МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
«ХАРКІВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»

ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
до самостійної роботи
з курсів
«Основи наукових досліджень»
та «Сучасні методи наукових досліджень в обробці тиском»

для студентів освітньої програми
«Прикладна механіка»
денної і заочної форми навчання

Затверджено
редакційно-видавничою
радою університету,
протокол № 1 від 25.02.2021

Харків
НТУ “ХПІ”
2021

Планування експерименту. Методичні вказівки до самостійної роботи з курсів «Основи наукових досліджень» та «Сучасні методи наукових досліджень в обробці тиском»: для студентів освітньої програми «Прикладна механіка» денної і заочної форми навчання / уклад. В.І. Кузьменко, А.О. Окунь. – Харків : НТУ «ХПІ», 2021. – 44 с.

Укладачі: В.І. Кузьменко
А.О. Окунь

Рецензент О.І. Тришевський

Кафедра комп'ютерного моделювання та інтегрованих технологій обробки тиском

Вступ

Методичні вказівки «Планування експерименту» для студентів освітньої програми «Прикладна механіка» висвітлюють розділ курсів «Основи наукових досліджень» та «Сучасні методи наукових досліджень в обробці тиском» і призначені для виконання самостійної роботи студентами денної та заочної форми навчання. У даному виданні встановлено правила, необхідні для обґрунтованого вибору контрольованих параметрів при розробці та вдосконаленні діючих технологічних процесів в машинобудуванні і приладобудуванні на основі методів планування експерименту.

Впровадження статистичних методів планування експерименту дозволяє в значній мірі виключити інтуїтивний підхід, замінити його науково обґрунтованою програмою проведення експериментального дослідження, що включає об’єктивну оцінку результатів експерименту на всіх послідовних етапах дослідження.

Основне завдання дослідження при плануванні експерименту – оптимізація, що полягає в знаходженні сукупності варійованих факторів, при яких обрана цільова функція (параметр оптимізації) набуває екстремального значення, розв’язується оптимальним чином. При цьому здійснюється мінімальна кількість дослідів, що дозволяє зробити на кожному етапі надійну статистичну оцінку. Навіть при неповному знанні механізму досліджуваного процесу спрямованим експериментом можна отримати математичну модель, що включає найбільш значущі фактори технологічного процесу незалежно від їх фізичної природи. Така модель може бути з успіхом застосована для знаходження необхідних режимів роботи процесу і керування ним.

Мета даної методики – застосування на практиці майбутніми інженерами-технологами методів планування експериментів для отримання лінійної математичної моделі при визначенні контрольованих параметрів складних технологічних процесів.

Завдання вибору контрольованих параметрів складається у визначенні значимих чинників, які визначають хід технологічного процесу, з метою подальшого систематичного контролю. При вирішенні поставленого завдання необхідні такі умови:

– рішення повинні мати певні обмеження, оскільки вони допускають оптимізацію тільки одного параметра деталі, складальної одиниці або процесу;

– процес повинен бути заданий безліччю факторів;

– кожен фактор повинен бути керованим;

– результати дослідів повинні відтворюватися;
– досліди рівноцінні, тобто різницею у вартості можна знехтувати;
– математична модель заздалегідь невідома.

За даною методикою можуть бути вирішені завдання з числом факторів від 2 до 31. Для побудови математичних моделей застосовують повний або дробовий факторний план експерименту, що володіє оптимальною матрицею планування.

1. Основні поняття і визначення

Під *експериментом* будемо розуміти сукупність операцій, що здійснюються над об'єктом дослідження з метою отримання інформації про його властивості. Експеримент, в якому дослідник на свій розсуд може змінювати умови його проведення, називається *активним експериментом*. Якщо дослідник не може самостійно змінювати умови його проведення, а лише реєструє їх, то це *пасивний експеримент*.

Найважливішим *завданням* методів обробки отриманої в ході експерименту інформації є задача побудови *математичної моделі досліджуваного явища, процесу, об'єкта* . Її можна використовувати і при аналізі процесів і при проектуванні об'єктів. Можна отримати добре апроксимуючу математичну модель, якщо цілеспрямовано застосовується активний експеримент. Іншим завданням обробки отриманої в ході експерименту інформації є задача оптимізації, тобто знаходження такої комбінації незалежних змінних, що впливають на результат, при якій обраний показник оптимальності набуває екстремального значення.

Дослід – це окрема експериментальна частина.

План експерименту – сукупність даних, що визначають кількості, умови і порядок проведення дослідів.

Планування експерименту – вибір плану експерименту, що задовольняє заданим вимогам, сукупність дій спрямованих на розробку стратегії експериментування (від отримання апріорної інформації до отримання працездатної математичної моделі або визначення оптимальних умов). Це цілеспрямоване керування експериментом, що реалізується в умовах неповного знання механізму досліджуваного явища.

У процесі вимірювань, наступної обробки даних, а також формалізації результатів у вигляді математичної моделі, виникають похибки і втрачається частина інформації, що міститься у вихідних даних. Застосування методів планування експерименту дозволяє визначити похибку математичної моделі і судити про її адекватність. Якщо точність моделі виявляється недостатньою, то застосування методів планування експерименту дозволяє модернізувати математичну модель з проведенням додаткових дослідів без втрати попередньої інформації і з мінімальними витратами.

Мета планування експерименту – знаходження таких умов і правил проведення дослідів, при яких вдається отримати надійну і достовірну інформацію про об’єкт з найменшою витратою праці, а також представити цю інформацію в компактній і зручній формі з кількісною оцінкою точності.

Нехай нас цікавить властивість (Y) об’єкта, яка залежить від декількох (n) незалежних змінних (X_1, X_2, ..., X_n), і ми хочемо з’ясувати характер цієї залежності – $Y = F(X_1, X_2, ..., X_n)$, про яку ми маємо лише загальне уявлення. Величина Y – називається «відгук» , а сама залежність $Y = F(X_1, X_2, ..., X_n)$ – «функція відгуку» .

Відгук повинен бути визначений кількісно. Однак можуть зустрічатися і якісні ознаки Y. У цьому випадку можливе застосування рангового підходу. Приклад рангового підходу – оцінка на іспиті, коли одним числом оцінюється складний комплекс отриманих відомостей про знання студента.

Незалежні змінні X_1, X_2, ..., X_n – інакше фактори, також повинні мати кількісну оцінку. Якщо використовуються якісні чинники, то кожному їх рівню має бути присвоєно будь-яке число. Важливо вибирати в якості факторів лише незалежні змінні, тобто тільки ті, які можна змінювати, не зачіпаючи інші фактори. Фактори повинні бути однозначними. Для побудови ефективної математичної моделі доцільно провести попередній аналіз значущості факторів (ступеня впливу на функцію), їх ранжування та виключити малозначні фактори.

Діапазони зміни факторів задають область визначення Y. Якщо прийняти, що кожному фактору відповідає координатна вісь, то отриманий простір називається факторним простором. При $n = 2$ область визначення Y являє собою прямокутник, при $n = 3$ – куб, при $n > 3$ – гіперкуб.

При виборі діапазонів зміни факторів потрібно враховувати їх сумісність, тобто контролювати, щоб у цих діапазонах будь-які поєднання чинників були б реалізовані в дослідах і не призводили б до абсурду. Для кожного з факторів вказують граничні значення

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

Регресійний аналіз функції відгуку призначений для отримання її математичної моделі у вигляді рівняння регресії

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

де B_1, ..., B_m – деякі коефіцієнти; e – похибка.

Серед основних методів планування, що застосовуються на різних етапах дослідження, використовують:

– планування експерименту, що відсікає, основне значення якого – виділення з усієї сукупності факторів групи істотних факторів, що підлягають подальшому детальному вивченню;

– планування експерименту для дисперсійного аналізу, тобто складання планів для об’єктів з якісними факторами;

– планування регресійного експерименту, що дозволяє отримувати регресійні моделі (поліноміальні і інші);

– планування екстремального експерименту, в якому головне завдання – експериментальна оптимізація об’єкта дослідження;

– планування при вивченні динамічних процесів і т.д.

Ініціатором застосування планування експерименту є Р. А. Фішер, інший автор відомих перших робіт – Ф. Йетс. Далі ідеї планування експерименту формувалися в працях Дж. Боксу, Дж. Кіфера. У нашій країні – в працях Г. К. Кола, Є. В. Маркова та ін.

В даний час методи планування експерименту закладені в спеціалізованих пакетах, широко представлених на ринку програмних продуктів, таких, наприклад , як: StatGrapfics, Statistica, SPSS, SYSTAT та ін.

Представлення результатів експериментів

При використанні методів планування експерименту необхідно знайти відповіді на 4 питання:

1) Які поєднання факторів і скільки таких сполучень необхідно взяти для визначення функції відгуку?

2) Як знайти коефіцієнти B_0, B_1, ..., B_m?

3) Як оцінити точність представлення функції відгуку?

4) Як використовувати отримане подання для пошуку оптимальних значень Y?

Геометричне представлення функції відгуку в факторному просторі X_1, X_2, ..., X_n називається поверхнею відгуку (рис. 1).

Якщо досліджується вплив на Y лише одного фактору X_1, то знаходження функції відгуку – досить просте завдання. Поставивши собі завдання знаходження функції відгуку за кількома значеннями цього фактору, в результаті дослідів отримуємо відповідні значення Y і графік $Y = F\ (X)$ (рис. 2).

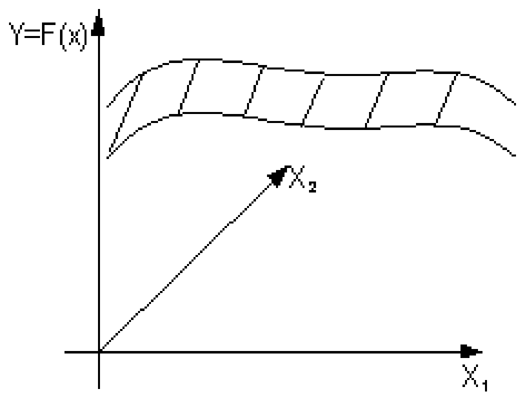


Рисунок 1 – Поверхня відгуку

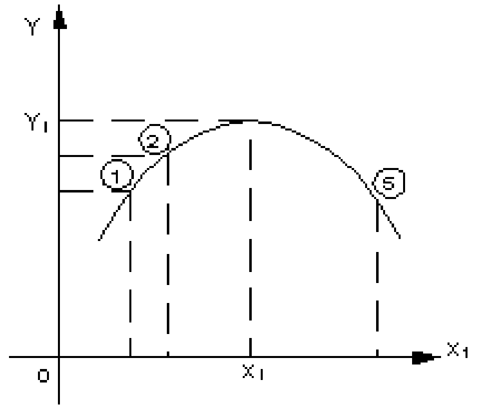


Рисунок 2 – Побудова функції відгуку однієї змінної за дослідними даними

За його виглядом можна підібрати математичний вираз функції відгуку. Якщо ми не впевнені, що досліди добре відтворюються, то зазвичай досліди повторюють кілька разів і отримують залежність з урахуванням розкиду дослідних даних.

Якщо чинників два, то необхідно провести досліди при різних співвідношеннях цих факторів. Отриману функцію відгуку в тривимірному просторі (див. рис. 1) можна аналізувати, проводячи ряд перерізів з фіксованими значеннями одного з факторів (рис. 3). Виокремлені графіки перерізів можна апроксимувати сукупністю математичних виразів.

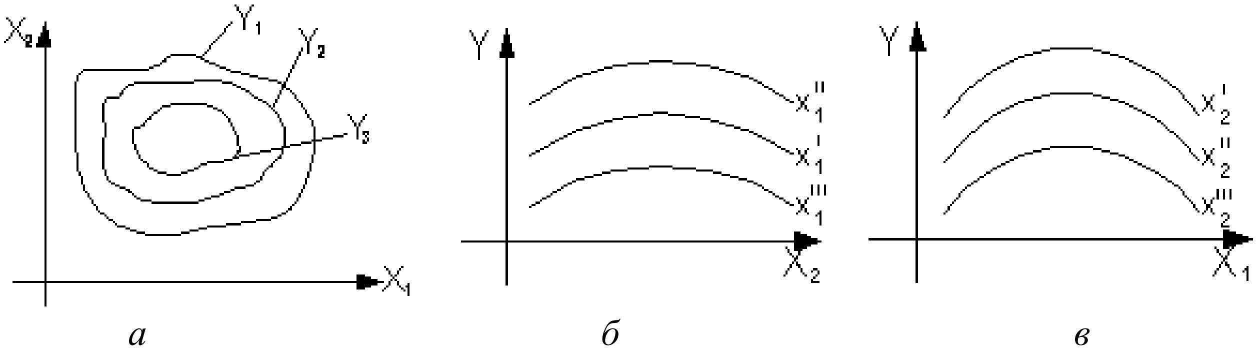


Рисунок 3 – Перерізи поверхні відгуку при фіксованих відгуках (*а*) і змінних (*б, в*)

При трьох і більше факторах завдання стає практично нерозв'язною. Якщо і будуть знайдені рішення, то використовувати сукупність виразів достатньо важко, а часто і не реально.

Наприклад, нехай необхідно дослідити вплив U, f і R^r на $M_п$ і P_2 асинхронного двигуна (АД) (рис. 4).

