

ПРОГРАММНО-АЛГОРИТМИЧЕСКОЕ СРЕДСТВО ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ТРЕХФАКТОРНОГО ПЛАНИРОВАННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА В-D₁₃

Разработчик: Образцов И.В., инженер
sunspire@list.ru; www.sunspire.ru

Программный продукт предназначен для моментального расчета матрицы планирования и обработки выходных данных трехфакторного планированного эксперимента типа В-D₁₃. Построение функциональных моделей экспериментальных зависимостей свойств объекта исследования от переменных параметров (например, состава, технологических режимов и т.д.) включает в себя следующие этапы:

- уточнение в зависимости от конкретной задачи оптимизируемых параметров (например, плотности, прочности, формуемости и др.);
- выбор факторов, определяющих изменчивость оптимизируемых параметров;
- выбор интервалов варьирования переменных факторов;
- выбор плана и условий проведения эксперимента;
- обработка результатов эксперимента с построением математических моделей зависимостей свойств объекта исследования от выбранных факторов.

Данная программа ориентирована на работу с трехфакторным планом эксперимента В-D₁₃, который позволяет получать нелинейные квадратичные модели, и обладает хорошими статистическими характеристиками.

Алгоритм программы включает основные процедуры – процедуру расчета коэффициентов функции отклика, процедуру статистической обработки и процедуру визуализации математической модели. Все основные вычисления производятся циклично, что позволяет моментально перестраивать математическую модель, изменяя входные данные. Кроме того, алгоритм включает вспомогательную процедуру, обеспечивающую проверку синтаксической правильности вводимых данных. При допущении ошибок ввода данных программа корректирует действия пользователя по средствам текстового оповещения.

Интерфейс программного продукта реализован в виде логических блоков, позволяющих вводить исходные данные и изменять параметры вывода математической модели в интерактивном режиме (рис. 1).

