Лекція 5.

ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

Зміст

1. Попереднє експериментальне дослідження

Експериментальні дослідження можна поділити на попередні та основні дослідження. До попередніх відносять дослідження, які стосуються використання апріорної інформації (інформація про об'єкт дослідження, яку накопичило людство до моменту постановки задач дослідження), а також експерименти для відсіювання факторів, або для поліпшення організації експерименту .Основною задачею попередніх експериментальних досліджень є вибір факторів та змінних стану, (функції, відгуки або критерії), які будуть використанні при реалізації основного експерименту.

Критерій є функцією мети та повинен бути кількісною характеристикою параметру оптимізації. Це випадковий змінний параметр, який за передбаченням, залежить від факторів.

Він повинен задовольняти таким вимогам:

- бути кількісним, тобто вимірюватися;
- однозначно вимірювати ефективність об'єкта дослідження;
- бути статистично ефективним, фізично визначеним та мати мінімальну дисперсію.

Слід відзначити, що не завжди є можливість обмежитися одним критерієм. При наявності декількох критеріїв використовують різні способи для їх зменшення [15,23] шляхом зміни формулювання цілі дослідження; розділенням об'єкту дослідження на підоб'єкти; оцінкою наявності кореляційного зв'язку між критеріями; використовують також серії окремих або узагальнених критеріїв тощо. Правильний вибір критерію оптимізації є важливим етапом в експериментальному дослідженні.

Наступним етапом є вибирання факторів, незалежних змінних величин, які за передбаченням впливають на критерій оптимізації (результат експерименту).

При вибиранні факторів дотримуються таких вимог:

- фактори повинні бути сумісними, керованими та здатними за волею експериментатора змінювати своє значення;
- фактори не повинні бути корельованими та бути функціями інших факторів;
- точність вимірювання і управління факторів повинна бути відомою та достатньо високою.

Фактори і критерії оптимізації повинні мати свої області визначення, при цьому області визначення мають бути такими, щоб при їх різній комбінації, області визначення критеріїв не виходили за свої границі. Між факторами і критеріями повинні існувати однозначна відповідність, яка дозволяє в основному експерименті побудувати математичну модель об’єкту дослідження та вирішити задачу експерименту. Важливо в експеримент включити всі фактори. Вважають, що краще включити «зайвий» фактор, аніж пропустити фактор.

Важливим є вибирання нульової точки факторів. Нульову точку (нульовий рівень фактора) вибирають в області оптимуму критерію. При виконаних попередніх чи аналогічних експериментах або в результаті формалізації апріорної інформації за нульові рівні факторів вибирають їх значення, співвідношення яких відповідає оптимуму критерію.

Фактори мають інтервали варіювання, які повинні суттєво відрізнятися від нульового рівня. Рекомендовано, щоб інтервал фактора був більшим подвійної квадратичної похибки вимірювання даного фактора.

При великому інтервалі варіювання фактора, знижується ефективність пошуку оптимуму, так як оптимальну область можна «проскочити». При малому інтервалі варіювання фактора, зростають затрати на пошук оптимуму.

Попередні експерименти, в числі інших задач, вирішують і задачу уточнення інтервалу варіювання факторів. Кількість дослідів N при вибраних $p = const$ рівнях для $к$ факторів визначаються за залежністю:

$$N = p^k \ . \tag{1}$$

Залежність (1) справедлива при рівній кількості рівнів кожного із $к$ факторів.

Збільшуючи кількість рівнів, ми підвищуємо чутливість експерименту, але збільшуємо обсяг експериментальної роботи. Мінімальна кількість рівнів $p=2,$ коли ставиться задача визначити напрям оптимуму на поверхні відгуку. Для цього достатньо поверхню апроксимувати лінійною моделлю:

$$y = в_0 + в_1\, x_1 + в_2\, x_2 + \ \dots\ + в_n\, x_n. \tag{2}$$

Лінійна модель має невелику кількість коефіцієнтів, аналіз моделі підказує напрямок найшвидшого поліпшення параметра оптимізації.

