В разд. 6 мы, кроме того, рассмотрим ряд условий, при выполнении которых план является одновременно D-, A- и G-оптимальным.

Выбор критерия оптимальности плана осуществляется исходя из конкретного содержания решаемой задачи. Часто бывает нецелесообразным отказываться от таких полезных свойств планов, как ортогональность или ротатабельность. Действительно, потеря ортогональности приводит к существенным усложнениям вычислений, в то время как повышение точности за счет перехода к неортогональному плану может оказаться незначительным. Если истинный вид модели бывает не известен исследователю, то при планировании более существенным может оказаться возможность проверки адекватности модели, нежели строго оптимальный с точки зрения точности построения модели предполагаемого вида выбор экспериментальных точек. Естественно, что встречаются и иные задачи, где вид модели известен, а интерес представляет получение наивысшей точности оценок параметров модели.

Во всяком случае, всегда будет полезным анализ используемых планов с точки зрения различных критериев. Ниже мы в этом разделе рассмотрим ортогональные и ротатабельные планы для моделей, описываемых полиномами первой и второй степени относительно независимых переменных. В разд. 6 мы рассмотрим свойства этих планов с точки зрения A-, D- и G-оптимальности.

5.4. Планы для моделей, описываемых полиномами первого порядка

5.4.1. Вид модели

Здесь будут рассмотрены планы, предназначенные для построения линейных моделей процессов вида

$$y(x, a) = a_0 + a_1 x_1 + \ldots + a_n x_n. \tag{5.26}$$

Обозначив через F матрицу

$$F = (l, X), \tag{5.27}$$

где

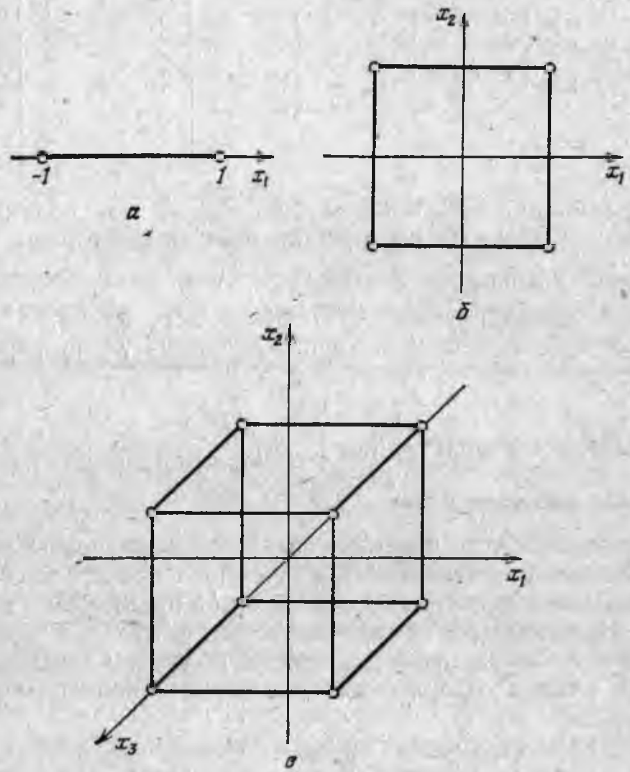
$$l = (1, 1, \ldots, 1)', \tag{5.28}$$

получим для информационной матрицы плана выражение

$$M = F'F = (m_{ij}) = \begin{pmatrix} N & l'X \\ X'l & X'X \end{pmatrix}. \tag{5.29}$$

5.4.2. Полные факторные планы

Мы здесь ограничимся рассмотрением планов, в которых каждый фактор x_i принимает значения только на двух уровнях. Без ограничения общности можно считать, что эти значения



Фиг. 5.2. Полные факторные планы для $n=1$ (*а*), $n=2$ (*б*) и $n=3$ (*в*).

суть $+1$ и -1. В дальнейшем мы будем обозначать эти величины соответственно знаком „+“ или „—“.

Определение 5.10

Множество всех точек в n-мерном пространстве, координаты которых являются $+1$ (+) или -1 (—), называется полным факторным планом типа 2^n. Число точек в этом плане

$$N=2^n. \tag{5.30}$$

Пример 5.2

При n, равном 1, 2 и 3, матрицы планирования X для факторных планов 2^n имеют вид

$$X_1 = \overset{n=1}{\begin{bmatrix} + \\ - \end{bmatrix}}, \quad X_2 = \overset{n=2}{\begin{bmatrix} + & + \\ - & + \\ + & - \\ - & - \end{bmatrix}}, \quad X_3 = \overset{n=3}{\begin{bmatrix} + & + & + \\ - & + & + \\ + & - & + \\ - & - & + \\ + & + & - \\ - & + & - \\ + & - & - \\ - & - & - \end{bmatrix}}.$$

Точки этих планов показаны на фиг. 5.2. Легко получить следующее общее правило построения полных факторных планов.

Утверждение 5.3

Матрица планирования X_{n+1} факторного плана 2^{n+1} может быть получена с помощью матрицы X_n плана 2^n по формуле

$$X_{n+1} = \begin{pmatrix} X_n & l \\ X_n & -l \end{pmatrix}, \tag{5.31}$$

где l определяется уравнением (5.28).

5.4.3. Дробные факторные планы

Число опытов $N = 2^n$ полных факторных планов быстро растет с увеличением размерности факторного пространства n, так что при больших n эти планы оказываются практически неприемлемыми. При этом из множества точек факторных планов 2^n может быть отобрана некоторая часть, представляющая дробный факторный план и содержащая подходящее число опытов.

Правило построения дробных факторных планов

Для построения дробного факторного плана типа 2^{n-p} из множества n отбирают $n-p$ основных факторов, для которых строят полный факторный план с матрицей X_{n-p}. Этот план дополняют затем p столбцами, соответствующими оставшимся факторам. Каждый из этих p столбцов получается как результат поэлементного перемножения не менее двух и не более $n-p$ определенных столбцов, соответствующих основным факторам. Для определения способа образования каждого из p столбцов дробного факторного плана вводится понятие генератора плана.

Генератор представляет собой произведение основных факторов, определяющее значение элементов каждого из дополнительных p столбцов матрицы плана. Очевидно, что в случае плана типа 2^{n-p} должно иметься p генераторов.

Построение дробного факторного плана для $n=3$

Исходим из факторного плана 2^2 для основных факторов x_1 и x_2 и дополняем этот план столбцом значений третьего фактора, элементы которого являются произведением соответствующих элементов первого и второго столбцов (здесь это единственная возможность определения столбца для фактора x_3):

x_1	x_2	$x_3=x_1x_2$
$-$	$+$	$-$
$+$	$+$	$+$
$-$	$-$	$+$
$+$	$-$	$-$

Выражение $x_1x_2=x_3$ является генератором плана. Преимуществом этого плана является меньшее число опытов ($2^{3-1}=4$) по сравнению с числом опытов полного факторного плана ($2^3=8$). Полученный дробный план является полурепликой факторного плана 2^3.

Построение дробных факторных планов для $n=4, 5, 6, 7$

Для этих размерностей факторного пространства можно построить дробные планы, содержащие восемь опытов. Исходим из полного факторного плана 2^3 для факторов x_1, x_2 и x_3 и дополняем его столбцами, образованными поэлементными произведениями столбцов плана 2^3: x_1x_2, x_1x_3, x_2x_3, $x_1x_2x_3$; эти произведения могут являться генераторами для дробных планов. Используя один из четырех возможных генераторов, можно построить четыре различных дробных плана типа 2^{4-1}:

$$x_4=\begin{cases} x_1x_2 \\ x_1x_3 \\ x_2x_3 \\ x_1x_2x_3 \end{cases}.$$

По сравнению с $2^4=16$ опытами полного факторного плана полученный дробный план состоит из $2^{4-1}=8$ опытов.

При $n=5$ для построения дробного плана типа 2^{5-2} имеется возможность выбрать два любых из четырех возможных генераторов для образования столбцов факторов x_4 и x_5. Очевидно, что возможно построение шести различных вариантов плана

Пример 5.2

При n, равном 1, 2 и 3, матрицы планирования X для факторных планов 2^n имеют вид

$$X_1 = \overset{n=1}{\begin{bmatrix} + \\ - \end{bmatrix}}, \quad X_2 = \overset{n=2}{\begin{bmatrix} + & + \\ - & + \\ + & - \\ - & - \end{bmatrix}}, \quad X_3 = \overset{n=3}{\begin{bmatrix} + & + & + \\ - & + & + \\ + & - & + \\ - & - & + \\ + & + & - \\ - & + & - \\ + & - & - \\ - & - & - \end{bmatrix}}.$$

Точки этих планов показаны на фиг. 5.2. Легко получить следующее общее правило построения полных факторных планов.

Утверждение 5.3

Матрица планирования X_{n+1} факторного плана 2^{n+1} может быть получена с помощью матрицы X_n плана 2^n по формуле

$$X_{n+1} = \begin{pmatrix} X_n & l \\ X_n & -l \end{pmatrix}, \tag{5.31}$$

где l определяется уравнением (5.28).

