УДК 519.242.5

С.Г. Радченко, С.М. Лапач

ГЕНЕРУВАННЯ КВАЗІРЕГУЛЯРНИХ КВАЗІРІВНОМІРНИХ БАГАТОФАКТОРНИХ ПЛАНІВ ЕКСПЕРИМЕНТІВ (АЛГОРИТМ RASTA8)

We develop the RASTA8 algorithm for generating quasi-regular and quasi-uniform multifactor experiment designs by using ЛПτ of uniformly distributed sequences. It allows obtaining the designs, not presented in catalogs as well as using them in further research. The conducted simulative experiment has shown that the obtained experiment designs are characterized by statistical criteria, rather close to the best possible criteria values.

Вступ

При створенні й удосконалюванні технічних, технологічних, вимірювальних систем широко використовуються статистичні методи оптимізації та моделювання. Множинний регресійний аналіз застосовується для одержання статистичних моделей з метою прогнозування, автоматизованого керування, вивчення механізмів явищ, що відбуваються в складних системах, процесах, об'єктах. Якість одержуваних моделей залежить від правильної постановки задачі, використання необхідних планів експериментів.

Без використання плану експерименту з відповідними критеріями якості (регулярність і рівномірність рівнів факторів, *D*-, *A*-, *E*-, *Q*-оптимальність) отримані багатофакторні регресійні моделі не будуть характеризуватися комплексом необхідних властивостей: адекватності, стійкості, ортогональності або близькості до ортогональності ефектів моделі [1; 2, с. 7–10]. Початкові умови розв'язуваної задачі побудови статистичних моделей за кількістю факторів, кількістю їх рівнів та необхідною кількістю дослідів можуть бути такими, для яких у відомих каталогах планів експериментів [3, с. 201–211] необхідні плани не подані.

Постановка задачі

Необхідно розробити загальний метод одержання планів експериментів для довільного сполучення кількості факторів, кількості їх рівнів і заданої кількості дослідів, що може бути виконано при здійсненні прикладного дослідження. Метод має бути доступним для прикладних досліджень і ефективним за одержуваними характеристиками моделей. Отримані плани експериментів мають відповідати необхідним можливим критеріям їх якості.

Концепція розв'язання задачі

Як вихідні критерії генерованого плану експерименту взято умову пропорційності частот і рівномірність рівнів факторів для багатофакторних регулярних планів експериментів [3, с. 36–40, 68–72]. При виконанні цих критеріїв і використанні для ефектів факторів системи ортогональних контрастів усі головні ефекти ортогональні один до одного й виконується критерій *Q*-оптимальності плану експерименту – мінімум середньої дисперсії передбачення функції відгуку (критерію якості системи) $\hat{y}$ по всій області факторного простору [4, с. 123].

Точне виконання зазначених критеріїв відоме для планів, опублікованих у каталогах, але не для всіх можливих сполучень рівнів факторів. Наближене виконання (квазівиконання) є умовою для генерованих планів експериментів.

Формування умови пропорційності частот і рівномірності рівнів факторів реалізується використанням базового плану експерименту на основі рівномірно розподілених ЛПτ-послідовностей [5, с. 10, 14, 83]. Теорія їх побудови, алгоритми одержання й властивості наведені в праці І.М. Соболя [5, с. 102–106].

Послідовність точок P_1, ..., P_i називається рівномірно розподіленою [5, с. 10] в n-вимірному кубі K^n, якщо для будь-якого паралелепіпеда П

$$\lim_{N \to \infty} S_N(\Pi)/N = V_\Pi,$$

де $S_N(\Pi)$ – кількість точок P_i з номерами $1 \le i \le N$, що належать П; V_Π – n-вимірний об'єм П.

Послідовність точок P_0, P_1, ..., P_i n-вимірного куба K^n називається ЛПτ-послідовністю, якщо будь-яка її двійкова ділянка, що містить не менше $2^{\tau+1}$ точок, становить Пτ-сітку [5, с. 83].

