Л. № 6 (т. 4)

ФАКТОРНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ

План викладу матеріалу

6.1. Повний факторний експеримент типу 2^K
6.2. Дробовий факторний експеримент
    6.2.1. Властивості повного факторного експерименту
    6.2.2. Математична модель повного факторного експерименту
6.3. Дробовий факторний експеримент

6.1. Повний факторний експеримент типу 2^K

Повним факторним експериментом називається експеримент, в якому реалізують всі можливі поєднання рівнів факторів. Повний факторний експеримент ґрунтується на варіюванні факторів на двох рівнях. Якщо число факторів відоме, то можна відразу знайти число дослідів, необхідних для реалізації всіх можливих поєднань рівнів чинників, за формулою

$$N = 2^K, \qquad (4.6)$$

де N – число дослідів; 2 – число рівнів; K – число факторів.

Якщо число рівнів кожного фактора дорівнює двом, а число факторів дорівнює також двом, то матимемо повний факторний експеримент типу 2^K, тобто 2^2.

Знаючи кількість рівнів – 2 і число факторів – 2, складаємо матрицю планування експерименту 2^2 (табл. 4.1).

Таблиця 4.1

Матриця планування експерименту 2^2

Номер досліду	Кодування числа факторів		Параметр оптимізації y
	X_1	X_2	
1	-1	-1	y_1
2	+1	-1	y_2
3	-1	+1	y_3
4	+1	+1	y_4

Рядки в цій таблиці відповідають різним дослідам, а стовпчики – значенням факторів. Кожен стовпчик в матриці планування називається вектором-стовпчиком, а кожен рядок – вектором-рядком.

Таким чином, у табл. 4.1 ми маємо два вектори-стовпчики незалежних змінних і один вектор-стовпчик параметра оптимізації.

Матрицю планування експерименту $N = 2^2$ можна зобразити графічно. Для цього знайдемо в області визначення факторів точку, що відповідає основному рівню, і проведемо через неї нові осі координат, паралельні осям натуральних значень факторів. Після цього виберемо масштаби по нових осях так, щоб інтервал варіювання для кожного фактора дорівнював одиниці. Тоді умови проведення дослідів відповідатимуть вершинам квадрата, центром якого є основний рівень, а кожна сторона паралельна одній з осей координат і дорівнює двом інтервалам (рис. 4.6).

Номери вершин квадрата відповідають номерам дослідів у матриці планування. **Площа, обмежена квадратом, називається областю експерименту.**

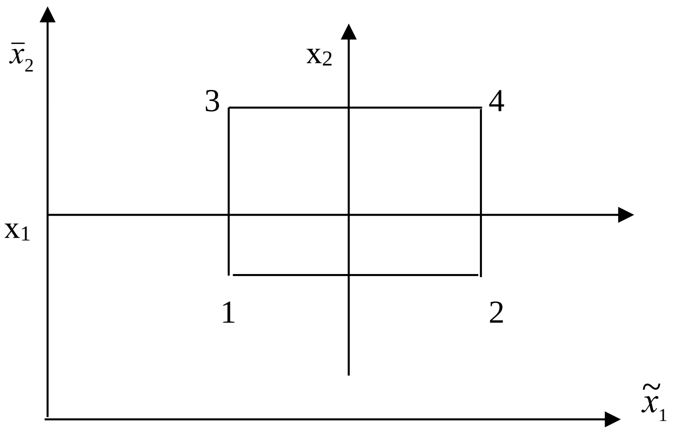

Рисунок 4.6 – Геометрична інтерпретація повного факторного експерименту 2^2

Якщо для двох факторів усі можливі комбінації рівнів легко знайти прямим перебором, то із зростанням числа факторів виникає необхідність в деякому прийомі побудови матриць. З багатьох можливих прийомів використовуватимемо тільки один, що базується на правилі чергування знаків. При цьому методі у першому стовпчику знаки змінюються по черзі, у другому стовпчику вони чергуються через два, у третьому – через 4, а в четвертому – через 8 і т.д. по степенях двійки.