5.4.3. Дробные факторные планы

Число опытов $N = 2^n$ полных факторных планов быстро растет с увеличением размерности факторного пространства n, так что при больших n эти планы оказываются практически неприемлемыми. При этом из множества точек факторных планов 2^n может быть отобрана некоторая часть, представляющая дробный факторный план и содержащая подходящее число опытов.

Правило построения дробных факторных планов

Для построения дробного факторного плана типа 2^{n-p} из множества n отбирают $n-p$ основных факторов, для которых строят полный факторный план с матрицей X_{n-p}. Этот план дополняют затем p столбцами, соответствующими оставшимся факторам. Каждый из этих p столбцов получается как результат поэлементного перемножения не менее двух и не более $n-p$ определенных столбцов, соответствующих основным факторам. Для определения способа образования каждого из p столбцов дробного факторного плана вводится понятие генератора плана.

Генератор представляет собой произведение основных факторов, определяющее значение элементов каждого из дополнительных p столбцов матрицы плана. Очевидно, что в случае плана типа 2^{l-p} должно иметься p генераторов.

Построение дробного факторного плана для $n=3$

Исходим из факторного плана 2^2 для основных факторов x_1 и x_2 и дополняем этот план столбцом значений третьего фактора, элементы которого являются произведением соответствующих элементов первого и второго столбцов (здесь это единственная возможность определения столбца для фактора x_3):

x_1	x_2	$x_3=x_1x_2$
$-$	$+$	$-$
$+$	$+$	$+$
$-$	$-$	$+$
$+$	$-$	$-$

Выражение $x_1x_2=x_3$ является генератором плана. Преимуществом этого плана является меньшее число опытов $(2^{3-1}=4)$ по сравнению с числом опытов полного факторного плана $(2^3=8)$. Полученный дробный план является полурепликой факторного плана 2^3.

Построение дробных факторных планов для $n=4,\ 5,\ 6,\ 7$

Для этих размерностей факторного пространства можно построить дробные планы, содержащие восемь опытов. Исходим из полного факторного плана 2^3 для факторов x_1, x_2 и x_3 и дополняем его столбцами, образованными поэлементными произведениями столбцов плана 2^3: x_1x_2, x_1x_3, x_2x_3, $x_1x_2x_3$; эти произведения могут являться генераторами для дробных планов. Используя один из четырех возможных генераторов, можно построить четыре различных дробных плана типа 2^{4-1}:

$$x_4=\begin{cases} x_1x_2 \\ x_1x_3 \\ x_2x_3 \\ x_1x_2x_3 \end{cases}.$$

По сравнению с $2^4=16$ опытами полного факторного плана полученный дробный план состоит из $2^{4-1}=8$ опытов.

При $n=5$ для построения дробного плана типа 2^{5-2} имеется возможность выбрать два любых из четырех возможных генераторов для образования столбцов факторов x_4 и x_5. Очевидно, что возможно построение шести различных вариантов плана типа 2^{5-2}:

$$x_4=\begin{cases} x_1x_2 \\ x_1x_2 \\ x_1x_2 \\ x_1x_3 \\ x_1x_3 \\ x_2x_3 \end{cases}, \qquad x_5=\begin{cases} x_1x_3 \\ x_2x_3 \\ x_1x_2x_3 \\ x_2x_3 \\ x_1x_2x_3 \\ x_1x_2x_3 \end{cases}.$$

Еще шесть дробных планов можно получить, если поменять местами столбцы для факторов x_4 и x_5.

Для пяти факторов дробный план типа 2^{5-2} содержит восемь опытов по сравнению с $2^5=32$ опытами полного факторного плана.

При $n=6$ для построения дробного плана 2^{6-3} необходимо выбрать три из четырех возможных генераторов для получения элементов столбцов факторов x_4, x_5 и x_6. Возможны следующие комбинации:

$$x_4=\begin{cases} x_1x_2 \\ x_1x_2 \\ x_1x_2 \\ x_1x_3 \end{cases}, \quad x_5=\begin{cases} x_1x_3 \\ x_1x_3 \\ x_2x_3 \\ x_2x_3 \end{cases}, \quad x_6=\begin{cases} x_2x_3 \\ x_1x_2x_3 \\ x_1x_2x_3 \\ x_1x_2x_3 \end{cases}.$$

Рассматривая теперь всевозможные перестановки трех полученных столбцов, получим 24 варианта дробных планов типа 2^{6-3}. Дробный план типа 2^{7-4} для $n=7$ приведен в табл. 5.1.

Дробные факторные планы для n от 5 до 15

Исходим из факторного плана 2^4 и дополняем его всевозможными поэлементными произведениями столбцов плана 2^4: x_1x_2, x_1x_3, x_1x_4, x_2x_3, x_2x_4, x_3x_4, $x_1x_2x_3$, $x_1x_2x_4$, $x_1x_3x_4$, $x_2x_3x_4$, $x_1x_2x_3x_4$.

Таблица 5.1

x_1	x_2	x_3	$x_4=x_1x_2$	$x_5=x_1x_3$	$x_6=x_2x_3$	$x_7=x_1x_2x_3$
+	+	+	+	+	+	+
−	+	+	−	−	+	−
+	−	+	−	+	−	−
−	−	+	+	−	−	+
+	+	−	+	−	−	−
−	+	−	−	+	−	+
+	−	−	−	−	+	+
−	−	−	+	+	+	−

Выбирая необходимое число генераторов для оставшихся факторов, строим дробные планы типа $2^{5-1}, 2^{6-2}, 2^{7-3}, 2^{8-4}, \ldots, 2^{15-11}$, каждый из которых содержит 16 опытов. Заметим, что полный факторный план 2^{15} требует постановки 32 768 экспериментов. Преимущества дробных планов с точки зрения числа опытов очевидны.

5.4.4. Формулы для вычислений и свойства полных и дробных факторных планов для линейных моделей

Матрица F для плана типа 2^{n-p} (при $p=0$ имеем полный факторный план) и линейной модели вида (5.26) содержит $n+1$ столбцов и $N=2^{n-p}$ строк. Например, для плана 2^{3-1} имеем

$$F=\begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & +1 & -1 \\ 1 & -1 & +1 \\ 1 & +1 & +1 \end{bmatrix}. \tag{5.32}$$

Первый столбец соответствует фиктивной переменной x_0 при свободном члене уравнения модели, которая во всех опытах принимает значение, равное единице. Легко убедиться в том, что информационная матрица плана 2^{n-p} для модели (5.26) имеет вид

$$M=F'F=2^{n-p}I_{n+1}=NI_{n+1}, \tag{5.33}$$

где I_{n+1} — единичная матрица размера $n+1$.

Для дисперсионной матрицы получаем

$$C=M^{-1}=\frac{1}{N} I_{n+1}. \tag{5.34}$$

Из (5.34) следуют простые формулы для оценок коэффициентов

$$\hat{a}_i=\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \tilde{y}^j x_i^j, \quad i=0, 1, \ldots, n. \tag{5.35}$$

Для дисперсий оценок коэффициентов s_i^2 получаем

$$s_i^2=\frac{s^2}{N}. \tag{5.36}$$

Здесь s^2 — оценка дисперсии $\tilde{y}$ (дисперсии ошибки наблюдений). Из (5.36) следует, что оценки всех коэффициентов имеют одну и ту же дисперсию. Вид выражений (5.33) и (5.34) определяет ортогональность плана 2^{n-p} для модели (5.26). Легко убедиться, что для линейной модели план 2^{n-p} является также и ротатабельным (см. утверждение 5.2).

В разд. 6.4 будет показано, что полные и дробные факторные планы для линейных моделей вида (5.26), в случае когда область планирования — гиперкуб с координатами вершин ± 1, являются также D-, A- и G-оптимальными планами (см. утверждение 6.5 и пример 6.5). Это означает, что для данного частного вида области планирования и числа опытов $N = 2^{n-p}$ рассмотренные планы обеспечивают максимально возможную точность оценок коэффициентов и всей модели в целом.

Перечисленные свойства факторных планов объясняют, почему эти планы находят широкое применение при построении линейных моделей.

Пример 5.3

При изучении возможностей повышения выхода одной из производных пиперазина рассматривались факторы, приведенные в табл. 5.2. Постулировался линейный вид зависимости между

Таблица 5.2

Факторы и их интервалы варьирования

Факторы	Значения факторов для примера 5.3 и их интервалы варьирования			
	−1	0	+1	Интервал варьирования
x_1^* — отношение NaOH/ Исходный продукт 1	1:1	1,25:1	1,5:1	0,25
x_2^* — отношение Исходный продукт 1/Исходный продукт 2	1:1	1,25:1	1,5:1	0,25
x_3^* — длительность реакции, ч	3	4	5	1
x_4^* — температура, °С	20	25	30	5
x_5^* — момент добавления исходного продукта 1, мин	20	40	60	20

выходом и указанными факторами. Был использован дробный факторный план типа 2^{5-2}, т. е. четверть реплики полного факторного плана 2^5, содержащий всего восемь опытов. Полный факторный план 2^5 содержит 32 опыта. План эксперимента и его результаты приведены в табл. 5.3. Для построения плана использованы генераторы $x_1x_2x_3$ и $-x_1x_2$, определяющие характер изменения в плане факторов x_4 и x_5 соответственно. Как ясно из табл. 5.3, опыты плана 2^{5-2} реализовывались в случайном порядке. Оценки коэффициентов, рассчитанные на основе результатов экспериментов, приведены в последней строке табл. 5.3.