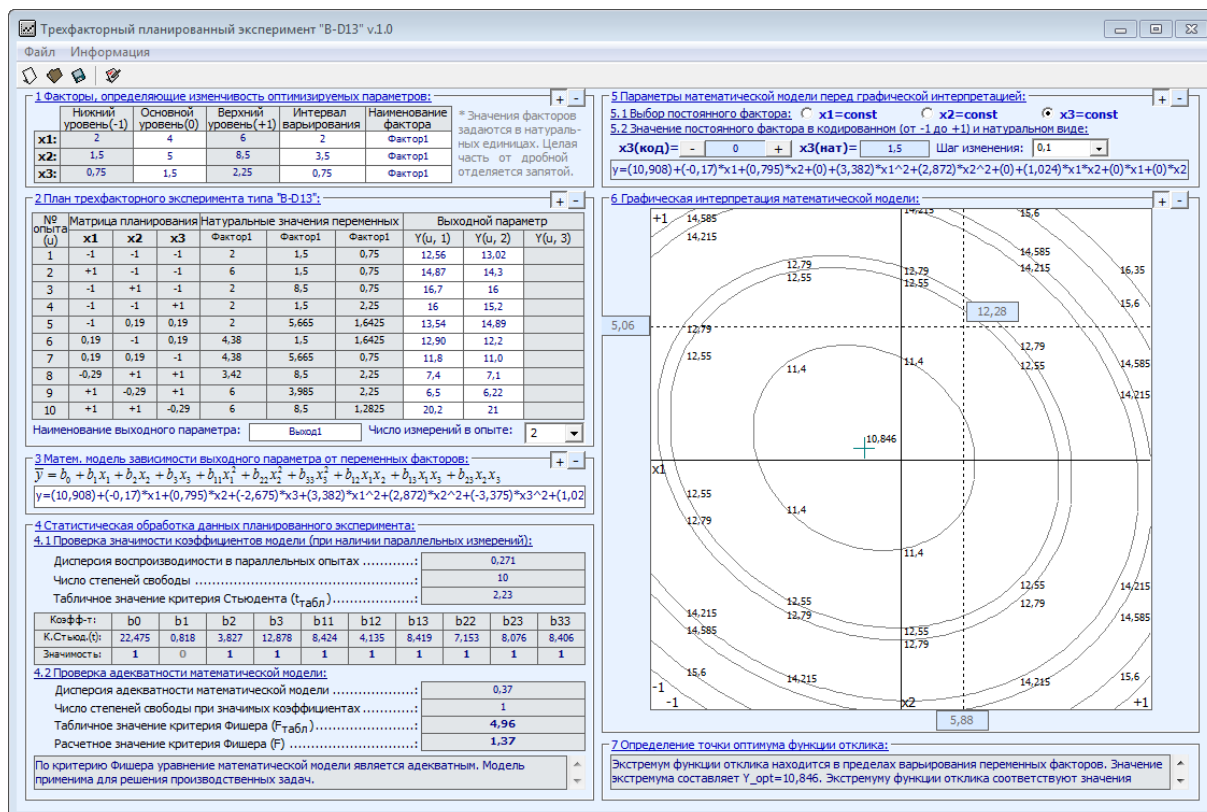


Рисунок 1 – Интерфейс программы

Опишем порядок работы с программой на примере планированного эксперимента по исследованию зависимости прочности бетона от рецептурных факторов.

В первом логическом блоке устанавливаются входные факторы эксперимента. В эксперименте варьируются: количество вяжущей части бетона; содержание наполнителя и количество химической добавки. Значения факторов задаются в натуральном виде (граммы, проценты и т.д.). Пользователь заполняет белые текстовые поля – основной уровень факторов, интервал варьирования и наименование фактора (рис. 2).

1 Факторы, определяющие изменчивость оптимизируемых параметров:					
	Нижний уровень (-1)	Основной уровень (0)	Верхний уровень (+1)	Интервал варьирования	Наименование фактора
x1:	15	20	25	5	Вяж. ч., %
x2:	0	5	10	5	Нап., %
x3:	0	0,75	1,5	0,75	Доб., %

* Значения факторов задаются в натуральных единицах. Целая часть от дробной отделяется запятой.

Рисунок 2 – Блок ввода значений входных факторов

В расчете факторного плана значения уровней входных факторов принимаются в кодированном виде, при этом, основной уровень (центр плана) каждого фактора обозначается как «0», а нижний и верхний уровни – «-1» и «+1» соответственно. Пересчет заданных пользователем натуральных значений факторов производится путем линейной интерполяции значений:

$$x_i = \frac{X_i - x_{0i}}{\Delta X_i}, \quad (1)$$

где x_i – значение i -го фактора в кодированном виде, X_i – значение i -го фактора в натуральном виде, ΔX_i – интервал варьирования i -го фактора.

В текущем примере в эксперименте контролируется величина предела прочности бетона на сжатие ($R_{сж}$, МПа). Для определения воспроизводимости измерений выходного параметра необходимо проводить параллельные измерения. В программе допускается ввод выходных значений до трех параллельных замеров. Согласно плану эксперимента рассчитывается 10 опытов по 3 параллельных испытания в каждом. Выходные параметры, наименование выходного параметра и количество параллельных замеров устанавливаются пользователем во втором блоке (рис. 3).

2 План трехфакторного эксперимента типа "B-D13":									
№ опыта (u)	Матрица планирования			Натуральные значения переменных			Выходной параметр		
	x1	x2	x3	Вяж. ч., %	Нап., %	Доб., %	Y(u, 1)	Y(u, 2)	Y(u, 3)
1	-1	-1	-1	15	0	0	38,7	37,2	38,1
2	+1	-1	-1	25	0	0	51,5	50,1	51,3
3	-1	+1	-1	15	10	0	28,6	28,7	28,9
4	-1	-1	+1	15	0	1,5	28,8	29,3	29,1
5	-1	0,19	0,19	15	5,95	0,8925	32,7	31,6	32,8
6	0,19	-1	0,19	20,95	0	0,8925	48,5	49,3	48,7
7	0,19	0,19	-1	20,95	5,95	0	43,6	42,9	42,5
8	-0,29	+1	+1	18,55	10	1,5	52,9	52,4	53,1
9	+1	-0,29	+1	25	3,55	1,5	71,2	71,5	72,6
10	+1	+1	-0,29	25	10	0,5325	60,5	60,3	65,8

Наименование выходного параметра: Число измерений в опыте:

Рисунок 3 – Блок расчета плана эксперимента и ввода значений выходных параметров

После автоматической проверки введенных данных программа рассчитывает коэффициенты математической модели и выводит функцию отклика в третьем логическом блоке (рис. 4).

