

Планы второго порядка

Описание поверхности отклика полиномами первого порядка часто оказывается недостаточным. Во многих случаях удовлетворительная аппроксимация может быть достигнута, если воспользоваться полиномом второго порядка .

В этом случае требуется, чтобы каждый фактор варьировался не менее чем на трех уровнях. В этом случае полный факторный эксперимент содержит слишком большое количество опытов, равное 3^k . Так, при $k=3$ их 27, а число коэффициентов $b - 10$, при $k=5$ число опытов 243, а коэффициентов 21. В связи с этим осуществление ПФЭ для планов второго порядка не только сложно, но и нецелесообразно.

Сократить число опытов можно, воспользовавшись так называемым композиционным или последовательным планом, разработанным Боксом и Уилсоном.

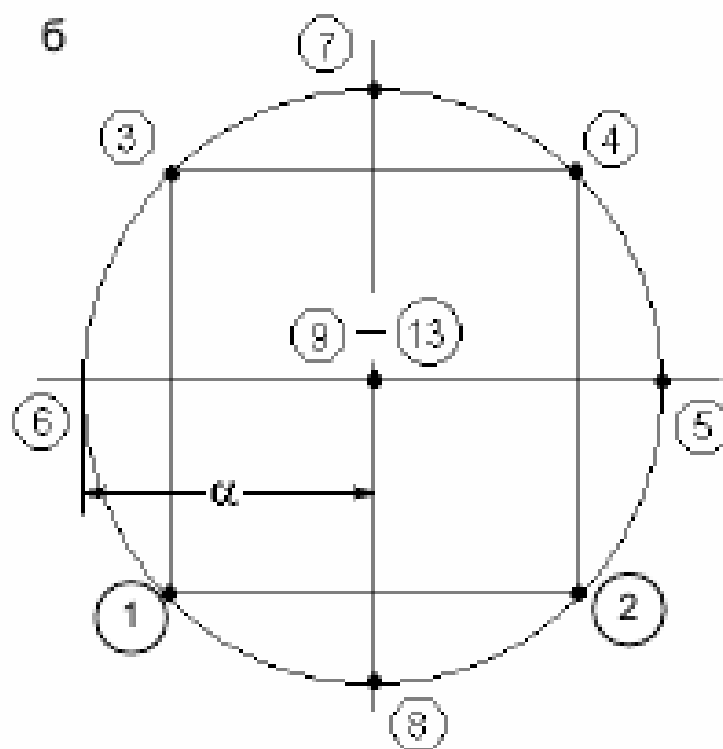
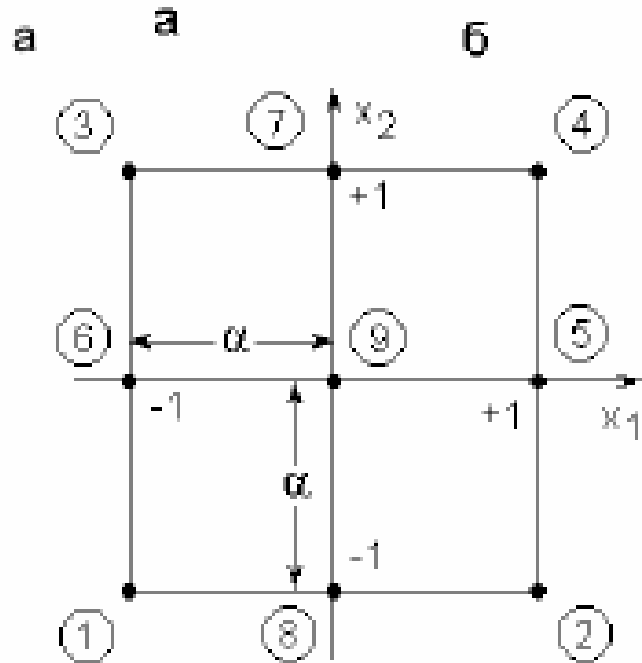
Так, при двух факторах модель функции отклика $y = f(x_1, x_2)$ второго порядка представляет собой поверхность в виде цилиндра, конуса, эллипса и т.д., описываемую в общем виде уравнением

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

Для определения такой поверхности необходимо располагать координатами не менее трех ее точек, т.е. факторы x_1 и x_2 должны варьироваться не менее чем на трех уровнях.