2. Апріорне ранжування факторів (метод рангової кореляції)

Виробничі процеси визначаються великою кількістю факторів контрольованих та неконтрольованих. Частина факторів є малозначимими, які не значно впливають на параметри оптимізації досліджуваного об’єкту. Проте в процесі дослідження неконтрольовані фактори можуть викликати розкид значень параметрів оптимізації досліджуваного об'єкту, тобто результати дослідів різних повторностей, при фіксованих значеннях контрольованих факторів будуть відрізнятися один від одного. Окрім цього, на результати впливають також взаємодія контрольованих і не контрольованих факторів. Тому в процесі дослідження виникає потреба відсіяти незначимі та виявити значимі фактори, які суттєво впливають на параметри оптимізації (критерії) досліджуваного об'єкту. В процесі оцінки ефективності технологічних систем є потреба в багатофакторних дослідженнях з великим обсягом експериментальної роботи. Для зменшення її, необхідно скорочувати кількість факторів, що є ризикованим заходом, тому що помилкове відсіювання значимого фактора приводить до помилкових результатів. Отже, при відсіюванні факторів експериментатор, повинен вивчити та проаналізувати апріорну інформацію, яка опублікована в літературних джерелах, звітах тощо та узагальнити і оцінити досвід наукових шкіл досліджуваного напрямку.

Суть апріорного ранжування полягає в тому що:

- аналізують апріорну інформацію та складають список факторів, які впливають на вибраний критерій;
- обґрунтовують область визначення факторів і критеріїв (параметрів оптимізації);
- заготовляють анкети для опитування експертів, де передбачена можливість виранжовування, кожним із експертів факторів за значимістю їх впливу на критерії. Надається можливість експертам уточнити область визначення, інтервали варіювання кожного із факторів та вказати їхню розмірність;
- експертів вибирають з представників наукових шкіл, які займаються задачами досліджуваного напрямку;
- ранг кожного із факторів експерт визначає суб'єктивно, за власного припущення. При цьому фактори з меншим номером рангу є більш значимими від факторів з вищим номером. Коли експерт утрудняється у виборі рангів факторів, тоді цим факторам присвоюються однакові ранги, значення яких є середнім арифметичним із суми їх рангів, таблиця 1.

В процесі ранжування експерту дозволяється добавляти чи відкидати фактори, а факторам, які не мають кількісної оцінки також присвоювати певний ранг значимості.

Після збирання анкет, складають таблицю 1, де основним елементом її є a_{ij}, ранг j – того фактора, яким його оцінює i – тий експерт. Узгодженість думок експертів по кожному фактору оцінюють коефіцієнтом узгодженості W, який може приймати значення у межах від 0 до 1. При W=0, узгодженість думок експертів, про оцінку даного фактора, відсутня, а при W=1 – має місце повна узгодженість думок експертів. Склавши таблицю 1 у вигляді матриці, з розмірністю m K, ми спрощуємо розрахунок W.

Таблиця 1

Матриця ранжування факторів

Експерти	a_{ij}						T_i
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	
1	1,5	5	1,5	4	3	6	2^3-2=6
2	2	3	1	4,5	4,5	6	2^3-2=6
3	2	3	1	5,5	5,5	4	2^3-2=6
4	1,5	3,5	1,5	5	3,5	6	2^3-2+2^3-2=12
$\sum a_{ij}$	7	14,5	5	19	16,5	22	$\sum T_i = \frac{30}{12} = 2{,}5$
d_j	-7	0,5	-9	5	2,5	8	
d^2_j	49	0,25	81	25	6,25	64	$\sum_1^6 d_j^2 = 225{,}5$

При цьому кількість i - тих експертів $i = m$, а кількість j - тих факторів $j = к.$

Сума за рядком рівна сумі чисел натурального ряду від 1 до $к$, який експерт розміщує у певному порядку.

Середнє по рядках всієї таблиці розраховують:

$$a = 0{,}5 \cdot m\,(к + 1), \tag{3}$$

Сума квадратів відхилення рангів від середньої суми рангів:

$$S = \sum_{j=1}^{k}\left(\sum_{i=1}^{m} a_{ij} - a\right)^2 . \tag{4}$$

Тоді коефіцієнт узгодженості (коефіцієнт конкордації), при наявності цілочисельних рангів:

$$W = \frac{S}{\frac{1}{12} m^2 \left(k^3 - k\right)} , \tag{4}$$

а при дробових рангах:

$$W = \frac{S}{\frac{1}{12} m^2 \left(n^3 - n\right) - m\sum_{\dot{y}}^{y} T_i} , \tag{5}$$

де T_i – показник, який враховує дробові ранги для рівних рангів у рядку.

При цьому

$$T_i = \frac{1}{12}\sum_{v=1}^{y}\left(t_v^3 - t_v\right) , \tag{6}$$

де t_v – кількість рівних рангів у рядку.