Рівномірно розподілені ЛПτ-послідовності характеризуються такими властивостями: проекції N точок в k-вимірному просторі на кожну $(k-j)$-вимірну грань $(1 \le j \le k-1)$ багатовимірного одиничного куба утворюють також рівномірно розподілені послідовність і, отже, містять N проекцій точок.

Приклад рівномірно розподілених ЛПτ-послідовностей, генерованих за розробленою програмою (“Планування, регресія і аналіз моделей” [6]), наведено у табл. 1.

Ідея генерування квазірегулярних квазірівномірних багатофакторних планів експериментів полягає у відображенні певної підмножини точок по кожній послідовності ξ_i у певний рівень F_{ic} фактора F_i (F_i — кодоване позначення в матриці плану експерименту фактора X_i, вираженого в натуральних значеннях).

Генерування плану експерименту ґрунтується на гіпотезі про рівномірний розподіл ЛПτ-послідовності в багатовимірному просторі та рівномірний розподіл точок різних ξ_i одна відносно одної. Значення ξ_{iu} $(1 \le i \le k$, $1 \le u \le N_{ЛП\tau})$, що мають парні номери, відрізняються від значень, що мають непарні номери (для інтервалів номерів 2—3, 4—5, ..., 30—31), на 0,5, і, в загальному випадку, при переході всередині інтервалу від парного номера до непарного ξ_{iu} набуває як більших, так і менших значень. Заповнення факторного простору одиничного куба відбувається рівномірно по кож-

***Таблиця* 1**. Матриця рівномірно розподілених ЛПτ-послідовностей

Номер точки	Послідовність							
	ξ_1	ξ_2	ξ_3	ξ_4	ξ_5	ξ_6	ξ_7	ξ_8
1	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
2	0,25	0,75	0,25	0,75	0,25	0,75	0,25	0,75
3	0,75	0,25	0,75	0,25	0,75	0,25	0,75	0,25
4	0,125	0,625	0,875	0,875	0,625	0,125	0,375	0,375
5	0,625	0,125	0,375	0,375	0,125	0,625	0,875	0,875
6	0,375	0,375	0,625	0,125	0,875	0,875	0,125	0,625
7	0,875	0,875	0,125	0,625	0,375	0,375	0,625	0,125
8	0,0625	0,9375	0,6875	0,3125	0,1875	0,0625	0,4375	0,5625
9	0,5625	0,4375	0,1875	0,8125	0,6875	0,5625	0,9375	0,0625
10	0,3125	0,1875	0,9375	0,5625	0,4375	0,8125	0,1875	0,3125
11	0,8125	0,6875	0,4375	0,0625	0,9375	0,3125	0,6875	0,8125
12	0,1875	0,3125	0,3125	0,6875	0,5625	0,1875	0,0625	0,9375
13	0,6875	0,8125	0,8125	0,1875	0,0625	0,6875	0,5625	0,4375
14	0,4375	0,5625	0,0625	0,4375	0,8125	0,9375	0,3125	0,1875
15	0,9375	0,0625	0,5625	0,9375	0,3125	0,4375	0,8125	0,6875
16	0,03125	0,53125	0,40625	0,21875	0,46875	0,28125	0,96875	0,28125
17	0,53125	0,03125	0,90625	0,71875	0,96875	0,78125	0,46875	0,78125
18	0,28125	0,28125	0,15625	0,96875	0,21875	0,53125	0,71875	0,53125
19	0,78125	0,78125	0,65625	0,46875	0,71875	0,03125	0,21875	0,03125
20	0,15625	0,15625	0,53125	0,84375	0,84375	0,40625	0,59375	0,15625
21	0,65625	0,65625	0,03125	0,34375	0,34375	0,90625	0,09375	0,65625
22	0,40625	0,90625	0,78125	0,09375	0,59375	0,65625	0,84375	0,90625
23	0,90625	0,40625	0,28125	0,59375	0,09375	0,15625	0,34375	0,40625
24	0,09375	0,46875	0,84375	0,40625	0,28125	0,34375	0,53125	0,84375
25	0,59375	0,96875	0,34375	0,90625	0,78125	0,84375	0,03125	0,34375
26	0,34375	0,71875	0,59375	0,65625	0,03125	0,59375	0,78125	0,09375
27	0,84375	0,21875	0,09375	0,15625	0,53125	0,09375	0,28125	0,59375
28	0,21875	0,84375	0,21875	0,53125	0,90625	0,46875	0,90625	0,71875
29	0,71875	0,34375	0,71875	0,03125	0,40625	0,96875	0,40625	0,21875
30	0,46875	0,09375	0,46875	0,28125	0,65625	0,71875	0,65625	0,46875
31	0,96875	0,59375	0,96875	0,78125	0,15625	0,21875	0,15625	0,96875
32	0,015625	0,796875	0,953125	0,671875	0,796875	0,921875	0,734375	0,890625