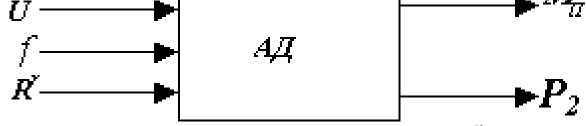


Рисунок 4 – Дослідження впливу U, f і R^r на $M_п$ і P_2 АД

Якщо в діапазоні зміни кожного фактору взяти хоча б по п'ять точок (табл. 1), то для того, щоб виконати досліди при всіх можливих поєднаннях значень факторів (їх три) необхідно виконати $5^3 = 125$ дослідів і сформувати по $5^2 = 25$ кривих для кожної з двох функцій відгуку. Якщо ми хочемо хоча б продублювати досліди, щоб знизити похибку, то число дослідів пропорційно зростає, тому довільне виконання дослідів при числі факторів більше двох і використання їх результатів – практично нереально.

Таблиця 1 – Точки відповідно до факторів

U, В	170	180	190	200	210	220
f, Гц	40	45	50	55	60	65
R^r, Ом	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6

2. Розкладання функції відгуку в степеневий ряд, кодування факторів

Якщо заздалегідь невідомо аналітичний вираз функції відгуку, то можна розглядати не саму функцію, а її розкладання, наприклад в степеневий ряд у вигляді полінома

$$Y = B_0 + B_1X_1 + \ldots + B_nX_n + B_{12}X_1X_2 + \ldots B_{nn-1}X_nX_{n-1} + B_{11}X_1^2 + \ldots + B_{nn}X_n^2 + \ldots.$$

Розкладання в степеневий ряд функції можливо в тому випадку, якщо сама функція є неперервною і гладкою. На практиці зазвичай обмежуються числом членів степеневого ряду і апроксимують функцію поліномом деякого ступеня.

Фактори можуть мати різні розмірності (А, В, Вт, об/хв) і різко відрізняються кількісно. У теорії планування експерименту використовують кодування факторів.

Ця операція полягає у виборі нового масштабу для кодованих факторів (рис. 5), причому такого, щоб мінімальне значення кодованих факторів відповідало «–1», а максимальне значення «+1» , а також в переносі початку координат в точку з координатами $X_{1ср}$, $X_{2\,р}$, ..., $X_{nср}$.

$$X_{iср} = \frac{X_{i\min} + X_{i\max}}{2}$$

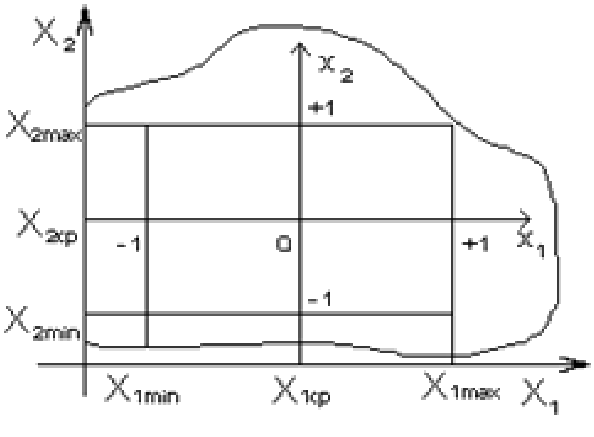


Рисунок 5 – Простір кодованих факторів

Поточне значення кодованого фактору

$$x_i = \frac{X_i - X_{i\text{ср}}}{X_{i\text{ср}} - x_{i\min}} = \frac{X_i - X_{i\text{ср}}}{X_{i\min} - X_{i\text{ср}}} = \frac{2X_i - X_{i\max} - X_{i\min}}{X_{i\max} - X_{i\min}},$$

де X_i – іменоване (абсолютне) значення фактору; x_i – кодоване значення фактору; $X_{i\text{ср}} - X_{i\min} = X_{i\max} - X_{\text{ср}}$ – інтервал варіювання фактору.

Границя сумісності факторів указана на рис. 5 у вигляді кривої лінії.

Якщо фактор змінюється дискретно, наприклад, він є якісним, то кожному рівню цього кодованого фактору присвоюються числа в діапазоні від +1 до –1. Так при двох рівнях це +1 і –1, при трьох рівнях +1, 0, –1 і т.д.

Функція відгуку може бути виражена через кодовані фактори $Y = f(x_1, ..., x_n)$ і записана в поліноміальному вигляді

$$Y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + ... + b_nx_n + b_{12}x_1x_2 + ... + b_{nn\text{-}1}x_{n\text{-}1}x_n + b_{11}x_1^2 + ... + b_{nn}x_n^2 + ...$$

Очевидно, що $B_i \neq b_i$, але

$$Y = F(X_1, ..., X_i, ..., X_n) = f(x_1, ... x_i, ..., x_n).$$

Для полінома, записаного в кодованих факторах, ступінь впливу факторів або їх сполучень на функцію відгуку визначається величиною їх коефіцієнта b_i. Для полінома в іменованих факторах величина коефіцієнта B_i ще не говорить однозначно про ступінь впливу цього фактору або їх поєднань на функцію відгуку.

Степеневий вигляд полінома може бути записаний в більш компактній формі

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^{n} b_i x_i + \sum_{\substack{i=1,...,n-1\\ j=i,...,n}} b_{ij}x_ix_j + \sum_{i=1}^{n} b_{ii}x_i^2 + \sum_{\substack{i=1,...,n-2\\ j=i,...,n-1\\ k=j,...,n}} b_{ijk}x_ix_jx_k + \sum_{i=1}^{n} b_{iii}x_i^3 + ...$$

При визначенні загального числа членів степеневого ряду кількість парних поєднань для n факторів в поліномі, потрійних поєднань, i-них сполучень $\left(C_n^i\right)$ при $n > i$ знаходиться за співвідношенням

$$C_n^i = \frac{n(n-1)(n-2)...(n-i-1)}{1\cdot 2\cdot 3\cdot ...\cdot i}.$$

Наприклад, для набору чотирьох чисел (n = 4) – 1, 2, 3, 4 число потрійних поєднань становить

$$C_4^3 = \frac{4\cdot 3\cdot 2}{1\cdot 2\cdot 3} = 4 - 123, 134, 124, 234.$$

Якщо вважати, що існує фактор x_0 завжди рівний 1, то

$$b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + ... + b_nx_n = b_0x_0 + b_1x_1 + ... + b_nx_n = \sum_{i=0}^{n} b_ix_i.$$

Якщо додатково все подвійні, потрійні і т.д. поєднання чинників, а також квадрати факторів і всі відповідні їм коефіцієнти позначити через x_i і b_i, для $i = n + 1, ..., m$, то степеневий ряд можна записати у вигляді

$$Y = \sum_{i=0}^{m} b_i x_i .$$

Тут $m + 1$ загальне число розглянутих членів статечного ряду.

Для лінійного полінома з урахуванням всіх можливих поєднань чинників

$$m+1 = 1 + C_n^1 + ... + C_n^i + ... + C_n^n .$$

Повний квадратичний поліном виглядає наступним чином:

$$Y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 = \sum_{i=0}^{5} b_i x_i ,$$

де $x_0 = 1$, $x_3 = x_1 x_2$, $x_4 = x_1^{\,2}$, $x_5 = x_2^{\,2}$, $b_3 = b_{12}$, $b_4 = b_{11}$, $b_5 = b_{22}$.

Матричні перетворення при обробці результатів експерименту

При матричної записи результатів різних N дослідів для поліноміального представлення результату матимемо $Y_U = \sum_{i=0}^{m} b_i x_{iU}$

$$Y = X \cdot B,$$

де X – матриця поєднань чинників.

$$X = \begin{vmatrix} x_{01} & x_{11} & x_{i1} & x_{m1} \\ x_{02} & x_{12} & x_{i2} & x_{m2} \\ x_{0U} & x_{1U} & x_{iU} & x_{mU} \\ x_{0N} & x_{1N} & x_{iN} & x_{mN} \end{vmatrix},$$

де N рядків, $m + 1$ стовпець.

Тут 0,1, ..., i, ..., m – номери членів рівняння; 1, ..., U, ..., N ... – номери дослідів.

Матриця X – прямокутна, що містить $m + 1$ стовпець і N рядків.

Якщо врахувати, що в матриці X елементи $x_{0U} = 1, U = 1,..., N$, то матрицю X можна записати

$$X = \begin{array}{r} 1 \\ 2 \\ U \\ N \end{array} \begin{vmatrix} 1 & x_{01} & x_{11} & x_{i1} & x_{m1} \\ 1 & x_{02} & x_{12} & x_{i2} & x_{m2} \\ 1 & x_{0U} & x_{1U} & x_{iU} & x_{mU} \\ 1 & x_{0N} & x_{1N} & x_{iN} & x_{mN} \end{vmatrix},$$

$$Y = \begin{vmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_U \\ Y_N \end{vmatrix} - \begin{matrix}\text{матриця стовпець} \\ \text{результатів досліду,}\end{matrix} \quad B = \begin{vmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_U \\ B_N \end{vmatrix} - \begin{matrix}\text{матриця стовпець} \\ \text{коефіцієнта полінома}\end{matrix}.$$

Домножимо ліву і праву частину цього рівняння на одну й ту ж саму матрицю X_t – транспоновану матрицю X

$$X_t \cdot X \cdot B = X_t \cdot Y.$$

Транспонована матриця – це матриця, у якої по відношенню до вихідної стовпчики і рядки поміняні місцями.

$$X_t = \begin{vmatrix} x_{01} & x_{02} & x_{0U} & x_{0N} \\ x_{11} & x_{12} & x_{1U} & x_{1N} \\ x_{i1} & x_{i2} & x_{iU} & x_{iN} \\ x_{m1} & x_{m2} & x_{mU} & x_{mN} \end{vmatrix},$$

де $m + 1$ рядок , N стовпців , $C = X_t \cdot X$ матриця, отримана в результаті добутку транспонованої матриці на початкову. Вона є квадратною матрицею, що містить $m + 1$ рядок і $m + 1$ стовпець:

$$C \cdot B = X_t \cdot Y.$$

Для того, щоб отримати в загальному вигляді матрицю-стовпець коефіцієнтів B, необхідно помножити обидві частини останнього матричного рівняння зліва на матрицю C^{-1} – матрицю зворотну матриці C.

$$C^{-1} \cdot C \cdot B = C^{-1} \cdot X_t \cdot Y.$$

Зворотна матриця будується так (використовується процедура перетворення матриці), що при множенні її на початкову матрицю виходить одинична матриця E, у якій на головній діагоналі розташовані 1, а поза нею – 0:

$$C^{-1} \cdot C = E = \begin{vmatrix} 10.....0 \\ 010...0 \\ .... \\ 0.....01 \end{vmatrix}.$$

Остаточно в загальному вигляді матриця-стовпець коефіцієнтів полінома

$$B = C^{-1} \cdot X_t \cdot Y.$$

Розглянемо в якості простого прикладу поліном у вигляді

$$Y_U = b_0 x_0 + b_1 x_U; \quad x_0 = 1, U = 1, ..., N,$$

що формується за результатами N дослідів.

$$X=\begin{vmatrix}1 & x_1\\ 1 & x_2\\ 1 & x_U\\ 1 & x_N\end{vmatrix};\quad Y=\begin{vmatrix}x_1\\ x_2\\ x_U\\ x_N\end{vmatrix};\qquad B=\begin{vmatrix}b_0\\ b_1\end{vmatrix};\ X_t=\begin{vmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ x_1 & x_2 & x_U & x_N\end{vmatrix};$$

$$C=X_t\cdot X=\begin{vmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ x_1 & x_2 & x_U & x_N\end{vmatrix}\cdot\begin{vmatrix}1 & x_1\\ 1 & x_2\\ 1 & x_U\\ 1 & x_N\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}N & \sum_{U=1}^{N}x_U\\ \sum_{U=1}^{N}x_U & \sum_{U=1}^{N}x_U^2\end{vmatrix};$$

$$C\cdot B=\begin{vmatrix}N & \sum_{U=1}^{N}x_U\\ \sum_{U=1}^{N}x_U & \sum_{U=1}^{N}x_U^2\end{vmatrix}\cdot\begin{vmatrix}b_0\\ b_1\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}N\cdot b_0+b_1\cdot\sum_{U=1}^{N}x_U\\ b_0\cdot\sum_{U=1}^{N}x_U+b_1\cdot\sum_{U=1}^{N}x_0^2\end{vmatrix};$$

$$X_t\cdot Y=\begin{vmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ x_1 & x_2 & x_U & x_N\end{vmatrix}\cdot\begin{vmatrix}x_1\\ x_2\\ x_U\\ x_N\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}\sum_{U=1}^{N}Y_U\\ \sum_{U=1}^{N}x_UY_U\end{vmatrix};$$

$$C\cdot B=X_t\cdot Y.$$

$$\begin{vmatrix}N\cdot b_0+b_1\cdot\sum_{U=1}^{N}x_U\\ b_0\cdot\sum_{U=1}^{N}x_U+b_1\cdot\sum_{U=1}^{N}x_0^2\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}\sum_{U=1}^{N}Y_U\\ \sum_{U=1}^{N}x_UY_U\end{vmatrix}\quad\text{або}\quad\begin{cases}N\cdot b_0+b_1\cdot\sum_{U=1}^{N}x_U=\sum_{U=1}^{N}Y_U\\ b_0\cdot\sum_{U=1}^{N}x_U+b_1\cdot\sum_{U=1}^{N}x_0^2=\sum_{U=1}^{N}x_UY_U\end{cases}.$$

Звідки рішення системи щодо коефіцієнтів b_0 і b_1

$$b_0=\frac{\sum_{U=1}^{N}Y_U\cdot\sum_{U=1}^{N}x_U^2-\sum_{U=1}^{N}x_UY_U\cdot\sum_{U=1}^{N}x_U}{N\sum_{U=1}^{N}x_U^2-\left(\sum_{U=1}^{N}x_U\right)^2};$$

$$b_0=\frac{\sum_{U=1}^{N}Y_Ux_U-\sum_{U=1}^{N}Y_U\cdot\sum_{U=1}^{N}x_U}{N\sum_{U=1}^{N}x_U^2-\left(\sum_{U=1}^{N}x_U\right)^2}.$$

Цей результат повністю збігається із співвідношеннями для такого ж поліному при використанні методу найменших квадрантів, де використовується чисельний показник мінімальності суми квадрантів відхилень у всіх N дослідах. Отже, побудований таким чином поліном буде проходити найближчим чином до результатів експерименту.

