В Ы Ч И С Л И Т Е Л Ь Н Ы Е   С И С Т Е М Ы
1969 г. Выпуск 35

УДК: 519.240

НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

В.И. Денисов

Решение многих задач связано с проведением экспериментов. Все возрастающая сложность и длительность экспериментальных работ требует повышения их эффективности. Планирование эксперимента позволяет повысить эффективность исследования. Очень часто целью экспериментов является оптимизация (улучшение в каком-то смысле) процесса. При этом может применяться метод крутого восхождения [I], в котором используется класс ортогональных планов, удовлетворяющих теореме Бокса. В этой работе обсуждаются некоторые вопросы применения теоремы Бокса к реальным объектам.

Разобьем все исследуемые объекты или процессы на два типа: евклидовы и неевклидовы.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Евклидовым объектом называется объект, независимые переменные которого имеют одинаковую физическую природу и равные единицы измерения. Объект, не являющийся евклидовым, называется неевклидовым.

Очевидно, большинство реальных объектов будут неевклидовыми.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Матрицей Бокса называется матрица, удовлетворяющая теореме Бокса.

Так матрица $X = \|x_{ij}\|_N$ будет матрицей Бокса, если выполняются условия:

$$\sum_{j=1}^{N} x_{ij}^2 = N, \quad \sum_{j=1}^{N} x_{ij} x_{kj} = 0$$

при всех i и при $i \neq k$. Кроме того, необходимо, чтобы первый столбец матрицы состоял только из +I.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ. Для евклидовых объектов все матрицы Бокса эквивалентны между собой независимо от их структуры. Для неевклидовых объектов такой эквивалентности нет.

Покажем справедливость этого предложения на примере. Рассмотрим матрицу планирования:

$$X = \|x_{ij}\|_N = \left\| \begin{matrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -R_n \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -R_{n-1} & +r_n \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot \\ 1 & 0 & -R_2 & +r_3 & \cdots & +r_{n-1} & +r_n \\ 1 & -R_1 & +r_2 & +r_3 & \cdots & +r_{n-1} & +r_n \\ 1 & +r_1 & +r_2 & +r_3 & \cdots & +r_{n-1} & +r_n \end{matrix} \right\|, \tag{I}$$

где $R_i = \sqrt{\frac{i \cdot N}{i+1}}$; $r_i = \frac{R_i}{i}$; $N = n+1$;

$i = 0, 1, 2, \ldots, n$; $j = 1, 2, \ldots, N$;

N - число экспериментов; n - число независимых переменных.

Матрица (I) является матрицей Бокса, что следует из соотношений:

I. $\sum_{j=1}^{N} x_{ij} = -R_i + i r_i = -R_i + i \frac{R_i}{i} = 0$;

2. $\sum_{j=1}^{N} x_{ij}^2 = R_i^2 + i r_i^2 = R_i^2 + \frac{R_i^2}{i} = \frac{i \cdot N}{i+1} + \frac{i \cdot N}{i(i+1)} = N$;

3. при $i < k$
$$\sum_{j=1}^{N} x_{ij} x_{kj} = -R_i r_k + i r_i r_k = r_k(-R_i + i r_i) = 0;$$

4. при $i > k$
$$\sum_{j=1}^{N} x_{ij} x_{kj} = r_i(-R_k) + k r_i r_k = 0.$$

Поэтому коэффициенты регрессии и их дисперсия определяются по формулам [I]:

$$b_i = \frac{\sum_{j=1}^{N} x_{ij} y_j}{N}, \tag{2}$$

$$s^2(b_i) = \frac{s^2(y)}{N}. \tag{3}$$

Из (2) видно, что для определения b_1 используются только два последних эксперимента, так как $x_{11} = x_{12} = \ldots = x_{1(N-2)} = 0$

$$b_1 = \frac{-R_1 y_{N-1} + r_1 y_N}{N}. \tag{4}$$

Аналогично определяем, что для вычисления b_2 используются только три последних эксперимента

