УДК 658.57:519

М.Н. Цивін, зав. каф.
Інститут підвищення кваліфікації Мінагрополітики України

ПОРІВНЯЛЬНИЙ СТАТИСТИЧНИЙ АНАЛІЗ ПЛАНІВ ЕКСПЕРИМЕНТУ НА ГІПЕРКУБІ

Розглянуто методику статистичного підходу до розв'язання багатофакторних задач технічної механіки рідини. На основі аналізу статистичних критеріїв розглядається можливість використання планів експерименту, запропонованих для стандартних квадратичних моделей і для квадратичних моделей, доповнених потрійними і неповнокубічними взаємодіями.

При плануванні активного експерименту перед дослідником виникає проблема вибору ситуації, коли після реалізації вихідного плану експерименту відхиляється гіпотеза про початковий вигляд статистичної моделі. Сучасна методологія передбачає альтернативу:

– при використанні комбінаторних планів добудувати експериментальний план і ускладнити вигляд моделі, замінюючи лінійну модель квадратичною, квадратичну модель – неповною кубічною та ін.;

– змінити розмір досліджуваного факторного простору, зменшуючи діапазон зміни факторів.

Перший варіант прийнятний тільки у випадку відхилення вихідної гіпотези про лінійний вигляд моделі. У випадку відхилення гіпотези про модель у вигляді квадратичного полінома добудовування плану експерименту призводить до значного збільшення кількості дослідів.

У другому випадку доводиться повторювати весь план експерименту знову, без гарантії, що гіпотеза про вигляд статистичної моделі буде прийнята. При цьому є загроза, що при зменшенні діапазону зміни фактора вклад цього фактора до досліджуваного процесу може виявитись сумірним з похибкою експерименту і фактор буде виключений, тобто відбудеться зменшення розмірності досліджуваного факторного простору.

Як об'єкт порівняльного статистичного аналізу були взяті такі експериментальні плани:

– дворівневий повнофакторний (ПФЕ - 2^5) із зірковими точками і різною кількістю точок у центрі плану (нульових точок);

– дворівневий п'ятифакторний з напівреплікою із зірковими точками і різним числом точок у центрі плану (нульових точок);

– трирівневий повнофакторний (ПФЕ -3^5).

Плани такого типу розроблені для моделей виду квадратичного полінома з парними взаємодіями

$$\acute{Y} = b_0 + \sum_{s=1}^{n} b_i x_i + \sum_{i \succ j}^{n} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} b_{ii} x_i^2 , \tag{1}$$

де b_{ij} – оцінки коефіцієнтів поліноміальної моделі.

Розглядалась можливість застосування таких планів для лінійних і квадратичних моделей з додаванням потрійних взаємодій виду $\sum\limits_{i \succ j \succ l}^{n} b_{ijl} x_i x_j x_l$ і заміною квадратичних ефектів $\sum\limits_{i=1}^{n} b_{ii} x_i^2$ неповними кубічними $\sum\limits_{i \succ 1}^{n} b_{ij} x_i^2 x_j$.

Оцінки коефіцієнтів моделі розраховуються за таким матричним співвідношенням [2–4]:

$$B = (X^T X)^{-1} X^T Y, \tag{2}$$

де X – розширена матриця експерименту, сформована з вихідної матриці експерименту, нелінійної матриці, сформованої за нелінійною частиною апроксимуючого полінома (наприклад, полінома (1)) і фіктивної матриці – стовпця із значенням всіх елементів, рівним +1; Y – вектор спостережень (дослідних значень досліджуваної функції), одержаної в результаті реалізації вихідного плану експерименту; (X^TX) – інформаційна матриця; $(X^TX)^{-1}$ – матриця дисперсій – коваріацій.

Очевидно, що сталість статистичних оцінок коефіцієнтів моделі (1) визначається властивостями матриці дисперсій-коваріацій, яка, в свою чергу, пов'язана з типом вихідного плану експерименту і видом апроксимуючої моделі.

Оцінка статистичних властивостей плану експерименту для обраного типу моделі здійснювалась за величиною наведеного визначника матриці дисперсій-коваріацій [1, 2]:

$$\det_N = \left\{ \left(\frac{X^T X}{N} \right)^{-1} \right\}^{\frac{1}{2k}},$$

де k – число членів апроксимуючого полінома і N – число дослідів (відношенню сингулярних чисел цієї ж матриці $cond = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$ [5]).

Для опису процесу, що вивчається, статистичними моделями типу полінома першого або другого ступенів від n незалежних змінних використовують відповідно плани першого і другого порядків. Підбір відповідного плану для обраного типу моделі здійснюють за відповідними статистичними критеріями. Розглянемо, чи суттєво зміняться статистичні критерії плану експерименту, якщо змінити вид вихідної статистичної моделі шляхом додавання потрійних лінійних взаємодій виду B_{ijl} або неповних кубічних виду B_{iij} в комбінації з квадратичними взаємодіями виду B_{ii} або без них.