3. Ортогональне планування експерименту

Структура матриці C відіграє важливу роль в реалізації алгоритму визначення коефіцієнтів апроксимуючого полінома. Структура матриці C залежить від вибору значень факторів в N дослідах. Тому бажано особливим чином вибирати значення факторів в дослідах.

Елемент C_{ii} на головній діагоналі матриці C (i-тий рядок, i-тий стовпець) представляється сумою квадратів значень i-того стовпця сполучень факторів матриці X в N дослідах

$$C_{ii} = \sum_{U=1}^{N} x_{iU}^2, \; i = 0,1,2,...m.$$

Елементи матриці симетрично розташовані відносно головної діагоналі рівні між собою, тобто матриця C – симетрична:

$$C_{ij} = C_{ji}, \; i = 0,1,2,...m, \; j = 0,1,2,...m,$$

де перший індекс вказує номер стовпця матриці X, другий індекс – номер рядка.

При цьому

$$C_{ij} = \sum_{U=1}^{N} x_{iU} \cdot x_{jU}, \quad C_{ji} = \sum_{U=1}^{N} x_{jU} \cdot x_{iU}.$$

Щоб існувала матриця C^{-1}, матриця C розміру ($1 + m$; $1 + m$) повинна бути невиродженою, тобто її визначник повинен бути відмінний від нуля. Ця умова виконується, якщо всі $m + 1$ стовпців матриці X лінійно незалежні. Крім того, необхідно, щоб число різних поєднань факторів в матриці X (число дослідів N) мало бути не менше ніж $m + 1$. Ця умова виходить з того, що для визначення $m + 1$ коефіцієнта полінома необхідно не менше $m + 1$ рівнянь (дослідів).

Отримані коефіцієнти B дозволяють сформувати рівняння функції відгуку при $m + 1$ членах рівняння. Якщо точність цього рівняння виявилася недостатньою, то потрібно взяти рівняння з великим числом членів і почати все заново так як всі коефіцієнти B виявляються залежними один від одного. Це виникає при використанні пасивного експерименту. Однак, якщо цілеспрямовано використовувати активний експеримент і особливим чином побудувати матрицю сполучень факторів в дослідах X, використовувати планування експерименту, то коефіцієнти полінома визначаються незалежно один від одного.

Стратегія застосування планів полягає в принципі поступового планування – поступового ускладнення моделі. Починають з найпростішої моделі, знаходять для неї коефіцієнти, визначають її точність. Якщо точність не задовольняє, то планування і модель поступово ускладняються.

Завдання планування полягає в тому, що потрібно будувати матрицю *X*, щоб матриця *C* легко зверталася і коефіцієнти *B* визначалися незалежно один від одного. Ці вимоги виконуються, якщо матриця *C* є діагональною, тобто всі елементи розташовані не на головній діагоналі матриці дорівнюють нулю

$$C_{ij} = 0, \quad i \neq j \quad i = 0,1,2,...m, \quad j = 0,1,2,...m,$$

або

$$C = \begin{vmatrix} C_{00} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & 0 & C_{ii} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{mm} \end{vmatrix}.$$

Тоді обернена матриця визначається як

$$C = \begin{vmatrix} \frac{1}{C_{00}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{C_{11}} & 0 & 0 & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{C_{ii}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{C_{mm}} \end{vmatrix}.$$

У цьому випадку система рівнянь розпадається на m + 1 незалежних рівнянь і коефіцієнти полінома визначаються як

$$b_i = \frac{1}{C_{ii}} \sum_{U=1}^{N} \left(x_{iU} \cdot Y_U \right); \quad i = 0,1,2,...,m.$$

Якщо врахувати, що C_{ii} визначається як сума квадратів значень факторів

$$C_{ii} = \sum_{U=1}^{N} x_{iU}^2,$$

то коефіцієнти визначаються як

$$b_i = \frac{\sum_{U=1}^{N}\left(x_{iU} \cdot Y_U\right)}{\sum_{U=1}^{N} x_{iU}^2}.$$

Вимога виконання умови $C_{ij} = 0$ полягає у виконанні умов

$$\sum_{U=1}^{N} x_{iU} \cdot x_{jU} = \sum_{U=1}^{N} x_{jU} \cdot x_{iU} = 0,$$

де i, j – номери стовпців в матриці X; $i = 0,1,2,...,m$ і $j = 0,1,2,...,m$, при $i \neq j$.

Кожен стовпець матриці X можна представити у вигляді вектору

$$X_i = \begin{vmatrix} x_{i1} \\ x_{iU} \\ x_{iN} \end{vmatrix}, \quad X_i = \begin{vmatrix} x_{j1} \\ x_{jU} \\ x_{jN} \end{vmatrix},$$

якщо

$$X_i \cdot X_j = \sum_{U=1}^{N} x_{iU} \cdot x_{jU} = 0,$$

то це означає що скалярний добуток двох векторів X_i і X_j дорівнює нулю, тобто вектори X_i і X_j – ортогональні.

Так як будь-який скалярний добуток двох різних стовпців в матриці X має дорівнювати нулю, то ця умова називається умовою ортогональності матриці X, а відповідне планування експерименту (визначення поєднань факторів) називається ортогональним плануванням.

Для ортогонального планування при врахуванні того, що $x_{0U} = 1$, $U = 1, \ldots, N$

$$\sum_{U=1}^{N} x_{0U} \cdot x_{iU} = \sum_{U=1}^{N} x_{iU} = 0.$$

Таким чином, при ортогональному плануванні сума елементів будь-якого стовпця матриці X, крім першого стовпця має дорівнювати нулю. Це правило використовується при побудові плану експерименту, тобто при визначенні яким чином потрібно міняти значення факторів в дослідах. Це правило показує, що якщо в ортогональному плануванні парне число рівнів, на яких фіксується кожен фактор, то ці рівні повинні бути симетрично розташовані відносно центральної точки $x = 0$, при непарному числі рівнів повинна використовуватися і центральна точка (рис. 6).

Крім властивості ортогональності план може мати властивості насиченості, ротатабельності та ін. План є насиченим, якщо загальне число дослідів N дорівнює числу невідомих коефіцієнтів полінома $m + 1$.

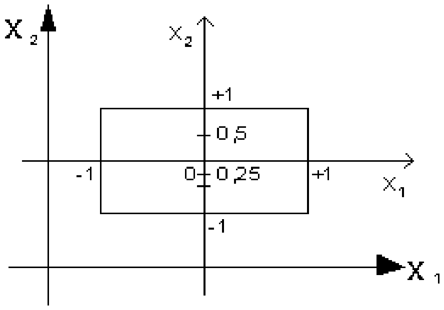


Рисунок 6 – Вибір рівнів варіювання
при ортогональному плануванні

План називається ротатабельним, якщо дисперсія відгуку однакова на одній відстані від центру плану при будь-якому напрямку в факторному просторі. У спрощеному вигляді це означає, що всі точки плану лежать на окружності (сфері, гіперсфері).

4. Плани повного факторного експерименту 2^n (плани ПФЕ 2^n)

Плани ПФЕ 2^n є найпростішими планами першого порядку. Основа 2 означає, що прийнято два рівня варіювання, на яких фіксуються фактори, а n – число факторів.

Для плану ПФЕ 2^2 число факторів дорівнює двом (n = 2) і число рівнів фіксування факторів також 2. Значення кодованих факторів вибираються у вигляді +1 і –1. Повне число можливих поєднань значень n факторів (число дослідів, а значить і число рядків плану) $N = 2^2 = 4$. Складається план, в якому число стовпців факторів і їх поєднань дорівнює числу членів рівняння. Так, для рівняння

$$Y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 \quad m+1=6$$

план ПФЕ 2^2 для цього рівняння представляється у вигляді табл. 2.

Таблиця 2 – План ПФЕ 2^2

i	0	1	2	3	4	5	–
U	x_0	x_1	x_2	$x_3 = x_1 \cdot x_2$	$x_4 = x_1^2$	$x_5 = x_2^2$	Y
1	+1	–1	–1	+1	+1	+1	Y_1
2	+1	+1	–1	–1	+1	+1	Y_2
3	+1	–1	+1	–1	+1	+1	Y_3
4	+1	+1	+1	+1	+1	+1	Y_4
$\sum_{U=1}^{N} x_{iU}$	4	0	0	0	4	4	–

У перший стовпець (i = 0) в усі чотири комірки заносяться +1. У другій стовпець (i = 1) заносяться одиниці із знаками, що чергуються, (починаємо з –1). У цьому випадку сума елемента стовпця дорівнює нулю. Третій стовпець заповнюємо одиницями, що чергуються через 2 елементи знаками. Сума елементів також дорівнює нулю. Геометричне відображення плану ПФЕ 2^2 із зазначенням номерів точок плану в факторному просторі представлено на рис. 7. Точки плану розташовуються у вершинах квадрата.

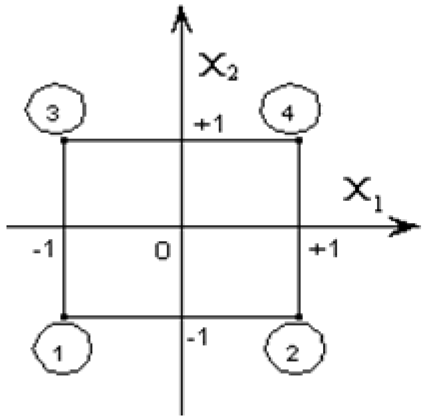


Рисунок 7 – Геометричне відображення плану ПФЕ 2^2
в факторному просторі

Елементи стовпців, відповідних добуткам факторів, отримують шляхом перемноження елементів попередніх стовпців. Таке правило дозволяє гарантувати, що ми не пропустили жодного можливого поєднання чинників в дослідах і в той же час не буде повторень однакових поєднань. Останні два стовпці чинників, відповідні квадратам чинників, складаються тільки з +1. Стовпці, обведені потовщеною рамкою, утворюють план експерименту (див. табл. 1). Стовпець x_1x_2, що не обведений потовщеною рамкою, при проведенні дослідів носить допоміжний характер.

Особливості плану ПФЕ 2^2.

1. Різних стовпців в таблиці вийшло лише чотири. Стовпці, що відповідають квадратам факторів, не відрізняються від стовпчика x_0 – це загальний результат для плану ПФЕ 2^n, що не дозволяє визначити окремо коефіцієнти при квадратах факторів. Тому плани ПФЕ 2^n називають планами першого порядку. Для визначення коефіцієнтів при квадратах факторів використовують плани другого порядку. Надалі в планах ПФЕ 2^n стовпці квадратів факторів зображуватися не будуть.

2. Число різних стовпців дорівнює числу різних сполучень факторів, тобто числу рядків плану числу дослідів N. Це теж загальний результат для цих планів, тобто за допомогою планів ПФЕ 2^n можна визначити всі коефіцієнти лінійного полінома з усіма можливими поєднаннями факторів, включаючи коефіцієнти $b_{12\,\dots\,n}$, що відображають максимальну взаємодію факторів вигляду $x_1x_2 \dots x_n$.

3. У плані ПФЕ 2^2 сума квадратів елементів будь-якого стовпця

$$\sum_{U=1}^{N} x_{iU}^2 = 4 = N.$$

Тому для планів ПФЕ 2^n

$$b_i = \frac{\sum_{U=1}^{N} x_{iU} \cdot Y_U}{N}.$$

Таким чином, за допомогою планів ПФЕ 2^n можна визначити вільний член рівняння b_0, $C_n^1 = n$ коефіцієнтів b_i, C_n^2 коефіцієнтів при різних взаємодіях двох чинників b_{ij}, C_n^3 коефіцієнтів потрійних взаємодій чинників b_{ijk}, ..., $C_n^n = 1$ коефіцієнт $b_{12 \ldots n}$ максимальної взаємодії факторів. Загальна кількість визначених коефіцієнтів

$$1 + n + C_n^2 + C_n^3 + \ldots + C_n^n = m + 1 = 2^2 = N.$$

План ПФЕ 2^n може бути насиченим, при виборі числа членів рівняння $m + 1 = N$, ненасиченим, при виборі числа членів рівняння і відповідно числа стовпців плану $m + 1 < N$. План ПФЕ 2^n є також ротатабельним, так як всі точки плану лежать на окружності (сфері, гіперсфері) з радіусом $r = \sqrt{n}$ відносно центру плану.

