

МЕТОДЫ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ. ЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

Основные определения и понятия

При активном эксперименте математическая статистика используется уже на стадии постановки и планирования эксперимента.

Пассивный эксперимент предусматривает накопление информации “в режиме нормальной эксплуатации”, но это требует много времени и затрат.

Поэтому предлагается "не ждать милостей от природы", а активно вмешиваться в ход технологического процесса: «разбалтывать» («покачивать») его тихонько, но целенаправленно, и быстро накапливать при этом информацию. Программа покачивания как раз и задается планом. Сам метод планирования может изменяться в зависимости от вида задачи, но принцип покачивания остается.

Теория планирования эксперимента началась с работ знаменитого английского ученого Р.Фишера в 30-х годах XX столетия, использовавшего ее для решения агробиологических задач.

В дальнейшем это направление было развито в пятидесятых годах в США Дж.Боксом и его сотрудниками.

Отечественные ученые также внесли большой вклад в развитие теории эксперимента, предложив ряд новых методов, а инженеры-исследователи все шире применяют эти методы на практике.

Под математической теорией планирования эксперимента будем понимать науку о способах составления экономичных экспериментальных планов, которые позволяют извлекать наибольшее количество информации об объекте исследования, о способах проведения эксперимента, о способах обработки экспериментальных данных и их использования для оптимизации производственных процессов, а также инженерных расчетов.

Принятая терминология — это либо перевод терминов с английского, либо просто их перенос в оригинале, и это необходимо иметь в виду при чтении литературы по теории планирования экспериментов.

Истинный вид функции отклика $y=f(x_1, ..., x_i, ..., x_k)$ до эксперимента чаще всего неизвестен, в связи с чем для математического описания поверхности отклика используют уравнение

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i,u=1}^k \beta_{iu} x_i x_u + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \dots +, \tag{1}$$

где x_i, x_u – переменные факторы при $i=1, ..., k; u=1, ..., k; i \neq u$;

$$\beta_i = \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)_0 ; \beta_{iu} = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_u} \right)_0 ; \beta_{ii} = \left(\frac{\partial^2 f}{2 \partial x_i^2} \right)_0 \text{ — коэффициенты.}$$

Это уравнение является разложением в ряд Тейлора неизвестной функции отклика в окрестности точки с $x_i=x_{i0}$.

На практике по результатам эксперимента производится обработка данных по методу наименьших квадратов.

Этот метод позволяет найти оценку b коэффициентов β , и данный полином заменяется уравнением вида

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i,u=1}^k b_{iu} x_i x_u + \sum_{i=1}^k b_{ii} x_i^2 + \dots +,$$

которое является регрессионной моделью (моделью регрессионного анализа).

В этом выражении \hat{y} означает модельное, т.е. рассчитываемое по уравнению модели, значение выхода.

Коэффициенты регрессии определяются экспериментально и служат для статистической оценки теоретических коэффициентов, т.е.

$$b_0 \rightarrow \beta_0, \quad b_i \rightarrow \beta_i, \quad b_{iu} \rightarrow \beta_{iu}, \quad b_{ii} \rightarrow \beta_{ii}.$$

В регрессионной модели члены второй степени $x_i x_u, x_{i2}$ характеризуют кривизну поверхности отклика. Чем больше кривизна этой поверхности, тем больше в модели регрессии членов высшей степени. На практике чаще всего стремятся ограничиться линейной моделью.

Последовательность активного эксперимента заключается в следующем:

1) разрабатывается схема проведения исследований, т.е. выполняется планирование эксперимента.

При планировании экспериментов обычно требуется с наименьшими затратами и с необходимой точностью либо построить регрессионную модель процесса, либо определить его оптимальные условия;

2) осуществляется реализация опыта по заранее составленному исследователем плану, т.е. осуществляется сам активный эксперимент;

3) выполняется обработка результатов измерений, их анализ и принятие решений.

Таким образом, планирование эксперимента – это процедура выбора условий проведения опытов, их количества, необходимых и достаточных для решения задач с поставленной точностью.

Использование теории планирования эксперимента обеспечивает:

- 1) минимизацию, т.е. предельное сокращение необходимого числа опытов;
- 2) одновременное варьирование всех факторов;
- 3) выбор четкой стратегии, что позволяет принимать обоснованные решения после каждой серии опытов;
- 4) минимизацию ошибок эксперимента за счет использования специальных проверок.

Для иллюстрации некоторых из этих положений воспользуемся ставшим уже классическим примером из книги В.В.Налимова, Т.И.Голиковой [7].