Таблица 5.3

План 2^{5-2} и результаты опытов (пример 5.3)

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	$\tilde{y}$ (среднее двух параллельных наблюдений)
1	+	—	—	—	—	—	50,0
2	+	+	+	—	—	—	57,2
3	+	—	—	+	+	—	48,1
4	+	+	—	+	—	+	46,0
5	+	—	+	+	—	+	64,8
6	+	+	—	—	+	+	45,3
7	+	—	+	—	+	+	54,8
8	+	+	+	+	+	—	53,0
$\hat{a}_i$	52,3	—1,755	5,050	0,575	—2,10	0,325	

Для проверки адекватности полученной модели рассчитаем, согласно (3.93), сумму квадратов S_e:

$$S_e = 51,2$$

с числом степеней свободы $\varphi_2 = N(\nu - 1) = 8$. По формуле (3.96) найдем сумму квадратов S_D:

$$S_D = 47,216$$

с числом степеней свободы $\varphi_1 = N - k - 1 = 8 - 5 - 1 = 2$. Отсюда следует

$$F = \frac{S_D/\varphi_1}{S_e/\varphi_2} = \frac{47,216/2}{51,2/8} = 3,69.$$

В табл. 15.4 находим для $1 - P = 0,05$

$$F_{кр} = 4,46.$$

Следовательно, полученная модель процесса является адекватной. По формуле (3.95) рассчитываем

$$s^2 = \frac{S_e}{\nu\,\varphi_2} = \frac{51,2}{2 \times 8} = 3,2$$

и $s = 1,79$. Для дисперсий оценок коэффициентов получаем

$$s_i^2 = \frac{s^2}{N} = \frac{3,2}{8} = 0,4,$$

$$s_i = 0,63.$$

Проверка значимости коэффициентов при $1-P=0{,}05$, $\varphi=8$ и соответственно $t_{кр}=2{,}31$ показывает, что коэффициенты a_3 и a_5 незначимы и, следовательно, могут быть исключены из модели. Окончательно получаем

$$\hat{y}(x)=52{,}3-1{,}755x_1+5{,}05x_2-2{,}1x_4.$$

5.5. Планы для моделей, содержащих линейные члены и взаимодействия различного порядка

5.5.1. Вид модели

При построении модели часто недостаточно принимать во внимание только линейные эффекты факторов, ибо влияние на целевую величину могут оказывать также взаимодействия факторов. В этих случаях в модель необходимо вводить взаимодействия различных порядков. Модель принимает вид

$$y(a, x)=a_0+\sum_{i=1}^{n} a_i x_i+\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=i+1}^{n} a_{ik}x_i x_k+$$
$$+\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=i+1}^{n}\sum_{l=k+1}^{n} a_{ikl}x_i x_k x_l+\ldots+a_{12\ldots n}x_1 x_2\ldots x_n. \qquad (5.37)$$

Коэффициент a_{ik} является мерой парного взаимодействия факторов (взаимодействия первого порядка), коэффициент a_{ikl} отражает воздействие тройного взаимодействия (взаимодействия второго порядка). Количество возможных взаимодействий для числа факторов от 2 до 10 приведено в табл. 5.4. Для шести факторов существует, например, 15 взаимодействий первого, 20 — второго, 15 — третьего, 6 — четвертого и 1 — пятого порядка.

5.5.2. Применение полных факторных планов для моделей типа (5.37)

Для получения оценок коэффициентов модели типа (5.37) в принципе можно использовать полные факторные планы. Однако, как правило, модель включает не все, а лишь некоторые взаимодействия первого порядка (парные взаимодействия), иногда взаимодействия второго порядка и почти никогда не содержит взаимодействий выше третьего порядка. Поэтому число степеней свободы для проверки адекватности модели с ростом числа факторов быстро увеличивается. Так, например, для случая, когда имеются только взаимодействия первого порядка, при $n=2$ отсутствуют степени свободы, а при $n=6$ имеется уже 42 степени свободы. Так как наша цель состоит в том, чтобы, пользуясь по возможности малым числом опытов, извлечь необ-

Таблица 5.4

Количество взаимодействий для числа факторов от 2 до 10

n	$N=2^n$	Число линейных эффектов	Порядок взаимодействия								
			1	2	3	4	5	6	7	8	9
2	4	2	1								
3	8	3	3	1							
4	16	4	6	4	1						
5	32	5	10	10	5	1					
6	64	6	15	20	15	6	1				
7	128	7	21	35	35	21	7	1			
8	256	8	28	56	70	56	28	8	1		
9	512	9	36	84	126	126	84	36	92	1	
10	1024	10	45	120	210	252	210	120	45	10	1

ходимую информацию об исследуемом объекте, оказывается целесообразным для построения модели типа (5.37) применить рассмотренные в разд. 5.4 дробные факторные планы.

5.5.3. Применение дробных факторных планов для модели типа (5.37) и порядок смешивания оценок коэффициентов

Дробные планы типа 2^{n-p} для моделей, содержащих линейные члены и взаимодействия, строятся так же, как и для линейных моделей, т. е. матрицу полного факторного плана для $(n-p)$ основных факторов дополняют столбцами, элементы которых представляют собой произведения элементов определенных столбцов основных факторов. Обычно предполагается, что только некоторые парные взаимодействия и взаимодействия высших порядков являются значимыми. При этом значимые взаимодействия рассматриваются как самостоятельные факторы, а незначимые приравниваются к факторам, не вошедшим в число основных. При использовании дробных планов для моделей с взаимодействиями можно, таким образом, включать в рассмотрение лишь столько дополнительных факторов, сколько существует незначимых взаимодействий.

При наличии в модели взаимодействий оценки $\hat{a}_i$ коэффициентов при линейных членах остаются независимыми друг от друга, однако они могут быть смешаны со взаимодействиями высших порядков. Часть оценок $\hat{a}_{ik}$ коэффициентов при парных взаимодействиях также оказывается смешанной друг с другом.

Рассмотрим матрицу F для полной модели вида (5.37), содержащей все возможные взаимодействия, в случае, когда для оценки коэффициентов используется дробный факторный план

2^{n-p}. Очевидно, что некоторые столбцы матрицы F окажутся одинаковыми. Так, например, столбцы для фактора x_4 и взаимодействия $x_1x_2x_3$ одинаковы, если в качестве генератора выбрано соотношение $x_4 = x_1x_2x_3$. Это означает, что план не позволяет получить раздельные оценки для коэффициентов $\bar{a}_4$ и $\bar{a}_{123}$ модели. С помощью данного плана можно получить лишь оценку $\hat{a}$, которая характеризует суммарное воздействие фактора x_4 и взаимодействия $x_1x_2x_3$. Оценки подобного рода называют смешанными. Заметим, что если $\bar{a}_{123} = 0$, то величина $\hat{a}$ является несмешанной оценкой коэффициента $\bar{a}_4$.

Для получения правила смешивания, с помощью которого можно было бы определить, совокупность каких линейных эффектов и эффектов взаимодействия оценивается всяким найденным на основе данного плана коэффициентом, введем понятие контраста плана. Под контрастом понимается соотношение между элементами матрицы F, задающее элемент первого столбца матрицы F. Элементы первого столбца, всегда равные единице, обозначим символически через I. Для дробного плана 2^{3-1}, например, имеем следующий контраст[1]:

$$I = x_1x_2x_3.$$

Для дробного плана 2^{4-1} (если генератор $x_4 = x_1x_2x_3$) контраст выражается соотношением

$$I = x_1x_2x_3x_4.$$

Чтобы определить, с какими факторами смешана оценка некоторого данного фактора, умножим обе части контраста на этот фактор, считая, что $x_i^2 = 1$. При этом мы получим порядок смешивания оценок коэффициентов при использовании данного плана.

Пример 5.4

Для дробного факторного плана 2^{3-1} с контрастом $I = x_1x_2x_3$ получаем следующий порядок смешивания для факторов x_1, x_2 и x_3:

$$x_1 = x_1^2x_2x_3 = x_2x_3,$$
$$x_2 = x_1x_2^2x_3 = x_1x_3,$$
$$x_3 = x_1x_2x_3^2 = x_1x_2.$$

Для оценок имеем соответственно

$$\hat{a}_1 \to \bar{a}_1 + \bar{a}_{23},$$
$$\hat{a}_2 \to \bar{a}_2 + \bar{a}_{13},$$
$$\hat{a}_3 \to \bar{a}_3 + \bar{a}_{12}.$$

[1] Предполагается, что $x_ix_i = 1$. Для плана 2^{3-1} генератор $x_3 = x_1x_2$. Поэтому $x_1x_2x_3 = 1$.— *Прим. ред.*

Для дробного факторного плана 2^{4-1} с контрастом $I=x_1x_2x_3x_4$ получаем аналогично

$$\begin{aligned} &\hat{a}_1 \to \bar{a}_1+\bar{a}_{234}, && \hat{a}_{12} \to \bar{a}_{12}+\bar{a}_{34},\\ &\hat{a}_2 \to \bar{a}_2+\bar{a}_{134}, && \hat{a}_{13} \to \bar{a}_{13}+\bar{a}_{24},\\ &\hat{a}_3 \to \bar{a}_3+\bar{a}_{124}, && \hat{a}_{14} \to \bar{a}_{14}+\bar{a}_{23}.\\ &\hat{a}_4 \to \bar{a}_4+\bar{a}_{123}, && \end{aligned}$$

В зависимости от выбора генераторов получаются дробные факторные планы, обладающие различной разрешающей способностью. В соответствии с порядком контраста (числом элементов в контрасте) говорят о планах с разрешающей способностью III, если контраст состоит из трех элементов, и IV, если контраст состоит из четырех элементов. Если для дробного плана 2^{4-1} в качестве генератора выбрано соотношение $x_1x_2x_3$ и контраст соответственно представляется выражением $I=$ $=x_1x_2x_3x_4$, то этот план имеет разрешающую способность IV и обозначается через 2_{IV}^{4-1}. Если, например, в качестве генератора выбрано соотношение x_1x_2, то план имеет контраст $I=x_1x_2x_4$, его разрешающая способность III и обозначение 2_{III}^{4-1}.

