ПЛАНУВАННЯ ІМІТАЦІЙНИХ ЕКСПЕРИМЕНТІВ ПІД ЧАС ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЇ СИСТЕМ

Під час вивчення цієї теми слід перш за все з’ясувати, що при експериментальному дослідженні систем ставиться задача вивчити вплив факторів системи на вихідну величину з допомогою полінома, який апроксимує функцію відгуку, адекватно описуючи поводження системи в заданій області факторного простору. Поліноміальна залежність дає змогу виявити вплив на функцію відгуку не лише кожного з факторів, а також і будь-якої їх комбінації за умови, що поліном містить відповідний цій комбінації член.

Коефіцієнти при незалежних змінних в апроксимуючому поліномі відбивають рівень впливу факторів. Якщо коефіцієнт додатний, то із збільшенням фактора зростає вихідний параметр системи. При від’ємному коефіцієнті зростання відповідного фактора спричиняється до зменшення величини y. Коефіцієнти при лінійних членах відповідають вкладу цього фактора у величину параметра системи y при переході фактора з нульового рівня на верхній чи нижній. Головним ефектом фактора називають його внесок при переході від нижнього рівня до верхнього. Головний ефект у кодованій системі вимірювання факторів дорівнює подвоєному коефіцієнту при відповідній змінній $2b_i$.

Під час планування експериментів для дослідження систем спочатку перевіряють, чи можна лінійно апроксимувати функцію відгуку. Якщо поліном першого ступеня є достатнім наближенням функції відгуку на заданих інтервалах змінювання факторів, то це означає, що в поліномах вищого порядку коефіцієнти при нелінійних членах малі порівняно з головними ефектами. У такому разі для оцінювання головних ефектів можна використовувати неповні (дробові) факторні плани. Проте для нелінійних моделей оцінювати ефекти факторів при дробових планах непросто, оскільки тут відбувається змішування ефектів. Наприклад, головний ефект може бути змішаний з однією чи кількома взаємодіями вищого порядку, що ускладнює вирізнення головного ефекту серед комбінації з іншими ефектами.

Як уже зазначалося, рівняння регресії (9.4) наближено відповідає ряду Тейлора (9.2), побудованого для функції відгуку (9.1), а коефіцієнти b_0, b_i, b_{ij}, b_{ii} є статистичними оцінками коефіцієнтів ряду Тейлора $\beta_0, \beta_i, \beta_{ij}, \beta_{ii}$. Проте ці оцінки бувають незалежними не для всіх планів, тобто не завжди оцінюють лише один відповідний коефіцієнт ряду Тейлора. Спостерігається явище змішування статистичних оцінок.

Оцінки найменше змішуються в повних факторних планах. У квадратичних рівняннях регресії оцінки головних ефектів та ефектів взаємодії факторів не змішуються:

$$b_i \approx \beta_i \qquad (i = 1,\ 2,\ \ldots,\ n),$$

$$b_{ij} \approx \beta_{ij} \qquad (i < j;\ i,\ j = 1,\ 2,\ \ldots,\ n).$$

У цьому легко переконатися з допомогою матриці планування (табл.12.1).

Таблиця 12.1

Матриця планування з ефектами взаємодії

Номер спроби	$\overline{X}_0$	$\overline{X}_1$	$\overline{X}_2$	$\overline{X}_3$	$\overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2$	$\overline{X}_1 \cdot \overline{X}_3$	$\overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3$	$\overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3$	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

Відсутність явища змішування оцінок рівнозначне тому, що вектори-стовпці матриці планування, які відповідають головним ефектам та ефектам взаємодії, відрізняються один від одного. Проте в матриці планування повного факторного плану вектори-стовпці, що відповідають фіктивному фактору X_0 і квадратичним ефектам $X_1^2,\ X_2^2,\ \ldots,\ X_n^2$, не відрізняються один від одного (табл.12.2).

