Ю.Б. Казаков

МЕТОДЫ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

Планы второго порядка

Они позволяют сформировать функцию отклика в виде полного квадратичного полинома, который содержит большее число членов, чем неполный квадратичный полином, сформированный по планам первого порядка, и поэтому требуют большего числа выполняемых опытов. Полный квадратичный полином при *n* =2 содержит 6 членов

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

при *n* = 3 - 11 членов

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

Известно, что для получения квадратичной зависимости каждый фактор должен фиксироваться как минимум на трех уровнях.

Для планов второго порядка область планирования может:

- Быть естественной, то есть включать область планирования планов первого порядка и дополнительные точки (такие планы называются композиционными). Дополнительные точки могут выходить за область плана первого порядка – единичного гиперкуба. В этом случае опыты в них реализуются при установлении факторов за пределами варьирования. Это надо учитывать при определении области совместимости факторов.

- Не выходить за пределы единичного гиперкуба, то есть для всех точек плана выполняется условие $|x_{iU}| \le 1$.

- Не выходить за пределы единичного гипершара, определяемую соотношением таких значений факторов в плане, что $x_1^2 + x_2^2 + \ldots + x_n^2 \le 1$.

Во втором и третьем случаях используют специальные приемы выполнения приведенных соотношений в плане. План с одной областью планирования можно перестроить в план другой областью планирования.

Если уже был ранее сформирован план ПФЭ, но точность его функции отклика не удовлетворяет, то мы можем достроить этот план до плана второго порядка (композиционный план) и сформировать функцию отклика в виде полного квадратичного полинома, без потери информации о ранее сделанных опытах.

Ортогональный центрально-композиционный план второго порядка

Ортогональным планом называется такой план, у которого матрица планирования **X** строится так, что бы матрица **C=X$_t$X** оказалась диагональной.

Используем этот подход и при построении планов второго порядка. План называется центральным, если все точки расположены симметрично относительно центра плана. ОЦКП – центральный симметричный ортогональный композиционный план.

В ОЦКП входят: ядро - план ПФЭ с $N_0 = 2^n$ точками плана, n_0 (одна для этого плана) центральная точка плана $(x_i = 0, i = 1,2,3,\dots, n)$ и по две "звездные" точки для каждого фактора

$$x_i = \pm\alpha, \quad x_j = 0, \quad i = 1,\dots,n, \quad j = 1,\dots,n, \quad i \neq j.$$

α – плечо "звездных" точек.

При этом в каждой плоскости, содержащей ось Y и координатную ось i-того фактора (проходящей через центр плана), оказываются три значения фактора x_i $(-\alpha,\ 0,\ +\alpha)$ и три соответствующих значения Y.

Общее количество точек в плане ОЦКП составляет

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

где для ОЦКП n_0=1.

При $n > 2$ в ОЦКП оказывается меньшее количество точек, чем в плане ПФЭ 3^n .

Число точек в плане

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

Графическое представление ОЦКП для n=3 приведено на рис. 13.

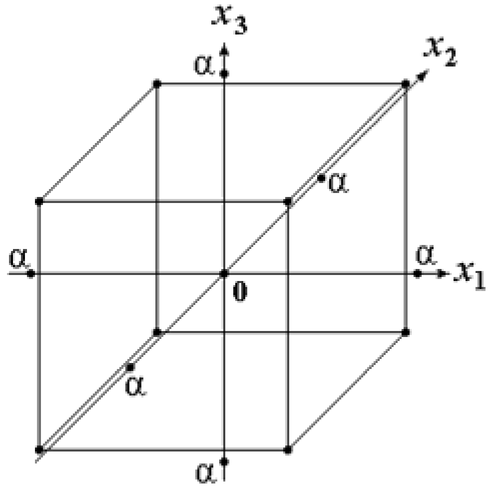

Рис. 13. ОЦКП при n=3

Для ортогонального плана необходимо, чтобы выполнялось соотношение

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

Так как $x_{0U} = 1$, то для столбцов j=1, 2,…., m+1 должно выполняться условие

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

Это означает необходимость выполнения требования, чтобы сумма элементов любого столбца (кроме j=0), включая столбцы, соответствующие квадратам фактора, должна быть равна нулю. Это возможно, если члены столбцов, соответствующих квадратам факторов, преобразованы, иначе сумма квадратов факторов не может быть равна нулю.

Преобразование элементов этих столбцов осуществляется в виде

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

где a – величина, зависящая от числа факторов.

