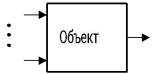




ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Что такое планирование эксперимента



Целью планирования эксперимента является создание таких планов покачивания входных переменных, которые обеспечивают более быстрое и точное построение модели объекта.

Выход объекта состоит из неизвестного сигнала (функции от входов) и центрированной помехи

$$y = \varphi(u_1, \dots, u_m) + h$$

Эксперименты в науке и промышленности

Экспериментальные методы широко используются как в науке, так и в промышленности, однако нередко с весьма различными целями.

Обычно основная цель научного исследования состоит в том, чтобы показать статистическую значимость эффекта воздействия определенного фактора на изучаемую зависимую переменную.

В условиях промышленного эксперимента основная цель обычно заключается в извлечении максимального количества объективной информации о влиянии изучаемых факторов на производственный процесс с помощью наименьшего числа дорогостоящих наблюдений.

Общие идеи

Обычно любая машина или станок, используемый на производстве, позволяет операторам **изменять** различные настройки, **влияя** на качество производимого продукта. Эксперименты позволяют инженеру, ответственному за производство, улучшать настройки машины, а также **выяснить** **какие факторы** вносят наиболее важный вклад в качество продукции. Использование этой информации позволяет улучшить настройки системы, достигнув оптимального качества. Чтобы проиллюстрировать эти рассуждения далее приводится несколько примеров.

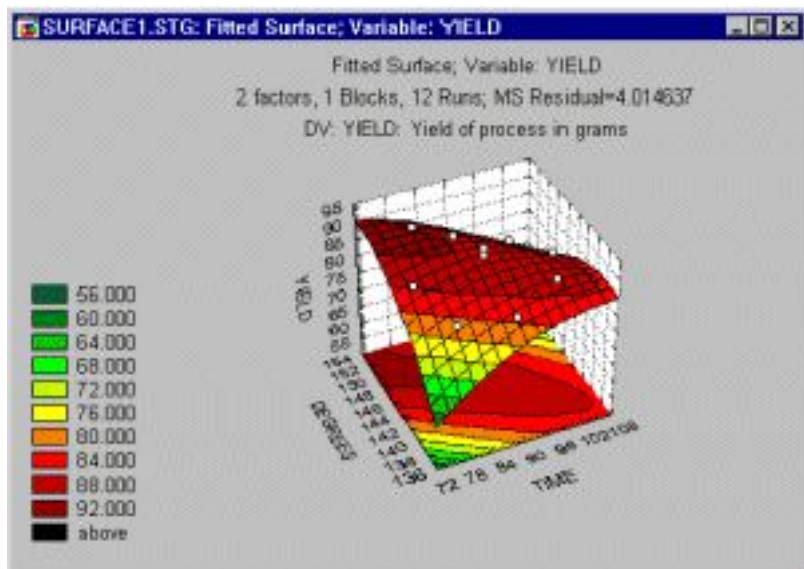
Общие идеи

Пример 1: Производство красителей для ткани. Рассмотрим эксперимент по производству некоторого красителя для ткани. В этом случае качество производимой продукции описывается насыщенностью, яркостью и стойкостью окрашенной ткани. Кроме того, необходимо уточнить, что надо изменять для получения красок различной насыщенности, яркости для удовлетворения потребительского спроса. Другими словами, в этом эксперименте нужно выявить факторы, наиболее заметно влияющие на яркость, насыщенность и стойкость производимой краски. В примере рассматривается 6 различных факторов, влияние которых оценивается с помощью плана 2^6 .

Результаты эксперимента показали, что имеется три наиболее важных фактора: Полисульфидный индекс, Время и Температура. Эту информацию теперь можно использовать для более тонкой настройки аппаратуры, что бы улучшить качество красителя.

Общие идеи

Пример 2: Максимизация выхода химической реакции. Выход продукта многих химических реакций зависит от времени и температуры. К сожалению, эти функции не линейны и не монотонны. Другими словами, нельзя сказать: “чем больше продолжительность реакции, тем больше выход” и “чем выше температура, тем больше выход”.



Формально цель эксперимента заключается в том, чтобы найти оптимальное положение на поверхности выхода, образованной двумя переменными: временем и температурой.