Таблиця 12.2

Матриця планування двофакторного експерименту

Номер спроби	$\overline{X}_0$	$\overline{X}_1$	$\overline{X}_2$	$\overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2$	$\overline{X}_1^2$	$\overline{X}_2^2$	y
1	+1	–1	–1	+1	+1	+1	y_1
2	+1	+1	–1	–1	+1	+1	y_2
3	+1	–1	+1	–1	+1	+1	y_3
4	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_4

Тому коефіцієнт b_0 враховує вплив на функцію відгуку не лише фактора X_0, а й квадратичних членів, тобто оцінки змішуються:

$$b_0 \to \beta_0 + \sum_{i=1}^{n} \beta_{ii} \,. \tag{12.1}$$

Якщо лінійна модель системи з достатньою точністю описує функцію відгуку в заданій області факторного простору, то коефіцієнти β_{ii} малі порівняно з рештою коефіцієнтів, а тому змішування оцінок (12.1) практичного значення не має.

Отже, у задачах дослідження системи повні факторні плани дають змогу найточніше вивчити механізм впливу факторів на систему, що досліджується, і, як наслідок, сформулювати найбільш обгрунтовані висновки.

Проте в багатофакторних системах здійснення повних факторних експериментів пов’язане із значними труднощами. Насамперед йдеться про необхідність проведення великого числа спроб у точках факторного простору, які до того ж мають багаторазово дублюватися. Тому за таких умов часто застосовуються дробові факторні плани, для яких значною мірою характерне змішування статистичних оцінок.

Під час дослідження систем така обставина може виявитися вирішальною, і тому необхідно ретельно вивчити явище змішування оцінок, перш ніж робити висновки щодо характеру впливу того чи іншого фактора або їх комбінації на ендогенну величину y. Для цього в теорії планування експериментів розроблено спеціальні процедури, що дають змогу залежно від поставленої задачі вибирати відповідну дробову репліку.

Розглянемо матрицю планування повного факторного плану для трьох факторів (табл. 12.1), який складається з двох півреплік:

перша — її здобуто за допомогою повного факторного плану заміною $\overline{X}_3 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2$ — об’єднує спроби 1—4;

друга — утворено заміною $\overline{X}_3 = -\overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2$ — об’єднує спроби 5—8.

У першій півrepліці збігаються елементи векторів-стовпців, що відповідають головним ефектам та ефектам взаємодії:

$$\overline{X}_1 = \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3, \text{ звідси } b_1 \to \beta_1 + \beta_{23};$$

$$\overline{X}_2 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_3, \text{ звідси } b_2 \to \beta_2 + \beta_{13};$$

$$\overline{X}_3 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2, \text{ звідси } b_3 \to \beta_3 + \beta_{12}.$$

Характер змішування оцінок можна з’ясувати, не вдаючись до аналізу матриці планування. Для цього треба розглянути співвідношення, за допомогою якого створено піврепліку. В даному разі це $\overline{X}_3 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2$. Такі співвідношення називаються *генеруючими***.** При виборі генеруючого співвідношення виходять з апріорної інформації щодо відсутності ефекту взаємодії $\overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2$, тобто наперед роблять припущення $\beta_{12} \approx 0$. Звідси: $b_3 \approx \beta_3$.

З поняттям генеруючих співвідношень, які показують взаємодії, що замінюються новими факторами при побудові дробової репліки, пов'язане поняття визначального контрасту. Визначальний контраст — це співвідношення між факторами, яке задає елементи стовпця матриці планування, що відповідає фіктивному фактору $\overline{X}_0 = +1$.

Для створення визначального контрасту достатньо помножити генеруюче співвідношення зліва і справа на нововведений фактор та використати умову $\overline{X}_i^2 = 1$.

У даному разі

$$\overline{X}_3 \cdot \overline{X}_3 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3 .$$

Звідси маємо визначальний контраст

$$+1 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3 .$$

Щоб дістати систему змішування оцінок, достатньо ліву і праву частини визначального контрасту помножити на відповідні фактори. Наприклад, помноживши визначальний контраст $+1 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3$ на $\overline{X}_2$, дістанемо $\overline{X}_2 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_3$. Це означає рівність відповідних векторів-стовпців матриці планування, тому $b_2 \to \beta_2 + \beta_{13}$.

