ЛЕКЦИЯ 9

5. ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

План лекции

5.4. Выбор основных факторов и их уровней

5.5. Планы эксперимента

5.6. Статистический анализ регрессионной модели

5.7. Планирование эксперимента при поиске оптимума

5.4. Выбор основных факторов и их уровней

Планированию эксперимента должен предшествовать этап неформализованных решений – выбора *области экспериментирования (области планирования)*, т .е. области факторного пространства, изучение которой представляет интерес для исследователя. Границы этой области по каждому фактору X_i обусловлены его минимальным и максимальным значениями, т. е. $X_{i\,max} \geq X_i \geq X_{i\,min}$.

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. Для каждого фактора необходимо указать тот интервал изменения параметров, в пределах которого ставится исследование. При выборе диапазонов изменения факторов нужно учитывать их совместимость, т.е. контролировать, чтобы в этих диапазонах любые сочетания факторов были бы реализуемы в опытах и не приводили бы к абсурду.

Факторы могут иметь разные размерности (А, В, Вт, об/мин) и резко отличаться количественно. В теории планирования эксперимента для удобства обработки и интерпретации результатов используют кодирование факторов.

Эта операция заключается в выборе нового масштаба для кодированных факторов (рис. 5.4), причем такого, чтобы минимальное значение кодированных факторов соответствовало “-1”, а максимальное значение “+1”, а также в переносе начала координат в точку с координатами $\overline{X}_i$ (центр эксперимента, на рис. 5.4 – точка 0′), где $\overline{X}_i = \frac{X_{i\max} + X_{i\min}}{2}$.

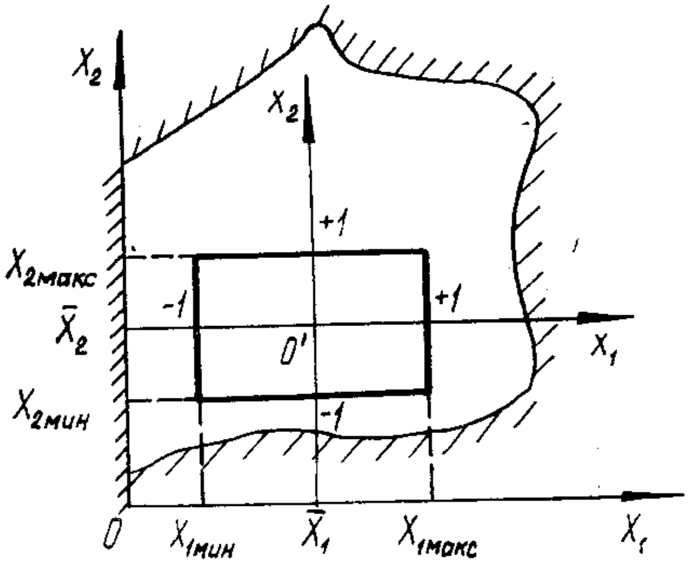

Рис. 5.4. Пример области планирования для двух факторов

Кроме того, интервал варьирования факторов $\Delta X_i = \frac{X_{i\max} - X_{i\min}}{2}$ разбивается на ряд уровней, симметричных относительно центра эксперимента. В случае составления симметричных двухуровневых планов все k факторов изменяются на двух уровнях. Для количественных факторов связь между физическими (X_i) и кодированными (x_i) значениями факторов определяется соотношением $x_i = \frac{X_i - \overline{X}_i}{\Delta X_i}$.

Область планирования для случая учета двух факторов (X_1 и X_2) изображена на рис. 5.4. Граница совместимости факторов указана на рис. 5.4 в виде кривой линии.

При трех факторах такая область представляет собой параллелепипед. При большем числе факторов она ограничивается гиперплоскостями в n-мерном пространстве.

Если фактор изменяется дискретно, например он является качественным, то каждому уровню этого кодированного фактора присваиваются числа в диапазоне от +1 до –1. Так при двух уровнях это +1 и –1, при трех уровнях +1, 0, -1 и т.д. В теории планирования экспериментов показано, что минимально необходимое число уровней факторов на единицу больше порядка уравнения.