Слід відзначити, що незважаючи на те, що потрійні взаємодії мають спільний ступінь, який дорівнює трьом, в теорії планування вони відносяться до взаємодій першого порядку тому, що ступінь у кожної незалежної змінної, яка входить до складу потрійної взаємодії, дорівнює одиниці.

Мета аналізу – виявити, чи суттєво зміняться статистичні критерії експериментального плану, який розроблено для стандартного квадратичного полінома іншого виду.

В [3, 4] для неперервного D – оптимального плану наведено значення нормованого визначника коваріаційної матриці, яке дорівнює 1,3, і відзначається, що експериментальні плани, які підпадають під 15 % діапазон, можна вважати D – оптимальними. З наведених даних видно, що для всіх розглянутих моделей експериментальні плани можуть бути віднесені до D – оптимальних. Збільшення числа нульових точок практично не змінює властивість D – оптимальності планів для квадратичної моделі. Додавання до квадратичної моделі потрійних лінійних взаємодій також не погіршує інтерполяційних властивостей експериментального плану.*

Таблиця 1

Статистичні характеристики 5-факторного плану, який складається з ПФЗ 2 (2") і зіркових точок

Тип моделі	Характеристики планів[1]		
	det	λ	*cond*
Лінійна модель з парними взаємодіями. Точок у центрі плану немає $N = 42$, $k = 27$	43.6360 1.1252	1.3125 1.1456	1.3125
Лінійна модель з парними взаємодіями. Одна точка в центрі плану $N = 43$, $k = 16$	128.5397 1.1639	1.4063 1.1859	1.3438
Модель лінійна з парними взаємодіями. Три нульових точки $N = 45$, $k = 16$	122.8269 1.1622	1.4063 1.1859	1.4063
Стандартна квадратична модель. Три нульових точки. $N = 45$, $k = 21$	4.2215e+07 1.5190	22.5000 4.7434	99.7142
Стандартна квадратична модель. Одна нульова точка $N = 43$, $k = 21$	2.0689e+07 1.4934	21.5000 4.6368	99.5207
Стандартна квадратична модель (без нульових точок) $N = 42$, $k = 21$	1.4619e+07 1.4811	21.0000 4.5826	99.4252
Стандартна квадратична модель з потрійними взаємодіями. Нульових точок немає. $N = 42$, $k = 31$	2.2178e+08 1.3634	21.0000 4.5826	99.4252
Стандартна квадратична модель з потрійними взаємодіями. Три нульових точки. $N = 45$, $k = 31$	1.2767e+09 1.4024	22.5000 4.7434	99.7142

Закінчення таблиці 1

1	2		
Стандартна квадратична модель з неповними кубічними взаємодіями за першим фактором 11_i. Три нульові точки $N = 45$, $k = 25$	1.3789e+13 1.8314	45.7141 6.7612	202.593
Стандартна квадратична модель з неповними кубічними взаємодіями за першим і другим факторами (11_i; 22_i). Три нульові точки	Матриця вироджена (сингулярна)		
Лінійна модель з парними взаємодіями і неповними кубічними взаємодіями за першим і другим факторами (11_i; 22_i). Три нульові точки	Матриця вироджена (сингулярна)		

[1] Верхнє значення критерію відповідає звичайному значенню матриці дисперсій-коваріацій, нижнє – нормованому.

Введення неповних кубічних взаємодій до квадратичної моделі за одним фактором призводить до погіршення властивостей D – оптимальності. У зв'язку з тим, що значення визначника наведеної матриці знаходиться за 15 % межею, даний план вже не можна відносити до D-оптимальних

З критерієм *cond* жоден з розглянутих планів не може бути віднесений до ортогональних, тільки лінійні, причому додавання точок у центрі плану незначно знижують можливості ортогональності.

Розглянемо експериментальний план, який, згідно з [2, 4], вказаний як один з найкращих за критерієм D – оптимальності.

