Полный факторный эксперимент

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

При двух уровнях имеем ПФЭ типа $\mathbf{2^к}$. Число опытов для данного случая будет равно $\mathbf{N = 2^к}$

Условие эксперимента записываются в виде таблицы.

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

Такие таблицы называются матрицами планирования эксперимента (МПЭ).

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

Таблица 4.1

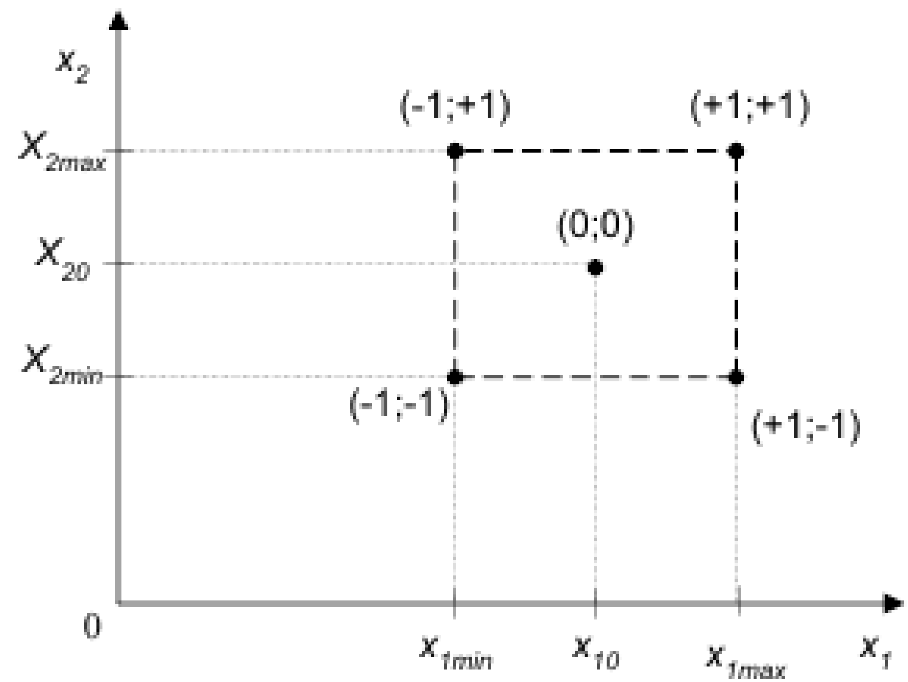
Опыт	x_1	x_2	y
1	-1	-1	y_1
2	+1	-1	y_2
3	-1	+1	y_3
4	+1	+1	y_4

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

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

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

Рис. 4. Геометрическое представление ПФЭ



В матрицу ПФЭ вводится фиктивный столбец x_0 для учета свободного члена b_0 . Коэффициенты b_0,b_1,b_2 **оцениваются** согласно выражений

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

Свойства полного факторного эксперимента $2^К$

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

Первые два свойства вытекают из построения матрицы.

Симметричность относительно центра эксперимента. Алгебраическая сумма элементов столбца каждого фактора равно нулю 0

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

где j- номер фактора, N - число опытов.

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

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

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

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

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

Ортогональные планы делают эксперимент более **эффективным**.

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

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

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

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

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

Выбор модели при проведении полного факторного эксперимента

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

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

Часто встречающийся вид нелинейности связан с эффектом взаимодействия между факторами.

ПФЭ позволяет оценить кроме коэффициентов при линейных эффектах коэффициенты взаимодействия.

Для этого **перемножают** соответствующие столбцы.

Тогда уравнение принимает вид $y = \beta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \beta_{12} x_1 x_2 + \varepsilon$ (4)

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

Таблица 2

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

Коэффициенты уравнений регрессии оцениваются следующим образом:

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

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

Нахождение модели методом ПФЭ состоит из следующих этапов:

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

При составлении матрицы ПФЭ руководствуются следующими правилами:

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

Рассмотрим пример составления МПЭ для трех факторного полного эксперимента.

В качестве уравнения регрессии берем неполную квадратичную модель.