За аналогією до повного факторного експерименту 2^2 можна дати геометричну інтерпретацію повного факторного експерименту 2^3 - це куб, координати вершин якого задають умови дослідів.

Якщо помістити центр куба в точку основного рівня факторів, а масштаби по осях вибрати так, щоб інтервал варіювання дорівнював одиниці, то отримаємо куб (рис.4.7). Куб задає область експерименту, а центр куба є його центром.

6.2.1. Властивості повного факторного експерименту

Експеримент планується для того, щоб одержати модель, яка має оптимальні властивості. Це означає, що оцінки коефіцієнтів моделі повинні бути якнайкращими і що точність прогнозу параметра оптимізації не повинна залежати від напряму у просторі чинника, бо наперед невідомо, куди належить рухатися у пошуках оптимуму.

З побудови матриці випливає чотири властивості.

Перша – **симетричність** щодо центра експерименту. Ця властивість формулюється таким чином: сума алгебри елементів вектора-стовпчика кожного фактора дорівнює нулю, або $\sum_{i=1}^{N} x_{ji} = 0$, де j – номер фактора, який дорівнює 1,2, ..., K; i – номер стовпчика; N – число дослідів.

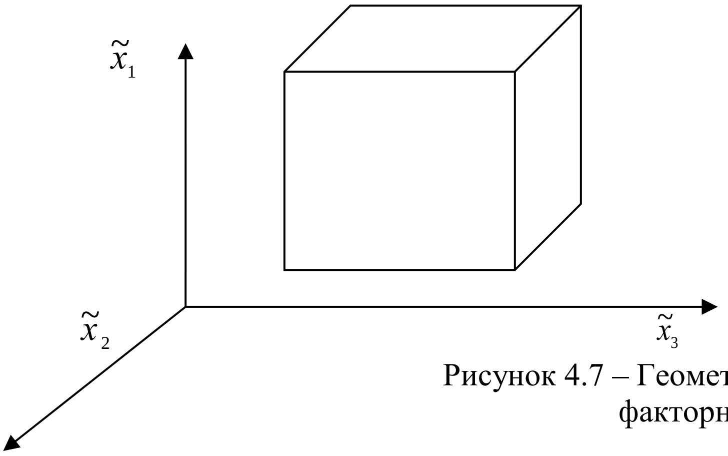

Рисунок 4.7 – Геометрична інтерпретація повного факторного експерименту 2^3

Друга – умова **нормування**. Воно формується таким чином: сума квадратів елементів кожного стовпчика дорівнює числу дослідів, або $\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 = N.$

Третя – сума почленних добутків будь-яких двох векторів-стовпчиків матриці дорівнює нулю, або $\sum_{i=1}^{N} x_{ji}x_{ui} = 0$, j, u, i, u = 0,1, 2, ..., K. Ця властивість називається **ортогональністю** матриці планування.

Четверта – точки у матриці планування підбираються так, що точність прогнозу значень параметра оптимізації однакова на різних відстанях від центра експерименту і не залежить від напряму. Ця властивість називається **рототабельністю**.

6.2.2. Математична модель повного факторного експерименту

Для руху до точки оптимуму при N = 22 (табл. 4.1) нам потрібна лінійна модель $y = y + в_1x_1 + в_2x_2.$ Необхідно за результатами експерименту знайти значення невідомих коефіцієнтів моделі. Коефіцієнти моделі обчислюються за формулою

$$в_j = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_{ji} \cdot y_i}{N}, \tag{4.7}$$

де j = 0, 1, 2, ..., n.