Для прикладу, табл. 1, визначаємо за залежністю (5), W=0,805 та оцінюємо значимість коефіцієнта узгодженості за критерієм Пірсона (χ^2). Гіпотезу про значимість W і наявність узгодженості думок експертів встановлюємо за співвідношеннями значень:

$$\chi_p^2 \geq \chi_T^2, \tag{7}$$

де χ_T^2 - табличне значення критерія Пірсона, при ступені свободи $f = k - 1 = 5$.

$$\chi_T^2 = 11{,}07.$$

а розрахункове вираховується за залежністю:

$$\chi_p^2 = m(k-1)W = 16{,}1, \tag{8}$$

тобто $\chi_p^2 > \chi_T^2$ при q =5%, означає, що W=0,805 є значимим і думки експертів є узгодженими.

Після цього будують ранжувальну діаграму. Для цього на осі ординат відкладають суму рангів по кожному із факторів у зворотньому порядку, а по осі абсцис – фактори, рис.1.

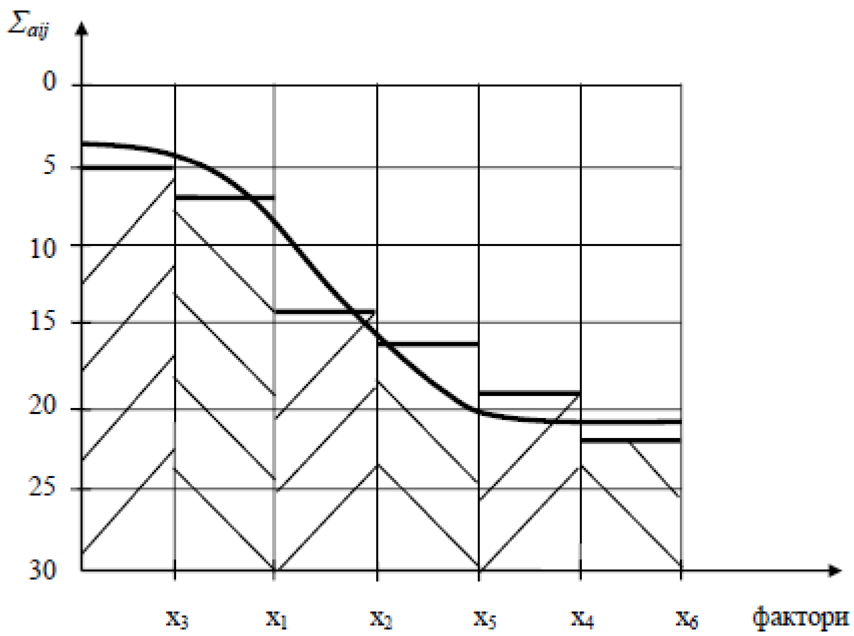


Рис.1. Ранжувальна гістограма

Гістограма, рис.1, свідчить, що вона є нерівномірною і рішення має бути, в залежності від цілей та задач дослідження, а саме:

І-й варіант – до плану експерименту необхідно включати найбільш значимі фактори x_3 і x_1 ;

ІІ-й варіант – до плану експерименту включати, щоб уникнути ризику отримати неправильний результат, фактори x_3 і x_1 та x_2 і x_5 ;

ІІІ-й варіант – фактори x_4 і x_6 відсіяти. При цьому слід пам'ятати, що значення рангів суб'єктивні.

Отже, для отримання лінійної моделі, експериментатору необхідно виконати повний факторний експеримент (ПФЕ) типу $2^к$, з

$2^2 = 4$ дослідами в першому варіанті; або $2^4 = 16$

дослідами в другому варіанті; або нарешті, $2^6 = 64$

дослідів, в варіанті ПФЕ.

Апріорне ранжування використовують при нелінійній гістограмі ранжування, а при лінійній та експоненціальній, необхідно використати інші методи, зокрема метод випадкового балансу тощо.

3. Метод випадкового балансу

Метод апріорного ранжування (метод рангової кореляції) використовують лише у випадках, коли гістограма ранжування є нелінійною. При лінійній та експоненціальній ранжувальних гістограмах, рис. 2 і при кількості факторів $к \geq 7$, , використовують метод випадкового балансу.