Для другої піврепліки за допомогою генеруючого співвідношення $\overline{X}_3 = -\overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2$ утворимо визначальний контраст

$$+1 = -\overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3 .$$

Система змішування оцінок буде така:

$$\overline{X}_1 = -\overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3, \quad b_1 \to \beta_1 - \beta_{23};$$
$$\overline{X}_2 = -\overline{X}_1 \cdot \overline{X}_3, \quad b_2 \to \beta_2 - \beta_{13};$$
$$\overline{X}_3 = -\overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2, \quad b_3 \to \beta_3 - \beta_{12}.$$

Дробові репліки факторних планів характеризуються *розв'язувальною здатністю*, порядок якої залежить від числа факторів у визначальному контрасті. Розв'язувальна здатність тим вища, чим вищий порядок взаємодій, з оцінками коефіцієнтів яких змішані оцінки головних ефектів. Розв'язувальна здатність розглянутих півреплік однакова і дорівнює трьом.

Для чотирифакторних планів маємо вісім можливостей створення півреплік 2^{4-1}. Розглянемо дві з них, що задані генеруючими співвідношеннями $\overline{X}_4 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2$ і $\overline{X}_4 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3$.

Для першого генеруючого співвідношення визначальний контраст

$$+1 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_4 .$$

За його допомогою знаходимо змішування оцінок коефіцієнтів регресії:

$$\overline{X}_1 = \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_4, \qquad b_1 \to \beta_1 + \beta_{24};$$
$$\overline{X}_2 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_4, \qquad b_2 \to \beta_2 + \beta_{14};$$
$$\overline{X}_3 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3 \cdot \overline{X}_4, \qquad b_3 \to \beta_3 + \beta_{1234};$$
$$\overline{X}_4 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2, \qquad b_4 \to \beta_4 + \beta_{12}.$$

Визначальний контраст другого генеруючого співвідношення має вигляд

$$+1 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3 \cdot \overline{X}_4 .$$

Система змішування оцінок:

$$\overline{X}_1 = \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3 \cdot \overline{X}_4, \qquad b_1 \to \beta_1 + \beta_{234};$$
$$\overline{X}_2 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_3 \cdot \overline{X}_4, \qquad b_2 \to \beta_2 + \beta_{134};$$
$$\overline{X}_3 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_4 , \qquad b_3 \to \beta_3 + \beta_{124};$$
$$\overline{X}_4 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3, \qquad b_4 \to \beta_4 + \beta_{123}.$$

З погляду аналізу проблеми змішування оцінок розглянуті піврепліки не еквівалентні. У другій піврепліці оцінки лінійних коефіцієнтів змішані з оцінками ефектів потрійних взаємодій, які менше цікавлять дослідників, аніж парні взаємодії. Тому друга піврепліка має більшу розв'язувальну здатність порівняно з першою. Репліки, що мають максимальну розв'язувальну здатність, називаються **головними.**

Слід підкреслити, що експериментатор, який не має апріорної інформації щодо ефектів взаємодії, повинен намагатися обрати дробову репліку з найбільшою розв'язувальною здатністю. Адже ефекти взаємодії високих порядків менш важливі, ніж решта ефектів, оскільки коефіцієнти при цих взаємодіях малі, а отже, змішування оцінок істотно не впливає на величину головних ефектів.

Для реплік вищої дробовості порядок визначення системи змішування оцінок такий самий, як для півреплік. Наприклад, 1/4 репліка 2^{5-2} у п'ятифакторному плануванні може бути задана генеруючими співвідношеннями $\overline{X}_4 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3$ і $\overline{X}_5 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2$. Тут апріорі вважається, що $\beta_{123} = \beta_{12} = 0$.