Скористаємося цією формулою для підрахунку коефіцієнтів $в_1$ і $в_2$:

$$в_1 = \frac{(-1)y_1 + (+1)y_2 + (-1)y_3 + (+1)y_4}{4}, \tag{4.8}$$

$$в_2 = \frac{(-1)y_1 + (-1)y_2 + (+1)y_3 + (+1)y_4}{4}. \tag{4.9}$$

Для підрахунку коефіцієнтів $в_1$ використовується вектор-стовпчик x_1, а для $в_2$ – вектор-стовпчик x_2 (див. табл. 4.1). Коефіцієнт $в_0$ визначається з умови, що $y = в_0 + +в_1x_1 + в_2x_2$

справедливе, отже, воно справедливе і для середніх арифметичних значень змінних $\bar{y} = в_0 + в_1\bar{x}_1 + в_2\bar{x}_2$. Через властивість симетрії $\bar{x}_1 = \bar{x}_2 = 0$.

Отже, $\bar{y} = в_0$, тобто $в_0$ є середньоарифметичне значення параметра оптимізації. Щоб його одержати, необхідно скласти всі U і розділити на число дослідів. Щоб привести цю процедуру у відповідність з формулою для обчислення коефіцієнтів, ми в матрицю планування введемо вектор-стовпчик фіктивної змінної x_0, яка набуває у всіх випадках значення +1. Тому лінійну модель $y = в_0 + в_1x_1 + в_2x_2$ *запишемо* у вигляді

$$y = в_0x_0 + в_1x_1 + в_2x_2 \,. \qquad (4.10)$$

Коефіцієнти при незалежних змінних вказують на силу впливу факторів: чим більша чисельна величина коефіцієнтів, тим більший вплив надає фактор. Якщо коефіцієнт має знак плюс, то із збільшенням значення фактора параметр оптимізації збільшується, а якщо мінус - зменшується.

Величина коефіцієнта відповідає внеску даного чинника у величину параметра оптимізації під час переходу чинника з нульового рівня на верхній або нижній.

На першому етапі планування експерименту ми прагнемо одержати лінійну модель. Проте у нас немає гарантії, що у вибраних інтервалах варіювання процес описується лінійною моделлю. Один з видів нелінійності, що часто трапляється, пов'язаний з тим, що ефект одного фактора залежить від рівня, на якому знаходиться інший фактор. У цьому випадку має місце ефект взаємодії двох факторів.

Повний факторний експеримент дозволяє кількісно оцінювати ефекти взаємодії. Для цього треба, користуючись правилом перемножування стовпчиків, одержати стовпчик добутку двох факторів. Для повного факторного експерименту 2^2 матрицю планування з урахуванням ефекту взаємодії подано у табл. 4.2.

Тепер модель виглядатиме так:

$$y = в_0x_0 + в_1x_1 + в_2x_2 + в_{12}x_1x_2 \qquad (4.11)$$

Коефіцієнт $в_{12}$ обчислюється звичайно, як і вся решта коефіцієнтів. Стовпчики x_1 і x_2 задають планування – за ними визначають умови дослідів, а стовпчики x_0 і x_1x_2 служать тільки для розрахунку.

Таблиця 4.2

Матриця планування експерименту 2^2 з ефектом взаємодії

Номер досліду	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	y
1	+1	-1	-1	+1	y_1
2	+1	+1	-1	-1	y_2
3	+1	-1	+1	-1	y_3
4	+1	+1	+1	+1	y_4

Із збільшенням числа факторів число можливих взаємодій швидко зростає.

Матриця планування 2^3 з урахуванням всіх можливих взаємодій наведена у табл. 4.3.

Ефект взаємодії $x_1x_2x_3$ одержують перемножуванням всіх трьох стовпчиків і називають ефектом взаємодії другого порядку, а ефект взаємодії двох факторів називають ефектом взаємодії першого порядку.

Таблиця 4.3

Повний факторний експеримент 2³

Номер досліду	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y
1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	y_1
2	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	y_2
3	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	y_3
4	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	y_4
5	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	y_5
6	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	y_6
7	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	y_7
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_8

Матриця планування експерименту 2^3 матиме вигляд (табл. 4.4).