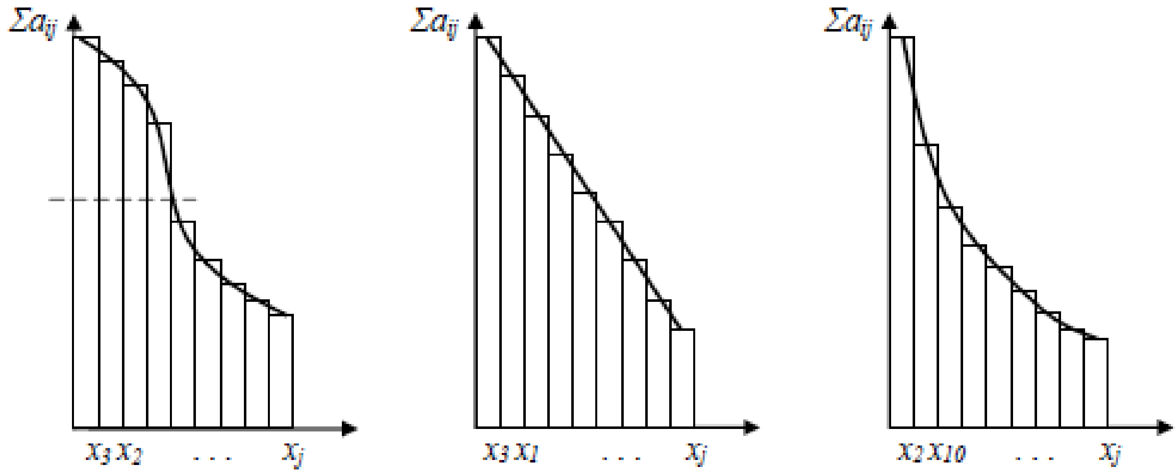


Рис.2 Типи ранжування гістограм при нелінійному, лінійному та експоненціальному розподіленні суми рангів.

Сутність методу полягає в постановці експерименту за складеним планом та виділення певної кількості лінійних факторів та факторів взаємодії (x_i, x_j) на основі значимих ефектів. При цьому відомо, якщо всі ефекти розмістити в порядку зменшення внеску, який вони забезпечують в дисперсію критерію (параметра) оптимізації, то отримаємо виранжований ряд, зі зменшенням експоненціального типу. В разі відтворення цього ряду за допомогою невеликої кількості дослідів, можна виділити ефекти, які відносять до шумового поля, а значимі ефекти використовують в подальшому плануванні експерименту. Для цього складають плани експериментів з умовою:

$$к > N - 1, \tag{9}$$

де $к$ – кількість факторів, які плануємо оцінювати; N - загальна кількість дослідів.

Таким чином, в такому експерименті ступінь свободи f є від'ємною, а чутливість цього методу є невисокою, тому він не може бути використаний для побудови математичної моделі. Його призначення: оцінити значимість факторів і не значимі фактори відкинути, тим самим спростити математичну модель, скоротити трудомісткість експерименту.

Метод отримав назву із-за побудови матриці з використанням випадкового методу змішування напівреплік (рівні в стовпчиках плану вибирають за таблицею випадкових чисел). При цьому фактори змінюються на двох рівнях «+» та «-». Всі фактори на підставі апріорного ранжування поділяють на дві групи, кожна з яких повинна бути не чисельнішою $K_{гр} \leq 6$.

Для кожної групи будують матрицю, (табл.2) кількість дослідів в яких є кратним $2^к$, тобто 8, 16, 32 тощо, та перевищувало $N > к + 1$.

В першу групу відносять більш значимі фактори. Один із можливих планів експерименту подано на таблиці

Таблиця 2

Приклад плану експерименту за методом випадкового балансу

Номер досліду	I частина					II частина					
	x_1	x_3	x_4	x_2	x_5	x_8	x_7	x_9	x_6	x_{10}	y
1	-	-	-	-	-	-	-	-	+	+	y_1
2	+	+	-	-	-	+	+	-	-	-	y_2
3	+	-	+	+	+	+	-	+	-	-	y_3
4	-	+	+	+	+	-	-	-	-	-	y_4
5	+	-	+	-	-	+	-	-	+	-	y_5
6	-	+	+	-	-	+	+	+	-	+	y_6
7	-	-	-	+	+	+	-	-	-	+	y_7
8	+	+	-	+	+	+	-	+	+	+	y_8
9	+	-	-	-	+	-	+	+	-	-	y_9
10	-	+	-	-	+	-	+	-	+	-	y_{10}
11	-	-	+	+	-	-	+	+	+	+	y_{11}
12	+	+	+	+	-	-	-	+	-	+	y_{12}
13	+	-	-	+	-	+	+	-	+	+	y_{13}
14	-	+	-	+	-	-	-	+	+	-	y_{14}
15	-	-	+	-	+	-	+	-	-	+	y_{15}
16	+	+	+	-	+	+	+	+	+	-	y_{16}