Дробные факторные планы с наибольшей разрешающей способностью называют главными. Этим планам следует отдавать предпочтение при использовании.

Если имеется несколько незначимых взаимодействий, можно ввести в план несколько дополнительных факторов. При этом число различных генераторов и контрастов, определенных так же, как и выше, будет таким же, как число дополнительных факторов. Чтобы определить порядок смешивания для этого случая, введем обобщающий контраст, который строится из отдельных контрастов, а также произведений отдельных контрастов во всевозможных сочетаниях по 2, 3, ..., p. При этом все произведения контрастов, так же как и сами контрасты, задают элементы первого столбца матрицы F.

Пример 5.5

Для дробного факторного плана 2^{5-2} в качестве генераторов выбраны соотношения $x_4=x_1x_2$ и $x_5=x_1x_2x_3$. Контрасты плана $I=x_1x_3x_4$ и $I=x_1x_2x_3x_5$.

Для получения обобщающего контраста перемножим вышеуказанные контрасты и получим еще один контраст $I=x_2x_4x_5$. Обобщающий контраст при этом

$$I=x_1x_3x_4=x_2x_4x_5=x_1x_2x_3x_5.$$

Умножая все составляющие обобщающего контраста на факторы, находим совпадающие столбцы матрицы F:

$$x_1 = x_3x_4 = x_1x_2x_4x_5 = x_2x_3x_5,$$
$$x_2 = x_1x_2x_3x_4 = x_4x_5 = x_1x_3x_5,$$
$$x_3 = x_1x_4 = x_2x_3x_4x_5 = x_1x_2x_5,$$
$$x_4 = x_1x_3 = x_2x_5 = x_1x_2x_3x_4x_5,$$
$$x_5 = x_1x_3x_4x_5 = x_2x_4 = x_1x_2x_3,$$
$$x_1x_2 = x_2x_3x_4 = x_1x_4x_5 = x_3x_5,$$
$$x_2x_3 = x_1x_2x_4 = x_3x_4x_5 = x_1x_5.$$

Отсюда легко получить порядок смешивания оценок. Например, для $\hat{a}_1$ имеем

$$\hat{a}_1 \longrightarrow \bar{a}_1 + \bar{a}_{34} + \bar{a}_{1245} + \bar{a}_{235}.$$

Если в модель входят функции вида x_i^2 ($i = 1, 2, \ldots, n$), то столбцы матрицы F, соответствующие этим функциям, будут состоять из единиц. Эти столбцы, таким образом, совпадают со столбцом для x_0 (т. е. для свободного члена уравнения). А это означает, что $\hat{a}_0$ является смешанной оценкой для свободного члена $\bar{a}_0$ и всех коэффициентов $\bar{a}_{ii}$, $i = 1, 2, \ldots, n$:

$$\hat{a}_0 \longrightarrow \bar{a}_0 + \bar{a}_{11} + \bar{a}_{22} + \ldots + \bar{a}_{nn}.$$

Пользуясь этим свойством, можно получить правило для проверки значимости квадратичных эффектов. Для этого проведем в центре плана n_0 опытов и найдем значение $\bar{y}^0$:

$$\bar{y}^0 = \frac{1}{n_0} \sum_{j=1}^{n_0} \tilde{y}^{0j}. \tag{5.38}$$

Если квадратичные эффекты отсутствуют, т. е. $\bar{a}_{11} = \bar{a}_{22} = \ldots = \bar{a}_{nn} = 0$, то

$$E\{\bar{y}^0 - \hat{a}_0\} = 0.$$

Отсюда следует, что, в случае когда гипотеза H: $E\{\hat{a}_0\} = E\{\bar{y}^0\}$ отвергается, в модель необходимо включать функции вида x_i^2.

Пусть полный (или дробный) факторный план содержит $N = 2^{n-p}$ точек, причем в каждой точке реализовано ν экспериментов. На основе параллельных опытов в каждой точке найдена оценка s^2 дисперсии ошибок наблюдений с числом степеней свободы φ_e [см. формулы (3.68) и (3.69)]. Для проверки гипотезы можно воспользоваться величиной

$$t = \frac{\bar{y}^0 - \hat{a}_0}{s\sqrt{\dfrac{n_0 + \nu N}{n_0 N}}},$$

которая при условии нормальности распределения и независимости ошибок наблюдений подчинена закону распределения Стьюдента (t-распределению) с числом степеней свободы φ_e [15]. Гипотеза H: $E\{\hat{a}_0\} = E\{\tilde{y}^0\}$ отклоняется, если

$$|\tilde{y}^0 - \hat{a}_0| > t_{\text{кр}} s \sqrt{\frac{n_0 + \nu N}{n_0 N}}, \tag{5.39}$$

где $t_{\text{кр}}$ — критическое значение распределения Стьюдента при выбранном уровне значимости α и числе степеней свободы[1] φ_e. Если гипотеза отвергается, в модель следует ввести квадраты факторов.

5.5.4. Вычислительные формулы и свойства планов 2^{n-p}

Легко убедиться в том, что информационная матрица планов 2^{n-p} для моделей, содержащих $(k+1)$ подлежащий оценке коэффициент, в случае когда оценки всех коэффициентов не смешаны (т. е. матрица F не имеет совпадающих столбцов), имеет следующий вид:

$$M = F'F = 2^{n-p} I_{k+1} = N I_{k+1}. \tag{5.40}$$

Для C получаем

$$C = \frac{1}{N} I_{k+1}. \tag{5.41}$$

Планы типа 2^{n-p} являются, таким образом, ортогональными для моделей вида (5.37). Для вычисления оценок коэффициентов получаем формулы

$$\hat{a}_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} x_i^j \tilde{y}^j, \quad i = 0, 1, \ldots, n, \tag{5.42}$$

$$\hat{a}_{i \ldots \mu} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} x_i^j \ldots x_\mu^j \tilde{y}^j, \quad i, \mu = 1, 2, \ldots, n, \tag{5.43}$$

$$s_i^2 = \frac{s^2}{N}, \quad i = 0, 1, \ldots, k. \tag{5.44}$$

Здесь $(k+1)$ — общее число коэффициентов модели (5.37). Из (5.44) следует, что все коэффициенты оцениваются с одинаковой точностью. Отметим, что планы типа 2^n и 2^{n-p} для моделей, содержащих взаимодействия, не являются ротатабельными (см. пример 5.1).

---

[1] Оценка s_e^2 дисперсии результатов единичного эксперимента связана с оценкой s^2 дисперсии ошибок наблюдений соотношением $s_e^2 = \nu s^2$. — *Прим. ред.*

Как и в случае линейных моделей, планы 2^{n-p} для моделей вида (5.37) являются A-, D- и G-оптимальными, если областью планирования эксперимента является гиперкуб с координатами вершин, принимающими значения ± 1 (см. утверждение 6.2 и пример 6.5). Эти свойства, разумеется, имеют место только в тех случаях, когда возможно получение несмешанных оценок всех коэффициентов модели.

Пример 5.6

При предварительных исследованиях было установлено, что на удельную теплопроводность возгона, получаемого при хлорировании титановых шлаков, влияют следующие факторы:
x_1 — плотность засыпки;
x_2 — содержание хлора в возгоне;
x_3 — отношение концентраций SiO_2 и TiO_2 в возгоне;
x_4 — температура.

Требуется экспериментальным путем найти интерполяционную формулу, с помощью которой можно было бы описать зависимость удельной теплопроводности от перечисленных четырех факторов и их парных взаимодействий:

$$y(a, x) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_4 + a_{13}x_1x_3 + a_{23}x_2x_3 + a_{34}x_3x_4.$$

В табл. 5.5 представлены интервалы варьирования факторов. Анализ механизма реакции показывает, что на теплопроводность возгона могут оказывать влияние следующие два взаимодействия: x_2x_3 и x_3x_4 (механизм проводимости).