Для плану ПФЕ 2^3 число факторів $n = 3$. Виконується $N = 2^3 = 8$ дослідів. Рівняння може містити до восьми членів

$$Y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3.$$

Таким чином формується план з восьми рядків і восьми стовпців. У четвертому стовпці ($i = 3$) записуються одиниці зі знаками, що чергуються через чотири елементи. План ПФЕ 2^3 складається аналогічно плану ПФЕ 2^2 (табл. 3).

Таблиця 3 – План ПФЕ 2^3

i	0	1	2	3	4	5	6	7	
U	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	Y
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
$\sum_{U=1}^{N} x_{iU}$	8	0	0	0	0	0	0	0	0

Стовпці, обведені потовщеною рамкою, утворюють план експерименту. Стовпці, не обведені потовщеною рамкою, при проведенні дослідів носять допоміжний характер. Геометричне відображення плану ПФЕ 2^3 із вказівкою номерів точок плану в факторному просторі представлено на рис. 8. Точки плану розташовуються у вершинах куба.

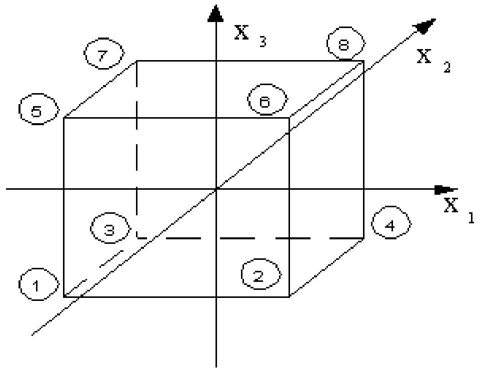


Рисунок 8 – Геометричне відображення плану ПФЕ 2^3
в факторному просторі

Приклад застосування плану ПФЕ 2^2.

Нехай в результаті проведення експериментів за планом ПФЕ 2^2, тобто при зміні двох факторів, ми отримали дослідні значення Y_1, Y_2, Y_3, Y_4. Поверхня, рівняння якої нас цікавить, має вигляд (рис. 9).

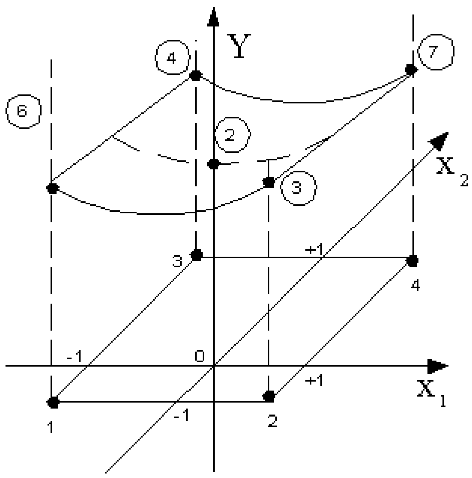


Рисунок 9 – Поверхня функції відгуку

Складаємо план ПФЕ 2^2 (табл. 4).

Таблиця 4 – план ПФЕ 2^2

i	0	1	2	3	4	5		
U	x_0	x_1	x_2	$x_3 = x_1 \cdot x_2$	Y	$\widehat{Y}'$	$\widehat{Y}''$	$\left\lvert\widehat{Y}'' - Y\right\rvert$
1	+1	–1	–1	+1	6	4,5	6	0
2	+1	+1	–1	–1	3	4,5	3	0
3	+1	–1	+1	–1	4	5,5	4	0
4	+1	+1	+1	+1	7	5,5	7	0
5	+1	0	0	0	2	5	5	3

Спочатку знайдемо коефіцієнти скороченого лінійного полінома вигляду

$$\widehat{Y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2$$

і результати обчислень $\widehat{Y}_1', \widehat{Y}_2', \widehat{Y}_3', \widehat{Y}_4',$ по ньому.

Розраховуємо коефіцієнти полінома.

$$b_0 = \frac{\sum_{U=1}^{N} x_{0U} \cdot Y_U}{4} = \frac{1 \cdot 6 + 1 \cdot 3 + 1 \cdot 4 + 1 \cdot 7}{4} = 5;$$

$$b_1 = \frac{\sum_{U=1}^{N} x_{1U} \cdot Y_U}{4} = \frac{-1 \cdot 6 + 1 \cdot 3 - 1 \cdot 4 + 1 \cdot 7}{4} = 0;$$

$$b_2 = \frac{\sum_{U=1}^{N} x_{2U} \cdot Y_U}{4} = \frac{-1 \cdot 6 - 1 \cdot 3 + 1 \cdot 4 + 1 \cdot 7}{4} = 0,5.$$

Поліном має вигляд

$$\widehat{Y}' = 5 + 0 \cdot x_1 + 0,5 \cdot x_2 .$$

Результати розрахунку по ньому наведені у відповідному стовпці плану. Спостерігаються розбіжності між Y і $\widehat{Y}'$. Якщо точність скороченого полінома не задовольняє, то за тими ж результатами дослідів можна сформувати більш повний поліном вигляду

$$\widehat{Y}' = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2 .$$

При цьому раніше визначені коефіцієнти залишаються без змін. Визначимо коефіцієнт при додатковому члені полінома

$$b_{12} = \frac{\sum_{U=1}^{N} x_{3U} \cdot Y_U}{4} = \frac{1 \cdot 6 - 1 \cdot 3 - 1 \cdot 4 + 1 \cdot 7}{4} = 1,5.$$

Поліном має вигляд

$$\widehat{Y} = 5 + 0 \cdot x_1 + 0,5 \cdot x_2 + 1,5 \cdot x_1 x_2 .$$

По ньому розраховуємо передбачені значення відгуку в точках плану (стовпець $\widehat{Y}''$). Поверхня, побудована за отриманим поліномом, проходить точно через чотири точки плану ($\left|\widehat{Y}'' - Y\right|$ = 0), за якими визначено коефіцієнти. Однак в інших точках області визначення функції, наприклад в центрі плану (точка 5 в плані, x_1 = 0, x_2 = 0), передбачені і дійсні значення, можуть не збігатися ($\left|\widehat{Y}_5'' - Y_5\right|$ = 3).

5. Плани дрібного факторного експерименту (плани ДФЕ)

При багатофакторному експерименті, особливо коли число факторів більше шести ($n > 6$), число дослідів планів ПФЕ 2^n ($N = 2^n$) стає надмірним. Якщо не потрібно визначення всіх коефіцієнтів неповного квадратичного полінома, то переходять до дробового факторного експерименту (ДФЕ) – частини повного факторного експерименту. Так, наприклад, якщо потрібно визначити лише коефіцієнти при самих факторах

$$Y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + ... + b_n x_n,$$

то план ПФЕ 2^n дає надмірну інформацію. Так при $n = 6$ в цьому випадку потребується визначити $n + 1 = 7$ коефіцієнтів, тоді як за планом ПФЕ необхідно провести $N = 2^6 = 64$ досліди.

Хоча ця надлишкова інформація не є даремною, вона дозволяє більш точно визначити коефіцієнти, але все ж часто використовують плани ДФЕ 2^{n-k}, де k – показник дробності плану ПФЕ. При $k = 1$ число дослідів в плані ДФЕ в два рази менше, ніж в плані ПФЕ, тому такі плани називають напіврепліка плану ПФЕ. Так при $k = 1$ для плану ДФЕ 2^{6-1} $N = 2^{6-1} = 32$, при $k = 2$ для плану ДФЕ 2^{6-2} $N = 2^{6-2} = 16$ і такий план називають чвертьреплікою, при $k = 3$ для плану ДФЕ 2^{6-3} $N = 2^{6-3} = 8$. При виборі дробності плану k необхідно враховувати, що число дослідів повинно бути більше числа членів рівняння. У розглянутому випадку величина k повинна бути такою, щоб задовольнялося умова

$$n + 1 \le 2^{n-k}.$$

План ДФЕ будується, як і план ПФЕ, але з меншим числом факторів. Решта чинників варіюються не довільно, а так щоб зберігалася ортогональність плану. Це забезпечується, якщо залишкові чинники варіюються за обраним співвідношенням, що генерується, наприклад як добуток будь-яких чинників з першої групи. Але це призводить до того, що в матриці X будуть існувати однакові стовпці. Отже, ми не зможемо знайти в чистому вигляді всі коефіцієнти неповного квадратичного полінома, а лише визначимо спільну величину коефіцієнтів для однакових стовпців.

Розглянемо побудову плану ДФЕ 2^{3-1}. Тут $n = 3$, $k = 1$, $N = 2^{3-1} = 4$. Перші два чинника варіюємо як і раніше для плану ПФЕ 2^2, а для третього фактору вибираємо співвідношення, що генерується у вигляді $x_3 = x_1 \cdot x_2$.

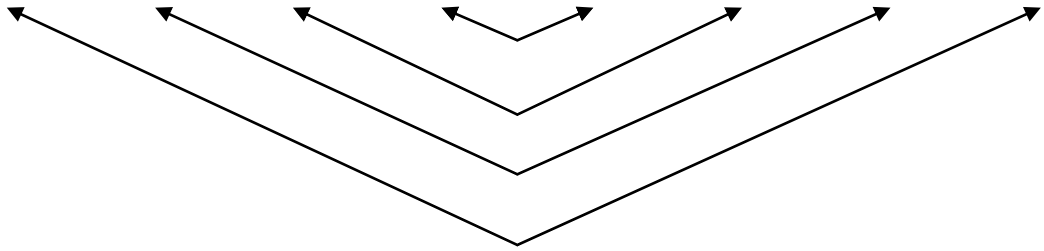
Для неповного квадратичного полінома

$$Y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{123} x_1 x_2 x_3$$

кількість стовпців плану становить вісім (табл. 5).

Таблиця 5 – Стовпці плану неповного квадратичного полінома

i	0	1	2	3	4	5	6	7
U	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$
1	+1	–1	–1	+1	+1	–1	–1	+1
2	+1	+1	–1	–1	–1	–1	+1	+1
3	+1	–1	+1	–1	–1	+1	–1	+1
4	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1



План є ортогональним, але в ньому виявилися чотири пари однакових стовпців. Тому можна визначити тільки чотири коефіцієнта, що відображають спільний вплив двох однакових стовпців

$$b_0 + b_{123} = \frac{\sum_{U=1}^{N} x_{0U} \cdot Y_U}{N}.$$

Сумарні значення коефіцієнта в $b_1 + b_{23}; b_2 + b_{13}; b_3 + b_{12}$ визначаються аналогічно. Це наслідок того, що ми намагаємося визначити повну кількість коефіцієнтів (8) за недостатньою кількістю дослідів (4). Проте, якщо заздалегідь відомо, що деякі з членів рівняння дорівнюють нулю (малі і можна знехтувати), або є апріорна інформація про величини деяких коефіцієнтів, то отримані коефіцієнти можуть бути виокремлені. Так якщо $b_{123} = 0$, то

$$b_1 + b_{23}; b_2 + b_{13}; b_3 + b_{12},$$

$$b_0 = \frac{\sum_{U=1}^{N} x_{0U} \cdot Y_U}{N}.$$

Якщо можна допустити, що коефіцієнти з їх змішаною оцінкою можна порівняти, то для розглянутого плану

$$b_0 = b_{123} = \frac{1}{2} \frac{\sum_{U=1}^{N} x_{0U} \cdot Y_U}{N}.$$

Графічне зображення планів ПФЕ 2^3 і ДФЕ $2^{3\text{-}1}$ в факторному просторі (для трьох факторів – тривимірний простір) представлено на рис. 10. План ПФЕ 2^3 представлений кубом з вісьмома вузлами (точками плану), а можливі плани ДФЕ 2^{3-1} – проекціями цього куба на три площини. Тобто з восьми умов вибираються чотири (рис. 10, *а*). З куба можна також вибрати чотири точки з восьми, що не лежать в одній площині, і сформувати план ДФЕ 2^{3-1} (рис. 10, *б*).