ній послідовності ξ_i і рівномірно по сполученню рівнів послідовностей ξ_i і ξ_j $(1 \le i < j \le k)$ між собою. Корельованість $r_{ij}(\xi_i, \xi_j)$ буде мінімально можливою для певного значення $N_{ЛП\tau}$ порівняно з випадковим розміщенням точок у багатовимірному просторі і зі зростанням $N_{ЛП\tau}$ буде наближатися до нуля.

Використовуючи зазначені властивості рівномірно розподілених ЛПτ-послідовностей, можна побудувати алгоритм RASTA8 генерування квазірегулярних і квазірівномірних багатофакторних планів експериментів.

Крок 1. Записуємо найменування плану експерименту і ймовірну кількість необхідних дослідів

$$s_1^{k^{(1)}} \cdot s_2^{k^{(2)}} \cdot \ldots \cdot s_k^{k^{(k)}} //(1{,}5...2) \sum_{i=1}^{k}(s_i - 1),$$

де $s_1, \ldots, s_k$ – кількість рівнів 1, ..., k-го факторів.

Крок 2. Генеруємо рівномірно розподілені ЛПτ-послідовності із загальною кількістю факторів і дослідів, заданих на кроці 1 (при першому проході).

Крок 3. Перетворюємо рівномірно розподілені ЛПτ-послідовності на квазірегулярний квазірівномірний план експерименту. Для безперервних факторів виконується крок 4. Для дискретних факторів, якісних або прийнятих як дискретні виконується крок 5.

Крок 4. Обчислюємо значення рівнів факторів

$$X_{iu} = X_{i\,\min} + \xi_{iu}(X_{i\,\max} - X_{i\,\min}),$$

де ξ_{iu} – значення рівномірно розподіленої ЛПτ-послідовності для i-го фактора і u-го досліду; $1 \le i \le k$, де k – кількість факторів; $1 \le u \le N_{ЛП\tau}$; $0 < \xi_{iu} < 1$; $X_{i\,\min}$, $X_{i\,\max}$ – мінімальне й максимальне натуральні значення i-го фактора в експерименті відповідно.

Крок 5. Інтервал зміни рівномірно розподілених ЛПτ-послідовностей (0, 1) розіб'ємо на s_i підінтервалів: 0, $1/s_i$; $1/s_i$, $2/s_i$; ...; $(s_i - 1)/s_i$, 1. Кожному підінтервалу присвоємо рівні 0, 1, ..., $s_i - 1$ фактора X_i. У матриці плану рівномірно розподілених ЛПτ-послідовностей кожне значення ξ_{iu} замінимо рівнем 0 або 1, ..., або $s_i - 1$ залежно від того, у який підінтервал потрапило значення ξ_{iu}.

Крок 6. За результатами кроків 4 і 5 формуємо робочу матрицю квазірегулярного квазірівномірного плану експерименту.

Крок 7. Будуємо таблицю коефіцієнтів парної кореляції факторів X_i, X_j для отриманого плану експерименту на кроці 6.