Общие идеи

Пример 3: Улучшение поверхностной однородности при производстве кремниевых кристаллов. Производство надежных микропроцессоров требует высоко отлаженного производственного процесса. Отметим, что в данном примере одинаково, если не более важно, контролировать как изменчивость некоторых производственных характеристик, так и их средние значения. Например, средняя толщина поверхностного слоя поликремниевой подложки производственный процесс может быть отрегулирован превосходно, однако, если изменчивость этого параметра велика, то микрочипы будут недостаточно надежными. Не существует теоретической модели, которые позволяла бы инженеру предсказать, как эти факторы влияют на однородность поверхности кристаллов. Следовательно, для оптимизации производственного процесса нужно систематизировано проводить эксперименты на различных уровнях факторов.

Что такое планирование эксперимента

n	A	B	C	y_i
1	-	-	-	y_1
2	+	-	-	y_2
3	-	+	-	y_3
4	-	-	+	y_4

Взвешивание трех тел по традиционной схеме ("+" означает, что тело положено на весы, "-" указывает на отсутствие тела на весах).

$$\sigma^2(\text{вес } A) = \sigma^2(y_2 - y_1) = 2\sigma^2(y)$$

Взвешивание трех тел с использованием планирования эксперимента.

n	A	B	C	y_i
1	-	-	-	y_1
2	+	-	-	y_2
3	-	+	-	y_3
4	-	-	+	y_4

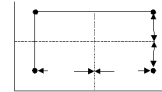
$$\sigma^2(\text{вес } A) = \sigma^2\left(\frac{-y_1 + y_2 - y_3 + y_4}{2}\right) = \frac{4\sigma^2(y)}{4} = \sigma^2(y)$$

Видно, что при новой схеме взвешивания дисперсия веса объектов получается вдвое меньше, чем при традиционном методе взвешивания, хотя в обоих случаях выполнялось по четыре опыта.

Построение линейной статической модели объекта

Считаем, что входами объекта являются u_1, \dots, u_m , а выходом y .
Уравнение линейной статической модели объекта имеет вид:

$$\hat{y} = \alpha_0 + \sum_{j=1}^m \alpha_j (u_j - u_j^0)$$



Необходимо на основе эксперимента (на основе нескольких измерений входов и выхода объекта) вычислить коэффициенты модели.

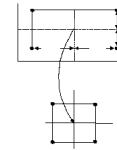
Экспериментальные точки для входных координат зададим в вершинах гиперпрямоугольника.

Интервалы покачивания относительно базовой точки задаются экспериментатором, и они определяют область изучения объекта.

Построение линейной статической модели объекта

С целью унификации процедур построения планов, исследования их свойств, расчета параметров и исследования качества модели осуществляется переход от размерных входных переменных u_1, \dots, u_m к безразмерным x_1, \dots, x_m .

$$x_j = \frac{u_j - u_j^0}{\Delta u_j}, \quad j = \overline{1, m}$$



Точки плана в вершинах прямоугольника в новых координатах оказываются в вершинах квадрата с единичными координатами. Центр плана переходит в начало координат.

В итоге получается план:

n	x_0	x_1	x_2	y_i
1	+	+	+	y_1
2	+	-	+	y_i
3	+	+	-	y_3
4	+	-	-	y_4

Построение линейной статической модели объекта

В новых безразмерных координатах x_1, \dots, x_m линейная модель также сохраняет линейный вид:

$$\hat{y} = \beta_0 + \sum_{j=1}^m \beta_j x_j$$

$$\beta_0 = \alpha_0, \quad \beta_j = \alpha_j \Delta u_j, \quad j = \overline{1, m} \quad \alpha_0 = \beta_0, \quad \alpha_j = \frac{\beta_j}{\Delta u_j}, \quad j = \overline{1, m}$$

Параметры β_i модели рассчитаем по критерию наименьших квадратов :

$$I = \sigma_y^{-2} \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^m \beta_j x_{ji})^2 = \min$$

Предполагая, что измерения выхода некоррелированные и равноточные получаем систему линейных алгебраических уравнений:

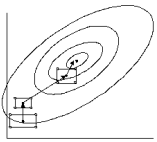
$$\sigma_y^{-2} \sum_{j=0}^m (x_k, x_j) \beta_j = \sigma_y^{-2} (x_k, y), \quad k = 0, 1, \dots, m$$

$$\beta_j = \frac{(x_j, y)}{(x_j, x_j)} = \frac{(x_j, y)}{n} \quad (x_k, x_j) = \sum_{i=1}^n x_{ki} x_{ji}, \quad (x_k, y) = \sum_{i=1}^n x_{ki} y_i$$

Крутое восхождение по поверхности отклика

В планировании эксперимента поверхностью отклика называют уравнение связи выхода объекта с его входами.

В 1951 году Бокс и Уилсон предложили использовать последовательный "шаговый" метод движения к экстремуму выхода объекта.



Коэффициенты a_i линейной модели являются оценками составляющих градиента:

$$a_i = \frac{\partial \varphi(\bar{u}^0)}{\partial u_i}; \quad i = \overline{1, m}$$

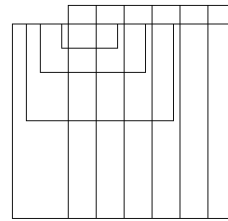
Далее движение осуществляется по поверхности отклика в направлении оценки градиента

$$\bar{u}^1 = \bar{u}^0 + k\alpha$$

, где k - величина шага.

Полный факторный эксперимент

Полным факторным экспериментом называется эксперимент, в котором реализуются все возможные сочетания уровней факторов. Если число факторов равно m , а число уровней каждого фактора равно p , то имеем полный факторный эксперимент типа p^m .



При построении линейной модели объекта используется полный факторный эксперимент типа 2^m . Условия эксперимента записываются в таблицы, в которых строки соответствуют различным опытам, а столбцы – значениям факторов. Такие таблицы называются матрицами планирования эксперимента.

Полный факторный эксперимент

С использованием ортогонального плана первого порядка можно определять не только коэффициенты β_i , но и коэффициенты β_{ij} перед факторами взаимодействия $x_i x_j$ ($i \neq j$)

Например, при $m=2$ можно рассчитать и коэффициенты модели:

$$\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2$$

n	x0	x1	x2	x1x2	yi
1	+	+	+	+	y1
2	+	-	+	-	y2
3	+	+	-	-	y3
4	+	-	-	+	y4

Дробные реплики

При большом числе входов объекта полный факторный эксперимент 2^m содержит большое число экспериментов. Можно этот план разбивать на блоки (дробные реплики) с сохранением ортогональности плана. При этом по меньшему числу точек определяются (также независимо друг от друга) все коэффициенты линейной модели.

Чтобы получить дробную реплику, необходимо за основу взять полный факторный эксперимент (например 2^3) и в качестве новой переменной взять один из столбцов (например x_4), соответствующий фактору взаимодействия (например $x_4 = x_1 x_2$). Для данного примера дробная реплика обозначается как 2^{4-1} .

n	x1	x2	x3	X4=x1x2
1	+	+	+	+
2	-	+	+	-
3	+	-	+	-
4	-	-	+	+
5	+	+	-	-
6	-	+	-	+
7	+	-	-	+
8	-	-	-	-

Определяющий контраст (или определяющие контрасты, когда их несколько) позволяет установить разрешающую способность дробной реплики. Разрешающая способность будет максимальной, если линейные эффекты будут смешаны с эффектами взаимодействия наибольшего возможного порядка.

Насыщенные планы. Симплекс

Иногда исследователь ставит цель получения линейного уравнения модели по планам, содержащим минимум точек (количество точек равно числу коэффициентов). Такие планы называют насыщенными.

Ортогональный план проводится в вершинах правильного симплекса. Правильным симплексом называется выпуклая правильная фигура в многомерном пространстве, число вершин которой превышает размерность этого пространства на единицу.

$$\begin{array}{c} x_1 \\ \left(\begin{array}{c} 1 \\ -1 \end{array} \right) \\ \dots \end{array} \quad \begin{array}{c} x_1 \quad x_2 \\ \left(\begin{array}{cc} \sqrt{3a} & a \\ -\sqrt{3a} & a \\ 0 & -2a \end{array} \right) \\ \downarrow \end{array} \quad \begin{array}{c} x_1 \quad x_2 \quad x_3 \\ \left(\begin{array}{ccc} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \end{array} \right) \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{3D diagram of a tetrahedron} \end{array}$$

Эти планы центральные и ортогональные.