3 Матем. модель зависимости выходного параметра от переменных факторов:	
$\bar{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + b_{33} x_3^2 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3$	
$y = (47,128) + (14,77) * x_1 + (1,734) * x_2 + (5,624) * x_3 + (0,016) * x_1^2 + (0,471) * x_2^2 + (0,141) * x_3^2 + (2,276$	

Рисунок 4 – Блок вывода математической модели

После получения математической модели производится проверка значимости (отличия от нуля) коэффициентов модели и ее адекватность. Проверка коэффициентов на значимость производится с помощью критерия Стьюдента (t -критерия), который рассчитывается по формуле:

$$t_i = |b_i| / S\{b_i\}, \quad (2)$$

где b_i – i -й коэффициент математической модели, $S\{b_i\}$ – среднее квадратическое отклонение в определении коэффициентов.

Среднее квадратическое отклонение в определении коэффициентов функции отклика определяется по формуле:

$$S\{b_i\} = \sqrt{C_i \cdot S_e^2}, \quad (3)$$

где C_i – величины, приведенные для плана В-D₁₃ в таблице 1, S_e^2 – дисперсия воспроизводимости в параллельных опытах.

Таблица 1 – Величины C_i для плана В-D₁₃

b_0	b_1	b_2	b_3	b_{11}	b_{12}	b_{13}	b_{22}	b_{23}	b_{33}
0,868	0,159	0,159	0,159	0,594	0,226	0,226	0,594	0,226	0,594

Дисперсия воспроизводимости в параллельных опытах рассчитывается по формуле:

$$S_e^2 = \frac{1}{N(m-1)} \sum_{u=1}^N \sum_{j=1}^m (y_{uj} - \bar{y}_u)^2, \quad (4)$$

где N – количество опытов в плане, m – количество параллельных измерений в каждом опыте, y_{uj} – значение выходного параметра в u -ом опыте, j -ом параллельном замере, \bar{y}_u – среднее значение выходного параметра в u -ом опыте.

Расчетное значение t -критерия сравнивается с табличным $t_{\text{табл}}$ для выбранного уровня значимости (как правило, 5%) и данного числа степеней свободы $N(m-1)$. При $t_i < t_{\text{табл}}$ коэффициент b_i считается значимым.

Проверка адекватности математической модели производится по критерию Фишера (F -критерий). Для этого вычисляется дисперсия адекватности по формуле:

$$S_{ad}^2 = \frac{m}{N - n_3} \sum_{u=1}^N \left(\bar{y}_u - \hat{y}_u \right)^2, \quad (5)$$

где n_3 – количество значимых коэффициентов, \hat{y}_u – значение отклика, предсказанное по уравнению математической модели.

В свою очередь критерий Фишера рассчитывается как отношение:

$$F = S_{ad}^2 / S_e^2 \quad (6)$$

Расчетное значение F -критерия сравнивается с табличным $F_{\text{табл}}$ для выбранного уровня значимости (как правило, 5%) и чисел степеней свободы $N(m-1)$ и $(N-n_3)$. При $F < F_{\text{табл}}$ уравнение математической модели считается адекватным. Результаты статистической обработки модели отображаются в четвертом логическом блоке (рис. 5).

4 Статистическая обработка данных планированного эксперимента:

4.1 Проверка значимости коэффициентов модели (при наличии параллельных измерений):

Дисперсия воспроизводимости в параллельных опытах	1,256
Число степеней свободы	20
Табличное значение критерия Стьюдента ($t_{\text{табл}}$)	2,09

Кoeff-т:	b0	b1	b2	b3	b11	b12	b13	b22	b23	b33
К.Стьюд.(t):	45,136	33,051	3,88	12,585	0,019	4,272	11,279	0,545	7,6	0,163
Значимость:	1	1	1	1	0	1	1	0	1	0

4.2 Проверка адекватности математической модели:

Дисперсия адекватности математической модели	3,858
Число степеней свободы при значимых коэффициентах	3
Табличное значение критерия Фишера ($F_{\text{табл}}$)	3,1
Расчетное значение критерия Фишера (F)	3,07

По критерию Фишера уравнение математической модели является адекватным. Модель применима для решения производственных задач.