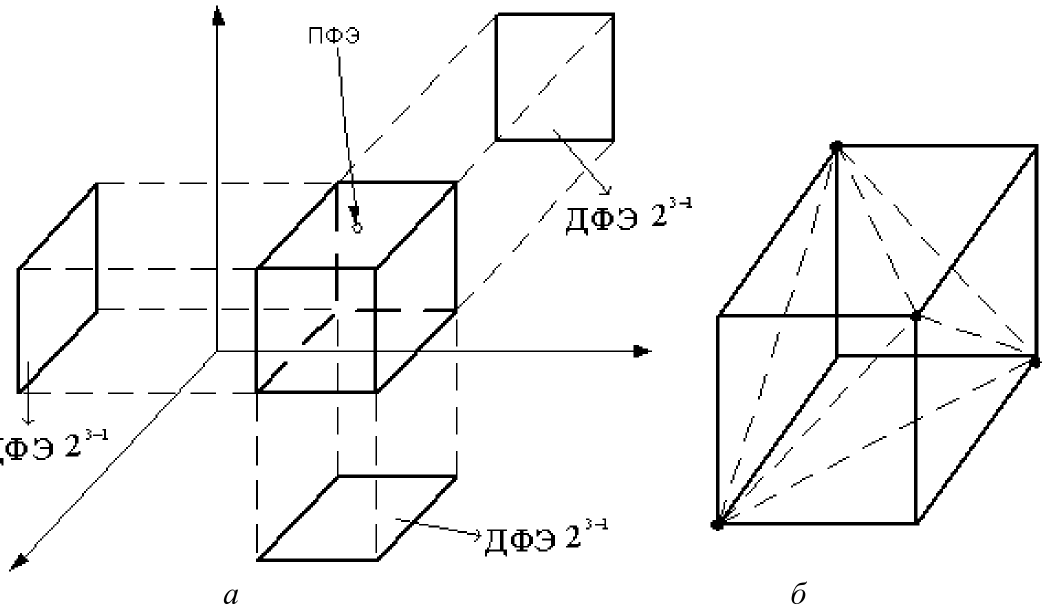


Рисунок 10 – Графічне зображення планів ПФЕ 2^3 і ДФЕ 2^{3-1} в факторному просторі:
а – вибір чотирьох умов; *б* – сформований план

Плани ДФЕ, як і плани ПФЕ, є ротатабельними. Плани ДФЕ можуть бути як насиченими так і ненасиченими.

Перевага планів ДФЕ полягає і в тому, що якщо побудований на його основі неповний поліном не задовольняє вимогам по точності, то план ДФЕ легко добудовуються до плану ПФЕ, без втрати інформації колишніх дослідів, з формуванням більш точного полінома.

Приклад побудови плану ДФЕ. Будуємо план ДФЕ 2^{4-1} і визначаємо поліном

$$Y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{14}x_1x_4 + b_{23}x_2x_3 + b_{24}x_2x_4 + b_{34}x_3x_4.$$

Число факторів – 4. Потрібно знайти 8 коефіцієнтів полінома. Вибираємо 8 з 16 дослідів плану ПФЕ 2^4 (табл. 5) Таким чином, щоб були визначені незалежні коефіцієнти при власне факторах, змішані коефіцієнти при парних поєднаннях факторів і нехтуємо потрійними і четверними поєднаннями факторів так, щоб при цьому зберігалася ортогональність плану.

Такий вибір дозволяє сформувати план ДФЕ 2^{4-1} як і план ПФЕ 2^3, але з $x_4 = x_1 x_2 x_3$. План ДФЕ 2^{4-1} представлений у вигляді табл. 6.

Таблиця 5 – План ПФЕ 2^4

U		x_1	x_2	x_3	x_4
ПФЕ 2^4	ПФЕ 2^{4-1}				
1	1	–1	–1	–1	–1
2	–	+1	–1	–1	–1
3	–	–1	+1	–1	–1
4	4	+1	+1	–1	–1
5	–	–1	–1	+1	–1
6	6	+1	–1	+1	–1
7	7	–1	+1	+1	–1
8	–	+1	+1	+1	–1
9	–	–1	–1	–1	+1
10	2	+1	–1	–1	+1
11	3	–1	+1	–1	+1
12	–	+1	+1	–1	+1
13	5	–1	–1	+1	+1
14	–	+1	–1	+1	+1
15	–	–1	+1	+1	+1
16	8	+1	+1	+1	+1

Таблиця 6 – План ДФЕ 2^{4-1}

U	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_1x_2	x_1x_3	x_1x_4	x_2x_3	x_2x_4	x_3x_4	Y	$\widehat{Y}$
1	+1	–1	–1	–1	–1	+1	+1	+1	+1	+1	–1	10	10
2	+1	+1	–1	–1	+1	–1	–1	+1	+1	–1	+1	8	8
3	+1	–1	+1	–1	+1	–1	+1	–1	–1	+1	+1	8	8
4	+1	+1	+1	–1	–1	+1	–1	–1	–1	–1	–1	7	6,8
5	+1	–1	–1	+1	+1	+1	–1	–1	–1	–1	+1	9	9,2
6	+1	+1	–1	+1	–1	–1	+1	–1	–1	+1	–1	8	8
7	+1	–1	+1	+1	–1	–1	–1	+1	+1	–1	–1	8	8
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	6,5	6,68

Значення коефіцієнтів полінома складають:

$$b_1b_2b_3 = b_1b_2b_4 = b_1b_3b_4 = b_2b_3b_4 = b_1b_2b_3b_4 = 0.$$

$$b_0 = \frac{10+8+8+7+9+8+8+6,5}{8} = 8,06;$$

$$b_1 = \frac{-10+8-8+7-9+8-8+6,5}{8} = -0,69;$$

$$b_2 = -0,69; b_3 = -0,19; b_4 = -0,19;$$

$$\left(b_{12}+b_{34}\right) = \frac{10-8-8+7+9-8-8+6,5}{8} = 0,06;$$

$$b_{13}+b_{24} = 0,06; b_{14}+b_{23} = 0,06.$$

Якщо прийняти, що

$$b_{12} \approx b_{34} = \frac{1}{2}\left(b_{12} + b_{34}\right) = 0,03,$$

$$b_{13} \approx b_{24} = \frac{1}{2}\left(b_{13} + b_{24}\right) = 0,03,$$

$$b_{14} \approx b_{23} = \frac{1}{2}\left(b_{14} + b_{23}\right) = 0,03,$$

то поліном має вигляд

$$\begin{aligned}\widehat{Y} = 8,06 - 0,69x_1 - 0,69x_2 - 0,19x_3 - 0,19x_4 + 0,03x_1x_2 + \\ +0,03x_1x_3 + 0,03x_1x_4 + 0,03x_2x_3 + 0,03x_2x_4 + 0,03x_3x_4\end{aligned}.$$

Значення полінома в точках плану наведені в останньому стовпчику плану ДФЕ 2^{4-1}. У нашому випадку точність його досить висока.

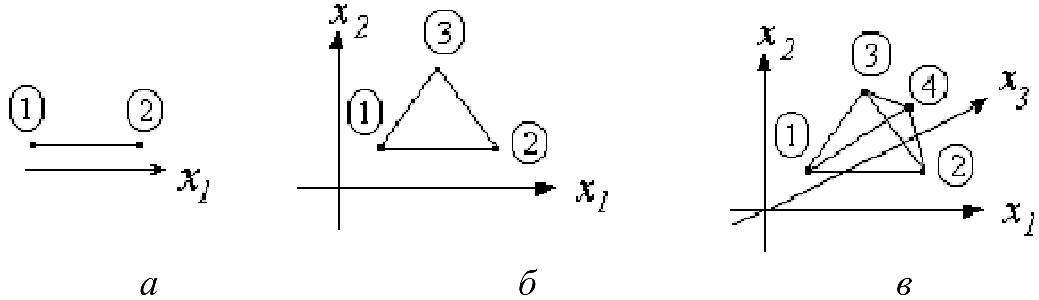
6. Насичені плани першого порядку

Насиченим планом першого порядку називається план, що містить $n + 1$ точку (дослід). Наприклад, при $n = 4$, $N = n + 1 = 5$.

Тобто поліном формується у вигляді

$$Y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + ... + b_nx_n.$$

Таким чином, насичений план – це гранично мінімальний випадок плану ДФЕ. Такі плани називаються симплекс-плани. Для симплекс-плану при $n = 1$ $N = 2$ його геометричне зображення представлено на рис. 11, *а*; при $n = 2$, $N = 3$ – на рис. 11, *б*; при $n = 3$, $N = 4$ – на рис. 11, *в*. Симплекс-плани зазвичай використовується на стадії попереднього дослідження.



а *б* *в*

Рисунок 11 – Симплекс-план для $n = 1$, $N = 2$ (*а*); $n = 2$, $N = 3$ (*б*); $n = 3$, $N = 4$ (*в*)

Симплекс-план не завжди є ортогональним. Симплекс-план називається правильним, якщо відстань між двома будь-якими точками плану однакова. Симплекс-план називається центрованим, якщо

$$\sum_{U=1}^{n+1} x_{iU} = 0, \text{ (Для } i = 1, 2, ..., n).$$

Застосування планів ПФЕ і шляхи підвищення точності поліномів

За якими ж ознаками можна судити про допустимість використання неповного квадратичного полінома, побудованого на основі планів ПФЕ 2^n?

Такі поліноми дають поверхню відгуку, яка проходить точно через всі експериментальні точки, за якими визначаються коефіцієнти. Так як точки планів ПФЕ розташовуються на границях діапазонів варіювання факторів, то це означає, що поверхня відгуку проходить через граничні точки. У будь-якому перерізі поверхні відгуку, отриманої за таким поліномом, площиною при фіксованих всіх факторах крім одного і паралельної осі Y отримується слід у вигляді прямої лінії.

Можливі випадки, коли реальна поверхня відгуку визначається поліномами другого і вище порядків. У цьому випадку поверхня плану ПФЕ співпадає з реальною поверхнею в граничних точках, може відрізнятися в інших точках факторного простору, наприклад, в центральній точці плану, тобто $Y_0 \neq \widehat{Y}_0$. Тому однією з ознак незадовільної апроксимації поліномами за планом ПФЕ є розбіжність результатів функції відгуку з реальною функцією в центральній точці плану.

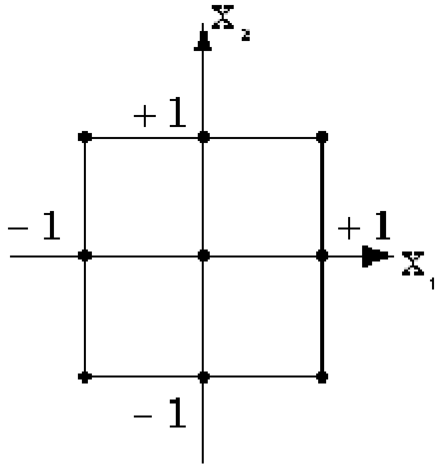
Однак при багатофакторному експерименті можливі випадки, коли в реальності функція відгуку залежить, в тому числі, від квадратів факторів, у котрих коефіцієнти мають різні знаки, наприклад, для «сідлоподібної» поверхні. При цьому, незважаючи на те, що ця поверхня явно нелінійна, результат досліду в центральній точці може виявитися досить близьким до отриманого результату за неповним квадратичному поліномом плану ПФЕ. Однак розбіжності будуть виникати у всіх інших точках плану експерименту. Тому недоцільність використання плану ПФЕ визначається нелінійністю будь-яких перерізів поверхні відгуку. Непрямою ознакою може служити розбіжність Y_0 і $\widehat{Y}_0$ в центральній точці плану.

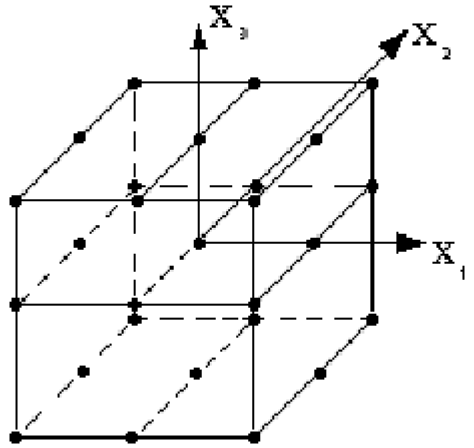
Якщо не вдається отримати поліном по плану ПФЕ, добре аппроксимуючий реальну поверхню, то для підвищення точності поліномів можна запропонувати наступні шляхи:

1. Зменшення діапазону варіювання факторів або його розбиття на піддіапазони, для кожного з яких будується свій план ПФЕ і визначається свій поліном. Шлях досить трудомісткий, але похибка сімейства планів ПФЕ знижується;

2. Виділення фактору, який породжує нелінійність, і побудова для залишкових $n-1$ чинників k планів ПФЕ, в кожному з яких виділений фактор зафіксований при деякому значенні. На основі отриманих k поліномів можна спробувати сформувати загальний поліном, коефіцієнти якого є функціями виділеного фактору. Цей шлях також достатньо трудомісткий;

3. Перехід до плану ПФЕ з великим числом рівнів варіювання факторів, наприклад, до планів з варіюванням факторів на трьох рівнях – планам ПФЕ 3^n (рис. 12). У цьому випадку відбувається різке збільшення кількості точок в порівнянні з планом ПФЕ 2^n. Так при $n = 2$ для ПФЕ 2^n $N = 4$, для ПФЕ 3^n $N = 9$; при $n = 3$ для ПФЕ 2^n $N = 8$, для ПФЕ 3^n $N = 27$; при $n = 4$ для ПФЕ 2^n $N = 16$, для ПФЕ 3^n $N = 81$ і т.д.;





а *б*

Рисунок 12 – Плани ПФЕ 3^2 (*а*) і ПФЕ 3^3 (*б*)

4. Добудовування планів ПФЕ 2^n до планів вищого порядку (найчастіше другого) і побудова повних квадратичних поліномів (з наявністю квадратів факторів);

5. Перетворення метрики матричного простору, тобто перехід до нових факторів, функціонально пов'язаних з колишніми факторами, але які не породжують нелінійність.