Після обчислення коефіцієнтів моделі виконуємо перевірку її придатності, тобто перевірку адекватності моделі. Функція відгуку, що цікавить нас, тобто рівняння регресії, має вигляд

$$y = в_0 + в_1x_1. \qquad (4.12)$$

Це рівняння прямої лінії. У ньому два невідомі коефіцієнти. Коли ми ставимо експеримент, то прагнемо провести більше дослідів, ніж число невідомих коефіцієнтів. Тому система лінійних рівнянь

$$\xi_i = y_i - в_{oi} - в_1x_{1i}$$

виявляється приреченою і часто суперечливою. Приреченість виникає, коли число рівнянь більше від числа невідомого; суперечність – коли деякі з рівнянь не сумісні один з одним. Якщо всі експериментальні точки лежать на прямій, то система має єдиний розв’язок.

Таблиця 4.4

Матриця планування експерименту 2³

Найменування	Вільний член	$\tilde{x}_1$	$\tilde{x}_2$	$\tilde{x}_3$	$\tilde{x}_1\tilde{x}_2$	$\tilde{x}_1\tilde{x}_3$	$\tilde{x}_2\tilde{x}_3$	$\tilde{x}_1\tilde{x}_2\tilde{x}_3$	$\tilde{y}$
Основний рівень									
Інтервал варіювання									
Верхній рівень (+1)									
Нижній рівень (-1)									
Код досліду	x_o	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y
1	+	-	-	-	+	+	+	-	y_1
2	+	+	-	-	-	-	+	+	y_2
3	+	-	+	-	-	+	-	+	y_3
4	+	+	+	-	+	-	-	-	y_4
5	+	-	-	+	+	-	-	+	y_5
6	+	+	-	+	-	+	-	-	y_6
7	+	-	+	+	-	-	+	-	y_7
8	+	+	+	+	+	+	+	+	y_8

Застосовуючи метод найменших квадратів (МНК), можна зробити визначеною будь-яку довільну систему рівнянь. Цей метод робить число рівнянь таким, що дорівнює числу невідомих коефіцієнтів. У рівнянні (4.12) два невідомі коефіцієнти. Застосовуючи МНК, одержимо два рівняння:

$$И = \sum_{i=1}^{N} \xi_i^2 = \sum_{i=1}^{N} \Delta y_i^2 = \min , \qquad (4.13)$$

або

$$И = \sum_{i-1}^{N} \xi_i^2 = \sum_{i-1}^{N} (y_i - в_{oi} - в_1 x_{1i})^2 = \min . \qquad (4.14)$$

Величина $\sum_{i=1}^{N} \Delta y_i^2$ і є залишкова сума квадратів. МНК гарантує, що ця величина мінімально можлива. Залишкова сума найменших квадратів цілком підходить для характеристики середнього відхилення щодо лінії регресії і залежить від числа коефіцієнтів у рівнянні. Ввівши стільки коефіцієнтів, скільки проведено незалежних дослідів, одержимо залишкову суму, що дорівнює нулю. Тому її відносять на один «вільний» дослід. Число таких дослідів називається числом ступенів вільності (f); числом ступенів вільності у статистиці називають різницю між числом дослідів і числом коефіцієнтів (констант), які вже обчислені за результатами дослідів незалежно один від одного.

Якщо проведений повний експеримент фактора 2^3 і знайдено лінійне рівняння регресії, то число ступенів вільності обчислюється за формулою

f =N – (K_o + 1) = 8 – (3 + 1) = 4. (4.15)

Залишкова сума квадратів, ділена на число ступенів вільності, називається залишковою дисперсією, або дисперсією адекватності ($S_{ад}^2$):

$$S_{ад}^2 = \frac{\sum_{i-1}^{N} \Delta y_i^2}{f} . \qquad (4.16)$$

У плануванні експерименту число ступенів вільності для дисперсії адекватності дорівнює числу різних дослідів , результати яких використовуються при підрахунку коефіцієнтів регресії, мінус число визначуваних коефіцієнтів.

Для перевірки гіпотези про адекватність можна використовувати критерій Фішера – F-критерій:

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S^2_{\{y\}}} , \qquad (4.17)$$

де $S^2_{\{y\}}$ - дисперсія відтворюваності зі своїм числом ступенів вільності.