7. Налимов В.В, Голикова Т.И. Логические основы планирования эксперимента.
– М.: Металлургия, 1980. – 152 с.

Пример хорошего и плохого эксперимента

Рассмотрим пример – взвешивание трех объектов А, В, С на аналитических весах.

Первый – традиционный – подход предусматривает последовательное взвешивание каждого из образцов.

Исследователь вначале делает холостое взвешивание для определения нулевой точки весов, а затем по очереди взвешивает каждый из образцов.

Это пример традиционного использования однофакторного эксперимента, т.е. здесь исследователь изучает реакцию на поведение каждого из факторов в отдельности.

Традиционная схема взвешивания трех объектов представлена в табл.

*Традиционное проведение эксперимента**

Номер опыта	А	В	С	Результат взвешивания
1	-1	-1	-1	y_0
2	+1	-1	-1	y_1
3	-1	+1	-1	y_2
4	-1	-1	+1	y_3

*) Когда образец кладется на весы, в таблице ставится +1, когда он на весах отсутствует, то -1.

Масса каждого объекта оценивается только по результатам двух опытов:

того опыта, в котором на весы был положен изучаемый объект, и холостого опыта. Например, масса объекта А: $m_A=y_1-y_0$. Как обычно, ошибка взвешивания предполагается независимой от взвешиваемой величины, аддитивной и имеющей одно и то же распределение. Тогда дисперсия измерения веса образца следующая:

$$\sigma_A^2 = \sigma_{y_1}^2 + \sigma_{y_0}^2 = 2\sigma^2,$$

где σ^2 — дисперсия любого взвешивания. Такими же будут и дисперсии весов образцов В и С.

Приведем теперь тот же эксперимент по несколько иной схеме, задаваемой матрицей планирования, приведенной в табл

Планирование эксперимента при взвешивании трех объектов

Номер опыта	А	В	С	Результат взвешивания
1	+1	-1	-1	y_1
2	-1	+1	-1	y_2
3	-1	-1	+1	y_3
4	+1	+1	+1	y_4

В первых трех опытах последовательно взвешивают объекты А, В, С, в последнем опыте тоже взвешивают объекты А, В, С, но все три объекта вместе, а "холостое" взвешивание не производится.

Легко заметить, что масса каждого объекта будет задаваться формулами

$$m_A = \frac{1}{2}(y_1 - y_2 - y_3 + y_4);$$

$$m_B = \frac{1}{2}(y_2 - y_1 - y_3 + y_4);$$

$$m_C = \frac{1}{2}(y_3 - y_1 - y_2 + y_4);$$

Масса объекта А, вычисленная по приведенной выше формуле, оказывается не искаженной массами весов объектов В и С, так как масса каждого из них входит в формулу для массы А дважды с разными знаками.

Найдем теперь дисперсию, связанную с ошибкой взвешивания, по новой схеме постановки экспериментов:

$$\sigma_A^2 = \frac{1}{4}(\sigma_{y_1}^2 + \sigma_{y_2}^2 + \sigma_{y_3}^2 + \sigma_{y_4}^2) = \sigma^2.$$

Аналогичным образом находим: $\sigma_B^2 = \sigma^2, \sigma_C^2 = \sigma^2.$

Мы видим, что при новой схеме дисперсия взвешивания получается вдвое меньше, чем при традиционной схеме, хотя в обоих случаях на взвешивание трех объектов затрачивалось по четыре опыта.

Зададимся вопросом: "В результате чего происходит увеличение точности экспериментов в два раза?".

В первом случае эксперимент был поставлен так, что каждую массу мы получали лишь из двух взвешиваний.

При новой схеме взвешивания каждая масса вычислялась уже по результатам всех четырех взвешиваний.

Вторую схему можно назвать многофакторной, поскольку здесь оперируют всеми факторами так, что каждая масса вычислялась по результатам сразу всех опытов, проведенных в данной серии экспериментов, – вот главная причина уменьшения дисперсии вдвое.

Не подумайте, что мы зря потратили время на обсуждение такой тривиальной задачи. Точно такой же подход используется при изучении других, более сложных задач.

Таким образом, использование теории планирования эксперимента может явиться одним из путей существенного повышения эффективности многофакторных экспериментальных исследований.

В планировании экспериментов применяются в основном планы первого и второго порядков. Планы более высоких порядков используются в инженерной практике редко. В связи с этим далее приводится краткое изложение методики составления планов эксперимента для моделей первого и второго порядков.