Таблица 5.5

Факторы (пример 5.6)

	x_1	x_2	x_3	x_4
Основной уровень ($x_i = 0$)	0,87	40,0	1,00	250
Интервал варьирования	0,15	5,0	0,25	50
Верхний уровень ($x_i = +1$)	1,02	45,0	1,25	300
Нижний уровень ($x_i = -1$)	0,72	35,0	0,75	200

Базируясь на этих соображениях для построения модели был выбран дробный факторный план типа 2^{4-1} с генератором $x_4 = x_1x_2$. Контрастом для этого плана является соотношение $I =$

$= x_1 x_2 x_4$. Оценки смешаны при этом следующим образом:

$$\hat{a}_1 \to \bar{a}_1 + \bar{a}_{24}, \quad \hat{a}_{34} \to \bar{a}_{34},$$
$$\hat{a}_2 \to \bar{a}_2 + \bar{a}_{14}, \quad \hat{a}_{13} \to \bar{a}_{13},$$
$$\hat{a}_3 \to \bar{a}_3, \quad \hat{a}_{23} \to \bar{a}_{23}.$$
$$\hat{a}_4 \to \bar{a}_4 + \bar{a}_{12},$$

Из приведенных соотношений ясно, что оценки интересующих нас взаимодействий смешаны с другими эффектами.

Таблица 5.6

План и результаты эксперимента (пример 5.6)

Номер опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_{13}	x_{23}	x_{34}	Целевая величина $\bar{y}$ (среднее по двум наблюдениям)
1	+	+	+	+	+	+	+	+	296
2	+	+	—	+	—	+	—	—	122
3	+	—	—	+	+	—	—	+	239
4	+	—	+	+	—	—	+	—	586
5	+	+	+	—	+	—	—	—	232
6	+	+	—	—	—	—	+	+	292
7	+	—	—	—	+	+	+	—	539
8	+	—	+	—	—	+	—	+	383
$\hat{a}_i$	336,12	—100,62	38,12	—25,38	—9,62	—1,12	92,12	—33,62	

Ошибки наблюдений: $s = 20{,}00$; $s_i = 7{,}10$, $\varphi_e = 8$.

План эксперимента и его результаты представлены в табл. 5.6. В нижней части таблицы приведены рассчитанные оценки коэффициентов. Очевидно, что взаимодействия $x_2 x_3$ и $x_3 x_4$ действительно оказывают существенное влияние на целевую величину. Интерполяционная формула имеет вид

$$\hat{y}(x) = 336{,}12 - 100{,}62 x_1 + 38{,}12 x_2 - 25{,}38 x_3 - 9{,}62 x_4 - $$
$$- 1{,}12 x_1 x_3 + 92{,}12 x_2 x_3 - 33{,}62 x_3 x_4.$$

Значимость коэффициентов

Пользуясь (3.102), проверим значимость коэффициентов, принимая $\alpha = 0{,}05$. Значение $t_{\text{кр}}$ при восьми степенях свободы и $\alpha = 0{,}05$ составляет $t_{\text{кр}} = 2{,}31$ (см. табл. 15.3). При этом

$$t_{\text{кр}} s_i = 2{,}31 \times 7{,}10 = 16{,}4.$$

Оценки $\hat{a}_4$ и $\hat{a}_{13}$ оказываются незначимыми, и, следовательно, соответствующие функции необходимо из модели исключить. В результате получаем

$$\hat{y}(x) = 336{,}12 - 100{,}62x_1 + 38{,}12x_2 - 25{,}38x_3 + \\ + 92{,}12x_2x_3 - 33{,}62x_3x_4.$$

Проверка значимости квадратичных эффектов

Проверим гипотезу H: $E\{\tilde{y}^0 - \hat{a}_0\} = 0$ для примера 5.6. Имеем

$$\begin{aligned} &\nu = 2, \\ &s_e^2 = \nu s^2 = 2 \times 400 = 800, \\ &n_0 = 2, \\ &N = 8, \\ &\varphi_e = 8, \quad \hat{a}_0 = 336{,}12. \end{aligned}$$

Согласно выражению (5.38), вычисляем $\tilde{y}^0$:

$$\tilde{y}^0 = 350;$$

$t_{кр}$ находим из табл. 15.3 при $\alpha = 0{,}05$ и $\varphi = 8$:

$$t_{кр} = 2{,}31.$$

Проверяем условие (5.39):

$$|\tilde{y}^0 - \hat{a}_0| = |350 - 336{,}12| = 13{,}88 < t_{кр} s \sqrt{\frac{n_0 + \nu N}{n_0 N}} = \\ = 2{,}31 \sqrt{\frac{400\,(2+16)}{2 \times 8}} \approx 49.$$

Отсюда следует, что разность $|\tilde{y}^0 - \hat{a}_0|$ незначимо отличается от нуля и квадратичные члены в модель можно не вводить.

5.6. Планы для квадратичных моделей

5.6.1. Вводные замечания

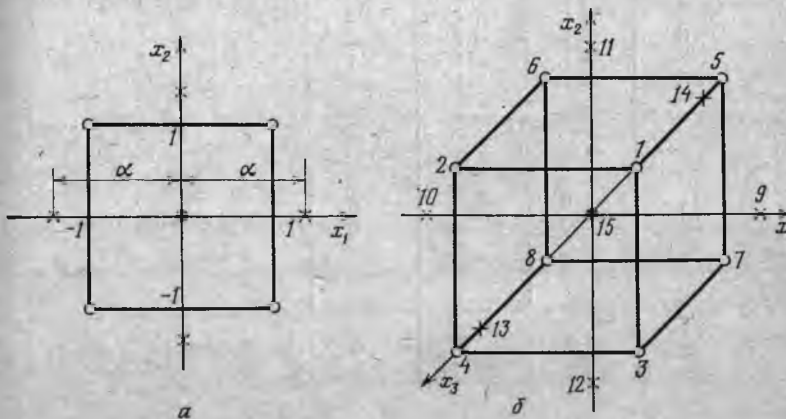
В этом разделе рассматриваются планы для моделей, имеющих вид

$$y(a, x) = a_0 + a_1x_1 + \ldots + a_nx_n + a_{n+1}x_1^2 + \ldots + a_{2n}x_n^2 + \\ + a_{2n+1}x_1x_2 + \ldots + a_kx_{n-1}x_n. \qquad (5.45)$$

Общее число неизвестных коэффициентов в модели (5.45) равно

$$(k+1) = \binom{n+2}{2} = \frac{(n+2)(n+1)}{2}. \qquad (5.46)$$

Для оценки коэффициентов модели вида (5.45), содержащей функции независимых переменных типа x_i^2, независимая переменная в плане должна принимать по крайней мере три различных значения. Композиционный план для квадратичных моделей может быть получен путем добавления некоторого количества специальных точек к «ядру», образованному планом для линейной модели. В качестве «ядра» могут быть использованы планы типа 2^n или 2^{n-p}. Если к ядру добавить точку в центре плана с координатами 0, ..., 0 и $2n$ так называемых «звездных»



Фиг. 5.3. Композиционные планы второго порядка для $n=2$ (*а*) и $n=3$ (*б*).

точек с координатами ($\pm\alpha$, 0, ..., 0), ..., (0, ..., 0, $\pm\alpha$), то получается центральный композиционный план, предложенный Боксом [14]. На фиг. 5.3 показаны точки композиционных планов для $n=2$ (*а*) и $n=3$ (*б*). Здесь в качестве ядра использованы точки полного факторного эксперимента (обозначены кружками). Крестиками обозначены звездные точки, расположенные на координатных осях на расстоянии α от центра плана.

Матрица планирования X для плана *б* (фиг. 5.3) приведена в табл. 5.7. Номера точек на фиг. 5.3 соответствуют номерам, указанным в табл. 5.7. Выбором величины плеча α композиционного плана и числа n_0 точек в центре могут быть обеспечены различные свойства получаемого плана. Ниже мы опишем ортогональные и ротатабельные центральные композиционные планы.

5.6.2. Ортогональные центральные композиционные планы

При построении этих планов величина α (плечо звездных точек) выбирается так, чтобы обеспечить ортогональность получаемого плана. Число точек в центре плана обычно принимается

Таблица 5.7

Композиционный план второго порядка для $n = 3$

j	x_1	x_2	x_3	
1	+1	+1	+1	Полный факторный план (2^n)
2	−1	+1	+1	
3	+1	−1	+1	
4	−1	−1	+1	
5	+1	+1	−1	
6	−1	+1	−1	
7	+1	−1	−1	
8	−1	−1	−1	
9	$+\alpha$	0	0	Звездные точки ($2n$)
10	$-\alpha$	0	0	
11	0	$+\alpha$	0	
12	0	$-\alpha$	0	
13	0	0	$+\alpha$	
14	0	0	$-\alpha$	
15	0	0	0	Центр плана (n_0 точек)

равным единице. Для обеспечения ортогональности оказывается необходимым преобразовать модель (5.45) следующим образом:

$$y(a,\ x) = b_0 + a_1 x_1 + \ldots + a_n x_n + a_{n+1}(x_1^2 - \beta) + \\ + \ldots + a_{2n}(x_n^2 - \beta) + a_{2n+1} x_1 x_2 + \ldots + a_k x_{n-1} x_n. \tag{5.47}$$

Здесь

$$\beta = \frac{\sum_{j=1}^{N} (x_i^j)^2}{N} = \frac{2^{n-p} + \alpha^2}{N}. \tag{5.48}$$

