

Қазақстан Республикасының
Білім және ғылым
Министрлігі

Министерство
образования и науки
Республики Казахстан

Д. Серікбаев атындағы
ШКМТУ

ВКГТУ
им. Д. Серикбаева



ҒЫЛЫМИ ЗЕРТТЕУ ӘДІСТЕРИ
Практикалық жұмыстарға арналған әдістемелік нұсқаулар

МЕТОДЫ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
Методические указания к практическим занятиям

Специальность: 6D070200 – «Автоматизация и управление»

Өскемен
Усть-Каменогорск
2017

Методические указания к практическим занятиям разработаны на кафедре приборостроения и автоматизации технологических процессов на основании Государственного общеобязательного стандарта образования и учебного плана для докторантов специальности 6D070200 «Автоматизация и управление»

Одобрено учебно-методическим советом школы «Информационные технологии и энергетика»

Председатель

Г. Уазырханова

Протокол № 1 от 20.09.2017 г.

Обсуждено на заседании кафедры ПиАТП

Зав. кафедрой

Е. Малгаждаров

Протокол № 1 от 29.08.17 г.

Разработал
Профессор

Д. Алонцева

Нормоконтролер

Л. Проходова

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
1 Многофакторный эксперимент	5
1.1 Выбор модели	5
1.2 Полный факторный эксперимент	6
1.3 Дробный факторный эксперимент	9
1.4 Проведение эксперимента и обработка его результатов	12
1.5 Принятие решений	15
2 Работа с экспериментальной установкой с использованием программного обеспечения	17
2.1 Настройка каналов сбора данных	19
2.2 Регистрация и обработка данных	20
2.3 Редактирование данных и удаление помех	22
2.4 Оценка параметров системы и получение ее модели	23
Список литературы	29

ВВЕДЕНИЕ

Развитие техники, особенно вычислительной, резко расширило возможность получения численной информации о самых различных процессах и явлениях, нужной человеку для проектирования и управления различными устройствами и процессами, для принятия различного рода решений. В большинстве случаев величина, которой мы хотим управлять, зависит от большого числа переменных факторов, а установление закономерностей ее изменения, создание модели системы представляет сложную задачу. Пример тому - известный всем со школьной скамьи закон идеального газа. Этот закон был открыт Клапейроном только в 1834 г., хотя более чем за тридцать лет до этого все частные законы поведения газа для фиксированных температуры, объема или давления были уже известны (это законы Бойля-Мариотта, Шарля, Гей-Люссака). Причиной послужило то, что этот вид зависимости, как и в почти всех открытых до сих пор теоретических и эмпирических законах, относится к функциями с «разделяющимися переменными». Это те зависимости, что сами или их нелинейные преобразования представляются в виде суммы функций, зависящих от одной или двух переменных. И хотя этот пример имеет почти двухвековую давность, нельзя утверждать, что современный исследователь абсолютно уверенno может планировать эксперимент и решать многомерные задачи.

Итак, с одной стороны – широкие возможности вычислительной техники: неуклонно повышающееся быстродействие, возможность проведения виртуальных экспериментов, заменивших длительные натурные, возможность одновременного получения и анализа массивов данных, постоянно совершенствующееся программное обеспечение. С другой – необходимость спланировать эксперимент и проанализировать его результаты, не «погрязнув» в потоке данных, выявив основные закономерности. Настоящее пособие ставит своей целью помочь в решении этой проблемы, предлагая знакомство с основами многофакторного эксперимента, сопровождаемое конкретными примерами получения и обработки данных и выбора модели.

1 МНОГОФАКТОРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Во многих задачах проектирования и исследования характеристик технических устройств необходимо найти оптимальное решение, т. е. найти наилучшее сочетание внутренних параметров и внешних факторов, которые бы давали наиболее высокие обобщенные показатели эффективности устройства.

Обобщенным показателем эффективности может быть коэффициент усиления сигнала, надежность, точность или процент выхода продукции при химических реакциях. На этот показатель, называемый параметром оптимизации, влияет ряд внутренних и внешних факторов. К внешним факторам относятся механические, климатические, электрические нагрузки, соотношение компонентов взаимодействующих веществ, время действия температура процесса и т. д. К внутренним факторам относятся номинальные значения и разброс параметров элементов, варианты схемно-конструктивных решений, масса, режим работы и т. п.

Задача сводится к тому, чтобы выявить, какие внешние и внутренние факторы оказывают существенное влияние на параметр оптимизации, какова количественно степень этого влияния. Другими словами, необходимо найти зависимость этого параметра оптимизации от всех существенных факторов (найти модель). Далее исследуется эта модель с целью поиска такого сочетания факторов и таких численных значений их уровней, которые давали бы наибольшее (или наименьшее) значение обобщенного параметра оптимизации. Таким образом, надо планировать и обрабатывать эксперимент не только для поиска неизвестной вначале модели, но и для нахождения оптимальной схемы, конструкции, технологического процесса. При этом характерной особенностью является совместное, а не раздельное действие факторов.

В настоящем разделе будет уделено основное внимание планированию такого многофакторного эксперимента. Частично будут рассмотрены вопросы обработки экспериментальных данных. Отметим, что кратко рассмотренные в курсе лекций по данной дисциплине разделы по дисперсионному и регрессивному анализу также в значительной степени относятся к методам обработки результатов факторного эксперимента и зачастую аппарат этих трех направлений исследования используется совместно.

Факторный эксперимент представляет собой довольно сложный и разветвленный метод. Здесь он дан в упрощенном виде, при необходимости следует обращаться к специальной литературе [1-5]. В настоящее время факторному эксперименту в технической литературе и в практике уделяется очень большое внимание. Помимо «классических» работ [6,7], представленных школой В. В. Налимова (им введен термин «наукометрия» в научный оборот), сейчас есть ряд работ, которые позволяют оптимизировать системы при наличии сильных внешних воздействий дестабилизирующих факторов. К таким работам следует отнести прежде всего исследования В. М. Мордашева [8, 9] по методам приближения функций многих переменных суперпозициями сумм меньшего числа переменных, которые имеют большое теоретическое и прикладное значение.

1.1 Выбор модели

Выбор модели состоит в выборе вида функции:

$$Y = f(X_1, X_2, \dots, X_k), \quad (1)$$

где Y - обобщенный показатель (параметр оптимизации), характеризующий эффективность устройства (системы) и позволяющий проводить оптимизацию; экстремум

Y соответствует оптимальной системе; X_1, X_2, \dots, X_k - факторы (внешние и внутренние), которые влияют на значение функции Y , принимают оптимальные значения при экстремуме Y .

Задача эксперимента состоит в том, чтобы определить численные значения констант (коэффициентов) этого уравнения.

Обычно функцию (X_1, X_2, \dots, X_k) выбирают в виде степенного ряда, точнее отрезков степенных рядов - алгебраических полиномов. В частности, для двух факторов полиномы имеют вид

нулевой степени $Y = Bo$;

первой степени $Y = Bo + B_1X_1 + B_2X_2$;

второй степени $Y = Bo + B_1X_1 + B_2X_2 + B_{12}X_1X_2 + B_{11}X_{12} + B_{22}X_{22}$;

третьей степени $Y = Bo + B_1X_1 + B_2X_2 + B_{12}X_1X_2 + B_{11}X_{12} + B_{22}X_{22} + B_{122}X_{12}X_2 + B_{122}X_{12}X_{22} + B_{111}X_{13} + B_{222}X_{23}$

Модель должна быть достаточно точной, т. е. быть близкой к фактической зависимости. Тогда говорят, что она адекватна. В то же время желательно, чтобы она была простой. В каждой конкретной задаче исследователь выбирает модель, проводит эксперимент, а затем по его результатам проверяет адекватность модели. Очень часто хорошей моделью является полином первой степени (линейная модель).

1.2 Полный факторный эксперимент

На основе априорной информации (результаты предыдущих однофакторных испытаний, расчеты и др.) оценивают границы изменения факторов. При этом учитывают принципиальные ограничения (например, для температуры нижним пределом будет абсолютный нуль), технико-экономические ограничения - стоимость, дефицитность, время испытаний, а также возможности аппаратуры, технологии и т. д.

В этих границах для каждого фактора надо выбрать основной уровень и интервал варьирования, которые и будут непосредственно использованы при планировании эксперимента. Интервалы факторов должны позволять найти оптимальное состояние, основные уровни должны быть примерно в центре интервалов.

Обычно вводят так называемое кодированное значение фактора X_j , которое определяют по формуле:

$$X_j = (\tilde{X}_i - \tilde{X}_{j0})/J_j, \quad (2)$$

где \tilde{X}_i - натуральное значение фактора; \tilde{X}_{j0} - натуральное значение основного уровня; J_j - интервал варьирования; j – номер фактора.

Для качественных факторов, имеющих два уровня, верхний уровень обозначают +1, а нижний - 1, порядок их не имеет значения. Верхний уровень фактора находят как сумму основного уровня и интервала варьирования, нижний - как их разность.