Матрицю плану експерименту, за методом випадкового балансу, можна будувати двома шляхами:

- випадкове розподілення рівнів по стовпчиках за допомогою таблиці випадкових чисел (це частий випадковий баланс);

- випадкове змішування регулярних дробових реплік факторного (див. підрозділ 3.3.) експерименту.

Другий шлях є більш розповсюдженим, а перший є менш ефективним і використовують його рідше, зокрема, коли кількість рівнів факторів більше 2. При змішуванні дробових реплік використовують напіврепліки. Для однієї половини факторів, більш значимих, напіврепліка використовується безпосередньо, а для других факторів – рівні розподіляються випадковим вибором рядків (за таблицею випадкових чисел) із тієї же напіврепліки. Фактори розподіляють по стовпчиках, щоб у першій половині матриці вони були значимі, на підставі раніше виконаного апріорного ранжування. Такий підхід скорочує наступний експеримент, так як дозволяє після аналізу результатів попереднього експерименту переходити до методу крутого сходження.

Матриця експерименту придатна, коли:

- в ній відсутні корельовані фактори (стовпчики), тобто знаки у двох стовпчиках співпадають;
- в матриці не повинно бути стовпчиків, скалярний добуток яких дає стовпчики з одними «+» чи «-» знаками.

Після реалізації дослідів в останній стовпчик матриці вписують їхні результати кожної повторності та середній результат.

Аналіз отриманих результатів розпочинають із побудови діаграм розсіювання. Для цього на осі абсцис наносять всі фактори з їхніми рівнями, а на осі ординат – дослідні значення критерія (параметра) оптимізації.

Кожний фактор аналізують незалежно від інших, і якщо фактор варіювали на двох рівнях (+ і -) то точки поділяються на дві групи, рис. 3.

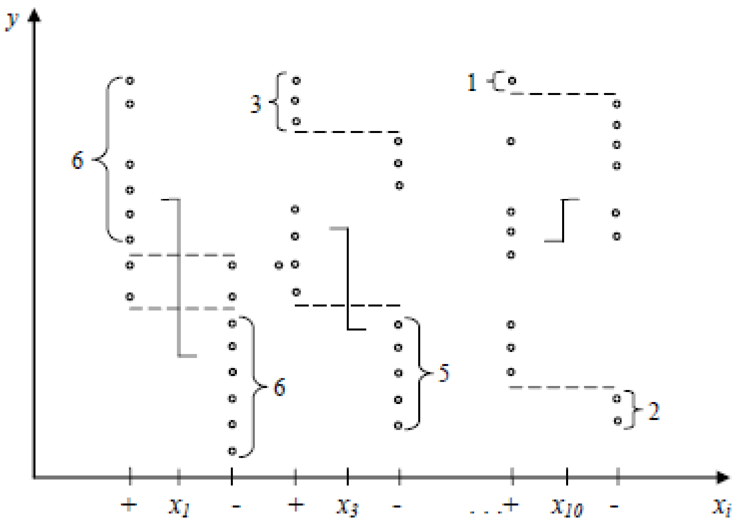


Рис. 3. Діаграма розсіювання результатів дослідів за рівнями факторів

Рис. 3. приклад побудови діаграми розсіювання за дослідними даними табл.5, на кожному рівні, знаходиться по 8 значень кожного із факторів. Для аналізу вибираємо метод медіан або метод виділених точок. Медіаною називають лінію, по обидві сторони якої лежить половина точок (результатів), для даного прикладу це 4 точки з 8. Різниця між медіанами двох рівнів кожного фактора якісно оцінює вплив цього фактора на критерій (параметр) оптимізації. Таким чином, побудована діаграма розсіювання, дає можливість візуально оцінити вплив кожного із аналізованих факторів, в т.ч. і найбільш значимих. Для даного прикладу, найбільш значимим є фактор x_1 , а найменш значимим – x_{10} , за висотою різниці медіан.