7. Плани другого порядку

Плани другого порядку дозволяють сформувати функцію відгуку у вигляді квадратичного полінома, який містить більшу кількість членів, ніж неповний квадратичний поліном, сформований за планами першого порядку, і тому потребують більшого числа виконуваних дослідів. Повний квадратичний поліном при $n = 2$ містить 6 членів

$$\hat{Y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2,$$

при $n = 3$ ... 11 членів

$$\hat{Y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{33}x_3^2.$$

Відомо, що для отримання квадратичної залежності кожен фактор повинен фіксуватися як мінімум на трьох рівнях.

Для планів другого порядку область планування може бути природньою, тобто включати область планування планів першого порядку і додаткові точки (такі плани називаються композиційними). Додаткові точки можуть виходити за область плану першого порядку – одиничного гіперкуба. В цьому випадку досліди в них реалізуються при встановленні факторів за межами варіювання. Це треба враховувати при визначенні області сумісності факторів, для чого:

1. Чи не виходити за межі одиничного гіперкуба, тобто для всіх точок плану має виконуватися умова $|x_{iU}| \le 1$;

2. Чи не виходити за межі одиничного гіперкулі, що визначаються співвідношенням таких значень факторів в плані, при яких $x_1^2 + x_2^2 + ... + x_n^2 \le 1$.

У другому і третьому випадках використовують спеціальні прийоми виконання наведених співвідношень в плані. План з однією областю планування можна перебудувати в план іншого областю планування.

Якщо вже був раніше сформований план ПФЕ, але точність його функції відгуку не задовольняє, то ми можемо добудувати цей план до плану другого порядку (композиційний план) і сформувати функцію відгуку у вигляді повного квадратичного полінома, без втрати інформації про раніше проведені досліди.

Ортогональний центрально-композиційний план другого порядку

Ортогональним планом (ОЦКП) називається такий план, у якого матриця планування X будується так, що б матриця $C = X_t X$ виявилася діагональною. Використаємо цей підхід і при побудові планів другого порядку. План називається центральним, якщо всі точки розташовані симетрично відносно центру плану. ОЦКП – центральний симетричний прямокутний композиційний план.

У ОЦКП входять: ядро – план ПФЕ з $N_0 = 2^n$ точками плану, n_0 (одна для цього плану) – центральна точка плану $\left(x_i = 0, i = 1, 2, 3, ..., n\right)$, і по дві «зіркові» точки для кожного фактору

$$x_i = \pm\alpha,\ x_j = 0,\ i = 1, 2, ..., n\ \ j = 1, 2, ..., n,\ i \ne j,$$

де α – плече «зіркових» точок.

При цьому в кожній площині, що містить вісь Y і координатну вісь i-того фактору (що проходить через центр плану), виявляються три значення фактору x_i $\left(-\alpha, 0, +\alpha\right)$ і три відповідних значення Y.

Загальна кількість точок в плані ОЦКП становить

$$N = 2^n + 2n + n_0,$$

де $n_0 = 1$ (для ОЦКП).

При $n > 2$ в ОЦКП виявляється менша кількість точок, ніж в плані ПФЕ 3^n (табл. 7).

Таблиця 7 – Число точок в плані

n	2	3	4	5	6
ОЦКП	9	15	25	43	77
ПФЕ 3^2	9	27	81	243	729

Графічне представлення ОЦКП для n = 3 наведено на рис. 13.

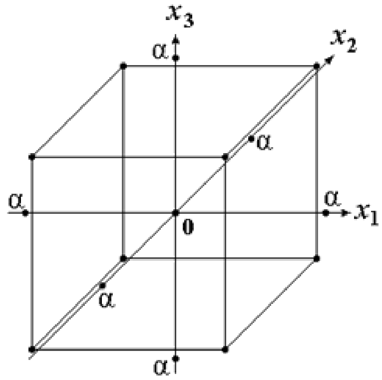


Рисунок 13 – ОЦКП при n = 3

Для ортогонального плану необхідно, щоб виконувалося співвідношення

$$\sum_{U=1}^{N} x_{iU} x_{jU} = 0.$$

Так як $x_{0U} = 1$, то для стовпців j = 1, 2, ..., m + 1 повинна виконуватися умова

$$\sum_{U=1}^{N} x_{jU} = 0.$$

Це означає необхідність виконання вимоги, щоб сума елементів будь-якого стовпця (крім j = 0), включаючи стовпці, відповідні квадратам фактору, повинна дорівнювати нулю. Це можливо, якщо члени стовпців, відповідних квадратів факторів, перетворені, інакше сума квадратів факторів не може дорівнювати нулю.

Перетворення елементів цих стовпців здійснюється у вигляді

$$x'_{jU} = x_{jU}^2 - a,$$

де a – величина, що залежить від числа факторів.

Сума елементів стовпця, відповідного квадратам факторів

$$\sum_{U=1}^{N} x'_{jU} = \sum_{U=1}^{N} \left(x_{jU}^2 - a \right) = \sum_{U=1}^{N} x_{jU}^2 - N \cdot a = 0.$$

Звідки

$$a = \frac{\sum_{U=1}^{N} x_{jU}^2}{N}.$$

У загальному випадку ортогональний центрально-композиційний план при трьох n факторах має вигляд, наведений в табл. 8.

Таблиця 8 – Ортогональний центрально-композиційний план при трьох n факторах

	U	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	$x_4 = x_1^2 - a$	$x_5 = x_2^2 - a$	$x_6 = x_3^2 - a$	Y
Точки плану ПФЕ 2^3 ($N_0 = 2^n$ точок)	1	+1	–1	–1	–1	+1	+1	+1	–1	1–a	1–a	1–a	Y_1
	2	+1	+1	–1	–1	–1	–1	+1	+1	1–a	1–a	1–a	Y_2
	3	+1	–1	+1	–1	–1	+1	–1	+ 1	1–a	1–a	1–a	Y_3
	4	+1	+1	+1	–1	+1	–1	–1	–1	1–a	1–a	1–a	Y_4
	5	+1	–1	–1	+1	+1	–1	–1	+1	1–a	1–a	1–a	Y_5
	6	+1	+1	–1	+1	–1	+1	–1	–1	1–a	1–a	1–a	Y_6
	7	+1	–1	+1	+1	–1	–1	+1	–1	1–a	1–a	1–a	Y_7
	8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	1–a	1–a	1–a	Y_8
Зіркові точки (2^n точок)	9	+1	–α	0	0	0	0	0	0	$\alpha^2 - a$	–a	–a	Y_9
	10	+1	+α	0	0	0	0	0	0	$\alpha^2 - a$	–a	–a	Y_{10}
	11	+1	0	–α	0	0	0	0	0	–a	$\alpha^2 - a$	–a	Y_{11}
	12	+1	0	+ α	0	0	0	0	0	–a	$\alpha^2 - a$	–a	Y_{12}
	13	+1	0	0	–α	0	0	0	0	–a	–a	$\alpha^2 - a$	Y_{13}
	14	+1	0	0	+ α	0	0	0	0	–a	–a	$\alpha^2 - a$	Y_{14}
Нульова точка	15	+1	0	0	0	0	0	0	0	–a	–a	–a	Y_{15}
$\sum_{U=1}^{N} x_{iU}$	–	N	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
$\sum_{U=1}^{N} x_{iU}^2$	–	N	$2^n + 2a^2$			2^n				$2^n(1-a)^2 + 2(a^2-a)^2 + a^2(2n-2) + n_0a^2$			

У ОЦКП кожен фактор фіксується, в загальному випадку, на п’яти рівнях (–α, –1, 0, 1, +α).

Для визначення невідомих a і α потрібно сформувати і вирішити систему з двох рівнянь. Одне з них для a ми записали раніше. Інше рівняння отримаємо з умови ортогональності для стовпців і x_4' x_5'

$$\sum_{U=1}^{N} x_{4U}' \cdot x_{5U}' = N_0\left(1-a\right)^2 - 4a\left(a^2-a\right)^2 + a^2\left(2n-4\right) + n_0a^2 = 0 .$$

Після найпростіших перетворень з урахуванням того, що $N = N_0 + 2n + n_0$ – загальне число дослідів в плані, отримуємо співвідношення

$$\frac{N_0}{N} - 2\frac{N_0 + 2\alpha^2}{N} \cdot a + a^2 = 0 .$$

Співвідношення для a при j = 1, 2 або 3 може бути записано як

$$a = \frac{\sum_{U=1}^{N} x^2{}_{jU}}{N} = \frac{N_0 + 2\alpha^2}{N} .$$

Підставивши його в останнє рівняння, отримуємо

$$\frac{N_0}{N} - 2a^2 + a^2 = 0,$$

звідки константа перетворення a

$$a = \sqrt{\frac{N_0}{N}} = \sqrt{\frac{2^n}{2^n + 2n + n_0}}.$$

Тоді

$$\frac{N_0 + 2\alpha^2}{N} = a = \sqrt{\frac{N_0}{N}}$$

і плече «зіркових» точок

$$\alpha = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\sqrt{N \cdot N_0} - N_0\right)}.$$

Наприклад, для ОЦКП при числі факторів n = 3 маємо наступні параметри плану

$$N_0 = 2^3 = 8, \quad N = 8 + 1 \cdot 3 + 1 = 15,$$

$$a = \sqrt{\frac{8}{15}} \approx 0,73; \quad \alpha = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\sqrt{15 \cdot 8} - 8\right)} \approx 1,215,$$

$$1 - a = 0,27; \quad -a = -0,73; \quad \alpha^2 - a = 1,215^2 - 0,73 = 0,75.$$

Сам план набуває вигляду, що представлений в табл. 9.

Таблиця 9 – План для ОЦКП при числі факторів n = 3

U	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	x'_4	x'_5	x'_6	Y
1	+1	–1	–1	–1	+1	+1	+1	–1	0,27	0,27	0,27	Y_1
2	+1	+1	–1	–1	–1	–1	+1	+1	0,27	0,27	0,27	Y_2
3	+1	–1	+1	–1	–1	+1	–1	+1	0,27	0,27	0,27	Y_3
4	+1	+1	+1	–1	+1	–1	–1	–1	0,27	0,27	0,27	Y_4
5	+1	–1	–1	+1	+1	–1	–1	+1	0,27	0,27	0,27	Y_5
6	+1	+1	–1	+1	–1	+1	–1	–1	0,27	0,27	0,27	Y_6
7	+1	–1	+1	+1	–1	–1	+1	–1	0,27	0,27	0,27	Y_7
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	0,27	0,27	0,27	Y_8
9	+1	–0,125	0	0	0	0	0	0	0,75	–0,73	–0,73	Y_9
10	+1	+0,125	0	0	0	0	0	0	0,75	–0,73	–0,73	Y_{10}
11	+1	0	–0,125	0	0	0	0	0	–0,73	0,75	–0,73	Y_{11}
12	+1	0	+0,125	0	0	0	0	0	–0,73	0,75	–0,73	Y_{12}
13	+1	0	0	–0,125	0	0	0	0	–0,73	–0,73	0,75	Y_{13}
14	+1	0	0	+0,125	0	0	0	0	–0,73	–0,73	0,75	Y_{14}
15	+1	0	0	0	0	0	0	0	–0,73	–0,73	–0,73	Y_{15}
$\sum_{U=1}^{N} x_{iU}$	N	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
$\sum_{U=1}^{N} x_{iU}^2$	15	10,952			8				4,3727			

Очевидно, що план є ортогональним. На відміну від планів ПФЕ для ОЦКП сума квадратів факторів різних стовпців не є однаковою.

За результатами дослідів плану формується поліном

$$\widehat{Y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + \\ + b_{123}x_1x_2x_3 + b_4\left(x_1^2 - a\right) + b_5\left(x_2^2 - a\right) + b_6\left(x_3^2 - a\right).$$

Коефіцієнти полінома $b_0, b_1, b_2, b_3, b_{12}, b_{13}, b_{23}, b_{123}, b_4, b_5, b_6$ визначається як

$$b_i = \frac{\sum_{U=1}^{N} x_{iU}Y_U}{\sum_{U=1}^{N} x^2{}_{iU}}.$$

Можна перетворити поліном до виду

$$\widehat{Y} = b_0' + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3 + b_4x_1^2 + b_5x_2^2 + b_6x_3^2,$$

де $b_0' = b_0 - b_4 \cdot a + b_5 \cdot a + b_6 \cdot a$.

Таблиця 10 – Значення параметрів ОЦКП при кількості факторів n

n	2	3	4	5	6	7	8
α	1	1,215	1,414	1,596	1,761	1,909	2,045
a	0,667	0,73	0,8	0,86	0,91	0,946	0,968
N	9	15	25	43	77	143	273

При n = 2 ОЦКП збігається з планом ПФЕ 2^3. «Зіркові» точки ОЦКП в цьому випадку лежать на границях варіювання факторів. Якщо точки плану ПФЕ 2^n завжди лежать на окружності (поверхні кулі, гіперкулі), то точки плану ОЦКП не лежать на якій-небудь одній окружності (поверхні кулі, гіперкулі). План ОЦКП не є насиченим. Так, наприклад, для n = 3 поліном має одинадцять членів зі своїми коефіцієнтами, але для їх визначення використовуються п’ятнадцять дослідів.

