Оптимальное планирование эксперимента

Литература

1. Н.А. Спирин, В.В. Лавров. Методы планирования и обработки инженерного эксперимента: Конспект лекций. Под общ. Ред. Н.А. Спирина. Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2004.-257с
2. Джонсон Н. Лион Ф. Статистика и планирование эксперимента в технике и науке: Методы планирования эксперимента. – М.: Мир, 1981. – 520 с.
3. Красовский Г.И., Филаретов Г.Ф. Планирование эксперимента. – Мн.: Изд-во БГУ, 1982. – 302 с.

Цель планирования эксперимента

- нахождение таких условий и правил проведения опытов при которых удается получить надежную и достоверную информацию об объекте с наименьшей затратой труда, а также представить эту информацию в компактной и удобной форме с количественной оценкой точности

Вводные понятия

- Эксперимент – система операций, воздействий и (или) наблюдений, направленных на получений информации об исследуемом объекте [1]
- Опыт – воспроизведение исследуемого явления в определенных условиях проведения эксперимента при возможности регистрации его результатов [1]
- Фактор – переменная величина, по предположению зависящая влияющая на результат эксперимента
- Отклик – наблюдаемая *случайная* переменная, по предположению зависящая от факторов [1]
- Функция отклика – зависимость мат. ожидания отклика от факторов [1]

Краткая классификация экспериментов

Качественные
(устанавливает сам факт наличия какого-либо явления, свойства и т.д.)

Количественные
(не только фиксирует акт существования, но, кроме того, позволяет установить соотношения между количественными характеристиками явления и количественными характеристиками способов внешного воздействия на объект)

Пассивные
(уровни факторов в каждом отпыте регистрируются исследовательм, но не задаются)

Активные
(уровни факторов в каждом опыте задаются исследователем)

Функция отклика

- это зависимость математического ожидания отклика от факторов [1]

$$M_y = f(x_i, h_j) + \varepsilon_\delta$$

M_y – математическое ожидание отклика

x_i – контролируемые и управляемые факторы

h_i – контролируемые, но неуправляемые факторы

ε_δ – ошибка эксперимента

Активный эксперимент

Полнофакторный эксперимент (ПФЭ) – эксперимент, реализующий все возможные неповторяющиеся комбинации уровней независимых факторов

Основная задача – определить коэффициенты β функции отклика

$$(*)\ y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_i + \sum_{i,u=1}^{k} \beta_{i,u} x_i x_u + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} x_i^{\ 2} + \ldots,$$

Уравнение (*), используется для описания функции отклика в связи с ее априорной неизвестностью

x, x – переменные факторы при i=1,…k; u=1,…k; i!=u (k-число факторов)

$$\beta_i = \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)_o ; \beta_{iu} = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_u}\right)_o ; \beta_{ii} = \left(\frac{\partial^2 f}{2\partial x_i^{\ 2}}\right)_o$$

коэффициенты влияния факторов

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

регрессионная модель (коэффициенты регрессии определяются экспериментально)

$$b \to \beta_0, b_i \to \beta_i, b_{iu} \to \beta_{iu}, b_{ii} \to \beta_{ii}$$

Последовательность проведения активного эксперимента

1. Разрабатывается схема проведения исследований, т.е. выполняется планирование эксперимента
2. Осуществляется реализация опыта по заранее составленному исследователем плану, т.е. осуществляется сам активный эксперимент
3. Выполняется обработка результатов измерений

Планирование активного эксперимента

При планировании экспериментов чаще всего применяются планы 1-ого и 2-ого порядков. Планы более высоких порядков применяются редко из-за их большой вычислительной сложности

Планы 1-ого порядка – это планы, которые позволяют провести эксперимент для отыскания уравнения регрессии, содержащее только первые степени факторов и их произведения

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

Планы 2-ого порядка – это планы, которые позволяют провести эксперимент для отыскания уравнения регрессии, содержащие вторые степени факторов

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

Планирование первого порядка

- В качестве факторов выбираются только контролируемые и управляемые факторы (переменные)
- Обеспечивается возможность независимого изменения каждого из факторов и поддержание его на определенном уровне
- Для каждого фактора указывается интервал (+/-), в пределах которого ставится исследование