В качестве примера в нижеследующей таблице приведены натуральные и кодированные значения факторов для условий опыта с четырьмя факторами

В полном факторном эксперименте (ПФЭ) реализуются все возможные сочетания уровней факторов. Если число уровней каждого фактора равно двум (верхний и нижний), то имеем полный факторный эксперимент типа 2^k . Общее число опытов равно $n = 2^k$, где k - число факторов. Если в опыте используют только верхний и нижний уровни факторов, то кодированные значения факторов будут соответственно +1 и -1; для простоты записи единицы можно опускать.

Таблица 1 - Натуральные и кодированные значения факторов для условий опыта с четырьмя факторами

Значение факторов	\tilde{X}_1	\tilde{X}_2	\tilde{X}_3	\tilde{X}_4
Основной уровень	3	30	1,5	15
Интервал варьирования	2	10	1	10
Верхний уровень	5	40	2,5	25
Нижний уровень	1	20	0,5	5
Натуральные значения факторов в конкретном опыте	2	20	1,25	15
Кодированные значения	-0,5	-1	-0,25	0

Условия эксперимента обычно записывают в виде матриц планирования эксперимента, где строки соответствуют различным опытам, а столбцы - значениям факторов.

Таблица 2 - Пример таблицы планирования для двух факторов 2^2

№ опыта	X_1	X_2	Y
1	-1	-1	Y_1
2	+1	-1	Y_2
3	-1	+1	Y_3
4	+1	+1	Y_4

По результатам эксперимента находят значения коэффициентов по формуле:

$$Bj = \left(\sum_{i=1}^N X_{ji} Y_i \right) / n, j = 0, 1, \dots, k. \quad (3)$$

В частности, для модели $Y = Bo + B_1 X_1 + B_2 X_2$ и двух факторов

$$B_1 = \frac{(-1) Y_1 + (+1) Y_2 + (-1) Y_3 + (+1) Y_4}{4};$$

$$B_2 = \frac{(-1) Y_1 + (-1) Y_2 + (+1) Y_3 + (+1) Y_4}{4};$$

$$Bo = \frac{Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4}{4};$$

Значение коэффициента для каждого фактора соответствует вкладу данного фактора в параметр оптимизации при переходе фактора с нулевого уровня на верхний или нижний. Вклад, определенный при переходе от нижнего уровня к верхнему, называется эффектом фактора (иногда его называют основным или главным эффектом). Он численно равен удвоенному коэффициенту.

Если есть основания считать, что модель нелинейна, то следует ее усложнить. Один из часто встречающихся видов нелинейности связан с тем, что эффект одного фактора зависит от уровня, на котором находится другой фактор. В этом случае говорят, что существует эффект взаимодействия двух факторов. ПФЭ позволяет количественно оценивать эффекты взаимодействия. Для этого надо, пользуясь правилом перемножения столбцов, получить столбец произведения двух факторов. Для ПФЭ 2^2 матрица планирования с учетом эффекта взаимодействия представлена в таблице 3.

Здесь X_0 (фиктивный фактор) вводится для удобства вычислений.

Таблица 3 - Матрица планирования с учетом эффекта взаимодействия

№ опыта	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

Теперь модель выглядит так: $Y = B_0X_0 + B_1X_1 + B_2X_2 + B_{12}X_1X_2$. Коэффициент B_{12} вычисляют по формуле:

$$B_{12} = \frac{(+1)Y_1 + (-1)Y_2 + (+1)Y_3 + (-1)Y_4}{4}$$

Другой способ вычисления (метод Йетса) дает следующие формулы для полного факторного эксперимента 2^2 :

$$\begin{aligned} B_0 &= (1/4)(Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4); \\ B_1 &= (1/4)(Y_1 - Y_2 + Y_3 - Y_4); \\ B_2 &= (1/4)(Y_1 + Y_2 - Y_3 - Y_4); \\ B_{12} &= (1/4)(Y_1 - Y_2 - Y_3 + Y_4). \end{aligned}$$

С увеличением числа факторов матрица планирования усложняется. Общие правила составления таких матриц: а) частота смены знаков в каждом последующем столбце уменьшается в два раза; б) добавление каждого нового фактора увеличивает количество опытов вдвое (сначала для «+» нового фактора, потом столько же опытов для «-»).

Для трех факторов ПФЭ имеет больше взаимодействий. Для справки матрица его приводится в таблице 4.

Таблица 4 - Матрица трехфакторного полного факторного эксперимента

№ опыта	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

ПФЭ обладает четырьмя важными свойствами.

- Симметричность относительно центра эксперимента - алгебраическая сумма элементов вектор - столбцов каждого фактора равна 0, т. е. $\sum_{i=1}^n X_{ji} = 0$,

где j - номер фактора ($j = 1, 2, \dots, k$); i - номер опыта; n - число опытов.

2. Условие нормировки: сумма квадратов элементов каждого столбца равна числу опытов: $\sum_{i=1}^n X_{ji}^2 = n$.

Это является следствием того, что значения факторов в матрице задаются равными + 1 и - 1.

3. Ортогональность матрицы планирования: сумма почленных произведений любых двух фактор - столбцов матрицы равна 0:

$$\sum_{i=1}^n X_{ji}X_{ui} = 0 \text{ и } j = u, j, u = 0, 1, 2, \dots, k.$$

4. Ротабельность матрицы планирования: точки в матрице планирования подбираются так, что точность предсказания значений параметра оптимизации одинакова на равных расстояниях от центра эксперимента и не зависит от направления.

1.3 Дробный факторный эксперимент

ПФЭ требует большого числа опытов, причем часть из них несет мало информации. Дробный факторный эксперимент (ДФЭ) позволяет сократить число опытов и в то же время получить основной объем необходимой информации.

Эксперимент, составляющий по объему только часть ПФЭ, называется *дробной репликой*. Существует полуреплика, 1/4 реплики, 1/8 реплики и т. д. Условные обозначения дробных реплик и количество опытов даны ниже.

Таблица 5 - Условные обозначения дробных реплик и количество опытов для части ПФЭ

Количество факторов	Дробная реплика	Условное обозначение	Количество опытов	
			для дробной реплики	для ПФЭ
3	1/2 реплики от 2^3	2^{3-1}	4	8
4	1/2 реплики от 2^4	2^{4-1}	8	16
5	1/4 реплики от 2^5	2^{5-2}	8	32
6	1/8 реплики от 2^6	2^{6-3}	8	64
7	1/16 реплики от 2^7	2^{7-4}	8	128
5	1/2 реплики от 2^5	2^{5-1}	16	32
6	1/4 реплики от 2^6	2^{6-2}	16	64
7	1/8 реплики от 2^7	2^{7-3}	16	128
8	1/16 реплики от 2^8	2^{6-4}	16	256

Процесс образования реплик для постановки двухфакторного эксперимента можно проследить на примере. Пусть задана следующая матрица для полного факторного эксперимента 2^2 .

Таблица 6 – матрица для полного факторного эксперимента

№ опыта	X_0	X_1	X_2	(X_3) X_1, X_2	Y
1	+	-	-	+	Y_1
2	+	+	-	-	Y_2
3	+	-	+	-	Y_3
4	+	+	+	+	Y_4

Параметр оптимизации выражается равенством:

$$Y = B_0 + B_1X_1 + B_2X_2 + B_{12}X_1X_2.$$

Если есть основания полагать, что в выбранных интервалах варьирования Y может быть представлен линейной моделью (т. е. B_{12} стремится к нулю), то достаточно определить только три коэффициента: B_0, B_1 и B_2 . Тогда число опытов будет больше числа искомых коэффициентов, поэтому столбец $X_1 X_2$ можно использовать для нового фактора X_3 . Следовательно, получится, что вместо восьми опытов в ПФЭ для трех факторов можно провести только четыре опыта.

При этом оценки B_1, B_2, B_3 истинных коэффициентов $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ являются уже смешанными: $B_1 = \beta_1 + \beta_{23}$; $B_2 = \beta_2 + \beta_{13}$; $B_3 = \beta_3 + \beta_{12}$. Эффект этого смешивания в принципе снижает точность оценок. Однако поскольку мы считаем модель линейной и взаимодействия пренебрежимо малыми, то точность оценок будет достаточной.

Составленная матрица будет представлять собой полуреплику от ПФЭ 2^3 , которая обозначается 2^{3-1} . При выборе более сложных реплик применяют специальные правила. Эффективность применения дробных реплик зависит от удачного выбора системы смешивания линейных эффектов с эффектами взаимодействий. Реплики, у которых линейные эффекты смешаны с взаимодействиями наивысшего порядка, являются наиболее эффективными, они обладают наибольшей разрешающей способностью. В реальных условиях разработчик может не иметь твердой уверенности в отсутствии того или иного взаимодействия факторов. В этом случае надо знать, когда и какие эффекты определяются совместно, т. е. определить разрешающую способность дробных реплик. Для этого удобно пользоваться понятиями «определяющие контрасты» и «генерирующие соотношения».