Описанные преобразования являются линейными, поэтому в аппроксимирующей функции изменяются только коэффициенты при факторах. Например, рассмотренные выше регрессионные зависимости будут иметь вид $Y_p = b_0 + b_1x$, при $k = 2$ $Y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_1x_2$. Квадратичная зависимость при $k = 1$ $Y_p = b_0 + b_1x + b_2x^2$. При этом справедливо равенство $Y = f(X_1,\ldots, X_i,\ldots, X_n) = f(x_1,\ldots x_i,\ldots, x_n)$.

Для полинома, записанного в кодированных факторах, степень влияния факторов или их сочетаний на функцию отклика определяется величиной их коэффициента b_i. Для полинома в именованных факторах величина коэффициента a_i еще не говорит однозначно о степени влияния этого фактора или их сочетаний на функцию отклика.

5.5. Планы эксперимента

Для получения исчерпывающей информации о свойствах функции отклика в принципе необходимо проведение бесконечного числа опытов во всех точках области планирования эксперимента. В противном случае всегда существует теоретическая возможность пропустить некоторую особенность поверхности отклика. Указанную разновидность эксперимента можно назвать экспериментом с полным перебором всех входных состояний. Такой эксперимент носит число умозрительный, гипотетический характер и нереализуем на практике. Если для однофакторного случая можно еще представить себе некий эксперимент, в какой-то степени близкий к полному перебору, когда экспериментатор, постепенно уменьшая или увеличивая значение фактора, непрерывно следит за откликом, то в случае, когда число факторов больше одного, подобный эксперимент уже становится принципиально нереализуем. Экспериментатор просто вынужден задаться дискретной сеткой значений факторов, выбрать какое-то фиксированное число уровней каждого фактора. В теории планирования эксперимента сознательно отказываются от полного перебора входных состояний или эксперимента близкого к нему по своей конструкции. Выбор числа уровней варьирования по каждому фактору непосредственно связывается с выбором вида функции отклика или точнее с выбором вида ее аппроксимации.

Теория планирования эксперимента рекомендует, как правило, начинать с простейшей модели (например, с линейной модели, если нет информации о свойствах объекта или есть информация, что объект не обладает ярко выраженными нелинейными свойствами, или с квадратичной модели, если известно, что функция отклика, по всей видимости, нелинейна).

Логика экспериментирования здесь такова: постановка небольшого числа опытов для получения простейшей модели, проверка ее пригодности; если модель удовлетворяет исследователя, эксперимент заканчивается. Если же модель не пригодна, необходим следующий цикл экспериментирования: постановка новых (дополнительных опытов), позволяющих получить более сложную модель, ее проверка и т.д. до тех пор, пока не будет получена модель, которую исследователь признает достаточно хорошей

Если обратиться к наиболее распространенным полиномиальным моделям, то подобная логика означает, что исследователь обычно начинает с построения простейшей линейной модели, для чего достаточно варьировать каждый фактор всего на двух уровнях. Затем, в случае неудачи, он переходит к построению квадратичных моделей; для этого нужно минимум три уровня варьирования по каждому фактору. Обычно исследователь довольно быстро определяет подходящую модель и экономит значительное число опытов по сравнению с вариантом, когда сразу ищется модель максимальной сложности. Согласно этой концепции при проведении эксперимента необходимо использовать последовательную, шаговую стратегию. После каждого шага производится анализ результатов, затем принимается решение о дальнейшей деятельности.

Таким образом, прежде чем приступить к составлению плана, нужно определить регрессионную модель объекта исследования, поскольку план и модель неразрывно связанные понятия. В настоящее время изданы каталоги планов эксперимента, в которых приводятся сравнительная оценка планов и рекомендации по их выбору применительно к конкретным условиям эксперимента. Одну и ту же задачу, как правило, можно решать с помощью различных планов эксперимента. Это значит, что при разных планах параметры модели и предсказанные значения отклика будут оцениваться с разной точностью.

План эксперимента – совокупность данных определяющих число, условия и порядок проведения опытов.