$$b_2 = \frac{-R_2 y_{N-2} + r_2 y_{N-1} + r_2 y_N}{N}. \tag{5}$$

Таким образом, при вычислении b_i используются только $(i+1)$ экспериментов. Итак, матрица Бокса типа (I) не позволяет использовать для вычисления каждого коэффициента регрессии все N экспериментов. Но для евклидовых объектов это не будет вызывать снижения точности, так как, несмотря на разное число экспериментов, применяемых при вычислении, например, b_i и b_k (при $i \neq k$), $s^2(b_i) = s^2(b_k)$. Это объясняется тем, что с уменьшением i увеличивается τ_i

$$\tau_i = \frac{R_i}{i} = \sqrt{\frac{N}{i(i+1)}}. \qquad (6)$$

Тем самым столбцы матрицы (I), имеющие больше нулей, имеют и большую величину шага варьирования τ_i. В формулах (2) и (3) N имеет разный физический смысл для разных коэффициентов регрессии, так как под N можно понимать число, характеризующее одновременно величину интервалов варьирования фактора и число нулей в соответствующем столбце матрицы (I). При этом уменьшение числа ненулевых членов в столбце матрицы (I) компенсируется увеличением интервала варьирования для соответствующей переменной, так что $N = const$ для всех столбцов. Для евклидовых объектов мы можем сравнивать интервалы варьирования различных переменных. Для неевклидовых объектов вопрос выбора интервалов варьирования и соотношения масштабов независимых переменных является неопределенным. Например, нет смысла сравнивать между собой единицы измерения, следовательно, и интервалы варьирования таких величин, как давления, температуры, длины и т.д. Поэтому вряд ли следует считать оптимальной матрицу (I) при исследовании неевклидовых объектов. Для неевклидовых объектов нужно брать матрицы Бокса, которые позволят использовать все эксперименты для каждого b_i. При этом не нужно будет сравнивать интервалы варьирования разных переменных. Таким образом, на примере матрицы (I) показана справедливость утверждения.

Рассмотрим множество матриц Бокса, элементы которых удовлетворяют условию:

$$|x_{ij}| = |x_{ik}| = |x_i|. \qquad (7)$$

Очевидно, что такие матрицы не будут иметь нулевых элементов. Кроме того, коэффициенты регрессии будут вычисляться здесь как средние величины равноточных измерений (ошибки имеют одинаковый вес для всех измерений). Поэтому эти матрицы будут наилучшими среди всех матриц Бокса.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Матрицей Адамара называется квадратная матрица с ортогональными столбцами, элементами которой являются действительные числа +I и -I.

Можно показать, что множество матриц Адамара A есть собственное подмножество множества матриц Бокса B, т.е. $A \subset B$.

ТЕОРЕМА. Множество матриц Бокса B_1, элементы которых удовлетворяют условию (7), есть множество A.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть X - любая матрица из A. Тогда $X \in B$. Так как для матриц Адамара выполняются условия (7), то $X \in B_1$. Таким образом, $A \subset B_1$. Далее, пусть $X \in B_1$. Тогда для X выполняется условие:

$$\sum_{j=1}^{N} x_{ij}^2 = N \qquad (i = 0, 1, \ldots, n). \qquad (8)$$

Из (8), учитывая (7), получим

$$\sum_{j=1}^{N} x_{ij}^2 = N x_i^2 = N; \qquad x_i^2 = 1; \qquad x_i = \pm 1.$$

Отсюда следует $X \in A$, т.е. $B_1 \subset A$. Так как $A \subset B_1$ и $B_1 \subset A$, то $A = B_1$, что и доказывает теорему.

Известно [2], что матрицы Адамара существуют только для N, кратного четырем, и $N=2$. Тем самым утверждается, что наилучшие матрицы Бокса могут быть получены только для N, кратного четырем. Для произвольного N можно получить только матрицы, не содержащие нулевых элементов.