Визначальні контрасти мають вигляд

$$+1 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3 \cdot \overline{X}_4 ,$$
$$+1 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_5 .$$

Скориставшись ними, сформулюємо *узагальнюючий контраст,* перемноживши один з одним частинні контрасти (знаходимо всі можливі комбінації визначальних контрастів):

$$+1 = \overline{X}_3 \cdot \overline{X}_4 \cdot \overline{X}_5 .$$

Контрасти дають змогу знайти змішування оцінок будь-яких факторів чи їх комбінацій. Помноживши на $\overline{X}_1$ вираз

$$+1 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3 \cdot \overline{X}_4 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_5 = \overline{X}_3 \cdot \overline{X}_4 \cdot \overline{X}_5 ,$$

дістанемо

$$\overline{X}_1 = \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3 \cdot \overline{X}_4 = \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_5 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_3 \cdot \overline{X}_4 \cdot \overline{X}_5 .$$

Звідси

$$b_1 \to \beta_1 + \beta_{234} + \beta_{25} + \beta_{1345} .$$

Для оцінки b_{13}

$$\overline{X}_1 \cdot \overline{X}_3 = \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_4 = \overline{X}_2 \cdot \overline{X}_3 \cdot \overline{X}_5 = \overline{X}_1 \cdot \overline{X}_4 \cdot \overline{X}_5 ,$$

$$b_{13} \to \beta_{13} + \beta_{24} + \beta_{235} + \beta_{145} .$$

Аналогічно встановлюються системи змішування та розв’язувальні здатності реплік довільної дробовості. Для коректного дослідження системи з допомогою дробового факторного планування необхідно використати всі наявні теоретичні відомості про об’єкт, що аналізується, або залучити інтуїцію, щоб визначити ті взаємодії, впливом яких можна знехтувати. Цю інформацію доцільно використати для побудови реплік заданої дробовості з метою знаходження апроксимуючого полінома.

Аналізуючи систему з допомогою апроксимуючого полінома, можна виявити головні й відкинути другорядні фактори, дістати результати, за допомогою яких можна проводити повніші експерименти з меншим числом факторів.

Другою основною задачею, що розв’язується шляхом імітаційного моделювання, є оптимізація систем. Проведення експериментів (натурних чи імітаційних) для пошуку оптимальних рішень полягає в реалізації деякої обчислювальної схеми знаходження екстремумів невідомої функції відгуку на заданій множині точок факторного простору. Нині розроблено численні наближені методи оптимізації, проте ефективність кожного з них істотно залежить від вигляду функції відгуку.

Головна складність проведення експериментів для оптимізації систем полягає у такому. Експериментатор не має відомостей про властивості функції відгуку. Отже, після закінчення експерименту, який реалізує деяку схему пошуку екстремуму, не може бути цілковитої впевненості в тому, що здобутий розв’язок є оптимальним. Тому під час виконання особливо відповідальних розрахунків для підвищення надійності результатів доцільно використовувати комбінації різних методів оптимізації.

Нагромаджений досвід розв’язання нелінійних оптимізаційних економіко-математичних задач у теорії керування запасами та календарному плануванні дає змогу зробити деякі узагальнені висновки щодо властивостей функцій відгуку, що відображають оптимізаційний процес в економіко-виробничих системах.

У загальному випадку функція відгуку (цільова функція) є багатоекстремальною, тобто має багато локальних екстремумів, серед яких може бути й кілька абсолютних. З огляду на це слід обережно використовувати методи направленого (детермінованого чи випадкового) пошуку екстремуму. Оптимальною стратегією проведення експериментів за цих умов є поєднання методів випадкового ненаправленого пошуку з детермінованими (наприклад, градієнтними) методами.

Друга важлива властивість оптимізаційних економіко-математичних моделей полягає у тому, що в області екстремумів функція відгуку є «гладкою», тобто варіювання змінних у цій області не спричиняється до помітних змін значень цільової функції. Це полегшує пошуки оптимальних розв'язків, оскільки за умов неточної вхідної інформації (чим характерні економічні задачі) для практичних цілей достатньо дістати результат, близький до оптимального.