Рассмотрим эти понятия вначале на примере полуреплики 2^{3-1} .

При построении полуреплики 2^{3-1} существуют всего две возможности: $X_3 = X_1X_2$ и $X_3 = -X_1X_2$. Эти две полуреплики приведены в таблице 7.

Таблица 7 - Полуреплики дробного эксперимента

№ опыта	I. $X_3 = X_1X_2$				№ опытов	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	-	+	+	-

Для произведения трех столбцов матрицы I имеем:

$$+1 = X_1X_2X_3, \text{ а для матрицы II: } -1 = X_1X_2X_3.$$

Произведения столбцов матриц, равные +1 или -1, называются *определяющими контрастами*. Контраст помогает найти смешанные эффекты. Для того чтобы определить, какой эффект смешан с данным, нужно умножить обе части определяющего контраста на столбец, соответствующий данному эффекту. Так, для I матрицы, где определяющий контраст $+1 = X_1X_2X_3$, имеем:

$$X_1 = X_{12}X_2X_3 = X_2X_3;$$

$$X_2 = X_1X_{22}X_3 = X_1X_3;$$

$$X_3 = X_1X_2X_{32} = X_1X_2.$$

Это значит, что коэффициенты линейного уравнения будут оценками линейных эффектов:

$$B_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23}; \quad B_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{13}; \quad B_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12}.$$

Соотношение, показывающее, с каким из эффектов смешан данный эффект, называется генерирующим соотношением.

Полуреплики, в которых основные эффекты смешаны с двухфакторными взаимодействиями, называются *планами с разрешающей способностью III* (по наибольшему числу факторов в определяющем контрасте). Они обозначаются 2_{III}^{3-1} . При выборе полуреплики 2^{4-1} возможны восемь решений:

- | | |
|---------------------|------------------------|
| 1. $X_4 = X_1X_2,$ | 5. $X_4 = X_1X_3,$ |
| 2. $X_4 = -X_1X_2,$ | 6. $X_4 = -X_1X_3;$ |
| 3. $X_4 = X_2X_3,$ | 7. $X_4 = X_1X_2X_3,$ |
| 4. $X_4 = -X_2X_3,$ | 8. $X_4 = -X_1X_2X_3.$ |

Реплики 1-6 имеют по три фактора в определяющем контрасте, а 7 и 8 - по четыре. Поэтому реплики 7 и 8 имеют максимальную разрешающую способность; они называются *главными*. Это связано с тем, что обычно тройные взаимодействия менее важны, чем парные. Реплики, в которых нет ни одного главного эффекта, смешанного с другим главным эффектом или парным взаимодействием, называются *планами с разрешающей способностью IV* (по наибольшему числу факторов в определяющем контрасте) и обозначаются 2_{IV}^{4-1} . Пример. Необходимо спланировать эксперимент с целью выбора оптимальных параметров устройства для получения максимального значения выходной характеристики Y . Исходные значения факторов и интервалы варьирования заданы в следующей таблице 8.

Таблица 8 - Исходные значения факторов и интервалы варьирования

Фактор	Уровни факторов			Интервал варьирования
	-1	0	+1	
X_1	200	220	240	20
X_2	3	6	9	3
X_3	40	100	160	60
X_4	1	2	3	1

Для матрицы планирования выбираем полуреплику 2^4 , заданную генерирующим соотношением $X_4 = X_1X_2X_3$. Определяющим контрастом является $1 = X_1X_2X_3X_4$.

Умножая определяющий контраст последовательно на X_1 , X_2 , X_3 и X_4 , определим совместно оценки линейных эффектов и взаимодействий

$$\begin{aligned} B_1 &\rightarrow \beta_1 + \beta_{234}, \quad B_{23} \rightarrow \beta_{23} + \beta_{14}, \\ B_2 &\rightarrow \beta_2 + \beta_{134}, \quad B_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{124}, \\ B_3 &\rightarrow \beta_{12} + \beta_{34}, \quad B_4 \rightarrow \beta_4 + \beta_{123}. \\ B_4 &\rightarrow \beta_{13} + \beta_{24}. \end{aligned}$$

Матрица планирования и результаты эксперимента приведены ниже.

Коэффициенты B_i рассчитываются по формулам, приведенным выше. Они равны:

$$B_0 = \frac{1}{8}(+10 + 9 + 15 + 25 + 26 + 14 + 5 + 20) = 15,$$

$$B_1 = \frac{1}{8}(+10 - 9 + 15 - 25 + 26 - 14 + 5 - 20) = -1,5$$

и т. д. Таким образом, аналитическое выражение для Y принимает вид

$$Y = 15 - 1,5X_1 + 4,75X_2 + 0,75X_3 + 4,5X_4 - 0,75X_1X_2 + 0,75X_1X_3 + 2X_2X_3.$$

Таблица 9 - Матрица планирования и результаты эксперимента

№ опыта	X_0	X_1	X_2	X_3	X_4	$X_1X_2 =$	$X_1X_3 =$	$X_2X_3 =$	Y
						X_3X_4	X_2X_4	X_1X_4	
1	+	+	+	-	-	+	-	-	10
2	+	-	-	-	-	+	+	+	9
3	+	+	-	-	+	-	-	+	15
4	+	-	+	-	+	-	+	-	25
5	+	+	+	+	+	+	+	+	26
6	+	-	-	+	+	+	-	-	14
7	+	+	-	+	-	-	+	-	5
8	+	-	+	+	-	-	-	+	20
<i>Bi</i>	15	-1,5	4,75	0,75	4,5	-0,75	0,75	2	

Дальнейший анализ подобных выражений, их изменение и проведение новых экспериментов ведутся в соответствии с порядком, изложенным ниже.

1.4 Проведение эксперимента и обработка его результатов

После планирования проводят непосредственно сам эксперимент. Для каждого принятого сочетания факторов измеряют значения параметра оптимизации. По этим значениям уже сразу приблизительно видно, комбинация каких значений факторов является наилучшей (близкой к оптимальной), а какая наихудшей. Однако прежде, чем перейти к оптимизации, необходимо выполнить ряд операций по анализу полученных данных.

Прежде всего, следует учитывать, что результаты каждого опыта обладают статистической неопределенностью. Она получается за счет погрешности измерения значений факторов и самого параметра Y , влияния неучтенных факторов и т.п. Поэтому если воспроизвести несколько раз опыт при одних и тех же значениях факторов, то каждый раз значение параметра оптимизации Y будет разным. Обычно стараются при каждом сочетании значений факторов («в каждой точке») проводить по несколько повторных опытов (n). Вначале производят обработку опытов по обычным формулам:

$$\bar{y} = \frac{\sum_{q=1}^n y_q}{n}, \quad s = \sqrt{\frac{\sum_{q=1}^n (y_q - \bar{y})^2}{n-1}}, \quad (4)$$

где q – текущий номер повторного опыта (из общего числа n) при определенном сочетании значений факторов.

Затем можно всегда сравнить две любые серии по n опыта, чтобы оценить их значимость, т.е. понять – существенно ли различаются значения у при двух комбинациях значений факторов, («в двух точках»), или это отличие мало по сравнению с разбросом при воспроизведении n опытов при одних и тех же значениях факторов. Если в каждой точке погрешности опыта практически равны, то используется t - критерий (критерий Стьюдента):

$$t = \frac{\bar{y}_1 - \bar{y}_2}{s \sqrt{1/n_1 + 1/n_2}}, \quad (5)$$

\bar{y}_1 - среднее значение n_1 опытов при определенном сочетании значений факторов;

\bar{y}_2 - среднее значение n_2 опытов при другом сочетании значений факторов;

s - разброс значений y (одинаковый в n_1 и n_2) опытах.

Вычисленное значение t сравнивают с табличным, которое находят для числа степеней свободы $f = n_1 + n_2 - 2$ и уровня значимости α (обычно $\alpha = 0,05$). Если расчетное значение t меньше табличного, то с вероятностью $P = 1 - \alpha$ следует считать, что разницы между сериями опытов n_1 и n_2 нет, т.е. их отличие незначимое.

Обработку экспериментальных результатов, учет при необходимости нескольких составляющих погрешностей, исключение грубых ошибок и т.п. производят по методам теории ошибок.

Помимо дисперсии s^2 в серии из n опытов рассчитывается также общая дисперсия параметра оптимизации s_y^2 , иначе называемая дисперсией воспроизводимости эксперимента $s_{\text{восп}}^2$. Этую дисперсию определяют по формуле:

$$s_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^n (y_{iq} - \bar{y}_i)^2}{N(n-1)}, \quad (6)$$

где $i = 1, 2, \dots, N$; $q = 1, 2, \dots, n$ - число повторных опытов, одинаковое по всей матрице.