Насыщенные планы. Симплекс

Один из общих способов построения планов:

$$\begin{array}{ccccc} x_1 & x_2 & x_3 & \boxtimes & x_m \\ \left(\begin{array}{ccccc} a_1 & a_2 & a_3 & \boxtimes & a_m \\ -a_1 & a_2 & a_3 & \boxtimes & a_m \\ 0 & -2a_2 & a_3 & \boxtimes & a_m \\ 0 & 0 & -3a_3 & \boxtimes & a_m \\ \boxtimes & \boxtimes & \boxtimes & \boxtimes & \boxtimes \\ 0 & 0 & 0 & \boxtimes & -ma_m \end{array} \right) \end{array}$$

Насыщенные планы.

Планы Плаккета – Бермана

Плаккет и Берман в 1946 г. предложили способ построения насыщенных планов (с единичными координатами) при $m=11, 19, 23, 27, 31, 35, 39, 43, 47, 51, 55, 59, 63, 67, 71, \dots$.

Задаются базовые строки. Каждая следующая строка матрицы планирования образуется из исходной циклическим сдвигом вправо. Получается матрица размером $m \times m$. Последняя $(m+1)$ -я строка матрицы планирования состоит из минус единиц.

Пример базисных строк:

m	n	Строка
11	12	+ + - + + + - - - + -
19	20	+ + - - + + + - + - + - - - - + + -
23	24	+ + + + + - + - + + - - + + - - + - + - - - -
31	32	- - - - + - + - + + + - + + - - - + + + + - - + + - + - - +
35	36	- + - + + + - - - + + + + + - + + + - - + - - - - + - + - + + - - + -

Разбиение матрицы планирования на блоки

При проведении эксперимента выход объекта дрейфует. Если этот дрейф кусочно-постоянный, то его можно нейтрализовать, изменяя порядок проведения эксперимента во времени. Для этого разбивают матрицу планирования на блоки и последовательно реализуют (во времени) эту матрицу: вначале один блок, затем другой и т. д.

В качестве примера рассмотрим ортогональный план 2^3 . Считаем, что выход объекта имеет аддитивный дрейф на величину Δ_1 (когда проводятся эксперименты с номерами 1, 2, 3, 4) и на величину Δ_2 (когда проводятся эксперименты № 5, 6, 7, 8). Этот дрейф приводит к смещению на величину $(4\Delta_1 - 4\Delta_2)/8$ параметра β_3 .

Разбиение матрицы планирования на блоки

Пример эксперимента в котором выход объекта дрейфует.

n	x_1	x_2	x_3	$x_{др} = x_1 x_2 x_3$	y_i	Номер блока
1	+	+	+	+	$y_1 = y_{1ист} + \Delta_1$	1
2	-	+	+	-	$y_2 = y_{2ист} + \Delta_1$	2
3	+	-	+	-	$y_3 = y_{3ист} + \Delta_1$	2
4	-	-	+	+	$y_4 = y_{4ист} + \Delta_1$	1
5	+	+	-	-	$y_5 = y_{5ист} + \Delta_2$	2
6	-	+	-	+	$y_6 = y_{6ист} + \Delta_2$	1
7	+	-	-	+	$y_7 = y_{7ист} + \Delta_2$	1
8	-	-	-	-	$y_8 = y_{8ист} + \Delta_2$	2

Разбиение матрицы планирования на блоки

Для устранения этого недостатка изменим порядок проведения эксперимента, разбив план на 2 блока.