Крок 8. Виконуємо аналіз отриманої таблиці. Якщо отримані коефіцієнти парної кореляції факторів задовольняють поставлену умову $|\bar{r}_{ij}| \le (r_{ij})_з$, то план вважається отриманим. Якщо ні – $|\bar{r}_{ij}| > (r_{ij})_з$, то відбувається перехід до кроку 9. Тут $1 \le i < j \le k$; $(r_{ij})_з$ – задана максимально припустима величина середнього значення абсолютних величин $|\bar{r}_{ij}|$ коефіцієнтів парної кореляції між факторами X_i і X_j.

Крок 9. Якщо умова на кроці 8 не виконується, переходимо на крок 2 зі збільшенням кількості дослідів.

Залежно від кількості рівнів факторів бажана кількість дослідів у плані експерименту має бути приблизно такою:

1. s_i = 2; 3; 4; 5; 6; 8, N = 24; 25.
2. s_i = 2; 3; 4; 5; 6; 7, N = 35; 36.
3. s_i = 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8; 9, N = 63; 64; 65.

Моделюючий експеримент

З метою перевірки розробленого алгоритму RASTA8 було проведено моделюючий експеримент з генерування планів експериментів $2^1 \times 3^2 \times 4^3 \times 5^1 \times 7^1 //32$ і $2^1 \times 3^2 \times 4^3 \times 5^1 //27$. Було взято значення $(r_{ij})_з = 0{,}2$. Як базовий план експерименту на основі рівномірно розподілених ЛПτ-послідовностей використовувався план $N_{ЛП\tau}$ = = 32 (табл. 1).

Для генерованого першого плану $2^1 \times 3^2 \times 4^3 \times 5^1 \times 7^1 //32$ отримана матриця, подана в табл. 2. Розрахунок кореляційної матриці (табл. 3) для факторів F_1, ..., F_8 дав такі результати: середнє значення абсолютних величин коефіцієнтів парної кореляції факторів – $|\bar{r}_{ij}| = 0{,}06434$; максимальна абсолютна величина коефіцієнта парної кореляції факторів – $\max|\bar{r}_{ij}| = 0{,}2000$. Умова $|\bar{r}_{ij}| \le (r_{ij})_з$ виконана – план отримано. Результати можна вважати добрими.

Для 24 головних ефектів і 244 генерованих взаємодій (по два ефекти в кожній взаємодії), перетворених на ортогональні контрасти, була розрахована діаграма розподілу коефіцієнтів парної кореляції (діаграма, *а*). Середнє значення абсолютних величин коефіцієнтів парної кореляції відносно мале: $|\bar{r}_{ij}|$ = 0,1324. Число

Інтервал	Частка, %	
$0,0 = \|r_{ij}\| = 0,0$	0,25	
$0,0 < \|r_{ij}\| < 0,1$	48,68	####################
$0,1 \le \|r_{ij}\| < 0,2$	29,19	############
$0,2 \le \|r_{ij}\| < 0,3$	13,35	######
$0,3 \le \|r_{ij}\| < 0,4$	5,08	###
$0,4 \le \|r_{ij}\| < 0,5$	2,02	#
$0,5 \le \|r_{ij}\| < 0,6$	0,91	#
$0,6 \le \|r_{ij}\| < 0,7$	0,34	
$0,7 \le \|r_{ij}\| < 0,8$	0,10	
$0,8 \le \|r_{ij}\| < 0,9$	0,08	
$0,9 \le \|r_{ij}\| < 1,0$	0,00	

а

Інтервал	Частка, %	
$0,0 = \|r_{ij}\| = 0,0$	0,22	
$0,0 < \|r_{ij}\| < 0,1$	47,90	###################
$0,1 \le \|r_{ij}\| < 0,2$	27,47	###########
$0,2 \le \|r_{ij}\| < 0,3$	13,31	######
$0,3 \le \|r_{ij}\| < 0,4$	6,20	###
$0,4 \le \|r_{ij}\| < 0,5$	2,85	##
$0,5 \le \|r_{ij}\| < 0,6$	1,00	#
$0,6 \le \|r_{ij}\| < 0,7$	0,56	#
$0,7 \le \|r_{ij}\| < 0,8$	0,25	
$0,8 \le \|r_{ij}\| < 0,9$	0,24	
$0,9 \le \|r_{ij}\| < 1,0$	0,00	