Значущість коефіцієнтів за t-критерієм визначається за формулою

$$t = \frac{|в_j|}{S_{\{в_j\}}} , \qquad (4.18)$$

де $в_j$ – коефіцієнт моделі; $S_{\{в_j\}}$ – квадратична помилка коефіцієнта регресії.

Обчислене значення t – критерію порівнюється з табличним при заданому α і у відповідному числі ступенів вільності. Чим вужчий довірчий інтервал (при заданому α), тим більша вірогідність значущості коефіцієнта.

Якщо абсолютна величина коефіцієнта більша, ніж довірчий інтервал, то коефіцієнт значущий.

6.3. Дробовий факторний експеримент

При проведенні повного факторного експерименту встановлено, що кількість дослідів у повному факторному експерименті значно перевершує число визначуваних коефіцієнтів лінійної моделі. Нашим завданням є скорочення числа дослідів за рахунок тієї інформації, яка не дуже істотна при побудові лінійних моделей. При цьому матриця планування не повинна позбутися своїх оптимальних властивостей.

У табл. 4.2 представлений повний експеримент фактора 2^2. Результати цього експерименту наведені у вигляді неповного квадратного рівняння у формулі (4.11). Якщо у вибраних інтервалах варіювання процес може бути описаний лінійною моделлю, то достатньо визначити три коефіцієнти: у, $в_1$ і $в_2$. Залишається один ступінь вільності. При лінійному наближенні (табл. 4.2) $в_{12} > 0$ і вектор-стовпчик x_1x_2 можна використовувати для нового фактора x_3. Складемо таблицю і визначимо оцінки коефіцієнтів (табл. 4.5). У цій таблиці не буде трьох роздільних оцінок як у повному експерименті фактора $2^к$, оскільки оцінки змішуються:

$в_1 > \beta_1 + \beta_{23}; в_2 > \beta_2 + \beta_{13}; в_3 > \beta_3 + \beta_{12}.$

Таблиця 4.5

Дробовий експеримент фактора 2^3

Номер досліду	$x_о$	x_1	x_2	x_3	У
1	+	-	-	+	y_1
2	+	+	-	-	y_2
3	+	-	+	-	y_3
4	+	+	+	+	y_4

Оскільки у нас лінійна модель, то всі парні взаємодії незначущі. Таким чином, ми мінімізували число дослідів: замість восьми дослідів для вивчення трьох факторів поставимо чотири. При цьому матриця планування не втрачає своїх оптимальних властивостей (ортогональність, рототабельність і т.д.). Правило побудови дробового факторного експерименту формулюється так: **щоб скоротити число дослідів, потрібно новому фактору привласнити вектор-стовпчик матриці, що належить взаємодії, якою можна знехтувати. Тоді значення нового фактора в умовах дослідів визначається знаками цього стовпчика**.

Поставивши чотири досліди для оцінки трьох факторів, ми скористалися половиною повного експерименту фактора 2^3, або «**напівреплікою».**

Якщо x_3 прирівняти до x_1x_2, то одержимо другу половину матриці 2^3. При реалізації обох напівреплік одержимо роздільні оцінки для лінійних ефектів і ефектів взаємодії, як в повному експерименті фактора 2^3. Об'єднання цих двох напівреплік і є повний експеримент фактора 2^3.

Матриця з восьми дослідів для планування чотиричинника буде напівреплікою від повного експерименту фактора 2^4, а для планування п'ятичинника – чвертьреплікою 2^5. У останньому випадку два лінійні ефекти прирівнюються до ефектів взаємодії. Для позначення дробових реплік, в яких ρ лінійних ефектів прирівняні до ефектів взаємодії, зручно користуватися умовним позначенням $2^{к-ρ}$. Так, напіврепліка від 2^6 запишеться у вигляді 2^{6-1}, а чвертьрепліка від 2^5 – у вигляді 2^{5-2}.