Представления плана эксперимента

(на примере эксперимента с 3-мя независимыми факторами)

b_0, b_1, b_2, b_3 – коэффициенты регрессии

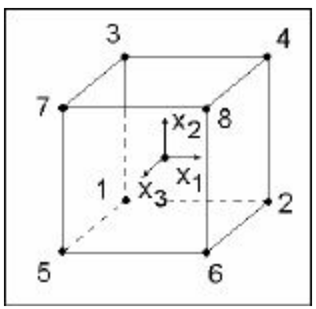
$x_i * x_u$ – члены двойного взаимодействия

$x_1 * x_2 * x_3$ – члены тройного взаимодействия

Уравнением регрессии

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

Геометрическое представление



Табличное (матричное) представление

Номер опыта	План								Результат y
	x0	x1	x2	x3	x1x2	x1x3	x2x3	x1x2x3	
1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	y1
2	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	y2
3	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	y3
4	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	y4
5	+1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	+1	y5
6	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	y6
7	+1	-1	+1	+1	-1	+1	+1	-1	y7
8	+1	+1	+1	+1	+1	-1	+1	+1	y8

Свойства матрицы представления эксперимента

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

$$\sum_{j=1}^{n} X_{ij} = 0,$$ i = номер фактора, j – номер опыта

2. Свойство нормирования – сумма квадратов 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 вектор столбцов) равно нулю

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

Определение коэффициентов b уравнения регрессии

Методом наименьших квадратов находятся оценки b коэффициентов

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

$$\Phi = \sum_{j=1}^{n} \left(y_j - \hat{y}_j \right)^2 \to \min_{b_i}$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial b_1} = 2 \sum_{j=1}^{n} \left(y_j - b_0 - b_1 X_{1j} - b_2 X_{2j} \right) X_{1j} = 0;$$

$$\sum_{j=1}^{n} y_{1j} X_{1j} - b_0 \sum_{j=1}^{n} X_{1j} - b_1 \sum_{j=1}^{n} X_{1j}^{\ 2} - b_2 \sum_{j=1}^{n} X_{1j} X_{2j} = 0;$$

По свойствам матрицы планирования

$$\text{- (ссимметриность)}\ b_0 \sum X_{1j} = 0;$$

$$-\text{(нормирования)}\ b_1 \sum X_{1j}^{\ 2} = n b_1;$$

$$-\text{(ортогональность)}\ b_2 \sum X_{1j} X_{2j} = 0;$$

Получаем

$$b_1 = \frac{\sum_{j=1}^{n} y_j X_{1j}}{n};\ b_2 = \frac{\sum_{j=1}^{n} y_j X_{2j}}{n};\ b_0 = \frac{\sum_{j=1}^{n} y_j X_{0j}}{n}$$

$$b_{12} = \frac{\sum_{j=1}^{n} y_j \left(X_1 X_2 \right)_j}{n};\ b_{123} = \frac{\sum_{j=1}^{n} y_j \left(X_1 X_2 X_3 \right)_j}{n}$$

Планирование второго порядка

- Применяется если описание функции отклика первым порядком получается недостаточным (например, процесс носит нелинейный характер)
- Каждый фактор варьируется не менее чем на трех уровнях – полный эксперимент содержит 3^k (k – количество факторов) опытов.

Номер опыта		Факторы						Результат
		x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x_1^2	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	$+\alpha$	0	0	α^2	0	y_5
Звездные точки	6	+1	$-\alpha$	0	0	α^2	0	y_6
	7	+1	0	$+\alpha$	0	0	α^2	y_7
	8	+1	0	$-\alpha$	0	0	α^2	y_8
Центр плана	9	+1	0	0	0	0	0	y_9

План 2-ого порядка при k=2 n=1

Опыты проводятся

1. В «крайних точках» - как в планировании 1-ого порядка
2. В «звездных точках» - x_i=(+/-)a, x_j=0, 1,…,n; 1,…,n; i!=j
3. В «центре» - x_i=0, j=1,2,3,…,n