В выражении (5.48) N — общее число точек в плане, 2^{n-p} — число точек ядра композиционного плана. От модели (5.47) легко перейти к модели (5.45), определяя a_0 в (5.45) следующим образом:

$$a_0 = b_0 - \beta \sum_{i=1}^{n} a_{n+i}. \tag{5.49}$$

В общем случае матрица F функций независимых переменных для ортогонального центрального композиционного плана имеет вид, показанный в табл. 5.8. Через x_0 в табл. 5.8 обозначена фиктивная переменная при коэффициенте a_0. Общее число

Таблица 5.8

Матрица F для ортогонального центрального композиционного плана второго порядка

	Номер опыта j	Матрица F										
		x_0	матрица X плана				$x_1^2-\beta$	...	x_n^2-p	x_1x_2	...	$x_{n-1}x_n$
			x_1	x_2	...	x_n						
Ядро плана	1	1	+1	+1	...	+1	1—β	...	1—β	+1	...	1
	2	1	—1	+1		+1	1—β		1—β	—1		1
	3	1	+1	—1		+1	1—β		1—β	—1		⋮
	4	1	—1	—1		+1	⋮		⋮	+1		⋮
	5	1	+1	+1		+1	⋮		⋮			⋮
	⋮	⋮	⋮	⋮		⋮	⋮		⋮			⋮
	2^{n-p}	1	⋮	⋮	...	⋮	1—β	...	1—β	...	...	...
Звездные точки	$2^{n-p}+1$	1	+α	0	...	0	α²—β	...	—β	0	...	0
	$2^{n-p}+2$	1	—α	0		0	α²—β		—β	0		0
	⋮	1	0	+α		0	—β		⋮	⋮		
	⋮	1	0	—α		0	—β		⋮	⋮		
	⋮	⋮	⋮	⋮		⋮	⋮		⋮	⋮		
		1	0	0		+α	—β		α²—β	0		0
	$2^{n-p}+2n$	1	0	0	...	—α	—β	...	α²—β	0	...	0
Центр плана	$N=2^{n-p}+2n+1$	1	0	0	...	0	—β	...	—β	0	...	0

точек плана

$$N = 2^{n-p} + 2n + 1.$$

Рассмотрим вопрос о том, в каких случаях в качестве ядра плана можно использовать дробные факторные планы.

Предположим, что модель имеет вид (5.47) (т. е. модель представлена полным квадратичным полиномом) и требуется получить раздельные (несмешанные) оценки для всех коэффициентов. Тогда необходимо потребовать, чтобы в матрице F размера $N \times \binom{n+2}{2}$ не было одинаковых столбцов. Из табл. 5.8 ясно, что одинаковые столбцы в матрице могут быть только у парных произведений факторов. Таким образом, в качестве ядра в композиционном плане могут быть использованы только такие дробные планы, которые позволяют получить несмешанные друг с другом оценки коэффициентов при парных произведениях факторов. Поскольку выбор величины α не влияет на ортогональность столбцов матрицы F, соответствующих факторам x_i и парным произведениям $x_i x_j$, то для ортогональности композиционного плана мы должны еще дополнительно потребовать, чтобы парные произведения в ядре плана не были смешаны с линейными членами. Нетрудно убедиться в том, что для $n \leqslant 4$ дробных планов, удовлетворяющих указанным требованиям, построить нельзя. Действительно, выбирая, например, при $n=4$ дробный план с генератором $x_4 = x_1 x_2 x_3$, получаем матрицу композиционного плана, в которой столбцы, соответствующие функциям $x_1 x_4$ и $x_2 x_3$, $x_2 x_4$ и $x_1 x_3$, $x_3 x_4$ и $x_1 x_2$, полностью совпадают. А это означает (см. разд. 5.5.3), что коэффициенты при этих функциях нельзя оценить раздельно. Если же при $n=4$ мы используем дробный план с генератором $x_4 = x_1 x_2$, то в ядре окажутся смешанными оценки коэффициентов при линейных членах и парных произведениях факторов, и выбором величины α композиционный план не удается сделать ортогональным. Таким образом, при $n \leqslant 4$ в качестве ядра ортогонального центрального композиционного плана может быть использован только полный факторный план. Легко убедиться в том, что для $n=5$ в качестве ядра можно использовать дробный план 2^{5-1} с генератором $x_5 = x_1 x_2 x_3 x_4$; для $n=6$ или 7 также возможно применение только планов 2^{n-1} (например, с таким генератором $x_6 = x_7 = x_1 x_2 x_3 x_4 x_5$). Только для $n=8$ возможно в качестве ядра применить план 2^{8-2}, например, с генераторами $x_7 = x_1 x_2 x_3 x_4$ и $x_8 = x_1 x_2 x_5 x_6$.

Перейдем теперь к выбору плеча ортогональных планов. Из табл. 5.8 легко видеть, что скалярные произведения любых двух столбцов матрицы F равны нулю при любом выборе α. Исключение составляют столбцы при квадратичных функциях вида

Таблица 5.9

Параметры ортогональных центральных композиционных планов

Размерность	Ядро плана	N	α	β	Элементы матрицы C			
					c_0	c_1	c_2	c_3
2	2^2	9	1	0,6667	0,1111	0,1667	0,5	0,25
3	2^3	15	1,215	0,73	0,0667	0,0913	0,2298	0,1250
4	2^4	25	1,414	0,8	0,04	0,05	0,125	0,0625
5	2^{5-1}	27	1,547	0,77	0,03704	0,0481	0,0871	0,0625
6	2^{6-1}	45	1,722	0,843	0,0222	0,0264	0,0564	0,03125
7	2^{7-1}	79	1,885	0,9	0,0127	0,0141	0,0389	0,0156
8	2^{8-2}	81	2,001	0,8889	0,0123	0,0139	0,0312	0,0156

$(x_i^2-\beta)$: их попарные скалярные произведения в общем случае не равны нулю, но зато зависят от α. Приравнивая нулю сумму произведений элементов двух столбцов при функциях вида $(x_i^2-\beta)$, получаем условие для выбора значения α, обеспечивающего ортогональность плана:

$$2^{n-p}\left(1-\frac{2^{n-p}+2\alpha^2}{N}\right)^2-4\,\frac{2^{n-p}+2\alpha^2}{N}\left(\alpha^2-\frac{2^{n-p}+2\alpha^2}{N}\right)+ \\ +(2n-3)\left(\frac{2^{n-p}+2\alpha^2}{N}\right)^2=0. \qquad (5.50)$$

Из (5.50) следует

$$\alpha=\sqrt{2^{\frac{n-p}{2}-1}\quad\left(\sqrt{N}-2^{\frac{n-p}{2}}\right)}. \qquad (5.51)$$

Значения α для различных n приведены в табл. 5.9.

Информационная матрица плана имеет вид

$$M=\begin{bmatrix} m_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m_1 I_n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_2 I_n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_3 I_{\binom{n}{2}} \end{bmatrix}. \qquad (5.52)$$

Здесь

$$m_0=N=2^{n-p}+2n+1, \qquad (5.53)$$

$$m_1=2^{n-p}+2\alpha^2, \qquad (5.54)$$

$$m_2=2^{n-p}(1-\beta)^2+2(\alpha^2-\beta)^2+(2n-1)\beta^2, \qquad (5.55)$$

$$m_3=2^{n-p}, \qquad (5.56)$$

I_n — единичная матрица размера n; $\binom{n}{2}$ — число сочетаний из n по 2.

Отсюда получаем следующее выражение для дисперсионной матрицы плана:

$$C=\begin{bmatrix} c_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_1 I_n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_2 I_n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_3 I_{\binom{n}{2}} \end{bmatrix}, \qquad (5.57)$$

где

$$c_i = m_i^{-1}. \qquad (5.58)$$

Значения элементов дисперсионной матрицы для различных n указаны в табл. 5.9.

Приведем здесь еще формулы для расчета оценок регрессионных коэффициентов:

$$\hat{a}_i=\begin{cases} c_1 \sum\limits_{j=1}^{N} x_i^j \tilde{y}^j, \quad i=1, \ldots, n, \\ c_2 \sum\limits_{j=1}^{N} [(x_{i-n}^j)^2-\beta]\tilde{y}^j, \quad i=n+1, \ldots, 2n, \\ c_3 \sum\limits_{j=1}^{N} x_\mu^j x_\lambda^j \tilde{y}^j, \ \mu, \lambda=1, 2, \ldots, n, \mu \neq \lambda, i=2n+1, \ldots, k. \end{cases} \qquad (5.59)$$

Оценка $\hat{b}_0$ рассчитывается по формуле

$$\hat{b}_0=\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \tilde{y}^j. \qquad (5.60)$$

Для $\hat{a}_0$ в соответствии с (5.49) имеем

$$\hat{a}_0=\hat{b}_0-\beta\sum_{i=1}^{n} \hat{a}_{n+i}. \qquad (5.61)$$

Оценки дисперсий коэффициентов определяются по формулам

$$s_i^2=\begin{cases} s^2 c_0, \quad i=0, \\ s^2 c_1, \quad i=1, \ldots, n, \\ s^2 c_2, \quad i=n+1, \ldots, 2n, \\ s^2 c_3, \quad i=2n+1, \ldots, k. \end{cases} \qquad (5.62)$$

Для $\hat{a}_0$ имеем

$$s_{\hat{a}_0}^2=s^2(c_0+n\beta^2 c_2). \qquad (5.63)$$

В (5.62) и (5.63) s^2 — оценка дисперсии ошибок наблюдений. С целью получения оценки дисперсии наблюдений опыты во всех точках плана могут проводиться по ν раз (см. разд. 3.3.3 и 3.3.5).