Рассмотрим матрицу планирования

$$X_N = \begin{Vmatrix} I & I & I & I & \ldots & I \\ I & a & c & c & \ldots & c \\ I & c & a & c & \ldots & c \\ I & c & c & a & \ldots & c \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ I & c & c & c & & a \end{Vmatrix}, \qquad (9)$$

где $a = \dfrac{(N-2)\sqrt{N}-1}{N-1}$, $\quad c = -\dfrac{\sqrt{N}+1}{N-1}$.

Можно показать так же, как это проведено для матрицы (I), что матрица (9) является матрицей Бокса.

Отметим, что матрица (9) получена из матрицы (I) путем ортогонального преобразования факторного пространства.

Планирование с использованием X_N позволит определить b_i с использованием всех N экспериментов. Все столбцы имеют одинаковую структуру, поэтому все переменные находятся в равных условиях по отношению к наблюдателю. Это выгодно отличает матрицы (9) от матриц (I). Недостатком матриц (9) по сравнению с матрицами Адамара является увеличение разности $|a|-|c|$ с увеличением размерности факторного пространства.

ТЕОРЕМА. Если X_N – матрица Бокса, то матрица

$$X_{2N} = \begin{Vmatrix} X_N & X_N \\ X_N & -X_N \end{Vmatrix}$$

также будет матрицей Бокса.

Доказательство теоремы следует из соотношений:

1. $$\sum_{j=1}^{2N} x_{ij} = \sum_{j=1}^{N} x_{ij} + \sum_{j=N+1}^{2N} x_{ij} = 0 + 0 = 0;$$

2. $$\sum_{j=1}^{2N} x_{ij}^2 = \sum_{j=1}^{N} x_{ij}^2 + \sum_{j=N+1}^{2N} x_{ij}^2 = N + N = 2N;$$

3. при $i = 1, 2, \ldots, N$; $k = N+1, N+2, \ldots, 2N$

$$\sum_{j=1}^{2N} x_{ij} x_{kj} = \sum_{j=1}^{N} x_{ij} x_{kj} + \sum_{j=N+1}^{2N} x_{ij} x_{kj} = \sum_{j=1}^{N} x_{ij} x_{kj} - \sum_{j=1}^{N} x_{ij} x_{kj} = 0;$$

4. при всех прочих i и k

$$\sum_{j=1}^{2N} x_{ij} x_{kj} = \sum_{j=1}^{N} x_{ij} x_{kj} + \sum_{j=N+1}^{2N} x_{ij} x_{kj} = 0 + 0 = 0.$$

Некоторое уменьшение разности $|\alpha| - |c|$ можно снизить, применив в качестве планов матрицы X_{2N}. Однако в отличие от матриц X_N матрицы типа X_{2N} существуют только для четного числа экспериментов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ. Теорема Бокса позволяет получать насыщенные ортогональные планы. Структура этих планов зависит от размерности факторного пространства. Среди всех насыщенных ортогональных планов лучшими будут планы с использованием матриц Адамара. Если размерность факторного пространства n такова, что $N = n+1$ не кратно четырем, то ортогональный насыщенный план не может быть представлен в качестве матрицы Адамара. Тогда исследователь вынужден либо ставить лишние m экспериментов с тем, чтобы $N = n+1+m$ было кратно четырем, либо применять в качестве планов матрицы с неравными по модулю элементами. Среди матриц Бокса с неравными по модулю элементами лучшими будут матрицы, не содержащие нулевых элементов, и, более того, матрицы Бокса, удовлетворяющие условию

$$\min_x \left\{ \max_{\substack{j,k \\ j \neq k}} \left| |x_{ij}| - |x_{ik}| \right| \right\}.$$

Они позволяют эффективно использовать эксперименты. Выбор того или иного вида матрицы Бокса должен производиться исходя из конкретных условий проведения эксперимента.

Литература

1. В.В. НАЛИМОВ, Н.А. ЧЕРНОВА. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов, М., Наука, 1965.
2. R.C. BOSE, S.S. SHRIKHANDE. A Note on a Result in the Theory of Code Construction. – Information and Control, 1959, vol.2, N 2.

Поступила в редакцию
20 мая 1968 г.