Принципово можливі два способи знаходження екстремуму функції відгуку

$$y = f\left(x_1, x_2, \ldots, x_n\right).$$

Перший полягає в тому, що за допомогою експериментальних досліджень визначається математична модель функції відгуку, яка потім досліджується на екстремум класичними методами диференціального числення. З цією метою обчислюються частинні похідні функції відгуку $\frac{\partial y}{\partial x_1}, \frac{\partial y}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial y}{\partial x_n}$ і відшукуються стаціонарні точки шляхом розв'язання системи рівнянь

$$\frac{\partial y}{\partial x_i} = 0 \quad (i = 1,\ 2,\ \ldots,\ n).$$

Розв'язок такої системи $x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*$ може бути точкою оптимуму функції відгуку. У цьому переконуються або з допомогою формальних методів, або на підставі інтуїтивних міркувань.

Важливим моментом в описаному способі оптимізації є знаходження частинних похідних функції відгуку і обчислення точок, у яких похідні набувають нульових значень. Похідні функції відгуку можна визначити і без використання її математичної моделі. Для цього з допомогою повного чи дробового факторного плану достатньо знайти коефіцієнти лінійної регресії, що є статистичними оцінками коефіцієнтів ряду Тейлора:

$$\frac{\partial y}{\partial x_i} \approx b_i \quad \left(i = 1,\ 2, \ldots, n\right). \tag{12.2}$$

Завдання пошуку екстремуму функції відгуку (параметра оптимізації) зводиться до визначення точок ($x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*$), у яких коефіцієнти лінійної регресії дорівнюють нулю. На цій умові базується другий спосіб оптимізації систем, запропонований Боксом та Уїлсоном (1951 р). Тому описаний далі метод має назву **метод Бокса–Уїлсона**. У спеціальній літературі він відомий і як метод крутого сходження (при визначенні точки максимуму).

Розглянемо загальну схему методу.

Спочатку обирається точка (одна або кілька) факторного простору, яка за інтуїтивними міркуваннями може міститися поблизу точок екстремуму. Якщо немає жодних додаткових відомостей на користь пріоритету «екстремальності» деяких точок факторного простору, то початкова точка (кілька початкових точок) обирається за методом Монте-Карло: значення рівнів факторів рівномірно і випадково генеруються в заданих межах їх змінювання.

В околі початкової точки за описаними правилами ставиться повний чи дробовий факторний експеримент. Потім функція відгуку апроксимується поліномом першого ступеня, коефіцієнти якого визначаються за формулою (10.8), і проводиться статистичне дослідження здобутої лінійної регресії щодо перевірки однорідності дисперсій, значущості коефіцієнтів регресії, адекватності моделі. Фактично в околі початкової точки функція відгуку замінюється деякою гіперплощиною, коефіцієнти при лінійних членах якої є коефіцієнтами регресії

$$y = b_0 + b_1\bar{x}_1 + b_2\bar{x}_2 + \ldots + b_n\bar{x}_n \,.$$

Якщо початкова точка не є підозрілою на екстремум, тобто не всі коефіцієнти статистично незначущі, то коефіцієнти регресії використовуються для визначення напряму руху до стаціонарної точки (надалі для визначеності розглядатимемо лише випадок максимізації функції відгуку). Круте сходження до точки максимуму відбувається за напрямом градієнта, який визначає напрям найшвидшого зростання функції:

$$\mathrm{grad}\, y \approx b_1\vec{i} + b_2\vec{j} + \cdots + b_n\vec{k} \,,$$

де $\vec{i}, \vec{j}, \ldots, \vec{k}$ — одиничні вектори в напрямі координатних осей, що відповідають факторам $X_1, X_2, \ldots, X_n$.