n	x_1	x_2	x_3	$x_{др}$	y_i	Номер блока
1	+	+	+	+	$y_1 = y_{1ист} + \Delta_1$	
2	-	-	+	+	$y_2 = y_{2ист} + \Delta_1$	Блок 1
3	-	+	-	+	$y_3 = y_{3ист} + \Delta_1$	
4	+	-	-	+	$y_4 = y_{4ист} + \Delta_1$	
5	-	+	+	-	$y_5 = y_{5ист} + \Delta_2$	
6	+	-	+	-	$y_6 = y_{6ист} + \Delta_2$	Блок 2
7	+	+	-	-	$y_7 = y_{7ист} + \Delta_2$	
8	-	-	-	-	$y_8 = y_{8ист} + \Delta_2$	



ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТА

Обработка результатов эксперимента

1. Проверка однородности дисперсий. Если при реализации ортогонального плана остается неизвестным, на самом ли деле дисперсии выходов (ошибок измерения) одинаковы в каждой точке плана, то необходимо в каждой точке плана осуществить несколько дополнительных измерений выхода, найти оценку дисперсии (в каждой точке) и проверить гипотезу о равенстве дисперсий.

Проверка однородности дисперсий производится с помощью различных статистик. Простейшей из них является статистика Фишера, представляющая собой отношение наибольшей из оценок к наименьшей:

$$F = \frac{\sigma_{\max}^2}{\sigma_{\min}^2}$$

Так же можно выполнить проверку с использованием статистики Кочрена:

$$G_{\max} = \sigma_{\max}^2 / \sum_{j=1}^n \sigma_j^2$$

Обработка результатов эксперимента

2. Проверка адекватности модели. Вычисляем остаточную сумму квадратов, делим ее на число степеней свободы $n-m-1$ и получаем остаточную дисперсию (дисперсию адекватности):

$$\sigma_{\text{ад}}^2 = \frac{1}{n-m-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

На основе дополнительного эксперимента объема n_0 в одной из точек плана (например в центре плана) строим оценку для дисперсии выхода объекта. Число степеней свободы для оценки $n_0 - 1$. По статистике Фишера проверяем гипотезу о равенстве дисперсий, которая совпадает с гипотезой об адекватности модели.

$$F = \sigma_{\text{ад}}^2 / \sigma_y^2$$

Если статистика не превосходит порогового значения, то принимается гипотеза об адекватности модели. В противоположном случае эта гипотеза отвергается. Надо заново строить модель, например, усложняя ее за счет введения дополнительных факторов, либо отказываться от линейной модели и переходить к квадратичной модели.

Обработка результатов эксперимента

3. Проверка значимости коэффициентов заключается в проверке гипотезы $H: b_j = 0$ для каждого $j=1, \dots, m$.
Вычисляется статистика Стьюдента:

$$t = \frac{\beta_j}{\sigma_y / \sqrt{n}}$$

Если $|t| < c$, где c – пороговое значения из таблицы Стьюдента, то принимается гипотеза о том, что коэффициент модели β_j незначимо отличается от нуля. В этом случае данный член модели можно опустить, но после этого упрощения модели ее надо проверить на адекватность.

Обработка результатов эксперимента

4. Интерпретация модели. Производится качественное сопоставление поведения полученной модели с реальными процессами объекта. При этом привлекается информация от экспертов (например технологов), детально изучивших объект. Знак коэффициентов β_j , линейной модели показывает характер влияния входа объекта на выход. Знак "+" свидетельствует о том, что с увеличением входа (фактора) растет величина выхода объекта и наоборот. Величина коэффициентов β_j – количественная мера этого влияния.

Если характер связи между входами и выходом объекта на основе построенной модели не соответствует реальным связям (на базе информации от экспертов) в объекте, то такую модель надо поставить под сомнение либо полностью отказаться от нее.

Ортогональное планирование второго порядка

Построение планов второго порядка – задача в математическом отношении значительно более сложная, чем в случае построения планов первого порядка. Модель второго порядка при $m=3$ имеет вид:

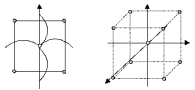
$$\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{33} x_3^2$$

Для вычисления коэффициентов модели второго порядка необходимо варьировать переменные не менее чем на трех уровнях. Это вызывает необходимость постановки большого числа опытов. Полный факторный эксперимент содержит 3^m точек.

m	1	2	3	4	5	6	7
3^m	3	9	27	81	243	729	2187
Композиционный план $n_0=1$	5	9	15	25	43	77	143

Ортогональное планирование второго порядка

В 1951 году Бокс и Уилсон предложили составлять композиционные планы. Число точек плана равно величине $n = n_1 + 2m + n_0$. Здесь n_1 – число точек полного факторного эксперимента или дробной реплики $2m$ – число парных точек, расположенных на осях координат; n_0 – число опытов в центре плана.