Умовне позначення дробових реплік і число дослідів наведені у табл. 4.6.

При побудові напіврепліки 2^{3-1} існує всього дві можливості: прирівняти x_3 до $+x_1x_2$ або $К_о$ $–x_1x_2$. Тому є тільки дві напіврепліки 2^{3-1} (табл. 4.7).

Для добутку трьох стовпчиків матриці І виконується співвідношення: +1 = $x_1x_2x_3$, а в матриці ІІ – (-1) = $x_1x_2x_3$. Усі знаки стовпчиків добутків однакові: у першому випадку дорівнюють плюс одиниці, а в другому – мінус одиниці. Символічне позначення добутків стовпчиків, що дорівнює +1 або -1, називається визначальним **контрастом.**

Таблиця 4.6

Умовне позначення дробових реплік і число дослідів

Число факторів	Дробова репліка	Умовне позначення	Число дослідів	
			для дробової репліки	для повного факторного експерименту
1	2	3	4	5
3	1/2 - репліка від 23	23-1	4	8
4	1/2 - репліка від 24	24-1	8	16
5	1/4 - репліка від 25	25-2	8	32
6	1/8 - репліка від 26	26-3	8	64
7	1/16 - репліка від 27	27-4	8	128
5	1/2 - репліка від 25	25-1	16	32
6	1/4 - репліка від 26	26-2	16	64
7	1/8 - репліка від 27	27-3	16	128
8	1/16 - репліка від 28	28-4	16	256
9	1/32 - репліка від 29	29-5	16	512
10	1/64 - репліка від 210	210-6	16	1024
11	1/128 - репліка від 211	211-4	16	2048
12	1/256 - репліка від 212	212-8	16	4096
13	1/512 - репліка від 213	213-9	16	8192
14	1/1024 - репліка від 214	214-10	16	16884
15	1/2048 - репліка від 215	215-11	4	8

Таблиця 4.7

Дві напіврепліки 2^{3-1}

Номер досліду	I $x_3=+x_1x_2$				Номер досліду	II $x_3 = -x_1x_2$			
	x_1	x_2	x_3	$x_1x_2x_3$		x_1	x_2	x_3	$x_1x_2x_3$
1	-	-	+	+	1	-	-	-	-
2	+	-	-	+	2	+	-	+	-
3	-	+	-	+	3	-	+	+	-
4	+	+	+	+	4	+	+	-	-

Контраст допомагає визначити змішані ефекти. Для того щоб визначити, який ефект змішаний з даним, потрібно помножити обидві частини визначального контрасту на стовпчик, що відповідає даному ефекту. Так, якщо 1 = $x_1x_2x_3$, то для x_1 маємо $x_1 = x_1^2 x_2 x_3 = x_2 x_3$. Оскільки завжди $x_1^2 = 1$, то для x^2 знаходимо $x_2 = x_1 x_2 x_{_2}^2 = x_1 x_2$, для $x_3 = x_1 x_2 x_3^2 = x_1 x_2$.

Це означає, що коефіцієнти лінійного рівняння будуть оцінками $в_1 > \beta_1 + \beta_{23}$, $в_2 > \beta_2 + \beta_{13}$, $в_3 > \beta_3 + \beta_{12}$.

Співвідношення, що показує, з яким з ефектів змішаний даний ефект, називається **генеруючим співвідношенням**. Матриця планування для N = 2^{4-1} наведена у табл. 4.8.

Таблиця 4.8

Матриця планування для 2^{4-1}

Номер досліду	x_o	x_1	x_2	x_3	x_4	$x_1x_2=x_2x_4$	$x_1x_3=x_2x_4$	$x_2x_3=x_1x_4$
1	+	+	+	-	-	+	-	-
2	+	-	-	-	-	+	+	+
3	+	+	-	-	+	-	-	+
4	+	-	+	-	+	-	+	-
5	+	+	+	+	+	+	+	+
6	+	-	-	+	+	+	-	-
7	+	+	-	+	-	-	+	-
8	+	-	+	+	-	-	-	+