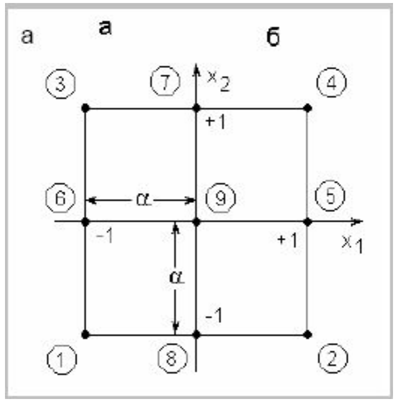
$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{11}x_1^{\ 2} + b_{22}x_2^{\ 2} + b_{12}x_1x_2$$

Уравнение регрессии для эксперимента с 2-мя факторами

Ортогональный план

Это план 2-ого порядка после преобразований (*)

Эти преобразования позволяют усреднить случайные погрешности



Номер опыта		Факторы						Результат y_j
		x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x_1'	x_2'	
Ядро плана	1	+1	-1	-1	+1	+1/3	+1/3	y_1
	2	+1	+1	-1	-1	+1/3	+1/3	y_2
	3	+1	-1	+1	-1	+1/3	+1/3	y_3
	4	+1	+1	+1	+1	+1/3	+1/3	y_4
Звездные точки	5	+1	α=+1	0	0	+1/3	-2/3	y_5
	6	+1	α=-1	0	0	+1/3	-2/3	y_6
	7	+1	0	α=+1	0	-2/3	+1/3	y_7
	8	+1	0	α=-1	0	-2/3	+1/3	y_8
Центр плана	9	+1	0	0	0	-2/3	-2/3	y_9

Ортогональный план 2-ого порядка

$$(*)\ x'_{ij} = x_{ij}^{\ 2} - \frac{\sum_{j=1}^{n} x_{ij}^{\ 2}}{n} = x_{ij}^{\ 2} - \bar{x}_i^{\ 2}$$

Тогда уравнение регрессии

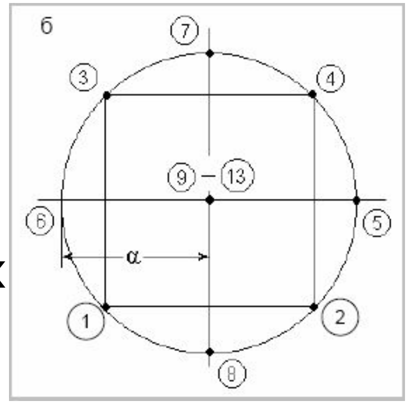
$$y = b_0' + \sum_{j=1}^{k} b_i x_i + \sum_{i,u=1}^{k} b_{iu} x_i x_u + \sum_{i=1}^{k} b_{ii}' x_i' ;$$

В итоге уравнение регрессии преобразуется к виду

$$\hat{y} = b_0' + \sum_{j=1}^{k} b_i x_i + \sum_{i,u=1}^{k} b_{iu} x_i x_u + \sum_{i=1}^{k} b_{ii}' (x_i^{\ 2} - \bar{x}_i^{\ 2})$$

Ротатабельный план

Это план, у которого точки плана располагаются на окружностях (сферах, гиперсферах)



Номер опыта		Факторы						Результат
		x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x_1^2	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
Звездные точки	5	+1	+1,414	0	0	2	0	y_5
	6	+1	-1,414	0	0	2	0	y_6
	7	+1	0	+1,414	0	0	2	y_7
	8	+1	0	-1,414	0	0	2	y_8
Центр плана	9	+1	0	0	0	0	0	y_9
	10	+1	0	0	0	0	0	y_{10}
	11	+1	0	0	0	0	0	y_{11}
	12	+1	0	0	0	0	0	y_{12}

Ротабельный план 2-ого порядка

В таком плане точность оценивания функции отклика по любому направлению факторного пространства (для всех точек плана) одинаковая, что позволяет наилучшим образом извлечь максимальное количество (несмещенной) информации из плана

Для того, что бы привести план 2-ого порядка к рототабельному величину плеча выбирают из условия (**)

$$(**)\ \alpha = 2^{\frac{k}{4}} \text{ при k} < 5 \text{ и } \alpha = 2^{\frac{k-1}{4}} \text{ при k} >= 5$$