При разном числе опытов n приходится пользоваться средним взвешенным значением дисперсий, взятым с учетом числа степеней свободы:

$$s_y^2 = \frac{s_1^2 f_1 + s_2^2 f_2 + \dots + s_N^2 f_N}{f_1 + f_2 + \dots + f_N} = \frac{\sum_{i=1}^N f_i s_i^2}{\sum_{i=1}^N f_i}, \quad (7)$$

где f_i - число степеней свободы в каждой серии опытов ($f_i = n - 1$).

Последняя формула справедлива только в том случае, когда дисперсии s_i однородны, т.е. среди них нет таких, которые бы значительно превышали все остальные. Проверку однородности обычно производят по различным критериям. Для двух дисперсий применяют критерий Фишера (F - критерий), представляющий собой отношение большей дисперсии к меньшей. Если полученное значение отношения больше приведенного в таблице для соответствующих степеней свободы и выбранного уровня значимости, то дисперсии существенно отличаются друг от друга, т.е. они неоднородны.

Пример. Пусть

$$s_1^2 = 5,14, \quad n_1 = 7, \quad f_1 = n - 1 = 6; \quad s_2^2 = 0,324, \quad n_2 = 6, \quad f_2 = 5.$$

Решение. Критерий Фишера $F = 5,14/0,324 = 15,9$.

Для степеней свободы $f_1 = 6$, $f_2 = 5$ и уровня значимости 0,05 в табл. находим значение 4,95. Значит, дисперсии неоднородны.

Если сравниваемое количество дисперсий больше двух и одна дисперсия значительно превышает остальные, можно воспользоваться критерием Кохрена. Этот критерий пригоден для случаев, когда число опытов во всех точках одинаково. При этом подсчитывают дисперсию в каждой горизонтальной строке матрицы s^2 , а затем из всех

дисперсий выбирают наибольшую s_{\max}^2 , которую делят на сумму всех дисперсий. Критерий Кохрена G находят по формуле

$$G = \frac{s_{\max}^2}{\sum_{i=1}^N s_i^2} \quad (8)$$

Сравнивают с табличным значением. Если табличное значение больше, чем рассчитанное по этой формуле, то дисперсии однородны.

Таблица 10- исходные данные для результатов эксперимента

№ опыта	1	2	3	4	5	6	7	8
s_i^2	1,444	1,444	0,062	1,62	0,046	0,246	0,246	0,106

$$G = 1,62 / 5,214 = 0,31.$$

Табличное значение $G = 0,68$, т.е. больше расчетного. Следовательно, дисперсии однородны:

$$s_y^2 = \frac{2 \sum_{i=1}^8 (y_{iq} - \bar{y}_i)^2}{8} = 0,652.$$

Если же возникает предположение о наличии неоднородности дисперсий, то его следует проверить. Для этого можно воспользоваться критерием Бартлетта (для распределений, близких к нормальному). Он довольно сложен, поэтому иногда используют для числа дисперсий больше двух критерий Фишера. Тогда сравнивают из всего ряда наибольшую и наименьшую дисперсии; если они отличаются не сильно, значит, все дисперсии однородны.

Чтобы исключить влияние систематических погрешностей, вызванных внешними условиями (мешающими факторами), необходимо опыты, запланированные матрицей, проводить в случайной последовательности. Этот прием называется *рандомизацией*. Простейший и кардинальный способ состоит в использовании таблицы случайных чисел, по которой выбирается последовательность всех опытов, включая и n_i опытов в каждой точке.

Другой подход состоит в разбивке матрицы на блоки. Если экспериментатор знает об изменении каких-то внешних условий, он может планировать эксперимент так, чтобы эффект влияния этих условий был связан с определенным воздействием, которым можно пренебречь. Например, матрицу 2^3 можно разбить на два блока таким образом, чтобы эффект влияния условий сказался на величине трехфакторного взаимодействия, а все линейные коэффициенты и парные взаимодействия были свободны от этого влияния.

После проведения эксперимента проводят анализ адекватности (соответствия) выбранной модели (вида полинома) опытным данным. Затем проверяют значимость коэффициента по t - критерию Стьюдента или построением доверительных интервалов. Эти методы изложены в литературе по регрессивному анализу, и их можно непосредственно использовать.

1.5 Принятие решений

После проведения эксперимента и обработки результатов дальнейшие действия должны сводиться к тому, чтобы найти оптимальное сочетание факторов и приблизить исследуемую систему (процесс) к оптимальной. При этом обычно выделяют три этапа: 1) принятие решений после построения модели; 2) кротое восхождение по поверхности отклика; 3) принятие решений после кротого восхождения.

В качестве адекватной модели принимают полином, коэффициенты которого являются частными производными параметрами оптимизации по соответствующим переменным.

Полученную математическую модель для предварительного анализа как бы переводят на язык экспериментатора (это называется интерпретацией модели). На первом этапе по коэффициентам судят о том, как сильно и с каким знаком влияет фактор на параметр оптимизации. Если ищется максимум функции Y , то увеличение положительных коэффициентов благоприятно, если ищется минимум Y , то благоприятно уже увеличение отрицательных коэффициентов. Далее факторы располагают в ряд по силе их влияния на Y . Незначимые коэффициенты можно не учитывать.

Изменение интервалов варьирования приводит к изменению коэффициентов регрессии. Абсолютные значения коэффициентов регрессии возрастают с увеличением интервалов. Знаки линейных коэффициентов до экстремальной точки не меняются, но они могут измениться, если мы «проскочим» экстремум функции Y .

Далее анализируются эффекты взаимодействия. Если эффект взаимодействия двух факторов имеет положительный знак, то для увеличения Y требуется одновременное увеличение или уменьшение значений факторов, а для уменьшения Y значения факторов должны одновременно изменяться в разных направлениях. Если же эффект взаимодействия имеет отрицательный знак, то для увеличения Y значения факторов должны одновременно изменяться в разных направлениях, а для уменьшения Y требуется одновременное увеличение или уменьшение значений факторов.

Вариантов решения получается очень много в зависимости от сочетания возможных действий и ситуаций по адекватности, значимости коэффициентов и положению оптимума. Среди «типичных» решений выделяют: движение по градиенту, план второго порядка, изменение интервалов варьирования, отсеивание незначимых факторов, параллельные опыты, дстройку плана и др.

Составляющие градиента (кратчайшего пути к оптимуму) представляют собой производные, оценками которых являются коэффициенты регрессии. Изменяя независимые переменные пропорционально величинам этих коэффициентов, будем двигаться в направлении градиента по кратчайшему пути. Такая процедура называется кротым восхождением. При этом незначимые факторы остаются на исходном уровне (+1 или -1), тогда как значимые изменяются с определенным шагом. Чтобы получить значение Y , лежащее на градиенте, при изменении одного значимого фактора надо соответствующий коэффициент умножить на шаг варьирования. Значение шага выбирается каждый раз конкретно с учетом необходимой точности нахождения оптимума и возможной области изменения фактора. Пример расчета кротого восхождения с использованием матрицы планирования результатов серии опытов дан ниже.

Пример. Проведена серия экспериментов. Полученные результаты представлены в следующей таблице:

В результате первой серии опытов получено адекватное уравнение регрессии: $Y = 88,0 - 2,0 X_1 - 4,5 X_2$, т.е. $B_0 = 88$; $B_1 = -2$; $B_2 = -4,5$.

Все коэффициенты регрессии значимы. Надо найти Y , который может достигать значений 99-100, т.е. такой, чтобы область оптимума была близка. Необходимо осуществить кротое восхождение, т.е. провести новую серию опытов с вариацией X_1 и X_2 , которая позволила бы найти такие значения X_1 и X_2 , при которых Y максимально.

Рассмотрим этапы расчета крутого восхождения. Вначале вычислим составляющие градиента, умножая соответствующие коэффициенты регрессии на шаг варьирования:

$$B_1 J_1 = -2 * 0,5 = -1; \quad B_2 J_2 = -4,5 * 1 = -4,5.$$

Исследуемый фактор	X_1	X_2	Y (среднее из двух параллельных опытов)	Исследуемый фактор	X_1	X_2	Y (среднее из двух параллельных опытов)
Основной уровень	1,5 0,5	7,0 1,0	- -	B_j $B_j X$ (интервал варьирования)	-2,0 -1,0	- 4,5 -	-
Интервал варьирования J_j				Шаг при изменении X_2 на 0,5		4,5 -	
Верхний уровень	2,0	8,0	-		- 0,11	-	
Нижний уровень	1	6,0	-	Округление		0,5 -	-
Кодированные значения переменных	X_1 -1	X_2 -1	- 95,0	Опыты: 5 6 7 8 9	-0,1 1,4 1,3 1,2 1,1 1,0	- 0,5 -	-
Опыты: 1 2 3 4	+1 -1 +1 +1	-1 +1 +1 +1	90,0 85,0 82,0			6,5 6,0 5,5 5,0 4,5	-

Теперь прибавим составляющие градиента к основному уровню факторов. Тогда для опыта 5 получим: $X_1 = 1,5 - 1 = 0,5$; $X_2 = 7 - 4,5 = 2,5$. Для опыта 6 уже будем иметь нереальные, недопустимые значения X_1 и X_2 : $X_1 = 0,5 - 1 = -0,5$; $X_2 = 2,5 - 4,5 = -2$.