Матрица плана – стандартная форма записи условий проведения эксперимента в виде прямоугольной таблицы, строки которой отвечают опытам, а столбцы факторам; размер матрицы плана N×k. ки; (i, j)-й элемент матрицы плана равен уровню i-го фактора в j-м опыте. Пример матрицы плана в табличном виде приведен в правой части таблицы 5.1.

Составить план эксперимента – значит определить, какое значение должен принимать каждый из факторов в каждом опыте. *Точка плана* – упорядоченная совокупность численных значений факторов, соответствующая условиям проведения опыта, точка факторного пространства, в которой проводится эксперимент.

При нестабильных условиях эксперимента последовательность опытов должна быть случайной. Это позволяет в определенной мере скомпенсировать влияние различного рода помех. Процесс организации случайной последовательности опытов называется *рандомизацией*. Тем самым обеспечивается представительность полученной выборки, т.е. гарантируется возможность с помощью измерения свойств конечного набора элементов из совокупности высказать обоснованное суждение о свойствах всей совокупности в целом. При проведении различного рода экспериментов принцип рандомизации предусматривает случайный порядок реализации строк матрицы плана.

В планировании экспериментов применяются в основном планы первого и второго порядков. Планы более высоких порядков используются в инженерной практике редко. Под планами первого порядка понимают такие планы, которые позволяют провести эксперимент для отыскания уравнения регрессии, содержащего только первые степени факторов и их произведения. Например, для k = 2.

$$Y_p = a_0 + a_1 X_1 + a_2 X_2 + a_3 X_1 X_2 .$$

Планы второго порядка позволяют провести эксперимент для отыскания уравнения регрессии, содержащего и вторые степени факторов. Например, для k = 2.

$$Y_p = a_0 + a_1 X_1 + a_2 X_2 + a_3 X_1 X_2 + a_4 X_1^2 + a_5 X_2^2 .$$

Рекомендации по выбору планов эксперимента можно найти в справочной литературе*.

5.6. Статистический анализ регрессионной модели

Планирование эксперимента исходит из статистического характера зависимостей, поэтому полученные уравнения подвергаются тщательному статистическому анализу с целью извлечь из результатов эксперимента максимум информации и убедиться в достоверности полученной зависимости и ее точности.

Точность получаемой модели обязательно должна быть сопоставлена с интенсивностью случайной помехи, воздействующей на результат измерения отклика Y. При прочих равных условиях, чем меньше уровень помехи, тем более точной (и, как правило, сложной) должна быть модель; чем выше уровень помехи, тем в большей степени можно ожидать, что более простая (необычно менее точная) модель окажется работоспособной. Фактически здесь можно провести известную аналогию с задачами теории измерений, ясно, например, что подключение прибора высокого класса точности для измерения переменной, отягощенной большой случайной ошибкой есть расточительность.

Например, для однофакторной ситуации приведенной на рис. 5.5, теоретическая функция отклика весьма сложной формы, и кроме того имеет место значительная случайная помеха. В данном случае для предсказания Y по X неце-

* Таблицы планов эксперимента для факторных и полиномиальных моделей. М.: Металлургия, 1982. С. 752.

лесообразно использовать сложную модель, поскольку все равно точность предсказания будет определяться в основном шумовой составляющей.

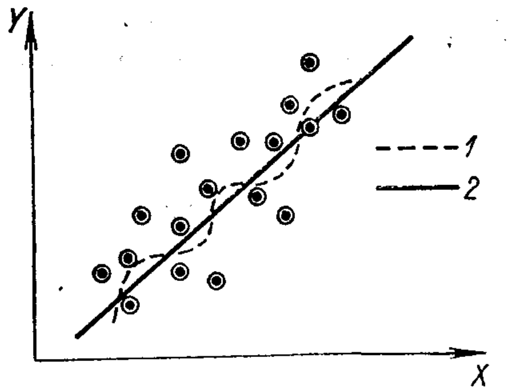

Рис. 5.5. К принципу сопоставления с шумом:
1 – теоретическая функция отклика; 2 – линейная модель