Другий метод виділених точок, передбачає відокремлення пунктирною лінією точок певного рівня від масиву точок протилежного рівня у верхній та нижній частинах діаграми розсіювання. Для нашого прикладу, для фактора x_1 виділених точок 6+6=12; для фактора x_3 відповідно 3+5=8, а для x_{10} 1+2=3 точки. Точки, які виділенні позначені фігурними дужками і більша кількість точок свідчить про вищу значимість даного фактора.

Для кількісної оцінки факторів, виділяють значимі фактори. Для цього, з діаграми розсіювання вибирають декілька факторів з максимальним значенням медіани або кількості виділених точок.

Після цього будують таблицю з декількома значимими факторами і входами, для прикладу табл.3., результати в загальному вигляді беремо з табл.2.

Таблиця 3

x_4	x_1 «+»		x_1 «-»	
	x_3 «+»	x_3 «-»	x_3 «+»	x_3 «-»
«+»	y_{12} $\underline{y_{16}}$ $\bar{y}_1$	y_3 $\underline{y_5}$ $\bar{y}_2$	y_4 $\underline{y_6}$ $\bar{y}_5$	y_{11} $\underline{y_{15}}$ $\bar{y}_6$
«-»	y_2 $\underline{y_8}$ $\bar{y}_3$	y_9 $\underline{y_{13}}$ $\bar{y}_4$	y_{10} $\underline{y_{11}}$ $\bar{y}_5$	y_1 $\underline{y_7}$ $\bar{y}_8$

Аналізуючи табл.3 вибираємо ті значення критерія оптимізації y, які забезпечують фактори x_1, x_3 і x_4 на відповідних рівнях. Так, при $+x_1$ і $+x_3$ та $+x_4$ матимемо критерій y_{12} та y_{16} тощо. Ефекти факторів вираховуємо, віднявши від суми середніх значень критеріїв при x_i на верхньому рівні суму середніх значень критеріїв при x_i на нижньому рівні:

$$ефX_1 = \frac{\bar{y}_1 + \bar{y}_2 + \bar{y}_3 + \bar{y}_4}{4} - \frac{\bar{y}_5 + \bar{y}_6 + \bar{y}_7 + \bar{y}_8}{4},$$

$$ефX_3 = \frac{\bar{y}_1 + \bar{y}_3 + \bar{y}_5 + \bar{y}_7}{4} - \frac{\bar{y}_2 + \bar{y}_4 + \bar{y}_6 + \bar{y}_8}{4},$$

$$ефX_4 = \frac{\bar{y}_1 + \bar{y}_2 + \bar{y}_5 + \bar{y}_6}{4} - \frac{\bar{y}_3 + \bar{y}_4 + \bar{y}_7 + \bar{y}_8}{4}.$$

Оцінку значимості x_i ефектів здійснюють за критерієм Стьюдента. Після цього виконують корегування вихідних даних матриці плану.

Для цього до всіх значень y плану відсіваючого експерименту, де фактори x_i на рівні «+», додають ефект x_i але із зворотнім знаком. Отримують нові результати скоригованого плану. За скоригованим планом будують нову діаграму розсіювання і виділяють значимі ефекти. Так проводять коригування для лінійних ефектів та ефектів взаємодії до часу, коли розраховані ефекти будуть набагато менше раніше отриманих ефектів. Процедуру виділення значимих лінійних факторів та факторів взаємодії є достатньо трудомісткими, а тому їх доцільно реалізовувати на ЕОМ.

4. Плани експерименту першого порядку

Задачею планів експерименту першого порядку є отримання лінійної математичної моделі типу:

$$y = в_0 + \sum в_i x_i \quad , \tag{10}$$

яка може бути використана для описування поверхні відгуку (інтерполяційна модель) або для оптимізації об'єкта дослідження (оптимізаційна модель). Для оптимізації об'єкта дослідження використовують частіше всього математичну модель другого порядку. Побудову такої моделі здійснюють після реалізації плану експерименту другого порядку, у вибраній локальній області оптимуму лінійної моделі, методами пошуку оптимуму (градієнтні методи, методи надшвидкого спуску, метод крутого сходження тощо.)