Таблица 5.10

Статистический анализ для ортогональных центральных композиционных планов

n	ν	$1-P$	φ_1	φ_2	h_1	h_2	h_3	$F_{кр}$
2	1	0,1	3	—	0,960	1,663	1,177	
		0,05	3	—	1,299	2,250	1,591	
		0,01	3	—	2,384	4,13	2,921	
	2	0,1	3	9	0,748	1,296	0,917	
		0,05	3	9	0,923	1,599	1,131	3,86
		0,01	3	9	1,327	2,298	1,625	6,99
	3	0,1	3	18	0,708	1,225	0,867	
		0,05	3	18	0,858	1,486	1,051	3,16
		0,01	3	18	1,175	2,035	1,439	5,09
3	1	0,1	5	—	0,609	0,966	0,712	
		0,05	5	—	0,777	1,232	0,909	
		0,01	5	—	1,218	1,933	1,426	
	2	0,1	5	15	0,529	0,840	0,619	
		0,05	5	15	0,644	1,022	0,753	2,90
		0,01	5	15	0,890	1,413	1,042	4,56
	3	0,1	5	30	0,513	0,814	0,600	
		0,05	5	30	0,617	0,979	0,739	2,53
		0,01	5	30	0,831	1,318	0,972	3,70
4	1	0,1	10	—	0,405	0,641	0,453	
		0,05	10	—	0,498	0,788	0,557	
		0,01	10	—	0,709	1,120	0,792	
	2	0,1	10	25	0,382	0,604	0,427	
		0,05	10	25	0,460	0,728	0,515	2,24
		0,01	10	25	0,623	0,985	0,697	3,13
	3	0,1	10	50	0,375	0,593	0,419	
		0,05	10	50	0,449	0,710	0,502	2,03
		0,01	10	50	0,599	0,948	0,673	2,70
5	1	0,1	6	—	0,426	0,573	0,486	
		0,05	6	—	0,537	0,722	0,612	
		0,01	6	—	0,813	1,092	0,928	
	2	0,1	6	27	0,373	0,502	0,426	
		0,05	6	27	0,450	0,606	0,513	2,46
		0,01	6	27	0,608	0,817	0,693	3,56
	3	0,1	6	54	0,367	0,494	0,419	
		0,05	6	54	0,440	0,592	0,501	2,27
		0,01	6	54	0,586	0,770	0,668	3,15
6	1	0,1	17	—	0,283	0,415	0,308	
		0,05	17	—	0,343	0,503	0,373	
		0,01	17	—	0,417	0,691	0,512	

Таблица 5.10 (продолжение)

n	ν	$1-P$	φ_1	φ_2	h_1	h_2	h_3	$F_{кр}$
	2	0,1	17	45	0,273	0,400	0,297	
		0,05	17	45	0,327	0,480	0,356	1,86
		0,01	17	45	0,437	0,642	0,476	2,40
	3	0,1	17	90	0,270	0,396	0,294	
		0,05	17	90	0,323	0,473	0,351	1,74
		0,01	17	90	0,428	0,628	0,465	2,18
7	1	0,1	43	—	0,200	0,332	0,210	
		0,05	43	—	0,239	0,398	0,252	
		0,01	43	—	0,320	0,532	0,337	
	2	0,1	43	79	0,198	0,328	0,208	
		0,05	43	79	0,236	0,393	0,249	1,53
		0,01	43	79	0,315	0,524	0,330	1,83
	3	0,1	43	158	0,196	0,326	0,207	
		0,05	43	158	0,235	0,390	0,247	1,46
		0,01	43	158	0,310	0,514	0,326	1,70
8	1	0,1	36	—	0,199	0,298	0,211	
		0,05	36	—	0,239	0,358	0,254	
		0,01	36	—	0,321	0,481	0,340	
	2	0,1	36	81	0,196	0,294	0,208	
		0,05	36	81	0,235	0,352	0,249	1,56
		0,01	36	81	0,311	0,466	0,330	1,89
	3	0,1	36	162	0,195	0,292	0,207	
		0,05	36	162	0,233	0,349	0,247	1,49
		0,01	36	162	0,307	0,461	0,326	1,75

При проведении статистического анализа результатов с целью проверки адекватности модели и значимости коэффициентов (см. разд. 3.3.7 и 3.3.8) может быть использована табл. 5.10. Здесь приняты следующие обозначения:

n — размерность факторного пространства;

n — число параллельных опытов в каждой точке ортогонального центрального композиционного плана;

$1-P$ — используемый уровень значимости проверки гипотез [1] (адекватность модели, значимость коэффициентов);

φ_1 — число степеней свободы для остаточной дисперсии [см. формулы (3.90) и (3.91)];

[1] В табл. 15.2 и 15.3, а также в других разделах книги уровень значимости обозначается через α. Это обозначение использовано и в примерах 5.7 и 5.8. Очевидно, что уровень значимости α не имеет никакого отношения к величине α плеча звездных точек.— *Прим. ред.*

φ_2 — число степеней свободы для оценки дисперсии наблюдений [см. формулы (3.94) и (3.95)];

h_1, h_2, h_3 — величины $t_{кр}\sqrt{c_1}$, $t_{кр}\sqrt{c_2}$ и $t_{кр}\sqrt{c_3}$ соответственно;

$t_{кр}$ — критическое значение распределения Стьюдента при заданных уровне значимости и числе степеней свободы φ_1 (при $\nu=1$) или φ_2 (при $\nu=2$, 3).

Величины h_1, ..., h_3 используются при проверке значимости коэффициентов. При этом вместо (3.102) имеем следующее условие значимости:

$$|\hat{a}_i| > h_i s, \tag{5.64}$$

где s^2 — оценка дисперсии ошибок наблюдений, определяемая по (3.91) при $\nu=1$ и по (3.95) при $\nu>1$.

В последней колонке табл. 5.10 приведены значения критерия Фишера для проверки адекватности модели, согласно разд. 3.3.7.

Заметим, что при применении ортогональных планов все коэффициенты оцениваются независимо. Это значит, что изменение оценки любого коэффициента (например, исключение соответствующего члена из уравнения) не приводит к изменению других оценок и их дисперсий.

Пример 5.7

Изучался процесс окисления фосфитов гипохлоритом натрия [13]. В качестве выходной переменной y рассматривался процент окисления фосфитов. Варьируемыми переменными являлись pH анализируемого раствора (x_1), температура (x_2), продолжительность окисления (x_3) и избыток раствора гипохлорита натрия сверх необходимого по стехиометрии. Методом крутого восхождения (разд. 12) были найдены значения факторов, обеспечивающие почти полное окисление фосфитов. Затем в окрестности

Таблица 5.11

Факторы и уровни их варьирования (пример 5.7)

Факторы	Кодовое обозначение	$x_i=-1,414$ (звездная точка)	$x_i=-1$ (нижний уровень)	$x_i=0$ (основной уровень)	$x_i=1$ (верхний уровень)	$x_i=1,414$ (звездная точка)
pH раствора	x_1	6,29	6,5	7,0	7,5	7,71
Температура, °С	x_2	17,9	20	25	30	32,1
Продолжительность окисления, мин	x_3	1,17	2	4	6	6,83
Избыток гипохлорита натрия, %	x_4	48,6	72,4	129,9	187,4	211,2

Таблица 5.12

План эксперимента, матрица F и результаты наблюдений (пример 5.7)