Точки на осях координат называют звездными точками. Их количество равно удвоенному числу факторов. Расстояние от центра плана до звездной точки одинаково. Его обозначают буквой α и называют звездным плечом.

Композиционные планы имеют следующие положительные свойства:

1. Они могут быть получены в результате достройки планов первого порядка.
2. Дополнительные точки на осях координат и в центре плана не нарушают ортогональности для столбцов, соответствующих факторам x_j и эффектам взаимодействия $x_i x_j$.

Ортогональное планирование второго порядка

Пример композиционного плана:

n	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x_1^2	x_2^2	x_1'	x_2'
1	+	+	+	+	+	+	◇	◇
2	+	-	+	-	+	+	◇	◇
3	+	+	-	-	+	+	◇	◇
4	+	-	-	+	+	+	◇	◇
5	+	α	0	0	α^2	0	Δ	□
6	+	$-\alpha$	0	0	α^2	0	Δ	□
7	+	0	α	0	0	α^2	□	Δ
8	+	0	$-\alpha$	0	0	α^2	□	Δ
9	+	0	0	0	0	0	□	□

$$x_i' = x_i^2 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{li}^2 = x_i^2 - \overline{x_i^2}$$

С учетом новых переменных x_i' получаем следующее уравнение модели (для случая $m=2$):

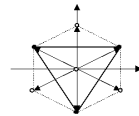
$$\begin{aligned} \hat{y} &= \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} (x_1' + \overline{x_1^2}) + \beta_{22} (x_2' + \overline{x_2^2}) = \\ &= \beta_0 + \beta_{11} \overline{x_1^2} + \beta_{22} \overline{x_2^2} + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} x_1' + \beta_{22} x_2' \equiv \\ &\equiv \beta_0' + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} x_1' + \beta_{22} x_2' \end{aligned}$$

Ротатабельное планирование

Если эта дисперсия одинакова на равном удалении от центра плана, то такой план называется ротатабельным.

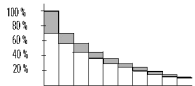
Ортогональный план первого порядка является ротатабельным.

Построение ротатабельного плана второго порядка из симплексных планов:



Метод случайного баланса

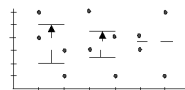
Часто влияние факторов на выходную координату объекта имеет затухающий экспоненциальный вид:



В 1956 году Сатерзвэйт предложил метод случайного баланса для отсеивания небольшого числа значимых факторов на шумовом поле. Метод базируется на постановке экспериментов по плану, содержащему координаты точек, выбранных случайным образом.

Построение матрицы планирования осуществляют следующим образом. Все факторы разбивают на группы. Затем для каждой группы строят матрицы планирования, беря за основу полный факторный эксперимент или дробные реплики. План проведения эксперимента образуется путем случайного смешивания строк соответствующих базовых планов (для групп факторов). Полученный план реализуется на объекте, и результаты анализируются с помощью диаграмм рассеяния.

Метод случайного баланса



Пример:

n	x_1	x_2	x_1x_2	y	y^1
1	+	+	+	24	27
2	-	+	-	27	27
3	+	-	-	26	29
4	-	-	+	29	29

Каждая из диаграмм содержит точки, соответствующие результатам эксперимента. Эти точки разбиты на две группы. Одна из них соответствует тем опытам, когда исследуемый фактор находился на нижнем уровне, вторая – тем опытам, когда фактор находился на верхнем уровне. Для каждой из групп находятся оценки медианы и вычисляется их разность (из оценки медианы правой группы вычитается оценка медианы левой).

Разность между оценками медиан количественно оценивает линейное влияние фактора на выход объекта.