Поэтому план эксперимента в плоскости факторов x_1 и x_2 на рис. а не может состоять лишь из опытов 1, 2, 3, 4 ПФЭ 2^2 , располагающихся в вершинах квадрата, как это было для модели первого порядка.

К ним должны быть добавлены опыты (звездные точки) 5, 6, 7, 8, расположенные на осях x_1 и x_2 с координатами $(\pm\alpha; 0)$, $(0; \pm\alpha)$ и обязательно опыт 9 в центре квадрата, чтобы по любому направлению (5-9-6), (1-9-4) и т.д. располагалось три точки, определяющие кривизну поверхности в этом направлении.



Планы второго порядка при $k=2$:
 а — ортогональный; б — ротатабельный

Таким образом, в общем случае ядро композиционного плана составляет при $k < 5$ ПФЭ 2^k , а при $k \geq 5$ — дробную реплику от него.

Если линейное уравнение регрессии оказалось неадекватным, необходимо:

1) добавить $2 \cdot k$ звездных точек, расположенных на координатных осях факторного пространства $(\pm\alpha, 0, 0, \dots, 0)$, $(0, \pm\alpha, 0, \dots, 0)$, ..., $(0, 0, \dots, \pm\alpha)$, где α — звездное плечо, или расстояние до звездной точки;

2) провести n_0 опытов при значениях факторов в центре плана.

При k факторах общее число опытов в матрице композиционного плана составит

$$n = 2^k + 2 \cdot k + n_0 \text{ при } k < 5,$$

$$n = 2^{k-1} + 2 \cdot k + n_0 \text{ при } k \geq 5.$$

При этом величина звездного плеча α и число опытов в центре плана n_0 зависит от выбранного вида композиционного плана.

Композиционный план для $k=2$ и $n_0=1$ представлен в табл.

Композиционный план для k=2 и n₀=1 представлен в табл.

Наименование		№	Факторы					Результат	
			x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x^2_1	x^2_2	Y_j
Ядро плана		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
		5	1	a	0	0	a^2	0	y_5
Звездные точки		6	1	$-1a$	0	0	a^2	0	y_6
		7	1	0	a	0	0	a^2	y_7
		8	1	0	$-1a$	0	0	a^2	y_8
Центр плана		9	1	0	0	0	0	0	y_9

Ан алогичным образом составляются планы и для большего числа факторов.

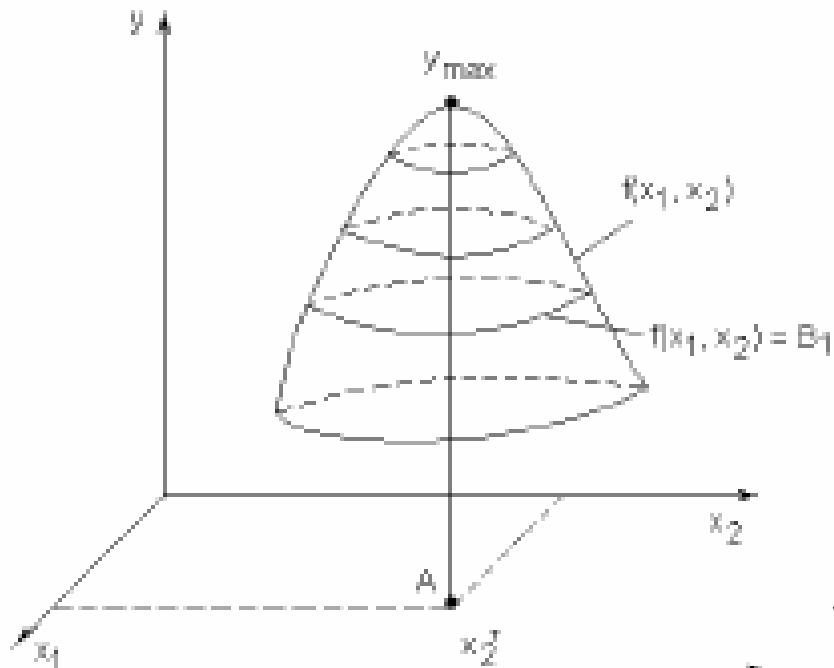
Планирование экспериментов при поиске оптимальных условий