	Номер опыта	Матрица F															$\bar{y}$
		x_0	Матрица X плана				$x_1^2-\beta$	$x_2^2-\beta$	$x_3^2-\beta$	$x_4^2-\beta$	x_1x_2	x_1x_3	x_1x_4	x_2x_3	x_2x_4	x_3x_4	
			x_1	x_2	x_3	x_4											
Ядро плана (план 2^n)	1	+1	−1	−1	−1	−1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	+1	+1	+1	+1	+1	+1	81,42
	2	+1	+1	−1	−1	−1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	−1	−1	−1	+1	+1	+1	61,31
	3	+1	−1	+1	−1	−1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	−1	+1	+1	−1	−1	+1	89,21
	4	+1	+1	+1	−1	−1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	+1	−1	−1	−1	−1	+1	75,31
	5	+1	−1	−1	+1	−1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	+1	−1	+1	−1	+1	−1	98,35
	6	+1	+1	−1	+1	−1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	−1	+1	−1	−1	+1	−1	86,09
	7	+1	−1	+1	+1	−1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	−1	−1	+1	+1	−1	−1	99,83
	8	+1	+1	+1	+1	−1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	+1	+1	−1	+1	−1	−1	94,65
	9	+1	−1	−1	−1	+1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	+1	+1	−1	+1	−1	−1	98,99
	10	+1	+1	−1	−1	+1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	+1	+1	−1	+1	−1	−1	93,71
	11	+1	−1	+1	−1	+1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	−1	+1	−1	−1	+1	−1	100,15
	12	+1	+1	+1	−1	+1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	+1	−1	+1	−1	+1	−1	99,07
	13	+1	−1	−1	+1	+1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	+1	−1	−1	−1	−1	+1	100,88
	14	+1	+1	−1	+1	+1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	−1	+1	+1	−1	−1	+1	100,31
	15	+1	−1	+1	+1	+1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	−1	−1	−1	+1	+1	+1	100,67
	16	+1	+1	+1	+1	+1	+0,2	+0,2	+0,2	+0,2	+1	+1	+1	+1	+1	+1	100,10
Звездные точки	17	+1	−1,414	0	0	0	+1,2	−0,8	−0,8	−0,8	0	0	0	0	0	0	99,90
	18	+1	+1,414	0	0	0	+1,2	−0,8	−0,8	−0,8	0	0	0	0	0	0	87,80
	19	+1	0	−1,414	0	0	−0,8	+1,2	−0,8	−0,8	0	0	0	0	0	0	98,98
	20	+1	0	+1,414	0	0	−0,8	+1,2	−0,8	−0,8	0	0	0	0	0	0	100,25
	21	+1	0	0	−1,414	0	−0,8	−0,8	+1,2	−0,8	0	0	0	0	0	0	89,69
	22	+1	0	0	+1,414	0	−0,8	−0,8	+1,2	−0,8	0	0	0	0	0	0	100,20
	23	+1	0	0	0	−1,414	−0,8	−0,8	−0,8	+1,2	0	0	0	0	0	0	87,48
	24	+1	0	0	0	+1,414	−0,8	−0,8	−0,8	+1,2	0	0	0	0	0	0	100,83
Центр плана	25	+1	0	0	0	0	−0,8	−0,8	−0,8	−0,8	0	0	0	0	0	0	99,94

этой точки (основной уровень факторов) был спланирован и реализован эксперимент с целью получения математической модели процесса в виде полинома второго порядка. Использовался ортогональный центральный композиционный план второго порядка. Уровни варьирования факторов указаны в табл. 5.11. Матрица плана приведена в табл. 5.12. В табл. 5.12, кроме того, представлены результаты опытов и приведены элементы матрицы F значений функций независимых переменных. Значения $\alpha = 1,414$ и $\beta = 0,8$ получены из табл. 5,9 при $n = 4$. В соответствии с табл. 5.9 для элементов дисперсионной матрицы плана имеем

$$c_0 = 0,04,$$
$$c_1 = 0,05,$$
$$c_2 = 0,125,$$
$$c_3 = 0,0625.$$

Пользуясь выражениями (5.59) и (5.61), получаем модель процесса в следующем виде:

$$\hat{y}(x) = 99,18 - 3,80x_1 + 1,98x_2 + 4,83x_3 + 6,30x_4 - 2,58x_1^2 + 0,30x_2^2 - 2,03x_3^2 - 2,43x_4^2 + 1,09x_1x_2 + 1,36x_1x_3 + 2,75x_1x_4 - 1,17x_2x_3 - 1,61x_2x_4 - 3,85x_3x_4. \quad (5.65)$$

В (5.65) через x_i обозначены кодированные значения переменных.

Проверим адекватность модели. При этом воспользуемся оценкой дисперсии ошибок наблюдений $s^2 = 1,19$ с числом степеней свободы $\varphi_2 = 3$, полученной путем параллельных наблюдений, проведенных в некоторой точке вне рамок данного плана. Остаточная сумма квадратов для полученной модели составляет $S_R = 52,2$ при числе степеней свободы $\varphi_1 = 10$. Эта величина в данном случае характеризует степень неадекватности модели. Поскольку известна оценка s^2 дисперсии ошибок наблюдений, не связанная с предположением об адекватности модели, а в случае адекватности $E\{s_R^2\} = E\{S_R/\varphi_1\} = E\{s^2\} = \sigma^2$, то проверку адекватности в данном случае можно осуществить путем проверки гипотезы о равенстве дисперсий, соответствующих оценкам s_R^2 с числом степеней свободы $\varphi_1 = 10$ и s^2 с числом степеней свободы $\varphi_2 = 3$. Согласно разд. 2.4, находим

$$F = \frac{s_R^2}{s^2} = \frac{5,22}{1,19} = 4,38. \quad (5.66)$$

Приняв уровень значимости $1 - P = \alpha = 0,05$, найдем с помощью табл. 15.4 при $\varphi_1 = 10$ и $\varphi_2 = 3$ $F_{кр} = 8,79$. Так как

$$F = 4,38 < F_{кр} = 8,79, \quad (5.67)$$

то гипотеза о равенстве дисперсии принимается и модель считается адекватной.

Проверим теперь значимость коэффициентов. При этом используем в качестве оценки s^2 дисперсии ошибок наблюдений остаточную дисперсию $s^2 = s_R^2 = 5{,}22$. Из табл. 5.10 при $n = 4$, $\nu = 1$ и уровне значимости $1 - P = \alpha = 0{,}05$ находим

$$h_1 = 0{,}498,$$
$$h_2 = 0{,}788,$$
$$h_3 = 0{,}557.$$

Сравнение произведения sh_1 с абсолютными значениями оценок коэффициентов при линейных членах, sh_2 — с оценками коэффициентов при квадратах факторов и sh_3 — с оценками при парных взаимодействиях, показывает, что условие (5.64) не выполняется для коэффициентов при следующих функциях: x_2^2, x_1x_2, x_2x_3. Исключая эти функции из уравнения (5.65), получим

$$\hat{y}(x) = 99{,}42 - 3{,}80x_1 + 1{,}98x_2 + 4{,}83x_3 + 6{,}30x_4 - 2{,}58x_1^2 - 2{,}03x_3^2 - \\ - 2{,}43x_4^2 + 1{,}36x_1x_3 + 2{,}75x_1x_4 - 1{,}61x_2x_4 - 3{,}85x_3x_4. \quad (5.68)$$

Обратим внимание на то, что все оставшиеся в (5.68) коэффициенты (кроме $\hat{a}_0$) совпадают с их значениями в уравнении (5.65). Этот факт — результат ортогональности плана. Оценка $\hat{a}_0$ связана в соответствии с (5.61) с оценками коэффициентов при квадратах переменных, и поэтому исключение из уравнения функции x_2^2 привело к изменению $\hat{a}_0$.

5.6.3. Ротатабельные центральные композиционные планы

В этом случае в качестве условия для выбора величины плеча звездных точек α используется требование ротатабельности плана.

Полагаем, что модель имеет вид (5.45). Ротатабельный центральный композиционный план [3, 4] строится аналогично ортогональному плану. Так же как и в случае ортогонального плана, в качестве ядра плана может быть использован полный (2^n) или дробный (2^{n-p}) факторный план. Величина плеча α для ротатабельного плана второго порядка вычисляется по формуле

$$\alpha = 2^{\frac{n-p}{4}}. \quad (5.69)$$

Число опытов n_0 в центре плана выбирается из следующих соображений. Выдвигается требование, чтобы информация о значении выходной переменной оставалась неизменной (или почти неизменной) для точек внутри сферы единичного радиуса с центром в центре плана. Иными словами, требуется, чтобы информационный профиль ротатабельного плана мало изменялся при значениях радиуса сферы от 0 до 1. Планы, удовлетворяющие этому условию, называются ротатабельными униформ-планами [3, 8].

Таблица 5.13

Параметры ротатабельных центральных композиционных планов

Размерность	Ядро плана	Число звездных точек	n_0	N	α
2	2^2	4	5	13	1,414
3	2^3	6	6	20	1,682
4	2^4	8	7	31	2,000
5	2^5	10	10	52	2,378
	2^{5-1}	10	6	32	2,000
6	2^6	12	15	91	2,828
	2^{6-1}	12	9	53	2,378
7	2^7	14	21	163	3,333
	2^{7-1}	14	14	92	2,828

Таблица 5.14

Ротатабельный центральный композиционный план и матрица F для $n=3$

	Матрица F									
	x_0	матрица X			x_1^2	x_2^2	x_3^2	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3
		x_1	x_2	x_3						
Ядро плана	1	−1	−1	−1	1	1	1	1	+1	+1
	1	+1	−1	−1	1	1	1	−1	−1	+1
	1	−1	+1	−1	1	1	1	−1	+1	−1
	1	+1	+1	−1	1	1	1	1	−1	−1
	1	−1	−1	+1	1	1	1	1	−1	−1
	1	+1	−1	+1	1	1	1	−1	+1	−1
	1	−1	+1	+1	1	1	1	−1	−1	+1
	1	+1	+1	+1	1	1	1	1	+1	+1
Звездные точки	1	+1,682	0	0	2,828	0	0	0	0	0
	1	−1,682	0	0	2,828	0	0	0	0	0
	1	0	+1,682	0	0	2,828	0	0	0	0
	1	0	−1,682	0	0	2,828	0	0	0	0
	1	0	0	+1,682	0	0	2,828	0	0	0
	1	0	0	−1,682	0	0	2,828	0	0	0
Центр плана	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0