Приклад плану ОЦКП для n = 2.

Параметри плану N_0 = 4, N = 9, α = 1, a = 2/3, 1–a = 1/3, –a = –2/3, $\alpha^2 - a = -2/3$.

Використано розглянутий раніше план ПФЕ 2^2 з доданими дослідами 5-9 (табл. 11).

Коефіцієнти полінома складають

$$b_0 = \frac{\sum_{U=1}^{N} x_0Y_0}{\sum_{U=1}^{N} x^2{}_{0U}} = \frac{6+3+4+7+5+5+1+3+2}{9} = 4;$$

Таблиця 11 – План ОЦКП для n = 2

U	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	$x_3' = x_1^2 - a$	$x_3' = x_1^2 - a$	Y	$\widehat{Y}$	$\lvert\widehat{Y} - Y\rvert$
1	+1	–1	–1	+1	1/3	1/3	6	5,83	0,17
2	+1	+1	–1	–1	1/3	1/3	3	2,83	0,17
3	+1	–1	+1	–1	1/3	1/3	4	4,17	0,17
4	+1	+1	+1	+1	1/3	1/3	7	7,17	0, 17
5	+1	–1	0	0	1/3	–2/3	5	5	0
6	+1	+1	0	0	1/3	–2/3	5	5	0
7	+1	0	–1	0	–2/3	1/3	1	1,33	0,33
8	+1	0	+1	0	–2/3	1/3	3	2,67	0,33
9	+1	0	0	0	–2/3	–2/3	2	2	0
$\sum_{U=1}^{N} x^2{}_{iU}$	9	6	6	4	2	2			

$$b_1 = \frac{-6+3-4+7-5+5+0\cdot 1+0\cdot 3+0\cdot 2}{6} = 0;$$

$$b_1 = \frac{-6-3+4+7-0\cdot 5+0\cdot 5-1+3+0\cdot 2}{6} = 0,67;$$

$$b_{12} = \frac{6-3-4+7}{4} = 1,5;$$

$$b_3 = \frac{1/3\left(6+3+4+7+5+5\right)-2/3\left(1+3+2\right)}{6\left(1/3\right)^2+3\left(2/3\right)^2} = 3;$$

$$b_4 = \frac{1/3\left(6+3+4+7+1+3\right)-2/3\left(5+5+2\right)}{2} = 0.$$

Поліном приймає вигляд

$$\widehat{Y} = 4+0\cdot x_1+0,67x_2+3\left(x_1^2-0,67\right)+0\cdot\left(x_2^2-0,67\right)+1,5x_1x_2 =$$
$$= 2+0,67x_2+3x_1^2+1,5x_1x_2.$$

(Раніше за планом ПФЕ 2^2 був сформований поліном $\widehat{Y} = 5+0,5x_2+1,5x_1x_2$).

Розраховані значення $\widehat{Y}$ по поліному наведені в плані. Також наведені величини $\left|\widehat{Y}_U - Y_U\right|$, що підтверджують досить високу точність полінома. Так в центральній точці плану, на відміну від випадку застосування плану ПФЕ 2^2, розбіжностей немає.

8. Ротатабельні плани

Ротатабельні плани – це плани, у яких точки плану розташовуються на окружностях (сферах, гіперсферах). У ротатабельного плану першого порядку точки плану розташовуються на одній окружності (сфері, гіперсфері) з радіусом R

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_{iv}^2} = \text{const} = R,$$

де $V = 1, ..., N$ – номер точки плану; $i = 1, ...; n$ – номер фактору.

У такому випадку точність оцінювання функції відгуку з будь-якого напряму факторного простору (для всіх точок плану) однакова.

Ротатабельний план може бути симетричним, коли точки плану розташовуються симетрично одна до одної. Розглянутий раніше план ПФЕ 2^n – ротатабельний симетричний план першого порядку.

У ротатабельних планів другого порядку точки плану розташовуються на двох концентричних гіперсферах з радіусами R_1 і R_2. В таких планах

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_{iv}^2} = \text{const}_1 = R_1,$$

для $V = 1, ..., N_0$ і

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_{iw}^2} = \text{const}_2 = R_2,$$

для $W = 1, ..., n_0$, де V і W – поточні номери точок плану в двох підмножинах дослідів N_0 і n_0 з їх загальної кількості N, що відносяться до двох різних концентричних сфер.

Одна зі сфер може бути виродженою, коли $R_2 = 0$. Розглянутий раніше ортогональний центрально-композиційний план другого порядку (ОЦКП) не є ротатабельним планом, так як його точки лежать на трьох концентричних окружностях (сферах, гіперсферах). При $n = 2$ це очевидно з рис. 14. «Зіркові» точки плану і точки плану ПФЕ 2^n лежать на різних окружностях.

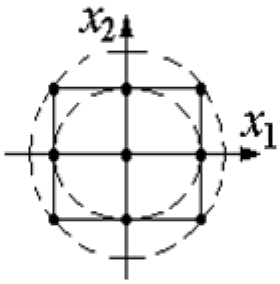


Рисунок 14 – Розташування точок ОЦКП на трьох окружностях

Ротатабельний план може бути ортогональним, якщо виконується умова

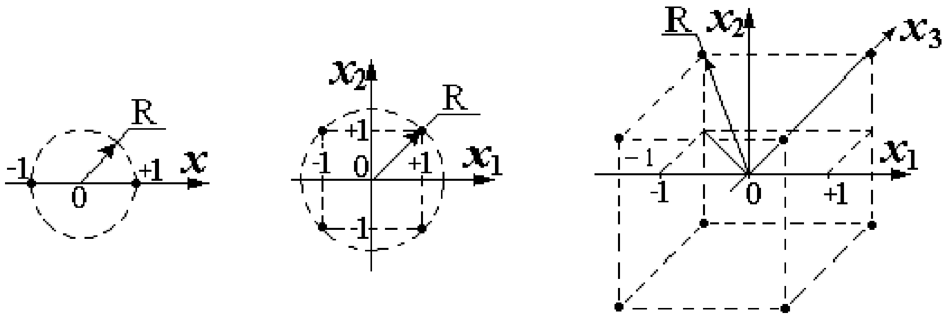
$$\sum_{U=1}^{N} x_{iU} \cdot x_{jU} = 0,$$

де $i = 1, ..., m$; $j = 1, ..., m$; $m > n$; $i \neq j$ – номера стовпців плану.

Ротатабельний ортогональний центрально-композиційний план

Ротатабельний ортогональний центрально-композиційний план (РОЦКП) будується аналогічно розглянутому раніше ОЦКП. До використаного в якості ядра плану ПФЕ 2^n додаються «зіркові» точки – по дві на кожен фактор і кілька точок у центрі плану. «Зіркові» точки повинні розташовуватися на поверхні гіперсфери з радіусом *R*, на якій лежать і точки плану ПФЕ 2^n, тобто величина плеча «зіркових» точок α повинна дорівнювати радіусу *R*. Це може бути забезпечено, при виконанні умови ортогональності, тільки при відповідному виборі числа спостережень в центральній (нульовий) точці плану n_0. Для РОЦКП n_0 залежить від числа факторів *n*. Нагадаємо, що в ОЦКП $n_0 = 1$ для будь-якого числа *n*.

Радіус сфери, на якій лежать точки плану ПФЕ 2^n при двох рівнях варіювання факторів з діапазоном ± 1 становить (рис. 15).



а *б* *в*

Рисунок 15 – Радіус кола (сфери), на якій лежать точки плану ПФЕ 2^n при діапазоні варіювання факторів від –1 до +1:

а – $n = 1$, $R = \sqrt{1} = 1$; *б* – $n = 2$, $R = \sqrt{2} = 1{,}414$; *в* – $n = 3$, $R = \sqrt{3} = 1{,}732$; $R = \sqrt{n}$

Таким чином, при побудові РОЦКП з ядром з плану ПФЕ 2^n плече «зіркових» точок визначається числом факторів

$$\alpha = \sqrt{n}\,.$$

Раніше при визначенні параметрів ортогонального композиційного плану другого порядку з ядром з плану ПФЕ 2^n було отримано

$$\alpha = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\sqrt{N \cdot N_0} - N_0\right)}\,,$$

де $N_0 = 2^n$ – число точок плану ПФЕ; $N = N_0 + 2n + n_0$ – повне число точок композиційного плану другого порядку; $a = \sqrt{N_0 / N}$ – константа перетворення елементів стовпців, відповідних квадратам факторів.

В цьому випадку для РОЦКП число спостережень в центрі плану

$$n_0 = \frac{4n^2}{2^n} + 2n\,.$$

Якщо n_0 не ціла, то при практичній побудові плану його округлюють до цілого, але властивість ортогональності плану порушується (табл. 12).

Таблиця 12 – Параметри РОЦКП в залежності від кількості факторів

n	1	2	3	4	5	6	7	8
$\alpha = \sqrt{n}$	1	1,414	1,732	2	2,236	2,45	2,646	2,83
$n_0 = \frac{4n^2}{2^n} + 2n$	4	8	10,5	12	13,13	14,25	15,53	17
$N_0 = 2^n$	2	4	8	16	32	64	128	256
N	8	16	24,5	36	55,13	90	157,55	289
$a = \sqrt{N_0 / N}$	0,5	0,5	0,574	0,67	0,76	0,84	0,9	0,94

У [1] без виведення для РОЦКП рекомендується приймати (табл. 13)

$$\alpha' = N_0^{\frac{1}{4}} = \left(2^n\right)^{\frac{1}{4}} = 2^{\frac{n}{4}}.$$

тоді

$$n_0' = 4 - 2n + 2^{\frac{n+4}{2}}.$$

Таблиця 13 – Параметри РОЦКП по [1]

N	1	2	3	4	5	6	7	8
$\alpha' = 2^{\frac{n}{4}}$	1,189	1,414	1,682	2	2,378	2,838	3,364	4
$n_0' = 4 - 2n + 2^{\frac{n+4}{2}}$	7,66	8	9,31	12	16,63	24	33,25	52
N'	11,66	16	23,31	36	58,63	100	177,2	324
a'	0,414	0,5	0,586	0,57	0,739	0,8	0,85	0,889

Приклад ротатабельного ортогонального центрально-композиційного плану для $n = 2$.

Параметри плану:

$$\alpha = \sqrt{2} = 1{,}414; \quad n_0 = 8; \quad N_0 = 2^2 = 4; \quad N = 2^2 + 2 \cdot 2 + n_0 = 16;$$

$$a = \sqrt{\frac{N_0}{N}} = 0{,}5; \quad 1 - a = 0{,}5; \quad -a = -0{,}5; \quad \alpha^2 - a = 2 - 0{,}5 = 1{,}5.$$

Немає необхідності проводити вісім разів (точки з 9 по 16) досліди в центрі плану. Досить провести цей дослід один раз і записати результат в усі вісім рядків. Рядки скорочувати не можна, так як порушується властивість ортогональності, і коефіцієнти полінома будуть визначені невірно.

Коефіцієнти квадратичного полінома розрахуються, як і раніше.

Використано розглянутий раніше план ПФЕ 2^2 з доданими дослідами 5-16.

Таблиця 14 – План ПФЕ 2^2

	U	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	$x_3' = x_1^2 - a$	$x_4' = x_2^2 - a$	Y	$\widehat{Y}$	$\lvert\widehat{Y} - Y\rvert$
ПФЕ 2^2	1	+1	–1	–1	+1	0,5	0,5	6	5,146	0,854
	2	+1	+1	–1	–1	0,5	0,5	3	2,146	0,854
	3	+1	–1	+1	-1	0,5	0,5	4	3,35	0,65
	4	+1	+1	+1	+1	0,5	0,5	7	6,35	0,65
Зіркові точки	5	+1	-1,414	0	0	1,5	–0,5	5	5,75	0,75
	6	+1	+1,414	0	0	1,5	–0,5	5	5,75	0,75
	7	+1	0	–1,414	0	–0,5	1,5	1	1,9	0,9
	8	+1	0	+1,414	0	–0,5	1,5	3	3,6	0,6
Точки в центрі плану	9	+1	0	0	0	–0,5	–0,5	2	2	0
	10	+1	0	0	0	–0,5	–0,5	2	2	0
	11	+1	0	0	0	–0,5	–0,5	2	2	0
	12	+1	0	0	0	–0,5	–0,5	2	2	0
	13	+1	0	0	0	–0,5	–0,5	2	2	0
	14	+1	0	0	0	–0,5	–0,5	2	2	0
	15	+1	0	0	0	–0,5	–0,5	2	2	0
	16	+1	0	0	0	–0,5	–0,5	2	2	0
$\sum_{U=1}^{N} x_{iU}$		16	0	0	0	0	0			
$\sum_{U=1}^{N} x_{iU}^2$		16	8	8	4	8	8			

$$b_0 = \frac{6+3+4+7+5+5+1+3+2\cdot 8}{16} = \frac{50}{16} = 3{,}125;$$

$$b_1 = \frac{-6+3-4+7-5\cdot 1{,}414+5\cdot 1{,}414+10\cdot 0}{6} = \frac{0}{8} = 0,$$

$$b_2 = 0{,}6035,$$

$$b_{12} = \frac{6-3-4+7+12\cdot 0}{4\cdot 1^2} = 1{,}5,$$

$$b_{11} = \frac{0{,}5(6+3+4+7)+1{,}5(5+5)-0{,}5(1+3+8\cdot 2)}{14\cdot 0{,}5^2+2\cdot 1{,}5^2} = \frac{15}{8} = 1{,}875,$$

$$b_{22} = \frac{0{,}5(6+3+4+7)-0{,}5(5+5)+1{,}5(1+3)-0{,}5\cdot 2\cdot 8}{8} = 0{,}375.$$

Поліном приймає вигляд

$$\widehat{Y}_{\text{РОЦКЛ}} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}\left(x_1^2 - a\right) + b_{11}\left(x_2^2 - a\right) =$$

$$= 3{,}125 + 0\cdot x_1 + 0{,}6035x_2 + 1{,}5x_1x_2 + 1{,}875\left(x_1^2 - 0{,}5\right) + 0{,}375\left(x_2^2 - 0{,}5\right) = .$$

$$= 2 + 0\cdot x_1 + 0{,}6035x_2 + 1{,}5x_1x_2 + 1{,}875x_1^2 + 0{,}375x_2^2.$$

Розраховані значення функції і розбіжності з дослідними даними представлені в передостанньому і останньому стовпцях плану.