Сумма элементов столбца, соответствующего квадратам факторов

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

Откуда

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

В общем случае ортогональный центрально-композиционный план при трех (n) факторов имеет следующий вид

	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 плана ПФЭ 2^3 ($N_0=2^n$ точек)	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
Звездные точки ($2n$ точек)	9	+1	$-\alpha$	0	0	0	0	0	0	α^2-a	-a	-a	Y_9
	10	+1	$+\alpha$	0	0	0	0	0	0	α^2-a	-a	-a	Y_{10}
	11	+1	0	$-\alpha$	0	0	0	0	0	-a	α^2-a	-a	Y_{11}
	12	+1	0	$+\alpha$	0	0	0	0	0	-a	α^2-a	-a	Y_{12}
	13	+1	0	0	$-\alpha$	0	0	0	0	-a	-a	α^2-a	Y_{13}
	14	+1	0	0	$+\alpha$	0	0	0	0	-a	-a	α^2-a	Y_{14}
Нулевая 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**	$2^n+2\alpha^2$			2^n				$2^n(1-a)^2+2(\alpha^2-a)^2+$ $+a^2(2n-2)+n_0a^2$			

В ОЦКП каждый фактор фиксируется, в общем случае, на пяти уровнях ($-\alpha$, -1, 0, 1, $+\alpha$).

Для определения неизвестных “а” и “α” нужно сформировать и решить систему из двух уравнений. Одно из них для “а” мы записали раннее. Другое уравнение получим из условия ортогональности для столбцов x'_4 и x'_5

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

После простейших преобразований с учетом того, что $N=N_0+2\cdot n+n_0$ – общее число опытов в плане, получаем соотношение

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

Соотношение для а при j=1, 2 или 3 может быть записано как (см. план)

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

Подставив его в последнее уравнение получаем

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

откуда константа преобразования а

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

Тогда

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

и плечо звездных точек

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

Например, для ОЦКП при числе факторов n=3 имеем следующие параметры плана

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

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

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

Сам план принимает вид

U	x_0	x_1	x_2	x_3	$x_1 x_2$	$x_1 x_3$	$X_2 x_3$	$x_1 x_2 x_3$	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	-1,215	0	0	0	0	0	0	0,75	-0,73	-0,73	Y_9
10	+1	+1,215	0	0	0	0	0	0	0,75	-0,73	-0,73	Y_{10}
11	+1	0	-1,215	0	0	0	0	0	-0,73	0,75	-0,73	Y_{11}
12	+1	0	+1,215	0	0	0	0	0	-0,73	0,75	-0,73	Y_{12}
13	+1	0	0	-1,215	0	0	0	0	-0,73	-0,73	0,75	Y_{13}
14	+1	0	0	+1,215	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, что план является ортогональным. В отличие от планов ПФЭ для ОЦКП сумма квадратов факторов разных столбцов не является одинаковой.

По результатам опытов плана формируется полином

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

Коэффициенты полинома $b_0, b_1, b_2, b_3, b_{12}, b_{13}, b_{23}, b_{123}, b_4, b_5, b_6$ определяется как

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

Можно преобразовать полином к виду

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

где

$$b_0' = b_0 - b_4 \cdot \mathrm{a} + b_5 \cdot \mathrm{a} - b_6 \cdot \mathrm{a}.$$

Значения параметров ОЦКП при числе факторов *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 совпадает с планом ПФЭ 2^3. Звездные точки ОЦКП в этом случае лежат на границах варьирования факторов. Если точки плана ПФЭ 2^n всегда лежат на окружности (поверхности шара, гипершара), то точки плана ОЦКП не лежат на какой-либо одной окружности (поверхности шара, гипершара). План ОЦКП не является насыщенным. Так, например, для n = 3 полином имеет одиннадцать членов со своими коэффициентами, но для их определения используются пятнадцать опытов.

Пример плана ОЦКП для *n* = 2.

Параметры плана N_0=4, N=9, α= 1, а = 2/3, 1-а=1/3, -а=-2/3, $\alpha^2 - \mathrm{a} = -2/3$.

Использован рассмотренный ранее план ПФЭ 2^2 с добавленными опытами 5-9.

U	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	$x_3' = x_1^2 - a$	$x_4' = x_2^2 - a$	Y	$\hat{Y}$	$\lvert\hat{Y} - Y\rvert$
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
$\sum_{U=1}^{N} x_{iU}^2$	9	6	6	4	2	2			

Коэффициенты полинома составляют

$$b_0 = \frac{\sum_{U=1}^{9} x_0 Y_0}{\sum_{U=1}^{9} x_{0U}^2} = \frac{6+3+4+7+5+5+1+3+2}{9} = 4;$$

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

$$b_2 = \frac{-6-3+4+7-0\cdot 5+0\cdot 5-1+3+0\cdot 2}{6} = 0,67;$$

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

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

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

Полином принимает вид

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

(Ранее по плану ПФЭ 2^2 был сформирован полином $\hat{Y} = 5 + 0,5x_2 + 1,5x_1x_2$).

Рассчитанные значения $\hat{Y}$ по полиному приведены в плане. Также приведены величины $\lvert\hat{Y}_U - Y_U\rvert$, подтверждающие достаточно высокую точность полинома. Так в центральной точке плана, в отличие от случая применения плана ПФЭ 2^2, расхождений нет.