Следовательно, шаг движения очень велик, его надо уменьшить в несколько раз. Известно, что умножение (деление) составляющих градиента на любое положительное число дает точки, также лежащие на градиенте. Выбор шага строго не формализован и определяется на основе практических соображений. В данной задаче для X_2 удобно выбрать шаг 0,5, т.е. уменьшить составляющую градиента в девять раз по сравнению с выбранной вначале. Во сколько же раз надо тогда уменьшить и составляющую градиента по X_1 , т.е. взять ее равной - 0,11, а с учетом округления - 0,1.

Далее необходимо планировать опыты путем последовательного прибавления составляющих градиента к основному уровню. В результате получим серию опытов крутого восхождения (в таблице опыты 5 – 9). Эти опыты называются «мысленными», так как они рассчитываются, но не всегда проводятся. Иногда производят расчет в каком – то мысленном опыте параметра оптимизации. В данном примере это можно сделать, используя уравнение регрессии $Y = 88 - 2X_1 - 4,5X_2$, подставив вместо X_1 и X_2 кодированные значения $X_j = (\tilde{X}_j - \tilde{X}_{j0}) / J_j$.

Например, для опыта 7 имеем: $x_1 = -0,6$; $x_2 = -1,5$; $y_7 = 95,95$.

Для опыта 8: $x_1 = -0,8$; $x_2 = -2$; $y_8 = 98,6$.

Экспериментальные значения могут и не совпадать с расчетными. Реализацию опытов производят обычно последовательно. Для адекватной модели начинают с опыта, условия которого выходят за область эксперимента ходя бы по одному из факторов. Для неадекватной модели опыты 1 и 2 выполняются в области эксперимента. Обычно после проведения первых опытов проводят оценку результатов и принимают решение о прекращении или дальнейшем проведении экспериментов (последовательный поиск).

После крутого восхождения принимают решения о дальнейших действиях. В зависимости от сложившейся ситуации они могут быть разными. Основные рекомендации сводятся к следующим.

Если кротое восхождение эффективно (т. е. значение Y существенно приближается к экстремуму) и область оптимума близка, возможны 2 решения: окончание исследования или достройка линейного плана до плана второго порядка в целях более точного описания области оптимума. Если область оптимума далека, решение одно: построение линейного плана нового цикла. При неясной степени близости оптимума следует переходить к новому линейному плану. Если кротое восхождение получилось неэффективным, то при линейной неадекватной модели надо для грубой оценки членов уравнения регрессии проводить опыты для значений аргументов, находящихся в середине области их изменения. При значимой величине квадратичных членов это может говорить о близости к почти стационарной области. В таком случае следует приступать к построению плана второго порядка или кончать исследования. При незначимой сумме квадратичных членов решения выбрать трудно; обычно переходят к построению линейного плана нового цикла.

2 РАБОТА С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ УСТАНОВКОЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

В данном разделе основное внимание уделено примерам использования программного обеспечения и проведению виртуального эксперимента. В настоящее время сложились определенные критерии к аппаратуре для регистрации и анализа потока сигналов. Согласно этим требованиям, например, измерительная система для акустической эмиссии при термоциклировании должна состоять из первичного преобразователя механических колебаний в электрические, усилителя с большим коэффициентом усиления до 120 dB и низким уровнем шумов, приведенных ко входу, блоков обработки потока акустических сигналов (интенсиметры, квадратичные детекторы и др.), блоков регистрации (самописцы, магнитофоны, компьютеры и др.). На рисунке 1 приведено изображение системы и вспомогательного оборудования для проведения экспериментов.

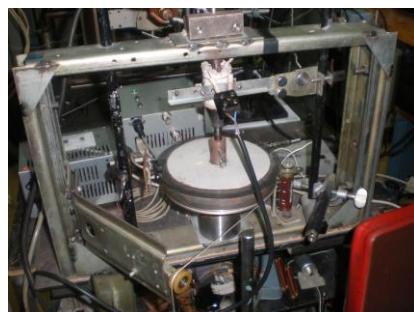


Рисунок 1 - Основные узлы установки: Устройство механического нагружения и измерения деформации, Печь для нагрева образца и термопара для регистрации температуры, Пьезопреобразователь акустических сигналов в электрические, Верхний неподвижный и нижний подвижный держатели образца.

Рассмотрим структурную схему экспериментальной установки и настройку программного обеспечения на примере эксперимента по термоциклированию сплавов с эффектом памяти формы. Эксперимент представляет собой регистрацию акустической эмиссии и температуры в области прямого и обратного мартенситных превращений.

Образец 1 (рисунок 2) нагревается печкой 2. Температура образца регистрируется термопарой 3 и потенциометром 4 (КСП4).

Параллельный реохорд потенциометра подключен к входу канала аналого-цифрового преобразователя 5 (АЦП). После нагрева до желаемой температуры печь отключается, и образец охлаждается до комнатной температуры. Акустическая эмиссия при обратном и прямом мартенситном превращении передается волноводом 6 пьезокерамическому датчику 7, в который встроен предварительный усилитель акустического сигнала. Дальнейшее усиление сигнала осуществляется селективным усилителем 8 (У2-8) на частоте примерно 117 кГц в узком диапазоне частот шириной в 10 кГц.

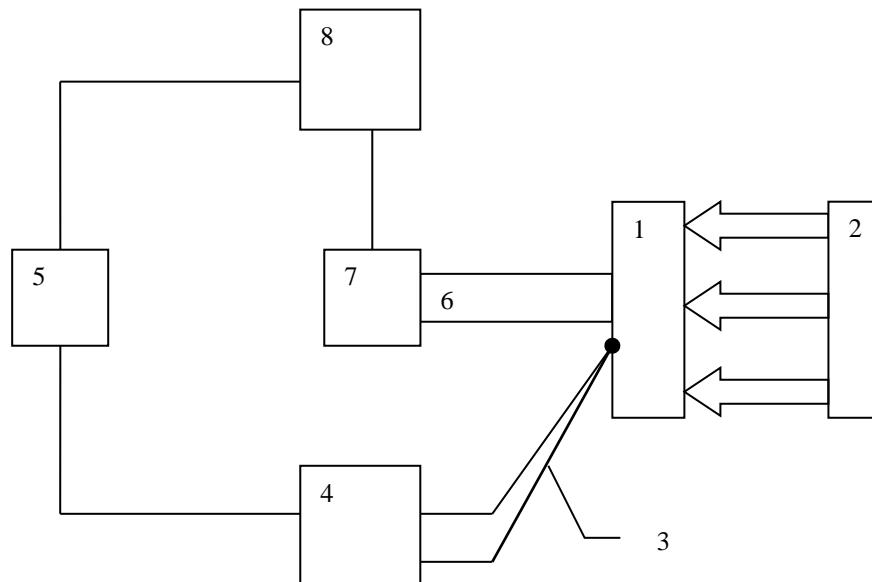


Рисунок 2 - Схема установки термоциклирования образцов с эффектом памяти формы

Среднеквадратичное напряжение выделяется линейным детектором усилителя и подается на вход канала АЦП. Регистрация и обработка акустической эмиссии осуществляется программой RAS (Регистратор аналоговых сигналов). На рисунке 3 приведен общий вид программы.

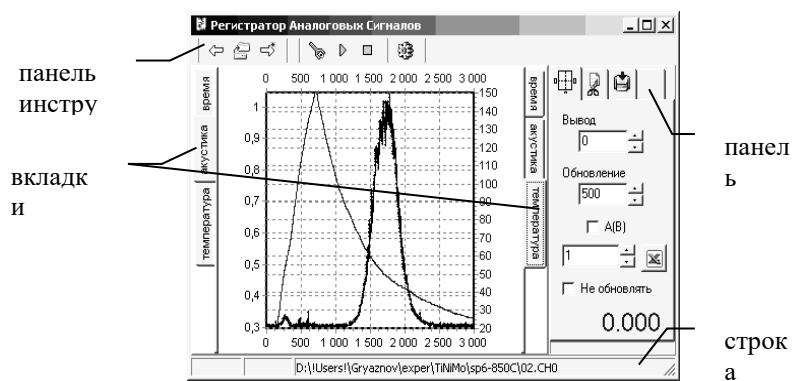


Рисунок 3 - Общий вид программы RAS

2.1 Настройка каналов сбора данных

Вызов диалога настройки конфигурации программы осуществляется клавишей  в панели инструментов.