б

Діаграма. Розподіл коефіцієнтів кореляції $|r_{ij}|$: *а* – план $2^1{\times}3^2{\times}4^3{\times}5^1{\times}7^1//32$ (середнє значення абсолютних величин коефіцієнтів кореляції – 0,132408; середнє квадратичне відхилення – 0,013325); *б* – план $2^1{\times}3^2{\times}4^3{\times}5^1//27$ (середнє значення абсолютних величин коефіцієнтів кореляції – 0,140633; середнє квадратичне відхилення – 0,016943)

обумовленості матриці всіх головних ефектів $\mathrm{cond}(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}) = 6,126$ добре.

Для всіх 268 ефектів частка коефіцієнтів парних кореляцій з $|r_{ij}| < 0,4$ становить 96,55 %: структура практично будь-якої моделі, побудованої за результатами проведеного за цим планом експерименту, буде стійкою.

Для другого плану $2^1{\times}3^2{\times}4^3{\times}5^1//27$ отримана матриця подана в плані $2^1{\times}3^2{\times}4^3{\times}5^1{\times}7^1//32$ (табл. 2) у перших 7 стовпцях і 27 рядках (виділено жирними лініями). Розрахунок кореляційної матриці для факторів F_1, ..., F_7 дав такі результати: $|\bar{r}_{ij}| = 0{,}09741$, $\max|\bar{r}_{ij}| = 0{,}2360$. Результати оцінюються як добрі.

Для 18 головних ефектів 136 генерованих взаємодій (по два ефекти в кожній взаємодії), перетворених на ортогональні контрасти, була розрахована діаграма розподілу коефіцієнтів парної кореляції $|r_{ij}|$ (діаграма, *б*). Середнє значення абсолютних величин коефіцієнтів парної кореляції становить $|\bar{r}_{ij}| = 0{,}1406$. Число обу-

Таблиця 2. Квазірегулярні квазірівномірні плани експерименту $2^1{\times}3^2{\times}4^3{\times}5^1{\times}7^1//32$ і $2^1{\times}3^2{\times}4^3{\times}5^1//27$

Кінець табл. 2.

Номер досліду	Фактор							
	F_1	F_2	F_3	F_4	F_5	F_6	F_7	F_8
1	0	1	1	1	1	1	2	3
2	0	2	0	2	0	2	1	5
3	1	0	2	0	2	0	3	1
4	0	1	2	3	2	0	1	2
5	1	0	1	1	0	2	4	6
6	0	1	1	0	3	3	0	4
7	1	2	0	2	1	1	3	0
8	0	2	2	1	0	0	2	3
9	1	1	0	3	2	2	4	0
10	0	0	2	2	1	3	0	2
11	1	2	1	0	3	1	3	5
12	0	0	0	2	2	0	0	6
13	1	2	2	0	0	2	2	3
14	0	1	0	1	3	3	1	1
15	1	0	1	3	1	1	4	4
16	0	1	1	0	1	1	4	1
17	1	0	2	2	3	3	2	5
18	0	0	0	3	0	2	3	3
19	1	2	1	1	2	0	1	0
20	0	0	1	3	3	1	2	1
21	1	1	0	1	1	3	0	4
22	0	2	2	0	2	2	4	6
23	1	1	0	2	0	0	1	2
24	0	1	2	1	1	1	2	5
25	1	2	1	3	3	3	0	2
26	0	2	1	2	0	2	3	0
27	1	0	0	0	2	0	1	4
28	0	2	0	2	3	1	4	5
29	1	1	2	0	1	3	2	1
30	0	0	1	1	2	2	3	3
31	1	1	2	3	0	0	0	6
32	0	2	2	2	3	3	3	6

Таблиця 3. Коефіцієнти парної кореляції факторів F_i плану $2^1 \times 3^2 \times 4^3 \times 5^1 \times 7^1 // 32$