Раніше для ОЦКП, при поверхні функції, що дещо відрізняється, був отриманий близький поліном у вигляді

$$\widehat{Y}_{\text{ОЦКЛ}} = 2 + 0 \cdot x_1 + 0,67x_2 + 1,5x_1x_2 + 3x_1^2 + 0 \cdot x_2^2.$$

Для n = 2 число членів квадратичного полінома становить шість. У ОЦКП і РОЦКП необхідно провести дев'ять дослідів, що відрізняються, при п'яти рівнях варіювання факторів. Тому ОЦКП і РОЦКП – ненасичені плани. Таке число експериментальних точок може бути використано для побудови, наприклад, кубічних поліномів.

9. Плани другого порядку з одиничною областю планування

Так як ОЦКП і РОЦКП – композиційні плани, то при природній області планування «зіркові» точки можуть виходити за межі одиничного гіперкуба і одиничної гіперкулі. Для вписування плану в область одиничної гіперкулі необхідно змінити значення факторів шляхом множення їх на коефіцієнт (табл. 15)

$$C = \frac{1}{\sqrt{n}}.$$

Так, при n = 2,

$$C_{\text{РОЦКЛ}} = C_{\text{ОЦКЛ}} = \frac{1}{\sqrt{2}} = 0,707.$$

Таблиця 15 – Значення факторів в ОЦКП і РОЦКП при переході від природної області планування до одиничного гіперкулі, при n = 2

U	ОЦКП		РЦКП	
	x_1	x_2	x_1	x_2
1	–0,707	–0,707	–0,707	–0,707
2	+0,707	–0,707	+0,707	–0,707
3	–0,707	+0,707	–0,707	+0,707
4	+0,707	+0,707	+0,707	+0,707
5	–0,707	0	–1	0
6	+0,707	0	+1	0
7	0	–0,707	0	–1
8	0	+0,707	0	+1
9	0	0	0	0
10	–		0	0
11	–		0	0
12	–		0	0
13	–		0	0
14	–		0	0
15	–		0	0
16	–		0	0

Можуть використовуватися ротатабельні плани з точками плану в вершинах інших, крім квадрата (куба, суперкуба), правильних багатогранників, вписаних в область одиничного кола (кулі, гіперкулі). У ротатабельному плані на основі N_0-кутника присутні N_0 точок, які відрізняються, на окружності з радіусом $R_1 = 1$, і n_0 співпадаючих точок в центрі плану, з радіусом $R_2 = 0$. При $n = 2$ для квадратичного полінома при шести його членах число точок плану, що відрізняються, повинно бути не менше шести. У планах на основі п'ятикутника (шестикутника або семикутника) присутні 6 (7 або 8) точок, які відрізняються, що менше ніж в ОЦКП і РОЦКП, у яких 9 точок, що відрізняються. При відповідному виборі багатокутника можна сформувати насичений ротатабельний план другого порядку. Значення факторів в точках плану визначаються типом багатокутника (табл. 16).

Таблиця 16 – Ротатабельний план на основі правильного багатокутника при $n = 2$

	U	x_0	x_1	x_2	$x_3 = x_1x_2$	$x'_4 = x_1^2 - a$	$x'_5 = x_2^2 - a$
N	1	1	$\cos 0$	$\sin 0$	$\frac{\sin 0}{2}$	$\cos^2 0 - \frac{N_0}{2N}$	$\sin^2 0 - \frac{N_0}{2N}$
	2	1	$\cos\frac{2\pi}{N_0}$	$\sin\frac{2\pi}{N_0}$	$\frac{\sin\frac{4\pi}{N_0}}{2}$	$\cos^2\frac{2\pi}{N_0} - 0{,}5\,{N_0}/{N}$	$\sin^2\frac{2\pi}{N_0} - 0{,}5\,{N_0}/{N}$
	…	..	…	…	…	…	…
	V	1	$\cos\frac{2\pi(V-1)}{N_0}$	$\sin\frac{2\pi(V-1)}{N_0}$	$\frac{\sin\frac{4\pi(V-1)}{N_0}}{2}$	$\cos^2\frac{2\pi(V-1)}{N_0} - 0{,}5\,{N_0}/{N}$	$\sin^2\frac{2\pi(V-1)}{N_0} - 0{,}5\,{N_0}/{N}$
	…	..	…	…	…	…	…
	N_0	1	$\cos(2\pi - \frac{2\pi}{N_0})$	$\sin(2\pi - \frac{2\pi}{N_0})$	$\frac{\sin(4\pi - \frac{4\pi}{N_0})}{2}$	$\cos^2(2\pi - \frac{2\pi}{N_0}) - 0{,}5\,{N_0}/{N}$	$\sin^2(2\pi - \frac{2\pi}{N_0}) - 0{,}5\,{N_0}/{N}$
	1	1	0	0	0	$-0{,}5\,{N_0}/{N}$	$-0{,}5\,{N_0}/{N}$
	…	..	…	…	…	…	…
	W	1	0	0	0	$-0{,}5\,{N_0}/{N}$	$-0{,}5\,{N_0}/{N}$
	…	..	…	…	…	…	…
	n_0	1	0	0	0	$-0{,}5\,{N_0}/{N}$	$-0{,}5\,{N_0}/{N}$
$\sum_{U=1}^{N} x_{iU}$		N	0		0	0	
$\sum_{U=1}^{N} x_{iU}^2$		N	$0{,}5N_0$		$0{,}125N_0$	$0{,}375N_0 - 0{,}25\,{N_0^2}/{N} = 0{,}25N_0$	

Константа перетворення елементів стовпців, відповідних квадратам факторів, для всіх подібних планів становить

$$a = \frac{\sum_{U=1}^{N} x^2{}_{jU}}{N} = 0,5\frac{N_0}{N}.$$

Дивись, наприклад, для стовпців $i = 1$ або 2 наведеного плану.

Співвідношення $\frac{N_0}{N}$ може бути визначено з рівняння виконання умови ортогональності стовпців x_4' і x_5'

$$\sum_{U=1}^{N} x'_{4U} \cdot x'_{5U} = 0.$$

Після нескладних перетворень воно зводиться до вимоги

$$0,125N_0 - 0,25\frac{N_0^2}{N} = 0,$$

що виконується за умови в таких планах

$$\frac{N_0}{N} = \frac{1}{2}$$

і отже $N_0 = n_0 = 0,5N$.

Таким чином число точок в центрі плану для всіх подібних планів дорівнює числу точок на поверхні одиничної гіперкулі і визначається типом використаного багатогранника.

Константа перетворення для всіх подібних планів складає $a = 0,25$.

Наприклад, в ротатабельному плані при $n = 2$ на основі правильного шестикутника присутні 7 точок, що відрізняються: $N_0 = 6$ точок на одиничній окружності і $n_0 = 6$ співпадаючих точок в центрі плану (рис. 16).

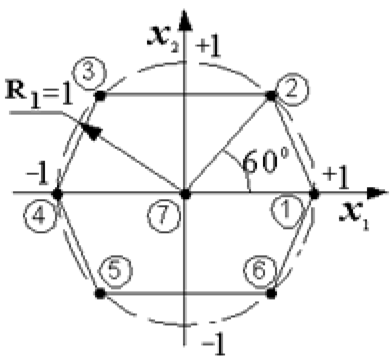


Рисунок 16 – Ротатабельний план при $n = 2$
на основі правильного шестикутника

Тут при побудові плану перший фактор варіюється на п’яти рівнях, а другий – на трьох рівнях (табл. 17).

Таблиця 17 – Ротатабельний план при n = 2 на основі шестикутника

	U	x_1	x_2	$\sum\limits_{i=1}^{n} x_{iU}^2 = R$	$x_3 = x_1x_2$	$x'_4 = x_1^2 - 0{,}25$	$x'_5 = x_2^2 - 0{,}25$
N_0	1	1	0	1,0	0	0,75	-0,25
	2	0,5	0,866	1,0	0,433	0	0,5
	3	-0,5	0,866	1,0	-0,433	0	0,5
	4	-1	0	1,0 R_1	0	0,75	-0,25
	5	-0,5	-0,866	1,0	0,433	0	0,5
	6	0,5	-0,866	1,0	-0,433	0	0,5
n_0	7	0	0	0,0	0	-0,25	-0,25
	8	0	0	0,0	0	-0,25	-0,25
	9	0	0	0,0 R_2	0	-0,25	-0,25
	10	0	0	0,0	0	-0,25	-0,25
	11	0	0	0,0	0	-0,25	-0,25
	12	0	0	0,0	0	-0,25	-0,25
$\sum\limits_{U=1}^{N} x_{iU}$		0	0		0	0	0
$\sum\limits_{U=1}^{N} x_{iU}^2$		3,0	3,0		0,75	1,5	1,5

Існують ротатабельні плани, де обидва радіуси не нульові. При цьому кількість точок на кожній поверхні і співвідношення радіусів пов’язані (табл. 18).

Таблиця 18 – Кількість точок окружностей ротатабельного плану і співвідношення їх радіусів

Кількість точок зовнішньої окружності (N_0)	6	7	8	7	8	8
Кількість точок зовнішньої окружності (n_0)	5	5	5	6	6	7
Співвідношення радіусів окружності (R_2/R_1)	0,204	0,267	0,304	0,189	0,25	0,176

Приклад такого плану при n = 2, N_0 = 8, n_0 = 6, R_2/R_1 = 0,25 (рис. 17).

Рисунок 17 – Рототабельний план з двома невиродженими колами

Список літератури

1. Планирование эксперимента в электромеханике / Б.А. Ивоботенко, Н.Ф. Ильинский, И.П. Копылов. – Москва : Энергия, 1971. – 185 с.
2. Планирование эксперимента и анализ данных / Д.К. Монтгомери. – Ленинград : Судостроение, 1980. – 384 с.
3. Статистика и планирование эксперимента в технике и науке: Методы планирования эксперимента / Н. Джонсон Ф. Лион. – Москва : Мир, 1981. – 520 с.
4. Планирование эксперимента / Г.И. Красовский, Г.Ф. Филаретов. – Минск : Изд-во БГУ, 1982. – 302 с.
5. Теория планирования эксперимента / В.И. Асатурян. – Москва : Радио и связь, 1983. – 243 с.
6. Композиционное планирование регрессионного эксперимента / Ю.С. Слотин. – Москва : Знание, 1983. – 52 с.
7. Планы эксперимента высоких порядков для идентификации объектов / В.Д. Чалый. – Москва : Изд-во МИФИ, 1987. – 64 с.
8. Математическое моделирование электрических машин / И.П. Копылов. – Москва : Высш. шк., 1994. – 318 с.
9. Методы планирования эксперимента в электромеханике: метод. указания к выполнению лаб. работ / Ю.Б. Казаков, А.И. Тихонов. – Иваново, 2001. – 28 с.

Зміст

Навчальне видання

ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
до самостійної роботи
з курсів
«Основи наукових досліджень»
та «Сучасні методи наукових досліджень в обробці тиском»
для студентів освітньої програми
«Прикладна механіка»
денної і заочної форми навчання

Укладачі: КУЗЬМЕНКО Віктор Іванович
ОКУНЬ Антон Олександрович

Відповідальний за видання *проф. В.Л. Чухліб*

Роботу до видання рекомендував *проф. О.М. Шовковий*

В авторській редакції

План 2021 р., поз. 32

Підп. до друку 14.06.2021. Формат 60×84 1/16. Папір офсетний.
Riso-друк. Гарнітура Times New Roman. Ум. друк. арк. 2,8.
Наклад 50 прим. Зам. № ______. Ціна договірна.

Видавець Видавничий центр НТУ «ХПІ».
Свідоцтво про державну реєстрацію ДК № 5478 від 21.08.2017 р.
61002, Харків, вул. Кирпичова, 2

Самостійне електронне видання