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^{3} b_1 x_i + \sum_{i<j}^{3} b_{ij} x_i x_j + b_{123} x_1 x_2 x_3$$

Введем обозначение переменных x через z, тогда

$$\hat{y} = \sum_{i}^{N} b_i z_i$$

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

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

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	Код. обозначение
	z_0	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5	z_6	z_7	
1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	y_1
2	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	y_2
3	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	y_3
4	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	y_4
5	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	y_5
6	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	y_6
7	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	y_7
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_8

Таблица 3

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

Дробный факторный эксперимент

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

Рассмотрим пути минимизации числа опытов.

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

В результате остается одна степень свободы, т.к. имеем четыре опыта, а количество констант три. Используем эту степень свободы для минимизации числа опытов. При линейном приближении $b_{12} \to 0$ и тогда вектор-столбец x_1x_2 может быть использован для нового фактора x_3.

Таблица 4

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Таблица 5

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

Возьмем в качестве определяющего контраста $-1 = x_1x_2x_3$.Тогда $-x_1 = x^2{}_1x_2x_3$

Учитывая, что $x^2 = 1$ получаем $x_1 = -x_2x_3$.

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

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

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

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

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

$$x_4 = x_1 x_2 \qquad x_4 = x_1 x_3$$

$$x_4 = -x_1 x_2 \qquad x_4 = -x_1 x_3$$

$$x_4 = x_2 x_3 \qquad x_4 = x_1 x_2 x_3$$

$$x_4 = -x_2 x_3 \qquad x_4 = -x_1 x_2 x_3$$

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

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

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

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

Обобщающий определяющий контраст

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

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

$$
\begin{array}{ll}
x_4=x_1x_2 & x_5=x_1x_2x_3 \\
x_4=x_1x_2 & x_5=-x_1x_2x_3 \\
x_4=-x_1x_2 & x_5=x_1x_2x_3 \\
x_4=-x_1x_2 & x_5=-x_1x_2x_3 \\
x_4=x_1x_3 & x_5=x_1x_2x_3 \\
x_4=x_1x_3 & x_5=-x_1x_2x_3 \\
x_4=-x_1x_3 & x_5=x_1x_2x_3 \\
x_4=-x_1x_3 & x_5=-x_1x_2x_3 \\
x_4=x_2x_3 & x_5=x_1x_2x_3 \\
x_4=x_2x_3 & x_5=-x_1x_2x_3 \\
x_4=-x_2x_3 & x_5=x_1x_2x_3 \\
x_4=-x_2x_3 & x_5=-x_1x_2x_3
\end{array}
$$

Допустим, выбран первый вариант.

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

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

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

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

$$x_1=x_2x_4=x_1x_3x_4x_5=x_2x_3x_5;$$

$$x_2=x_1x_4=x_2x_3x_4x_5=x_1x_3x_5;$$

$$x_3 = x_1x_2x_3x_4= x_4x_5x_1x_2x_5;$$

$$x_4=x_1x_2=x_3x_5=x_1x_2x_3x_4x_5;$$

$$x_5=x_1x_2x_4x_5=x_3x_4=x_1x_2x_3;$$

$$x_1x_2=x_4=x_1x_2x_3x_4x_5=x_3x_5.$$

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

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

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

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

Планирование экспериментов при построении квадратичной модели

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

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

Для двухфакторного эксперимента модель может быть представлена выражением

$$y = b_0 x_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 \tag{5}$$

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

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

Символически это можно записать:

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

Для квадратичной модели получается следующая система смешивания:

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

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

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

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

Поэтому разработаны специальные методы построения планов второго порядка.