Фактори	F_1	F_2	F_3	F_4	F_5	F_6	F_7	F_8
F_1	1							
F_2	– 0,03626	1						
F_3	– 0,03626	0,0462	1					
F_4	– 0,05929	– 0,12293	– 0,19382	1				
F_5	– 0,08402	– 0,01726	– 0,01726	– 0,03849	1			
F_6	– 0,08402	0,051793	0,051793	– 0,03849	0,2	1		
F_7	– 0,02127	0,055062	0,027094	– 0,09288	– 0,03037	– 0,03037	1	
F_8	– 0,10636	– 0,05955	0,132934	– 0,06303	0,034841	0,034841	– 0,03492	1

мовленості матриці всіх головних ефектів $\text{cond}(\mathbf{X}^\text{T}\mathbf{X}) = 5{,}676$ оцінюється як добре.

Для всіх 154 ефектів частка коефіцієнтів парної кореляції з становить 95,10 %, тобто майже всі ефекти близькі до ортогональних.

Отримані статистичні критерії квазірегулярних і квазірівномірних багатофакторних планів експериментів забезпечують одержання статистичних регресійних моделей з досить добрими критеріями якості — ортогональність ефектів, стійкість структури моделі.

Порівняння багатофакторних регулярних планів і планів на основі рівномірно розподілених ЛПτ-послідовностей виконано в [7, с. 83–89]. Зі сферами використання розробленої методології побудови планів експериментів, стійкого розв’язання регресійних задач в технічних, технологічних, вимірювальних системах і отриманими результатами можна ознайомитися в [8].

Висновки

1. Розроблений і обґрунтований метод генерування квазірегулярних квазірівномірних багатофакторних планів експериментів для випадків, коли вони не наведені у відомих каталогах, дає змогу отримувати плани для довільних поєднань рівнів факторів — безперервних, дискретних, якісних або прийнятих як дискретні.

2. Побудований алгоритм RASTA8 дає можливість одержати план експерименту з використанням як вихідного плану рівномірно розподілених ЛПτ-послідовностей.

3. Проведений обчислювальний експеримент показав, що отримані квазірегулярні квазірівномірні плани експериментів дають можливість одержувати регресійні моделі, що характеризуються різними статистичними критеріями, досить близькими до найкращих можливих їх значень.

Перспектива подальших досліджень: розглянути можливість зменшення корельованості ефектів у генерованому плані експерименту за допомогою аналізу матриці кореляції факторів та модифікації отриманого алгоритму RASTA8.

1. *Радченко С.Г.* Формализация постановки многофакторного экспериментального исследования // Математичні машини і системи. – 2011. – № 1. – С. 96–102.
2. *Радченко С.Г.* Стійке оцінювання статистичних моделей технічних систем: Автореф. дис. ... докт. техн. наук. – К., 2009. – 35 с.
3. *Бродский В.З.* Введение в факторное планирование эксперимента. – М.: Наука, 1976. – 224 с.
4. *Радченко С.Г.* Устойчивые методы оценивания статистических моделей: Монография. – К.: ПП “Санспарель”, 2005. – 504 с.
5. *Соболь И.М., Статников Р.Б.* Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями. – М.: Наука, 1981. – 112 с.
6. *Планирование*, регрессия и анализ моделей PRIAM (ПРИАМ). SCMC–90; 325, 660, 668 // Программные продукты Украины: Каталог. = Software of Ukraine: Catalog. – К., 1993. – С. 24–27.
7. *Лапач С.Н., Пасечник М.Ф., Чубенко А.В.* Статистические методы в фармакологии и маркетинге фармацевтического рынка. – К.: ЗАТ “Укрспецмонтажпроект”, 1999. – 312 с.
8. *Лаборатория* экспериментально-статистических методов исследований. – http://www.n-t.org/sp/lesmi/

Рекомендована Радою
Механіко-машинобудівного інституту
НТУУ “КПІ”

Надійшла до редакції
8 квітня 2011 року