Вихідною точкою руху в напрямі крутого сходження є початкова точка ($x_1^0, x_2^0, \ldots, x_n^0$), в околі якої здобуто апроксимуючу гіперплощину. В обраному напрямі у кількох точках факторного простору обчислюються значення функції відгуку, тобто в них проводяться експериментальні (імітаційні) спроби для визначення функції відгуку.

Координати першої точки в напрямі руху за градієнтом, у якій потрібно експериментально відшукати значення параметра y, в кодованій системі вимірювання обчислюються за формулою

$$\bar{x}_i^1 = \lambda b_i \quad \left(i = 1,\ 2, \ldots, n\right), \tag{12.3}$$

де λ — деяка додатна величина.

У початковій системі вимірюванням координати цієї точки можна дістати з допомогою перетворення

$$\bar{x}_i^1 = \frac{x_i^1 - x_i^0}{\Delta x_i} = \lambda b_i \,, \tag{12.4}$$

або

$$x_i^1 = x_i^0 + \lambda b_i\, \Delta x_i \quad \left(i = 1,\ 2, \ldots, n\right).$$

Величина λ визначається так. Спочатку обчислюються величини $|b_i \Delta x_i|$ $(i = 1,\ 2,\ \ldots,\ n)$, серед яких обирається найбільша. Нехай вона відповідає s-му фактору

$$|b_s \Delta x_s| = \max_i \{|b_i \Delta x_i|\}. \qquad (12.5)$$

Обирається деякий крок приросту s-го фактора (величини h_i і b_i мають один і той самий знак)

$$h_s = \lambda b_s \Delta x_s.$$

Звідси

$$\lambda = \frac{h_s}{b_s \Delta x_s}. \qquad (12.6)$$

Приріст i-ї координати $(i \neq s)$ точки факторного простору, яка лежить на напрямі руху по градієнту, визначається так:

$$h_i = \lambda b_i \Delta x_i,$$

або

$$h_i = \frac{h_s b_i \Delta x_i}{b_s \Delta x_s} \quad (i \neq s;\ i = 1,\ 2, \ldots, n). \qquad (12.7)$$

З урахуванням виразу (12.7) координати довільної k-ї точки факторного простору, у якій ставиться експеримент для визначення функції відгуку,

$$x_i^k = x_i^0 + \frac{k h_s b_i \Delta x_i}{b_s \Delta x_s} \quad (i = 1,\ 2, \ldots, n). \qquad (12.8)$$

Для визначення кроку руху h_s в напрямі крутого сходження потрібно оцінити витрати на проведення експериментів. При великому кроці можна пропустити точку локального максимуму, при малому доводиться визначати значення функції відгуку в багатьох точках. Це, з одного боку, приводить до вірогіднішої інформації, а з другого — до більших витрат ресурсів і машинного часу для проведення імітаційних експериментів. Великий крок хоча й забезпечує зниження витрат, проте не гарантує того, що точку максимуму не було загублено на певному етапі.

Експериментальне відшукування значень функції відгуку в напрямі крутого сходження триває доти, доки не з’явиться точка, у якій значення функції відгуку буде більшим, ніж у решті точок (включаючи точки з вищими індексами). Знайдена точка використовується як нова початкова точка планування експерименту. В околі цієї точки проводиться повний чи дробовий факторний план і знаходиться апроксимуюча гіперплощина, за допомогою якої визначається напрям подальшого крутого сходження.

Після кількох ітерацій дістаємо точку, в якій усі коефіцієнти лінійної регресії будуть статистично незначущі, тобто $b_i \approx 0$ $(i = 1, 2, ..., n)$. Це означає, що локальна гіперплощина майже горизонтальна і не дає змоги обрати наступний напрям руху до максимуму. Дана точка є підозрілою точкою щодо екстремуму, тобто вона може бути точкою локального максимуму, сідловою або балковою точкою.