Во многих случаях инженерной практики перед исследователем возникает задача не только выявления характера связи между двумя или несколькими рядами наблюдений, но и нахождения таких численных значений факторов, при которых отклик (выходной параметр) достигает своего экстремального значения (максимума или минимума).

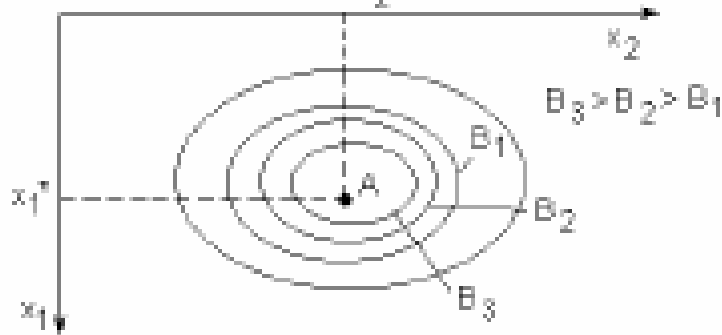
Эксперимент, решающий эту задачу, называется экстремальным. В этом случае задача сводится к оптимизационной и формулируется следующим образом: требуется определить такие координаты экстремальной точки $(x_1^*, x_2^*, \dots, x_k^*)$ поверхности отклика $y=f(x_1, x_2, \dots, x_k)$, в которой она максимальна (минимальна): $\max y(x_1, x_2, \dots, x_k)=y(x_1^*, x_2^*, \dots, x_k^*)$.

Графическая интерпретация задачи оптимизации объекта $y(x_1, x_2)$ при двух факторах x_1, x_2 представлена на рис. Здесь точка А соответствует оптимальным значениям факторов x_{1*} и x_{2*} , обеспечивающим максимум функции отклика y_{\max} . Замкнутые линии на рис. характеризуют линии постоянного уровня и описываются уравнением $y=f(x_1, x_2)=B=\text{const}$.