Отримують лінійну математичну модель після реалізації факторного експерименту при якому всі фактори варіюють за певним планом. При цьому дослідник виконує таку роботу:

- збирання та аналіз апріорної інформації;
- вибір вхідних та вихідних змінних і області їх змінювання;
- вибір математичної моделі за допомогою якої будуть подаватися данні експерименту;
- вибір критерія оптимальності та плану експерименту;
- визначення методу аналізу оптимальних даних;
- виконання експерименту;
- перевірка статистичних передумов для отримання експериментальних даних;
- обробка отриманих результатів;
- інтерпретація результатів та рекомендації з їх використання.

Вхідні змінні називають факторами і вони визначають стан досліджуваного об'єкту. Фактори повинні бути керованими, тобто значення їх ми можемо встановлювати та підтримувати певний час. Встановлене і підтримуване значення фактора називають рівнем. Це є особливістю активного інженерного експерименту. Фактори можуть бути кількісними і якісними. Так, фактори подачі (кг/с), швидкості (м/с), ширини захвата (м) тощо, є кількісними. Основною їх ознакою є числова шкала. Конструкція ТС, кваліфікація чи стан водія, рівень комфортності роботи, оператора тощо – це все якісні фактори, стан яких не відповідає або умовно відповідає числовим шкалам. Фактори, окрім цього, повинні відповідати вимогам і бути незалежними (не корельовані) змінними, бути однозначними, сумісними з іншими факторами, вимірюватися з певною точністю, мати свою область визначення. При цьому, вибирають рівні факторів. Рівні кожного із факторів вибирають із передумови визначення основного (нульового) рівня. Нульовий рівень повинен бути в області оптимуму. Інтервал варіювання факторів має бути таким, щоб значення факторів, які відповідають рівням +1 і -1 відрізнялися від їх значення на нульовому рівні. При цьому необхідно виходити з нерівності, що:

$$x_{i_{\max}} - x_{i_{\min}} > \Delta X_i \geq 2S_{xi}\,; \tag{11}$$

де ΔX_i – інтервал варіювання i -того фактора; $x_{i_{\max}} - x_{i_{\min}}$ – область визначення i -того фактора; S_{xi} - середня квадратична помилка фіксування x_i -того фактора.

Мале значення Δx_i небажане, так як воно може не відрізнятись від нульового значення і помилки, та в подальшому збільшує обсяг роботи при пошукові оптимуму. Велике значення Δx_i знижує пошук ефективності оптимуму, так як оптимум може бути «проскочено». Великий Δx_i може штучно підвищити значимість ефектів тих чи інших факторів. Тому вибір інтервалу факторів є відповідальним етапом .

Визначення рівнів факторів у кодованій формі здійснюють за залежністю:

$$x_i = \frac{X_i - X_{oi}}{\Delta X_i}, \tag{12}$$

де X_i – значення i - того фактора у його області визначення;

X_{oi} – значення основного (нульового) рівня i - того фактора.

Інтервал варіювання вибирають на підставі апріорної інформації (або інтуїтивно), а потім уточняють (якщо він невдало вибраний), після отримання і аналізу математичної моделі.

Слід відзначити, що одночасно з вибором інтервалів варіювання факторів, вибирають і кількість їх рівнів. Більша кількість рівнів забезпечує точність моделі та високу чутливість експерименту. При цьому, кількість рівнів збільшує обсяг експерименту та підвищує ефективність оптимізації моделі. Кількість дослідів в експерименті при однаковій кількості рівнів кожного фактора визначається:

$$N = p^k \tag{13}$$

де p – кількість рівнів; $к$ – кількість факторів.

Мінімальна кількість рівнів складає $p=2$, тобто *у* кодовій формі, верхній – *«+1»,* а нижній – *«-1».* Варіювання на двох рівнях є доцільним при експериментах відсіювання, на етапі руху в область оптимуму, а також при описуванні інтерполяційної моделі (лінійної моделі).

На етапі підготовки експерименту, дослідник повинен пам'ятати, що його складність мають диктувати задачі, які ставляться перед експериментом і, що зайві заощадження, які пов'язані з відсіванням факторів, можуть призвести до збільшення помилки та отримання не вірних результатів.

Вихідні змінні (параметри оптимізації, критерії оптимізації, функція відгуку тощо) – це реакція на дію вхідних змінних. Вихідні змінні залежать від специфіки дослідження й можуть бути технологічними, економічними, технічними тощо. Критерій оптимізації має бути ефективним, універсальним, кількісним, просто і легко розраховуватися та вимірюватися. Він повинен бути єдиним, мати фізичний зміст і не корелюватися з іншими параметрами. При необхідності мати декілька критеріїв оптимізації, дослідник повинен використати методи переходу до нормованих, непрямих чи узагальнених критеріїв тощо.