Для прийняття остаточного рішення необхідно ретельно дослідити функцію відгуку в підозрілій точці. Для цього проводяться ортогональні або рототабельні композиційні експерименти в околі цієї точки, і на підставі знайдених даних поверхня функції відгуку апроксимується поліномом другого ступеня. Дослідження здобутого таким чином полінома звичайними методами дає змогу прийняти остаточне рішення. Іноді буває корисним з допомогою полінома другого ступеня побудувати лінії однакового рівня поверхні відгуку, що дають змогу виявити характер поводження функції відгуку в точці, яка підозріла на екстремум.

Оскільки досліджувана поверхня відгуку в заданих межах змінювання факторів може мати кілька локальних екстремумів, за результатами однієї реалізації методу Бокса–Уїлсона не можна стверджувати, що знайдено глобальний екстремум. Серію експериментів за допомогою цього методу слід повторити кілька разів, починаючи рух з випадково обраних і рівномірно розкиданих у факторному просторі точок.

Під час руху в напрямі крутого сходження потрібний ретельний аналіз кожної створеної ситуації, щоб чергова точка на градієнті (або антиградієнті в задачах мінімізації) не вийшла за межі області факторного простору, визначеного експериментальними дослідженнями. Якщо виник такий стан, то рух у межовій точці потрібно припинити і знайти в ній напрям наступного руху, включаючи рух по межі області визначення функції відгуку.

ТЕРМІНОЛОГІЧНИЙ СЛОВНИК

Головний ефект фактора — внесок фактора в значення функції відгуку під час переходу його від нижнього рівня до верхнього, який в кодованій системі вимірювання факторів дорівнює подвоєному коефіцієнту регресії при відповідній змінній.

Змішування ефектів — небажана властивість дробових експериментів, яка полягає в тому, що один і той самий коефіцієнт регресії може відображати вплив на функцію відгуку окремих факторів і ефектів взаємодії, наприклад, головний ефект може бути змішаний з однією чи кількома взаємодіями вищого порядку.

Генеруюче співвідношення — співвідношення між факторами (добуток вектор-стовпців), яке використовується для побудови дробових факторних планів.

Визначальний контраст — співвідношення між факторами, яке задає елементи стовпця матриці планування, що дорівнює фіктивному фактору.

Головна репліка — репліка, що має максимальну розв’язувальну здатність, тобто у якій головні ефекти змішані з оцінками ефектів більш високих порядків.

Найшвидкий спуск (круте сходження) — метод чисельного пошуку мінімуму (максимуму) функції в математичному програмуванні, при якому напрямок пошуку екстремуму в кожній точці перпендикулярний до лінії однакового рівня, тобто пошук здійснюється в напрямі антиградієнта (градієнта) функції, що досліджується.

Градієнт (антиградієнт) функції $f\left(x_1, x_2, \ldots, x_n\right)$ — вектор, спрямований в бік найшвидшого зростання (зменшення) значення функції. Градієнт за своєю величиною залежить від похідних функції в даній точці і записується у вигляді:

$$\operatorname{grad} f = \nabla f = \frac{\partial f}{\partial x_1}\vec{i} + \frac{\partial f}{\partial x_2}\vec{j} + \cdots + \frac{\partial f}{\partial x_n}\vec{k} \ ,$$

де $\vec{i}, \vec{j}, \ldots \vec{k}$ — одиничні вектори в напрямі координатних осей, що відповідають змінним $x_1, x_2, \ldots, x_n$. Антиградієнт має зворотний напрям.

12.4. НАВЧАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Вправа 1. Під час проведення повного факторного експерименту для вивчення функції відгуку $y=f\left(x_1,\,x_2,\,x_3\right)$ отримано значення відгуку у 8 точках експерименту, які наведено в таблиці 12.3. Використовуючи результати експериментів та апроксимацію виду $y=b_0+b_1x_1+b_2x_2+b_3x_3+$ $+b_{12}x_1x_2+b_{13}x_1x_3+b_{23}x_2x_3+b_{123}x_1x_2x_3$, знайти коефіцієнти регресії і записати в кодованому вигляді рівняння регресії. Знайти оцінку градієнта функції відгуку в центрі плану, тобто в точці (0, 0, 0).