Под планами первого порядка понимают такие планы, которые позволяют провести эксперимент для отыскания уравнения регрессии, содержащего только первые степени факторов и их произведения

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{\substack{i,u=1 \\ u \neq i}}^k b_{iu} x_i x_u + \sum_{\substack{i,j,u=1 \\ u \neq i \neq j}}^k b_{iju} x_i x_j x_u + \dots$$

Планы второго порядка позволяют провести эксперимент для отыскания уравнения регрессии, содержащего и вторые степени факторов:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{\substack{i,u=1 \\ i \neq u}}^k b_{iu} x_i x_u + \sum_{i=1}^k b_{ii} x_i^2 + \dots$$

Нахождение уравнения регрессии методом планирования экспериментов состоит из следующих этапов:

- выбор основных факторов и их уровней;
- планирование и проведение собственно эксперимента;
- определение коэффициентов уравнения регрессии;
- статистический анализ результатов эксперимента.

Планирование первого порядка

На первой стадии исследования обычно принимают полином первой степени. Так, для трехфакторной задачи теоретическое уравнение регрессии имеет вид

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^3 \beta_i x_i + \sum_{\substack{i,u=1 \\ i \neq u}}^3 \beta_{iu} x_i x_u + \beta_{123} x_1 x_2 x_3.$$

Уравнение регрессии, получаемое на основании результатов эксперимента, в отличие от приведенного теоретического уравнения, имеет вид

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^3 b_i x_i + \sum_{\substack{i,u=1 \\ i \neq u}}^3 b_{iu} x_i x_u + b_{123} x_1 x_2 x_3.$$

где коэффициенты регрессии $b_0, b_1, \dots, b_3, \dots, b_{123}$ являются оценками для теоретических коэффициентов регрессии, т.е.

$$b_i \rightarrow \beta_i, \quad b_{iu} \rightarrow \beta_{iu}, \quad b_{123} \rightarrow \beta_{123}.$$

Члены, содержащие произведения $x_1 x_2$; $x_2 x_3$ и т.д., называют членами, отражающими попарное взаимодействие факторов, члены вида $x_1 x_2 x_3$ — членами тройного взаимодействия.

Выбор основных факторов и их уровней

В качестве факторов можно выбирать только контролируемые и управляемые переменные, т.е. такие, которые исследователь может поддерживать постоянными в течение каждого опыта на заданном уровне.

В число факторов должны быть включены параметры процесса, оказывающие наиболее сильное влияние на функцию отклика. Необходимо заметить, что, несмотря на всю заманчивость и очевидные преимущества активного спланированного эксперимента перед пассивным, в его применении имеется целый ряд трудностей, связанных с определенными ограничениями на его реализацию.

Важнейшим условием применимости этого подхода является управляемость процессов по каждому из выбранных факторов, т.е. возможность независимого изменения каждого из этих факторов и поддержания его на заданном уровне в период проведения опытов.

Для каждого фактора необходимо указать тот интервал изменения параметров, в пределах которого ставится исследование. Для этого на основе априорной информации устанавливаются ориентировочные значения факторов $x_{10}, x_{20}, \dots, x_{i0}, \dots, x_{k0}$.

Этой комбинации значений факторов соответствует точка в многомерном факторном пространстве, которая принимается за исходную точку. Координаты этой точки принимаются за основной (нулевой) уровень.

Интервалом варьирования факторов называется некоторое число (каждое для соответствующего фактора), прибавление которого к основному уровню дает верхний, а вычитание – нижний пределы.

Для упрощения записи условий эксперимента и обработки экспериментальных данных масштабы по осям выбираются так, чтобы верхний уровень составлял +1, нижний -1, а основной – 0.

Для факторов с непрерывной областью определения это достигается с помощью преобразования (кодирования) факторов:

$$X_i = \frac{x_i - x_{i0}}{\Delta x_i}$$

В теории планирования экспериментов показано, что минимально необходимое число уровней факторов на единицу больше порядка уравнения.

Планирование эксперимента

Рассмотрим сначала частный случай, когда функция отклика линейно зависит от трех независимых факторов. Уравнение регрессии в этом случае имеет вид (9), а план эксперимента представлен в табл.

Таблица полного факторного эксперимента для трех факторов

[illegible]

Здесь добавлен столбец фиктивной переменной x_0 , нужный для оценки свободного члена b_0 .

После реализации плана получают 8 уравнений с 8 неизвестными, их решение и даст оценку всех 8 коэффициентов регрессии $b_0, b_1, \dots, b_3, b_{12}, \dots, b_{123}$.