В условиях термоциклизации рекомендуется выбрать следующую конфигурацию работы программы: канал «Время», канал регистрации акустической эмиссии и канал регистрации температуры (именно в такой последовательности, необходимой для последующего анализа). Сбор данных осуществляется в файлы с одинаковым и различными расширениями: «.CH0», «.CH1», «.CH2» соответственно каждому каналу. Для минимизации объема данных время выделяется отдельным каналом.

Время единичного сбора данных определяется совокупным временем опроса каждого канала. В случае если совокупное время меньше величины периода опроса, задаваемого в окне диалога, то система пристаивает до достижения этого времени. Затем

 опрос начинается заново. Настройка отдельного канала осуществляется кнопкой  с предварительным выбором нужного в списке «Каналы». В данном варианте программы используются следующие типы устройств для сбора данных:

- Время
- La2M5PCI – АЦП сбора данных неакустических каналов (например температуры)
- NVL45_1 – высокочастотное АЦП для сбора данных акустической эмиссии.
- ExtInput – ввод значений с клавиатуры. Поле ввода находится на вкладке  в «панели вкладок».

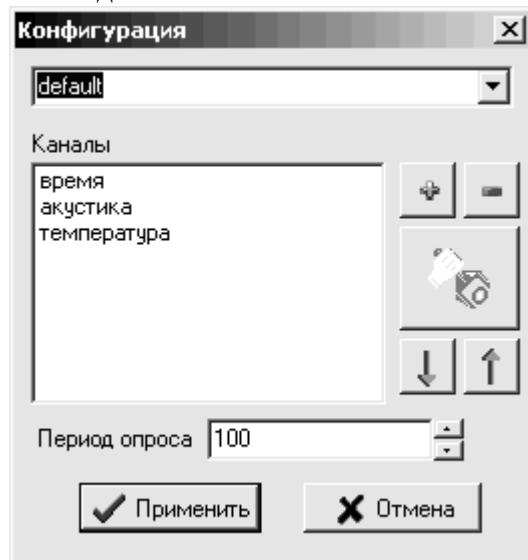


Рисунок 4 - Диалог конфигурации накалов сбора данных

Если в компьютере находится несколько АЦП одного типа, то нужное выбирается в поле «номер устройства». Иначе необходимо выбирать «1» для La2M5PCI и «0» для NVL45_1, во избежание ошибок работы программы!

Каждый тип устройства сопровождается собственным диалогом настройки. В случае регистрации с выхода усилителя среднеквадратичного напряжения рекомендуется

выбрать следующие настройки для NVL45_1: входное напряжение = ± 2 , делитель тактовой частоты 7,5 МГц, коэффициент прореживания 128.

АЦП за время опроса заполняет массив чисел размером, указанным в поле «буфер», с высокой частотой дискретизации. Для постоянных (низкочастотных) сигналов необходимо поставить галочку в поле «усреднять». При этом статистически повышается точность изменения. Далее среднее значение линейно преобразуется для привязки к шкале реальной величины (на рисунке 4 показано линейное преобразование времени из миллисекунд в секунды).

2.2 Регистрация и обработка данных

После настройки каналов необходимо осуществить выбор имени файла нулевого канала, который будет таким же и для остальных каналов, кнопками или в панели инструментов. После проверки подключения и правильной работы внешних устройств, подключенных к входам АЦП, запустите опрос каналов кнопкой . Во время регистрации на экране рисуются данные из каналов, установленных на «вкладках рисуемых каналов».

После проведения соответствующих измерений остановите сбор данных кнопкой в панели инструментов программы.

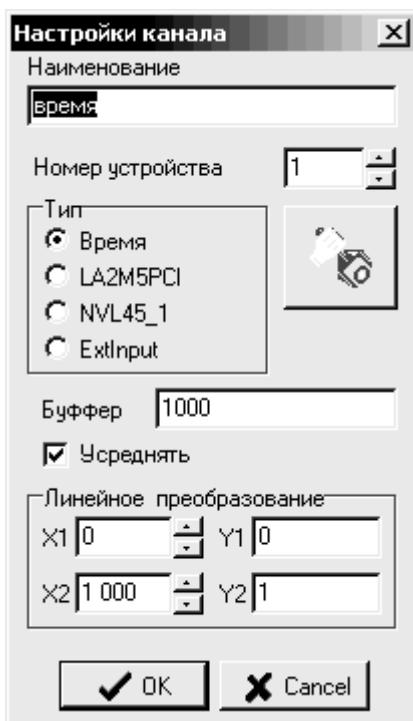


Рисунок 5 - Диалог настройки канала данных

Для расчета энергии акустической эмиссии и температурных точек максимума (поле «С»), начала («А»), и конца («В») излучения необходимо:

- 1) выделить на графике акустической эмиссии участок, соответствующий уровню шума (область «а», ограниченная штрихованной линией на рисунке 5). Выделение осуществляется левой клавишей мыши;
- 3) посчитать среднее значение уровня шума ($U_{ш}$) и среднеквадратическое отклонение шумовой линии (σ), нажатием кнопки «Дисп» на четвертой вкладке в «панели вкладок» программы (см. рис. 6);
- 4) вернуть исходный вид графика, выделив произвольную его область в направление левого верхнего угла;
- 5) выделите участок, включающий акустическую эмиссию фазового перехода («б» на рисунке 7);
- 6) запомните интервал нажатием кнопки «М»;
- 7) расчет параметров производится кнопкой «Авто»;
- 8) результаты обработки запишите в таблицу в тетради.



Рисунок 6 - Вкладка расчета энергии превращения

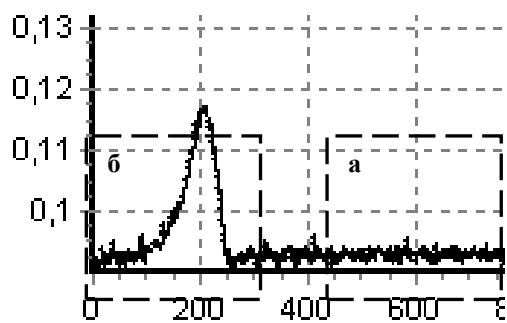


Рисунок 7 - Участок акустической кривой: а – область шума, б – среднеквадратичное напряжение акустической эмиссии фазового перехода

В автоматическом расчете энергии температурные точки определяются по снижению пика акустической эмиссии по сглаживающей кривой до уровня $U_{ш}-2\sigma$ (рисунок 8).

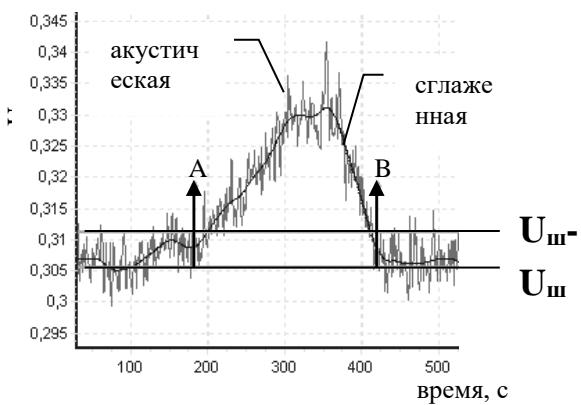


Рисунок 8 - Анализ пика акустической эмиссии

Энергия рассчитывается по формуле:

$$J = \sum_{i=A}^B U_i^2 \cdot \Delta t,$$

$$[J] = B^2 \cdot c$$

Замечание: температурные точки и энергия зависит от коэффициента сглаживания, который задается на второй вкладке «панели вкладок».

2.3 Редактирование данных и удаление помех

Редактирование полученных данных осуществляется с помощью кнопок, расположенных на второй вкладке «панели вкладок» (рисунок 9).

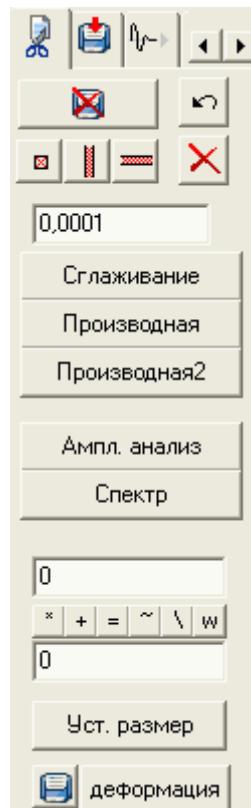


Рисунок 9 - Вкладка редактирования данных

Для редактирования выделенного на чёрном графике участка перечислим основные полезные операции:

- * – умножение выделенного участка на число,
- + – прибавление числа (для вычитания используйте знак «-»),
- = – замена значений графика данным числом,
- \sim – сглаживание сплайновой кривой,
- \backslash – сглаживание линейной функцией,
- w – сглаживание линейной функцией с добавлением шума.

Удаление возникшей на графике помехи (рисунок 10-а) возможно удалить следующим способом: выделите участок на графике, содержащий только помеху, как показано на рисунке 10-а – 10-в; нажмите кнопку «\» для сглаживания участка линией.