Таблиця 12.3

Матриця планування з ефектами взаємодії

Номер спроби	$\overline{X}_0$	$\overline{X}_1$	$\overline{X}_2$	$\overline{X}_3$	$\overline{X}_1\cdot\overline{X}_2$	$\overline{X}_1\cdot\overline{X}_3$	$\overline{X}_2\cdot\overline{X}_3$	$\overline{X}_1\cdot\overline{X}_2\cdot\overline{X}_3$	y
1	+1	–1	–1	+1	+1	–1	–1	+1	$y_1=128$
2	+1	+1	–1	–1	–1	–1	+1	+1	$y_2=142$
3	+1	–1	+1	–1	–1	+1	–1	+1	$y_3=116$
4	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	$y_4=120$
5	+1	–1	–1	–1	+1	+1	+1	–1	$y_5=132$
6	+1	+1	–1	+1	–1	+1	–1	–1	$y_6=110$
7	+1	–1	+1	+1	–1	–1	+1	–1	$y_7=102$
8	+1	+1	+1	–1	+1	–1	–1	–1	$y_8=98$

Вправа 2. Для умов попередньої вправи записати рівняння квадратичної регресії без квадратичних членів в некодованих факторах при заданих основних рівнях і інтервалах варіювання факторів:

Номер фактора	1	2	3
Основний рівень фактора	$x_1^0=12$	$x_2^0=10$	$x_3^0=6$
Інтервал варіювання	$\Delta x_1=0{,}5$	$\Delta x_2=0{,}4$	$\Delta x_3=0{,}2$

Вправа 3. Для чотирифакторних планів є вісім можливостей створення півреплік 2^{4-1}, що задані генеруючими співвідношеннями $\overline{X}_4=\overline{X}_1\cdot\overline{X}_2$; $-\overline{X}_1\cdot\overline{X}_2$; $\overline{X}_1\cdot\overline{X}_3$; $-\overline{X}_1\cdot\overline{X}_3$; $\overline{X}_2\cdot\overline{X}_3$; $-\overline{X}_2\cdot\overline{X}_3$; $\overline{X}_1\cdot\overline{X}_2\cdot\overline{X}_3$; $-\overline{X}_1\cdot\overline{X}_2\cdot\overline{X}_3$. Для кожного генеруючого співвідношення утворіть визначальний контраст і за його допомогою знайдіть змішування оцінок коефіцієнтів регресії. Знайдіть головні піврепліки 2^{4-1}.

Вправа 4. На рис. 12.1 зображено лініями однакового рівня функцію відгуку двофакторної моделі й показано напрям руху по антиградієнту до точки відносного мінімуму. За допомогою методу Монте-Карло оберіть

5 точок факторного простору і покажіть початковий напрям руху за методом Бокса–Уїлсона.

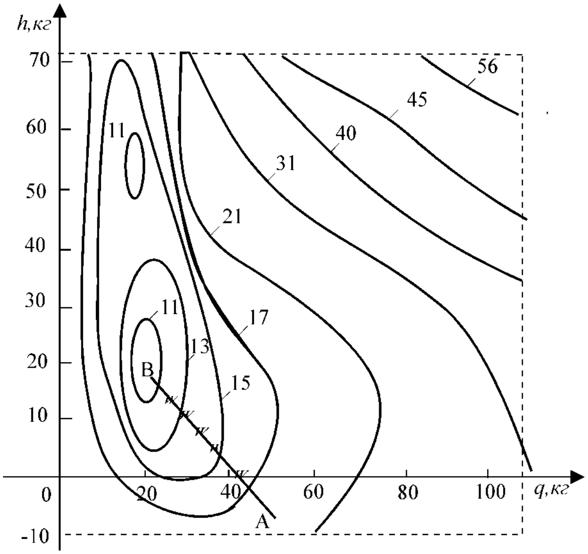

Рис. 12.1. Зображення функції відгуку лініями однакового рівня