2$; $s_{b_{ij}}^2 = s_0^2/\sum (x_{iu}x_{ju})^2$; $s_{b_{ii}}^2 = s_0^2/\sum (x'_{iu})^2$;	$s_{b_0}^2$, $s_{b_i}^2$, $s_{b_{ii}}^2$, $s_{b_{ij}}^2$ — дисперсии коэффициентов регрессии

Таблица 51. **Формулы расчета по композиционному ортогональному плану второго порядка**

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

Таблица 51. **Формулы расчета по композиционному ортогональному плану второго порядка**

№ п/п	Расчетная формула	Обозначения
6	$$s^2_{\text{ад}} = \frac{1}{N - l}\sum_{u=1}^{N}(y_u - \tilde{y}_u)^2;$$ $$F_{\text{р}} = \frac{s^2_{\text{ад}}}{s^2_{\text{о}}}.$$	l — число оставшихся членов в уравнении; $s^2_{\text{ад}}$ — дисперсия адекватности; $F_{\text{р}}$ — расчетное значение критерия Фишера.
6а	Условие адекватности $$F_{\text{р}} < F_{\text{т}}(q, f_{\text{ад}}, f_0)$$	$F_{\text{т}}$ — табличное значение критерия Фишера.

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 — 1976