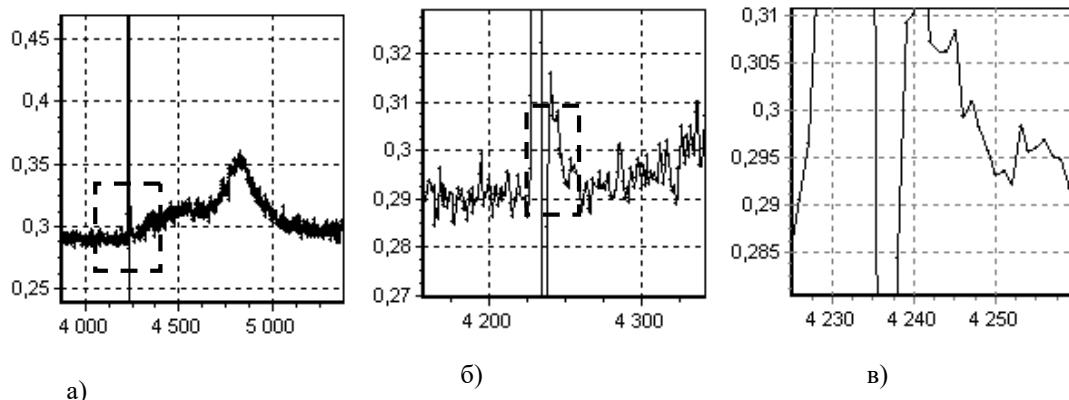


Рисунок 10 - Последовательное приближение интервала, содержащего помеху, для его последующего удаления.

После удаления всех помех результат можно сохранить в файл, нажав кнопку . При этом старый файл сохраняется с именем: «имя файла»~.«chX», где X – номер канала (номер вкладки графика). Вернуться к исходному файлу можно нажатием кнопки .

Данная программа специально разработана для проведения виртуальных экспериментов, позволяющих вести исследования системы в широком температурном интервале [10]

2.4 Оценка параметров системы и получение ее модели

В процессе выполнения виртуального эксперимента мы получили таблицы данных измерений. Проведем обработку результатов согласно основам факторного эксперимента, то есть, интерпретируем данные, используя модель. В качестве исходных данных для построения модели служат результаты эксперимента, который представляет собой совокупность нескольких измерений, выполненных по определённому плану. В простейшем случае план является описанием условий проведения измерений, то есть значения входных параметров (факторов) во время измерения. Поскольку технологические тонкости процесса мартенситного превращения в данном контексте не важны, в качестве основных факторов, влияющих на процесс, будем считать величину энергии акустической эмиссии d (в Джоулях) и температуру t (в $^{\circ}\text{C}$). Выходным параметром (откликом) процесса будем считать количество мартенситной фазы R , то есть

объемную или весовую долю данной фазы в материале. Эта величина определяется в результате экспериментальных исследований материала.

Итак, технологический процесс мартенситного превращения описывается некоторой функцией вида

$$R = f(d, t).$$

Построение модели технологического процесса позволяет выявить поведение отклика системы в зависимости от изменения факторов и тем самым найти пути для оптимизации технологии. Для данного конкретного случая — выбрать такую температуру и величину энергии, которые соответствуют наибольшему количеству мартенситной фазы.

В общем случае отклик системы описывается некоторой функцией n переменных

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n).$$

Математическая модель системы получается в результате аппроксимации этой функции какой-либо другой функцией, например линейной

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n,$$

где $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ — искомые параметры модели.

На рисунке 11 в графическом виде представлен процесс построения линейной модели процесса, где x_1 — энергия, x_2 — температура, y — доля фазы, полученная в данных условиях. Функция $y = f(x_1, x_2)$ нелинейна, однако в достаточной близости от точки A_0 её можно заменить касательной плоскостью $y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2$. В показанной на рисунке 11 области максимальная ошибка модели составляет Δy .

Зная коэффициенты модели a_0, a_1, a_2 , можно с определённой точностью предсказывать значение функции (а значит и поведение системы) в окрестностях точки A_0 . В определении значений коэффициентов a_0, a_1, a_2 и состоит цель эксперимента.

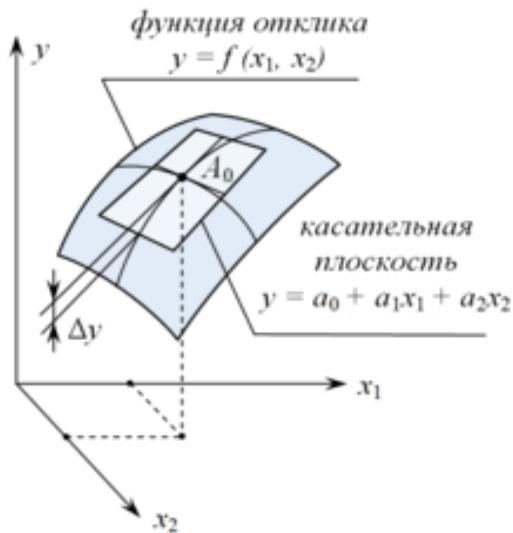


Рисунок 11 - Аппроксимация нелинейной функции двух переменных плоскостью

Составим матрицу эксперимента. Предположим, исходные параметры технологического процесса составляют: энергия 55 мкДж, температура – 30 °C, то есть $x_{1C} = 55$; $x_{2C} = 30$.

Возьмём верхние и нижние значения обоих факторов так, чтобы они располагались симметрично относительно текущего значения, например

$$\begin{aligned} x_{1B} &= 60; & x_{2B} &= 35; \\ x_{1H} &= 50; & x_{2H} &= 25; \end{aligned}$$

Составим таблицу, в которой значения обоих факторов находятся во всех возможных сочетаниях и проведём измерения в этих точках (значения отклика даны условно):

x_1	x_2	y
50	25	140
50	35	210
60	25	170
60	35	220

Полагая, что линейная модель процесса имеет вид
 $y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2$,

на основании полученных результатов можно составить систему четырёх уравнений с двумя переменными. Ниже показана эта система, а также её сокращённая запись в виде матрицы. Матрицу данного вида назовём *матрицей эксперимента*.

$$\begin{cases} a_0 + 50a_1 + 25a_2 = 140 \\ a_0 + 50a_1 + 35a_2 = 210 \\ a_0 + 60a_1 + 25a_2 = 170 \\ a_0 + 60a_1 + 35a_2 = 220 \end{cases}; \quad \left(\begin{array}{ccc|c} x_0 & x_1 & x_2 & y \\ 1 & 50 & 25 & 140 \\ 1 & 50 & 35 & 210 \\ 1 & 60 & 25 & 170 \\ 1 & 60 & 35 & 220 \end{array} \right).$$

В матрице эксперимента второй и третий столбцы представляют собой значения факторов, четвёртый столбец – значения отклика системы, а первый столбец содержит единицы, соответствующие единичным коэффициентам свободного члена модели a_0 . Будем считать этот столбец некоторым виртуальным фактором x_0 , который всегда принимает единичные значения.

Чтобы облегчить решение системы, проведём нормировку факторов. Верхним значениям факторов присвоим нормированное значение +1, нижним значениям – нормированное значение -1, среднему значению – нормированное значение 0. В общем виде нормировка фактора выражается формулой

$$\tilde{x}_i = \frac{2(x_i - x_{iC})}{x_{iB} - x_{iH}} = \frac{2x_i - x_{iB} - x_{iH}}{x_{iB} - x_{iH}}.$$

С учётом нормировки факторов система уравнений и матрица эксперимента примут следующий вид:

$$\begin{cases} \tilde{a}_0 - \tilde{a}_1 - \tilde{a}_2 = 140 \\ \tilde{a}_0 - \tilde{a}_1 + \tilde{a}_2 = 210 \\ \tilde{a}_0 + \tilde{a}_1 - \tilde{a}_2 = 170 \\ \tilde{a}_0 + \tilde{a}_1 + \tilde{a}_2 = 220 \end{cases}; \quad \left(\begin{array}{ccc|c} \tilde{x}_0 & \tilde{x}_1 & \tilde{x}_2 & y \\ +1 & -1 & -1 & 140 \\ +1 & -1 & +1 & 210 \\ +1 & +1 & -1 & 170 \\ +1 & +1 & +1 & 220 \end{array} \right).$$

Поскольку сумма членов во втором и третьем столбце матрицы равны нулю, свободный член модели можно найти, сложив все четыре уравнения:

$$4 \tilde{a}_0 = 140 + 210 + 170 + 220 = 740;$$

$$\tilde{a}_0 = 185.$$

Чтобы найти какой-либо другой коэффициент модели, нужно изменить знаки в уравнениях таким образом, чтобы в соответствующем столбце оказались одни единицы, после чего сложить все четыре уравнения:

$$\begin{aligned} 4 \tilde{a}_1 &= -140 - 210 + 170 + 220 = 40; \\ \tilde{a}_1 &= 10. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 4 \tilde{a}_2 &= -140 + 210 - 170 + 220 = 120; \\ \tilde{a}_2 &= 30. \end{aligned}$$