Рисунок 5 – Блок статистической обработки математической модели

В данном примере математическая модель прочности бетона признана адекватной по критерию Фишера ($F=3,07 < F_{табл}=3,1$) и применима для решения рецептурно-технологических задач. Уравнение математической модели представляет собой квадратичную функцию трех переменных:

$$y = 47,13 + 14,77x_1 + 1,73x_2 + 5,62x_3 + 0,02x_1^2 + 0,47x_2^2 + 0,14x_3^2 + 2,28x_1x_2 + 6,01x_1x_3 + 4,05x_2x_3$$

Поскольку для графической интерпретации функции трех переменных требуется четырехмерное пространство, с целью визуального упрощения и удобства работы с математической моделью функцию трех переменных необходимо преобразовать в функцию двух переменных, поочередно принимая константой один из факторов. В пятом логическом блоке программы представлены средства для преобразования уравнения регрессии в функцию двух переменных. Пользователь может установить постоянный фактор и задать его значение (в пределах интервала варьирования) в кодированном и натуральном виде (рис. 6).

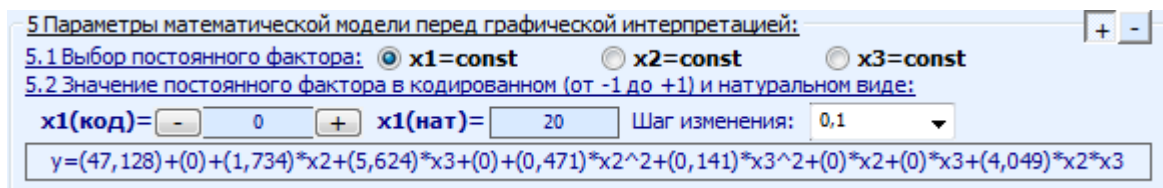


Рисунок 6 – Блок преобразования математической модели

В результате преобразования получаются три варианта математической модели: $y=f(x_2, x_3)$ при $x_1=const$, $y=f(x_1, x_3)$ при $x_2=const$ и $y=f(x_1, x_2)$ при $x_3=const$. Для визуализации каждого из трех видов уравнений строится диаграмма линий равного уровня (изолиний), представляющая собой проекции трехмерных поверхностей на плоскости $(x_2 \oplus x_3)$, $(x_1 \oplus x_3)$ и $(x_1 \oplus x_2)$. Таким образом, кривая каждой изолинии строится в координатах (x_2, x_3) , (x_1, x_3) и (x_1, x_2) , а ее построение производится по квадратичным функциям $x_2=f(x_3)$, $x_1=f(x_3)$ и $x_1=f(x_2)$ соответственно.

В шестом логическом блоке программы представлена интерактивная диаграмма изолиний, позволяющая пользователю снимать координаты факторного поля и значения выходного параметра в режиме реального времени.

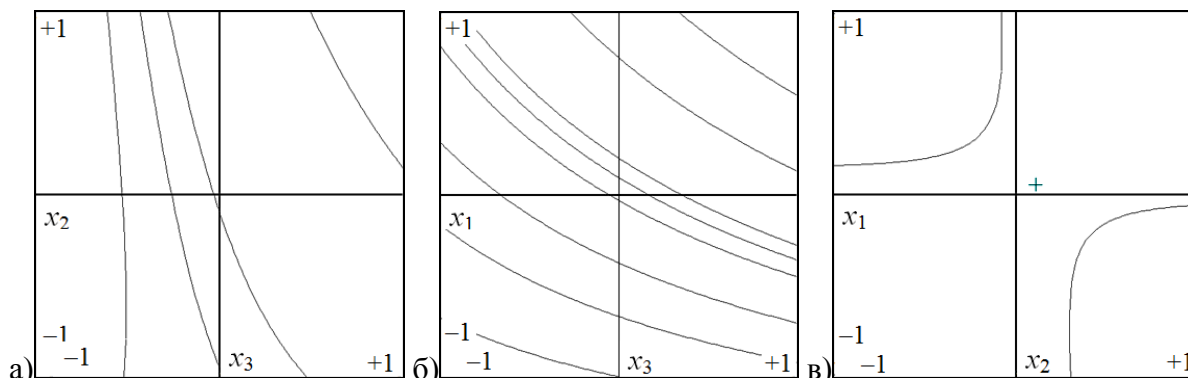


Рисунок 7 – Диаграмма изолиний математической модели прочности бетона: $x_1=const$ (а), $x_2=const$ (б), $x_3=const$ (в)