На примере рис. 5.5 можно проиллюстрировать понятие «корреляционной связи», которое широко используется при обработке экспериментальных данных. Если две переменные зависят друг от друга так, что каждому значению X соответствует значение Y, то между ними существует функциональная связь. Однако часто между переменными X и Y существует связь, но не вполне определенная. Одному значению X соответствует несколько значений (совокупность) Y. В этом случае связь называют корреляционной. Чтобы предварительно определить наличие корреляционной связи между X и Y, наносят точки на график и строят так называемое корреляционное поле. По тесноте группирования точек вокруг прямой или кривой линии, по наклону линии можно визуально судить о наличии корреляционной связи. Так, из рис. 5.5 видно, что экспериментальные данные имеют определенную связь между X и Y. По форме поля можно ориентировочно судить о форме графика, характеризующей прямолинейную или криволинейную зависимости. Поскольку многие реальные объекты характеризуются высоким уровнем помех, при их описании получили наибольшее распространение регрессионные модели первого и второго порядков.

После вычисления коэффициентов уравнения следует, прежде всего, проверить его пригодность или адекватность.

Для оценки адекватности регрессионной модели применяют критерий Фишера. Установление адекватности – это определение ошибки аппроксимации опытных данных. Для этого необходимо рассчитать экспериментальное (опытное) значение критерия Фишера – $k_{фэ}$ и сравнить его с теоретическим (табличным) – $k_{фт}$, принимаемым при требуемой доверительной вероятности (обычно 0,95). Если $k_{фэ} < k_{фт}$ – модель адекватна; если $k_{фэ} \geq k_{фт}$ – модель неадекватна.

Опытный критерий Фишера вычисляют по формуле $k_{фэ} = D_a / D_{ср}$,

где D_a – дисперсия адекватности; $D_{ср}$ – средняя дисперсия всего эксперимента, определяющиеся как

$$D_a = \frac{\sum_1^N (Y_{jp} - \overline{Y}_j)^2}{n - d}; \qquad D_{ср} = \frac{\sum_1^m \sum_1^N (Y_{jp} - Y_j)^2}{m \cdot n}$$

Здесь Y_{jp} – расчетное значение функции (отклика) в j-ой точке; $\overline{Y}_j$ – среднее экспериментальное значение функции в каждом опыте; m – количество серий измерений (число повторных или параллельных измерений в каждом из опытов); N – количество опытов.

Значение $k_{фт}$ принимается по справочным таблицам для определенной доверительной вероятности и числа степеней свободы $q_1 = N - d$, $q_2 = N \cdot (m - 1)$.

В случае проведения вычислительного эксперимента на модели результаты параллельных опытов совпадают и таким образом, дисперсия воспроизводимости и дисперсия опыта равны 0. В связи с этим приведенные статистические оценки аппроксимирующей зависимости могут быть применены только в том случае, если погрешность опыта известна заранее. Если погрешность не может быть определена заранее, то для оценки удовлетворительности аппроксимации можно прибегнуть к другим критериям, например, к абсолютным и относительным погрешностям. Для этого достаточно оценить отклонение выходной величины Y_{jp}, предсказанной уравнением регрессии, от результатов эксперимента Y_j в различных точках. Просматривая значения этих отклонений, исследователь может легко понять, какова погрешность предсказания в точках, где проводились опыты, устраивают его или нет подобные ошибки. Таким образом, путем сопоставления фактических значений отклика с предсказанными по уравнению регрессии можно получить достаточно надежное свидетельство о точностных характеристиках модели.

В результате определения уравнения регрессии может получиться так, что один (или несколько) коэффициентов не очень большие и окажутся незначимыми. Факторы, имеющие коэффициенты, незначимо отличающиеся от нуля, могут быть выведены из состава уравнения, так как их влияние на параметры отклика будет отнесено к ошибке эксперимента. Проверка значимости оценок коэффициентов регрессии проводится для того, чтобы установить статистическую значимость или незначимость отличия от 0 коэффициентов регрессии, т.е. выясняется, обусловлено ли отличие b_i от 0 чисто случайными обстоятельствами, влиянием помехи или же это отличие не случайно. Такую оценку проводят отдельно для каждого коэффициента с помощью критерия Стьюдента:

$$t_h = |b_h| / S_{b_j}, \ h = 0, 1, 2, \ldots d;$$

где h – число коэффициентов регрессии; S_{b_j} – среднеквадратическое отклонение оценки b_h.