а



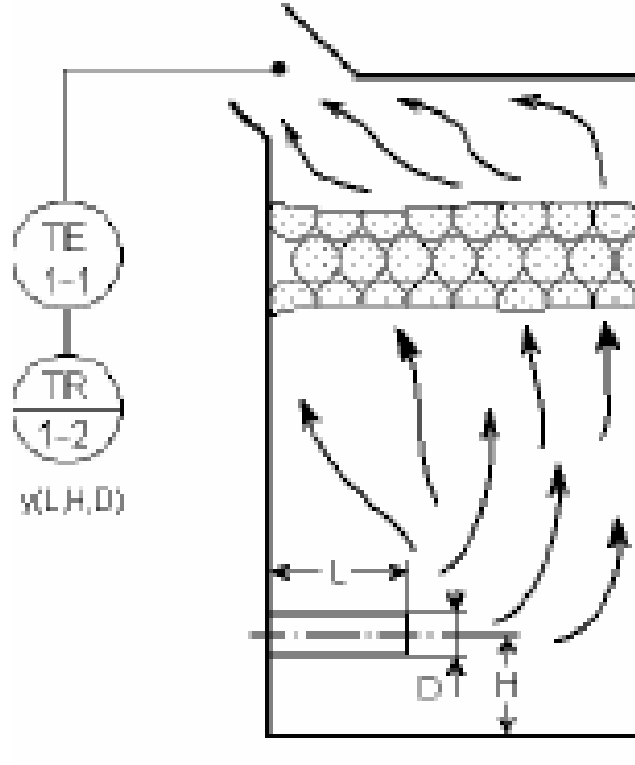
б



Поверхность отклика (а) и линии равного уровня (б): $y=f(x_1, x_2)=B=\text{const}$ для $n=2$

Необходимость в экстремальных экспериментах довольно часто возникает в инженерной практике. Так, на модели шахтной печи с противоточно движущимся плотным продуваемым слоем, схема которой представлена на рис. требуется определить расположение фурмы по высоте печи H , ее диаметр D и высоты L , обеспечивающие максимальную степень использования теплового потенциала газового потока.

В данном случае факторами являются H , D , L , а в качестве функции отклика $y(H, D, L)$ в первом приближении можно использовать температуру отходящих из печи газов.



Заметим, что вид функции отклика в этом случае исследователю заранее неизвестен, т.е. отсутствует математическая модель, адекватно описывающая данный процесс. Требуется с наименьшими затратами (при минимальном числе опытов) определить оптимальные значения H^* , L^* , D^* , при которых температура отходящих газов минимальна.

Известный из практики метод "проб" и "ошибок", в котором факторы изменяются на основании опыта, интуиции или наугад, при обычно имеющем место значительном числе факторов при исследовании процессов зачастую оказывается малоэффективным вследствие весьма сложной зависимости функции отклика от факторов.

Требуют значительно меньшего числа опытов и быстрее приводят к цели те поисковые методы оптимизации, где шаговое варьирование факторами производится целенаправленно по определенному плану.

Поисковые методы оптимизации относятся к классу итерационных процедур, при этом весь процесс разбивается на шаги, на каждом шаге делается ряд опытов и определяется, каким образом нужно изменить факторы, влияющие на процесс, чтобы получить улучшение результата.

При этом на каждом очередном шаге получаемая информация используется для выбора последующего шага.

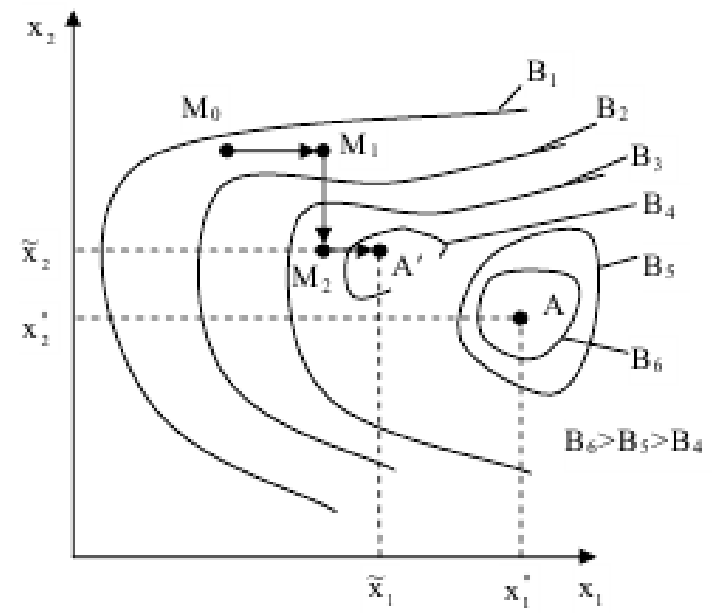
Метод покоординатной оптимизации

Процесс поиска оптимума методом покоординатной оптимизации в графическом виде для двумерного случая представлен на рис..

По этому методу выбирается произвольная точка M_0 и определяются ее координаты. Поиск оптимума осуществляется поочередным варьированием каждого их факторов.