План, в котором число опытов равно числу определяемых коэффициентов, называется насыщенным.

Заметим, что мы использовали все точки с "крайними" координатами, т.е. ± 1 , или, говоря другими словами, все возможные комбинации выбранных уровней.

В самом деле, всех возможных комбинаций $2^k=8$ (k – число факторов), и мы все их использовали.

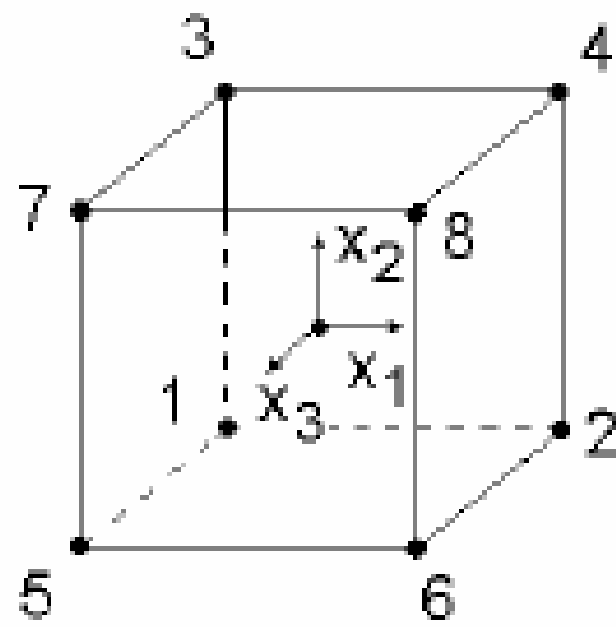
Если эксперименты проводятся только на двух уровнях (при двух значениях факторов) и при этом в процессе эксперимента осуществляются все возможные неповторяющиеся комбинации из k факторов, то постановка опытов по такому плану носит название полного факторного эксперимента (ПФЭ) или 2^k .

Иными словами, полный факторный эксперимент (ПФЭ) — это эксперимент, реализующий все возможные неповторяющиеся комбинации уровней независимых факторов.

Кодированный план геометрически может быть интерпретирован в виде куба, восемь вершин которого представляют собой восемь экспериментальных точек (рис.)

При числе факторов $k=2$ построение матрицы ПФЭ не вызывает затруднений, при увеличении же числа факторов возникает необходимость в некоторых специальных приемах построения матрицы.

Геометрическое изображение ПФЭ



Первый прием основан на чередовании знаков. В первом столбце (для x_1) знаки чередуются поочередно.

Во втором (для x_2) — через 2, в третьем (для x_3) — через 4 и т.д. по степеням двойки 2^k . Этот подход и использован при составлении плана, представленного в табл.

Второй прием основан на последовательном достраивании матрицы.

Для этого при добавлении нового фактора необходимо повторить комбинации уровней исходного плана — сначала при значениях нового фактора на верхнем уровне, а затем — на нижнем.

Матрица ПФЭ обладает следующими свойствами:

1) свойство симметричности: алгебраическая сумма элементов вектор-столбца каждого фактора равна нулю (за исключением столбца, соответствующего свободному члену):

$$\sum_{j=1}^n X_{ij} = 0, \quad \text{где } i - \text{номер фактора; } j - \text{номер опыта;}$$

2) свойство нормирования: сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу опытов:

$$\sum_{j=1}^n X_{ij}^2 = n;$$

3) свойство ортогональности: скалярное произведение всех вектор-столбцов (сумма почленных произведений элементов любых двух вектор-столбцов матрицы) равно нулю:

$$\sum_{j=1}^n X_{ij} X_{uj} = 0, i \neq u.$$

Планы, для которых выполняется свойство 3, называют ортогональными.

Благодаря этому свойству резко уменьшаются трудности, связанные с расчетом коэффициентов уравнения регрессии.

Поскольку результаты наблюдений отклика носят случайный характер, приходится в каждой точке плана проводить не один, а m^* параллельных опытов (обычно $m^*=2 \div 4$), осреднение результатов которых, как уже отмечалось, дает возможность уменьшить погрешности оценки истинного значения отклика в $\sqrt{m^*}$ раз.

В каждой серии экспериментов их последовательность рандомизируется, т.е. с помощью таблиц случайных чисел определяется случайная последовательность реализации экспериментов.

Рандомизация дает возможность свести эффект некоторого случайного фактора к случайной погрешности. Это позволяет в определенной степени исключить предвзятость и субъективизм исследователя.