Таким образом, линейная модель технологического процесса в окрестностях точки (55, 30) имеет вид

$$y = 185 + 10\tilde{x}_1 + 30\tilde{x}_2.$$

В общем случае решение системы будет выглядеть как

$$\tilde{a}_k = \frac{1}{2^n} \sum_{i=1}^{2^n} y_i \tilde{x}_{ki}$$

Переход от нормированных к ненормированным факторам осуществляется обратным преобразованием

$$x_i = \tilde{x}_i \frac{x_{iB} - x_{iH}}{2} + x_{iC} = \tilde{x}_i \frac{x_{iB} - x_{iH}}{2} + \frac{x_{iB} + x_{iH}}{2}.$$

Чтобы найти параметры модели для ненормированных координат, подставим выражения для нормированных координат в уравнение модели:

$$\begin{aligned} y &= \tilde{a}_0 + \tilde{a}_1 \tilde{x}_1 + \tilde{a}_2 \tilde{x}_2 = \\ &= \tilde{a}_0 - \tilde{a}_1 \frac{2x_{1C}}{x_{1B} - x_{1H}} - \tilde{a}_2 \frac{2x_{2C}}{x_{2B} - x_{2H}} + \frac{2\tilde{a}_1}{x_{1B} - x_{1H}} x_1 + \frac{2\tilde{a}_2}{x_{2B} - x_{2H}} x_2 = \\ &= \tilde{a}_0 - \tilde{a}_1 \frac{x_{1B} + x_{1H}}{x_{1B} - x_{1H}} - \tilde{a}_2 \frac{x_{2B} + x_{2H}}{x_{2B} - x_{2H}} + \frac{2\tilde{a}_1}{x_{1B} - x_{1H}} x_1 + \frac{2\tilde{a}_2}{x_{2B} - x_{2H}} x_2. \end{aligned}$$

Сравнивая последнее выражение с выражением для линейной модели в ненормированных координатах

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2,$$

получим выражения для параметров модели:

$$a_0 = \tilde{a}_0 - \tilde{a}_1 \frac{x_{1B} + x_{1H}}{x_{1B} - x_{1H}} - \tilde{a}_2 \frac{x_{2B} + x_{2H}}{x_{2B} - x_{2H}},$$

$$a_1 = \frac{2\tilde{a}_1}{x_{1B} - x_{1H}};$$

$$a_2 = \frac{2\tilde{a}_2}{x_{2B} - x_{2H}};$$

В общем случае

$$a_0 = \tilde{a}_0 - \sum_{i=1}^n \tilde{a}_i \frac{x_{iB} + x_{iH}}{x_{iB} - x_{iH}},$$

$$a_k = \frac{2\tilde{a}_k}{x_{kB} - x_{kH}}.$$

Для приведённого выше примера

$$a_0 = 185 - 10 \cdot \frac{60 + 50}{60 - 50} - 30 \cdot \frac{35 + 25}{35 - 25} = -105;$$

$$a_1 = \frac{2 \cdot 10}{60 - 50} = 2;$$

$$a_2 = \frac{2 \cdot 30}{35 - 25} = 6.$$

Окончательно получаем модель в естественных координатах:

$$y = -105 + 2x_1 + 6x_2.$$

Таким образом, данный пример иллюстрирует метод использования ПФЭ для выбора модели с получением данных виртуального эксперимента. Другие примеры использования компьютерных технологий для решения ряда практических задач оценки и проведения эксперимента можно найти в работах [10,11]

Существует много вариантов и тонкостей использования данного метода, но мы хотели резюмировать его сущность, дать основные формулы и алгоритмы, чтобы облегчить его использование при планировании и обработке результатов исследования. Итак: в общем виде матрица полного факторного эксперимента (ПФЭ) с n факторами имеет вид

$$\left(\begin{array}{cccc|c} \tilde{x}_0 & \tilde{x}_1 & \dots & \tilde{x}_n & y \\ \hline +1 & -1 & \dots & -1 & y_1 \\ +1 & -1 & \dots & +1 & y_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ +1 & +1 & \dots & +1 & y_{2^n} \end{array} \right).$$

Матрица ПФЭ обладает следующими свойствами:

Число строк в матрице равно 2^n ;

Нулевой столбец матрицы состоит из единиц: $\tilde{x}_{0i} = 1$;

В столбцах $1 \dots n$ находятся все возможные 2^n сочетаний значений -1 и $+1$;

В последнем столбце находятся результаты измерений, полученные при значениях факторов, записанных в соответствующих строках в столбцах $1 \dots n$.

Сумма элементов нулевого столбца всегда равна 2^n :

$$\sum_{i=1}^{2^n} \tilde{x}_{0i} = 2^n;$$

Сумма элементов любого столбца, кроме нулевого и последнего, равна нулю:

$$\sum_{i=1}^{2^n} \tilde{x}_{ki} = 0 \quad (k = 1 \dots n);$$

Два последних выражения можно объединить в единое соотношение:

$$\sum_{i=1}^{2^n} \tilde{x}_{ki} = 2^n \delta_{k0} \quad (k = 0...n),$$

где δ_{ij} – единичная матрица, ($i,j = 0...n$);

Сумма квадратов элементов любого (кроме последнего) столбца всегда равна 2^n :

$$\sum_{i=1}^{2^n} \tilde{x}_{ki}^2 = 2^n \quad (k = 0...n);$$

Сумма произведений соответственных элементов двух любых столбцов (кроме последнего) равна нулю:

$$\sum_{i=1}^{2^n} \tilde{x}_{ki} \tilde{x}_{mi} = 0 \quad (k, m = 0...n; k \neq m);$$

Два последних выражения можно записать как ортогональность столбцов матрицы:

$$\sum_{i=1}^{2^n} \tilde{x}_{ki} \tilde{x}_{mi} = 2^n \delta_{km} \quad (k, m = 0...n);$$

Коэффициенты линейной модели в нормированных координатах вычисляются по формулам:

$$\tilde{a}_k = \frac{1}{2^n} \sum_{i=1}^{2^n} y_i \tilde{x}_{ki} \quad (k = 0...n);$$

Коэффициенты линейной модели в естественных (ненормированных) координатах вычисляются по формулам:

$$a_0 = \tilde{a}_0 - \sum_{i=1}^n \tilde{a}_i \frac{x_{iB} + x_{iH}}{x_{iB} - x_{iH}};$$

$$a_k = \frac{2\tilde{a}_k}{x_{kB} - x_{kH}} \quad (k = 1...n).$$

Преобразование естественных факторов в нормированные и обратно можно выразить обобщенными формулами

$$\tilde{x}_i = \frac{2x_i - x_{iB} - x_{iH}}{x_{iB} - x_{iH}};$$

$$x_i = \tilde{x}_i \frac{x_{iB} - x_{iH}}{2} + \frac{x_{iB} + x_{iH}}{2}.$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. — М.: Наука, 1976. — 279 с., ил.
2. Монтгомери Д. К. Планирование эксперимента и анализ данных: Пер. с англ. — Л.: Судостроение, 1980. — 384 с., ил.
3. Построение моделей и граничные испытания электронных средств: Метод. указания / Сост. А.Н. Жирабок, В.Н. Ляхов. — Владивосток: Изд-во ДВГТУ, 2006. — 32 с.
4. Зажигаев Л.С., Кишьян А.А., Романиков Ю.И. Методы планирования и обработки результатов физического эксперимента. — М.: Атомиздат, 1978. - 232 с.
5. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры.- 2-е изд., испр..- М.: Физматлит, 2002.- 320 с.
6. Наукометрия. Изучение науки как информационного процесса / В. В. Налимов, З. М. Мульченко. — М.: Наука, 1969. — 192 с.
7. Логические основания планирования эксперимента / В. В. Налимов, Т. И. Голикова. — М.: Металлургия, 1976. — 128 с.
8. Мордашев В.М. Неклассический метод дискретного приближения функций многих переменных// Физика и техника реакторов (материалы школы ЛИЯФ). Л.: ЛИЯФ, 1998. С. 4-36.
9. Волков Ю.Г. Как написать диплом, курсовую, реферат. - Феникс - 2014, 127 с.
- 10.Основы патентного права и патентоведения в Республике Казахстан: Учебное пособие /Ответ. Редактор Т.Е.Каудыров. –Алматы: Meti тарғы, 2013. – 392 с.
11. Alontseva D.L., Pogrebnyak, A., Kolesnikova, T. and Russakova, A. Modeling of processes in Co-based coatings exposed to plasma jet irradiation (2013), Medziagotyra 3:277-282. DOI:10.5755/j01.ms.19.3.1903
- 12.18. Richard Threlfall Tips for Your Poster: Writing a Conference Abstract (2014) Copyright: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA
- 13.Basic Tips: Write Better Research Papers ChemViews Magazine (2017), DOI: 10.1002/chemv.201600116