При этом сначала изменяют один фактор (x_1) при фиксированных остальных ($x_2=const$) до тех пор, пока не прекращается прирост функции отклика (точка

В дальнейшем изменяется другой фактор (x_2) при фиксированных остальных ($x_1=const$), и далее процедура повторяется.



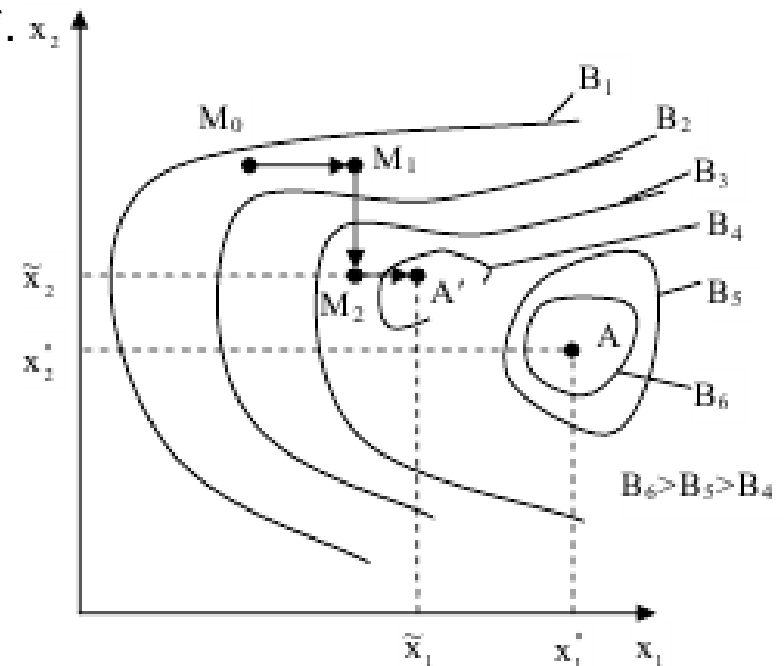
К методу покоординатной оптимизации

Данный метод весьма прост, однако при большом числе факторов требуется значительное число опытов, чтобы достичь координат оптимума.

Более того, при некоторых зависимостях $y=f(x_1, \dots, x_k)$ этот метод может привести к ложному результату.

На рис показан один из таких частных случаев, когда поочередное изменение каждого из факторов в любую сторону вдоль координатных осей x_1 и x_2 вызывает уменьшение y .