Таблиця 2

Статистичні характеристики плану B_5 з півреплікою за п'ятим фактором

Тип моделі	Характеристики планів		
	det	λ	*cond*
Стандартна квадратична модель. В центрі плану точки відсутні. $N = 26$, $k = 21$	3.443e+07 1.5072	13.0000 3.6056	51.5153
Стандартна квадратична модель. В центрі $N = 27$, $k = 21$	5.7966e+07 1.5305	13.5000 3.6742	51.6234
Стандартна квадратична модель. В центрі $N = 29$, $k = 21$	2.037e+08 1.5770	14.5000 3.8079	51.8449
Лінійна модель з парними взаємодіями. В центрі $N = 29$, $k = 16$	4.1534e+03 1.2974	1.8125 1.3463	1.8125
Лінійна модель з парними взаємодіями і потрійними взаємодіями. В центрі – три точки	Матриця вироджена (сингулярна)		
Лінійна модель з парними взаємодіями без п'ятого фактора. В центрі плану – три точки.	Матриця вироджена		
Лінійна модель з парними взаємодіями. Потрійні взаємодії тільки за першим фактором. В центрі плану – три точки	Матриця вироджена		
Лінійна модель с парними взаємодіями і неповними кубічними за першим фактором. В центрі плану – три точки. $N = 29$, $k = 20$	2.9410e+08 1.6282	29.9345 5.4712	34.0957
Лінійна модель з парними взаємодіями, квадратичним за першим фактором і неповними кубічними за першим фактором. В центрі плану три точки. $N = 29$, $k = 21$	1.2492e+09 1.6466	29.9345 5.4712	43.6854
Квадратична модель тільки з парними взаємодіями, п'ятьма квадратичними і неповними кубічними за першим фактором. В центрі плану три точки. $N = 29$, $k = 25$	1.4424e+13 1.8331	29.9345 5.4712	107.0312
Квадратична модель з парними взаємодіями, п'ятьма квадратичними і неповними кубічними за першими двома факторами В центрі – три точки	Матриця вироджена (сингулярна)		

Аналіз наведених характеристик свідчить, що додавання центральних (нульових) точок практично не позначається на статистичних характеристиках експериментального плану. Додавання неповних кубічних ефектів за окремими факторами (виключаючи фактор, який визначає півреплiку) незначно погіршують статистичні характеристики плану за критерієм D –

оптимальності (від $de\ t=1.507$ до det = 1.63...1.83), властивості ортогональності погіршились майже в 2 рази (від $cond$ = 51.5153 для стандартної квадратичної моделі до $cond$ = 107.03 для квадратичної моделі, доповненої однією неповною кубічною взаємодією).

Введення до моделі лінійних потрійних взаємодій призводить до виродження матриці дисперсій – коваріацій навіть за відсутності квадратичних взаємодій.

Розглянемо статистичні характеристики плану повного факторного експерименту, який має найкращі характеристики стосовно квадратичної моделі. Даний план є досить надлишковим (число дослідів N = 243 при числі членів моделі k = 21). Характеристики цього плану можна використати як порівняльний критерій оцінювання інших п'ятифакторних планів.

Таблиця 3

Статистичні характеристики повного факторного експерименту на 5 факторів (ПФЭ–3^5)

Тип моделі	Характеристики планів		
	det	λ	$cond$
Стандартна квадратична модель N = 243, k = 21	4.6596e+007 1.5226	15.2040 3.8992	51.3694
Лінійна модель N = 243, k = 16	2.5251e+004 1.3727	2.2500 1.5000	2.2500
Квадратична модель з потрійними взаємодіями N = 243, k = 26	4.8419e+009 1.5355	3.3750 1.8371	3.3750
Квадратична модель з потрійними взаємодіями і неповним кубічним за першим фактором N = 243, k = 30	1.0052e+013 1.6470	10.2635 3.2037	10.4039

Порівняння наведених вище експериментальних планів для різних апроксимуючих математичних моделей (від лінійної до неповної кубічної) свідчить, що при розв'язанні інтерполяційних задач, які передбачають використання D – оптимальних планів, можуть бути використані нестандартні поліноміальні моделі (з потрійними і з неповними кубічними взаємодіями), незважаючи на те, що ці плани розроблені для квадратичного полінома.

ЛІТЕРАТУРА:

1. *Box G.E.P., Hunter .J.S.* Annals of Mathematical Statistics, v 28, № 1, 1957. – 195 p.
2. *Андрукова П.Ф., Голикова Т.И., Костина С.Г.* Планы второго порядка на гиперкубе, близкие по свойствам к D-оптимальным /В кн. "Новые идеи в планировании эксперимента". – М.: Наука, 1969. – С. 140–152.
3. *Налимов В.В., Чернова Н.А.* Логические основания планирования эксперимента. – М.: Металлургия, 1976. – 128 с., ил.
4. Таблица планов эксперимента для факторных и полиномиальных моделей (справочное пособие) // Л.И. Бродский и др. – М.: Металлургия, 1982. – 750 с.
5. *Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К.* Машинные методы математических вычислений /Пер. с англ. Х. Д. Икрамова. – М.: Мир, 1980. – 279 с., ил.

ЦИВІН Михайло Наумович – завідувач кафедри інформатики та обчислювальної техніки ІПК Міністерства агропромислової політики України.

Наукові інтереси:

– технічна механіка рідини.

Дом. адреса: 03187, Київ-187, вул. Акад.Глушкова,17, кв.8.

Дом. тел. 266-07-17

Подано 18.07.2001