Обработка данных планированного эксперимента завершается процедурой обнаружения экстремума функции отклика. Для определения координат точки экстремума производится автоматическое вычисление первой производной по каждому из значений факторов. Корни полученной системы уравнений представляют собой координаты точки экстремума исследуемого уравнения регрессии:

$$\begin{cases} \frac{dy(x_1, x_2)}{dx_1} = 0, \\ \frac{dy(x_1, x_2)}{dx_2} = 0 \end{cases} \quad (7)$$

Программа оснащена дополнительными функциями загрузки/сохранения данных, а также функцией экспорта результатов расчетов в Microsoft Word.

Используя полученное уравнение функции отклика, пользователь может произвести дополнительные построения в программе Microsoft Excel, например, построить поверхность отклика в трехмерной системе координат (рис. 8. а), а также, построить сечения поверхности отклика, позволяющие проанализировать изменение выходного параметра в зависимости от одного переменного фактора (рис. 8. б).

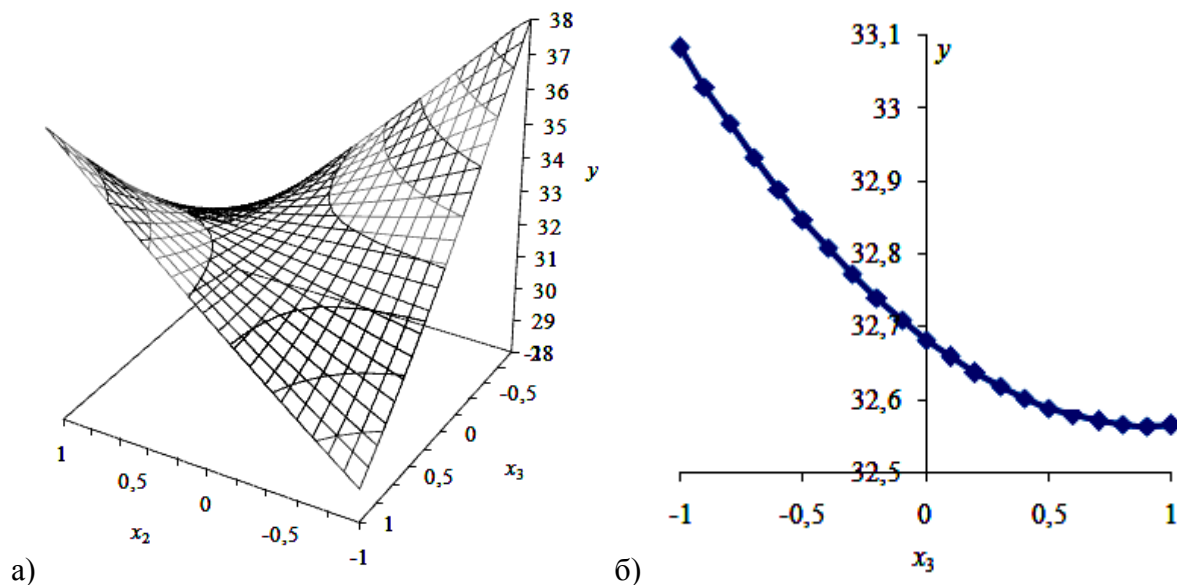


Рисунок 8 – Поверхность отклика (а) при $x_1=\text{const}$ и ее сечение (б) при $x_1=\text{const}$ и $x_2=\text{const}$

Разработанное программное средство можно применять в любых научно-прикладных задачах по оптимизации свойств объекта исследования, подбора рецептуры и технологических параметров, где используется математическое моделирование методом ортогонального планирования экспериментов.