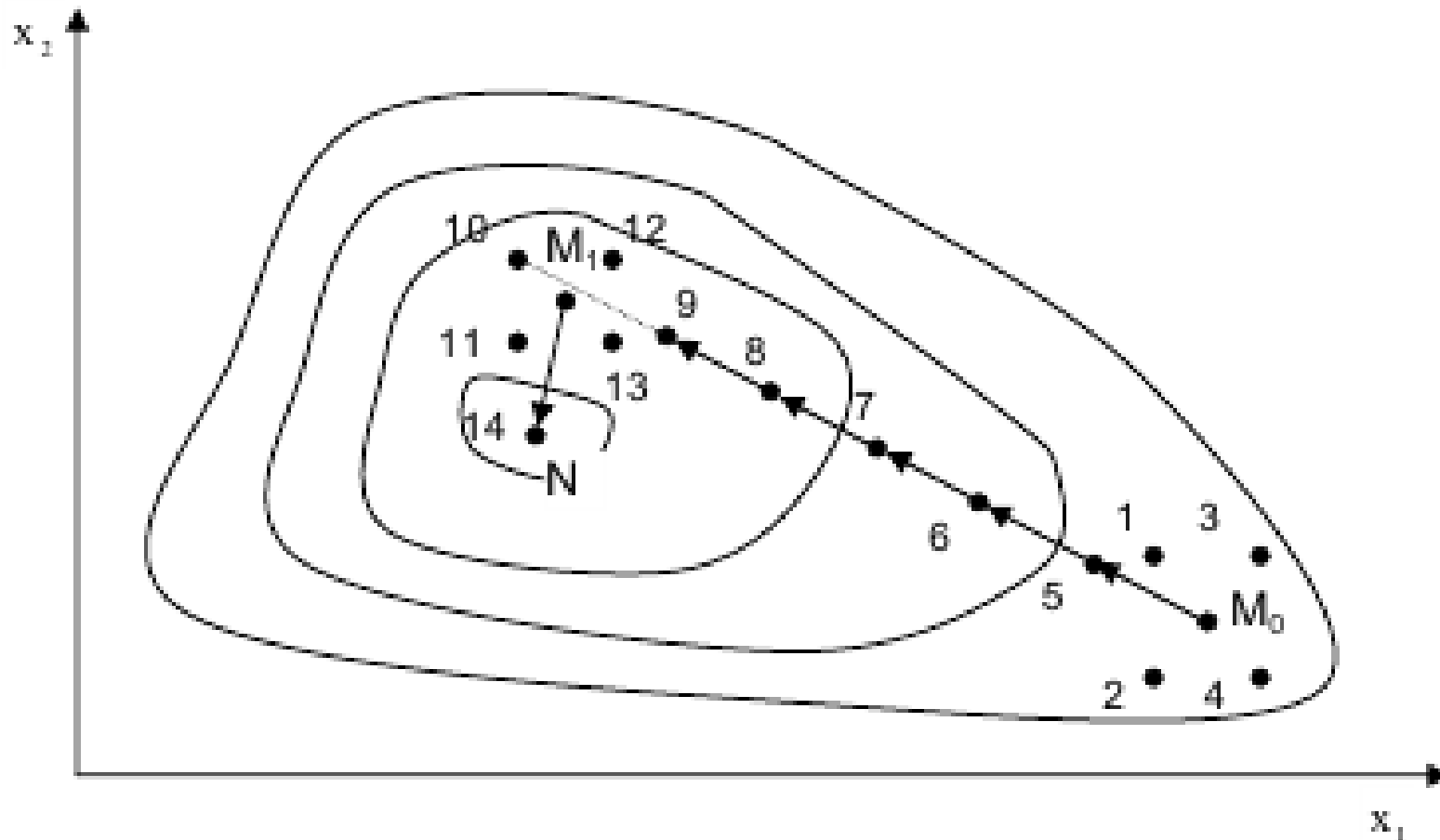
В результате решения находится ложный экстремум, находящийся в точке A' с координатами $\tilde{x}_1; \tilde{x}_2$, в то время как действительное значение максимума y_{\max} находится в точке A с координатами x_1^* и x_2^* .



Метод крутого восхождения

Известно, что кратчайший, наиболее короткий путь — это движение по градиенту, т.е. перпендикулярно линиям равного уровня, на которых функция отклика принимает постоянные значения $y(x_1, x_2, \dots, x_k) = B$. В связи с этим при оптимизации процесса рабочее движение целесообразно совершать в направлении наиболее быстрого возрастания функции отклика, т.е. в направлении градиента функции y .

Существуют различные модификации градиентного метода, одним из них является метод крутого восхождения. Сущность этого метода также рассмотрим на примере двухфакторной задачи (рис)



Процедура оптимизации методом крутого восхождения

В этом случае шаговое движение осуществляется в направлении наискорейшего возрастания функции отклика, т.е. $\text{grad } y(x_1, x_2)$. Однако направление корректируют не после каждого следующего шага, а при достижении в некоторой точке на данном направлении частного экстремума функции отклика.

Пусть в окрестности точки M_0 как центра плана поставлен ПФЭ 2^2 . Координаты отдельных опытов соответствуют точкам 1-4. По результатам ПФЭ можно рассчитать коэффициенты линейного уравнения регрессии.