Полученное значение t_h должно быть сопоставлено с табличным значением t для определенной доверительной вероятности и числа степеней свободы. Если $t_h \leq t$, коэффициент b_h считается незначимым (т.е. можно принять $b_h = 0$) и соответствующее слагаемое исключается из уравнения регрессии.

С помощью анализа *работоспособности* регрессионной модели выясняют практическую возможность ее использования для решения какой-либо задачи. Это анализ проводится путем вычисления коэффициента детерминации R^2 (квадрата корреляционного отношения), который является удобным числовым показателем, интегрально характеризующим точностные свойства уравнения регрессии.

$$R^2 = \frac{\sum_{j=1}^{N}\left(Y_{jp} - \hat{Y}\right)^2}{\sum_{j=1}^{N}\left(Y_j - \hat{Y}\right)^2},$$

где $\hat{Y} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} Y_j$ – общее среднее значение функции отклика

Величина R^2 может изменяться в пределах от 0 до 1. Если R^2 больше 1, то уравнение регрессии выбрано неверно или сделана ошибка при расчете его параметров. Если $R^2 = 1$, регрессионная кривая проходит через все экспериментальные точки. Малое значение R^2 всегда свидетельствует о низкой точности уравнения регрессии. Если $R^2 \geq 0{,}75$ уравнение регрессии, как правило, считают работоспособным.

Анализ результатов эксперимента завершается интерпретацией статистической модели в терминах объекта исследования. Прежде всего, выясняется, в какой мере каждый из факторов влияет на функцию отклика.

В процессе анализа результатов эксперимента помимо выявления соотношений между функцией отклика и факторами возможно определение условий, при которых функция отклика оптимальна (достигает экстремума).

5.7. Планирование эксперимента при поиске оптимума

Важное место в теории планирования эксперимента занимают вопросы оптимизации исследуемых объектов и процессов. Качество процесса или объекта обычно характеризуется несколькими функциями отклика. Как правило, нельзя найти такое сочетание влияющих факторов, при котором одновременно достигается экстремум всех функций отклика. Например, максимальный крутящий момент двигателя и минимальный расход топлива достигаются при различных режимах работы. Критерием оптимальности может быть лишь одна из функций отклика, характеризующих процесс. Проблема оптимизации сводится к отысканию таких значений факторов, при которых отклик достигает экстремума (минимума или максимума).

Оптимизацию обычно осуществляют в условиях ограничений на влияющие факторы и исследуемые функции отклика, поскольку как факторы, так и функции могут изменяться только в определенных границах.

Среди наиболее распространенных методов оптимизации можно выделить: метод поразрядного приближения, градиентный метод, метод дихотомии (половинного деления), метод координатного спуска, метод квадратичной интерполяции-экстраполяции и др.

Таким образом, планирование эксперимента включает следующие основные этапы:

– выбирается цель исследования и ее количественная характеристика (функция отклика);

– выбираются из действующих в системе факторов наиболее важные X_1, X_2, ….X_k;

– устанавливаются пределы изменений факторов $X_{i\,min}$ и $X_{i\,max}$, вычисляются основной уровень $\overline{X}_i$ и интервал (шаг) варьирования ΔX_i, заменяются переменные X_i на кодированные x_i ;

– разрабатывается методика измерения выбранных факторов, определяется погрешность и число повторений в каждой из выбранных комбинаций факторов;

– выбирается регрессионная модель процесса. В случае недостатка информации вначале принимается линейная модель;

– составляется или выбирается по справочным таблицам план эксперимента;

– проводится эксперимент;

– вычисляются коэффициенты регрессии изучаемой зависимости и проверяется адекватность полученной модели. Если линейная модель не согласуется с экспериментом, то проводятся дополнительные опыты для построения более сложных зависимостей.

– проводится анализ полученного в итоге уравнения регрессии и делаются соответствующие выводы.

В настоящее время методы планирования эксперимента заложены в специализированных пакетах, широко представленных на рынке программных продуктов, например: StatGrapfics, Statistica, SPSS, SYSTAT и др.