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

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

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

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

Рис.5. Восьмиугольный план эксперимента

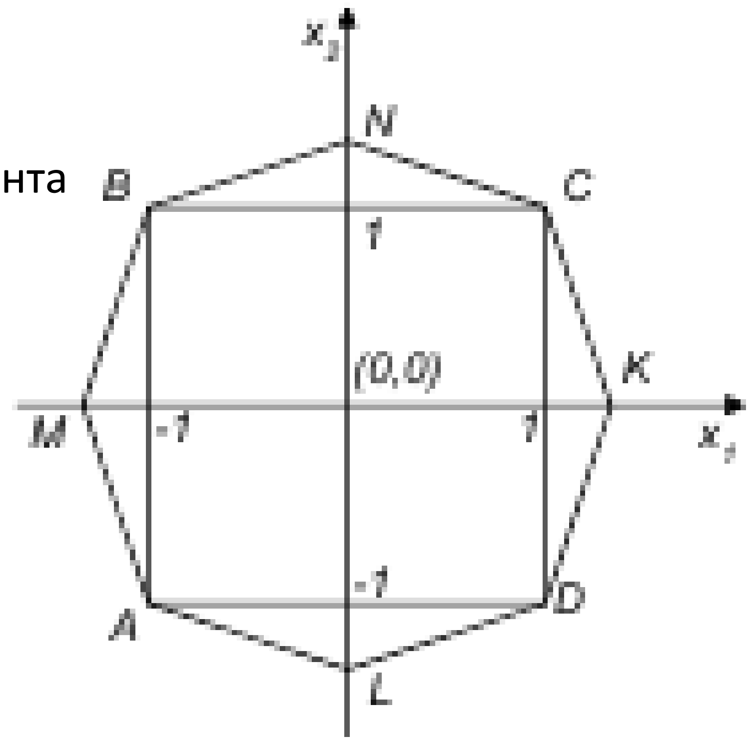


Таблица 6

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

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

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

План, приведенный в табл. 6, является рототабельным и обеспечивает получение раздельных оценок $\mathbf{b_0}$ и $\mathbf{b_{ii}}$.

Ортогональное центральное композиционное планирование

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

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

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

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

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

Рототабельное композиционное планирование

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

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

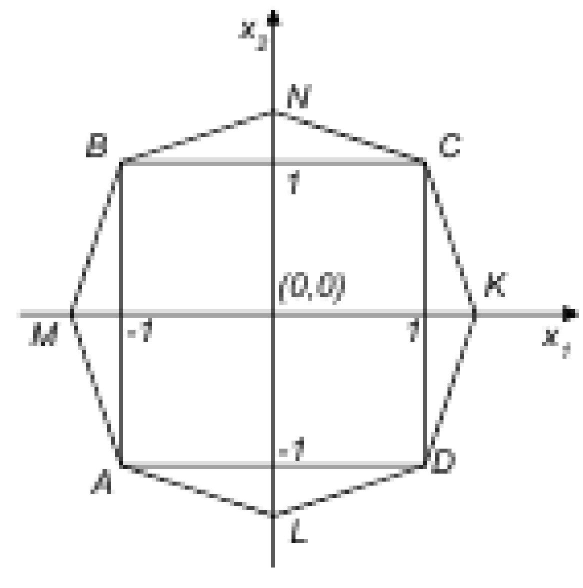


Рис.5. Восьмиугольный план эксперимента

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

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

Таблица 4.7

n	α	Nα	N_0	Nc	N
2	1,414	4	5	4	13
3	1,682	6	6	8	20
4	2	8	7	16	31

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

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

Таблица 8

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_{12}	x_{22}	x_{32}	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3
	z_0	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5	z_6	z_7	z_8	z_9
1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
2	+1	+1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	-1	+1
3	+1	-1	+1	-1	+1	+1	+1	-1	+1	-1
4	+1	+1	+1	-1	+1	+1	+1	+1	-1	-1
5	+1	-1	-1	+1	+1	+1	+1	+1	-1	-1
6	+1	+1	-1	+1	+1	+1	+1	-1	+1	-1
7	+1	-1	+1	+1	+1	+1	+1	-1	-1	+1
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
9	+1	-1,682	0	0	2,828	0	0	0	0	0
10	+1	+1,682	0	0	2,828	0	0	0	0	0
11	+1	0	-1,682	0	0	2,828	0	0	0	0
12	+1	0	+1,682	0	0	2,828	0	0	0	0
13	+1	0	0	-1,682	0	0	2,828	0	0	0
14	+1	0	0	+1,682	0	0	2,828	0	0	0
15	+1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	+1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	+1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	+1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19	+1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
20	+1	0	0	0	0	0	0	0	0	0

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

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

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

$$b_i = \frac{C}{N}\sum_{j=1}^{N} x_{j,i}\bar{y}_i \qquad b_{ij} = \frac{C^2}{N\lambda}\sum_{u=1}^{N} x_{ui}x_{uj}\bar{y}_u$$

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

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

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

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

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

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

Проверка адекватности модели проводится методом Фишера