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2$$

Градиент функции отклика в этой точке определяется как

$$\text{grad } y = \frac{\partial y}{\partial x_1} \cdot \vec{i} + \frac{\partial y}{\partial x_2} \cdot \vec{j}$$

где \vec{i} , \vec{j} — единичные векторы в направлении координатных осей.

Следовательно, для движения по градиенту необходимо изменять факторы пропорционально их коэффициентам регрессии и в сторону, соответствующую знаку коэффициента.

В процессе поиска двигаются в этом направлении до тех пор, пока не будет обнаружен локальный максимум (точка M_1 на рис.).

В точке последнего находят новое направление градиента (направление M_{1N}), осуществляя опять же ПФЭ, и далее процедура повторяется. Стрелками на рис. показана траектория движения к оптимуму.

Практически алгоритм сводится к следующей последовательности операций.

1. Планирование и постановка ПФЭ (или ДФЭ) в окрестности точки начального состояния x_{i0} . Расчет коэффициентов b_i линейной математической модели с целью определения направления градиента.
2. Расчет произведений $b_i \Delta x_i$, где Δx_i — интервалы варьирования факторов при ПФЭ (ДФЭ)
3. Выбор базового фактора $x_i = x_{i0}$, у которого $b_i \Delta x_i = a = \max$.
4. Выбор шага крутого восхождения для базового фактора h_a .

Этот выбор производится на основании имеющейся априорной информации или с учетом опыта исследователя, технологических соображений или других критериев.

Относительно выбора шага заметим, что слишком малый шаг потребует значительного числа опытов при движении к оптимуму, а большой шаг создает опасность про скакивания области оптимума.

. Расчет шагов изменения других факторов по формуле

$$h_i = (b_i \Delta x_i) h_a / a.$$

Это соотношение между величинами шагов изменения отдельных факторов обеспечивает движение по градиенту в факторном пространстве.

6. Составление плана движения по градиенту. Для этого в соответствии с определенными значениями шагов изменения факторов и их последовательным алгебраическим суммированием с основным уровнем в точке

$$x_{ik} = x_{i0} + kh_i, k = 1.2 \dots$$

находят координаты опытов 5, 6, 7, 8, 9, 10 (см.рис.). Часть этих опытов полагают "мысленными". "Мысленный" опыт заключается в получении предсказанных (расчетных) значений функции отклика по линейному уравнению регрессии, что позволяет сократить объем реальных опытов, т.е. увеличить скорость продвижения к экстремуму.

При "мысленном эксперименте" перевод координат в кодированную форму и подстановка их в уравнение модели объекта должна подтвердить действительное возрастание y .

Обычно реальные опыты в начале движения из базовой точки вдоль направления градиента ставятся через 2-4 мысленных опыта. Другие опыты реализуют на практике, определяя последовательность значений y в направлении градиента. Из опытных данных находят положение локального экстремума (точка M1 на рис.)

7. В окрестности локального экстремума ставят новую серию опытов (ПФЭ или ДФЭ) для определения новых значений коэффициентов уравнения регрессии и нового направления градиента (направление M_{1N} на рис.). В дальнейшем процедура повторяется до достижения следующего локального экстремума и так далее вплоть до определения окрестности координат максимума функции отклика, которая носит название почти стационарной области.

Признаком достижения этой области является статистическая незначимость коэффициентов b_i . В почти стационарной области становятся значимы эффекты взаимодействия и квадратичные эффекты. Здесь требуется переходить от ДФЭ (если он использовался ранее) к ПФЭ, а если и этого окажется недостаточно, перейти от планов эксперимента первого порядка к планам второго порядка.

Очевидно, что в задачах, где требуется определить координаты не максимума, а минимума функции отклика, знаки коэффициентов b_i следует поменять на обратные. В этом случае движение в факторном пространстве осуществляется по направлению, противоположному вектору градиента.