Найбільш простим планом експерименту є такий, що зводиться до вибирання експериментальних точок симетричних відносно центру експерименту. В такому випадку всі *к* факторів варіюють на двох рівнях і план називається повнофакторним на двох рівнях, типу $2^к$, так як в ньому реалізуються всі можливі сполучення рівнів факторів, табл. 4.

Повнофакторний експеримент (ПФЕ) типу $2^к$ повинен мати такі властивості:

Симетричність відносно центру експерименту

$$\sum_{i=1}^{N} x_{ij} = 0 , \tag{14}$$

де j – номер досліду ($j = 1,2,...,N$); i – номер фактора $(i=1,2,..., к)$.

Запис 14 означає, що алгебраїчна сума елементів вектора – стовпчика для кожного фактора рівна 0.

Умова нормування вимагає, щоб сума квадратів елементів кожного стовпчика була рівна кількості дослідів:

$$N = \sum_{j=1}^{N} x_{ij}^{2} . \tag{15}$$

Ця властивість притаманна лише для матриці плану експерименту у кодованій формі.

Ортогональність передбачає, що сума почленних добутків будь-яких двох вектор-стовпчиків матриці має бути рівною 0:

$$\sum_{j=i}^{N} x_{ij} x_{uj} = 0, \quad u \neq i, \quad i,u = 1,2,\ldots,x . \tag{16}$$

Завдяки ортогональності, ПФЕ дозволяє оцінити лінійні ефекти та ефекти взаємодії.

Ефектом фактора є зміна значення критерія оптимізації при змінні рівня фактора. Так, нехай ми маємо двох факторний експеримент з факторами А і В, то згідно з визначенням ефекту, вплив фактора А буде:

$$A = {}^{1}\!/_{2} \left[a - (1) + ав - в \right]. \tag{17}$$

де $а – (1)$ – означає, що фактор до А знаходиться на верхньому рівні ($а$), а ефект взаємодії факторів А і В знаходиться на нижньому рівні ($а^0\, в^0 = 1$);

$ав – в$ – означає, що фактор В знаходиться на верхньому рівні ($в$), а ефект взаємодії факторів А і В знаходяться на верхньому рівні ($а\ в$).

Таблиця 4

Матриця повнофакторного експерименту типу (ПФЕ), 2^5

№ досліду	a (x_1)	b(x_2)	Кодове позначення експеримента 2^2	c(x_3)	Кодове позначення експерименту 2^3	d(x_4)	Кодове позначення експерименту 2^4	e(x_5)	Кодове позначення експерименту 2^5
1	+	+	a b	+	a b c	+	a b c d	+	abcde
2	-	+	b	+	b c	+	b c d	+	bcde
3	+	-	a	+	a c	+	a c d	+	acde
4	-	-	(1)	+	c	+	c d	+	cde
5	+	+		-	a b	+	a b d	+	abde
6	-	+		-	b	+	b d	+	bde
7	+	-		-	a	+	a d	+	ade
8	-	-		-	(1)	+	d	+	de
9	+	+		+		-	a b c	+	abce
10	-	+		+		-	b c	+	bce
11	+	-		+		-	a c	+	ace
12	-	-		+		-	c	+	ce
13	+	+		-		-	a b	+	abe
14	-	+		-		-	b	+	be
15	+	-		-		-	a	+	ae
16	-	-		-		-	(1)	+	e
17	+	+		+		+		-	a b c d
18	-	+		+		+		-	b c d
19	+	-		+		+		-	a c d
20	-	-		+		+		-	c d
21	+	+		+		+		-	abd
22	-	+		-		+		-	bd
23	+	-		-		+		-	ad
24	-	-		-		+		-	d
25	+	+		+		-		-	abc
26	-	+		+		-		-	bc
27	+	-		+		-		-	ac
28	-	-		+		-		-	c
29	+	+		-		-		-	ab
30	-	+		-		-		-	b
31	+	-		-		-		-	a
32	-	-		-		-		-	(1)

Відповідно середній ефект фактора *B* запишеться:

$$B = \frac{1}{2}\left[в - (1) + ав - а\right], \quad (18)$$

а відповідно середній ефект взаємодії факторів А і В:

$$AB = \frac{1}{2}\{[ab - b] - [a - (1)]\} = \frac{1}{2}\{[ab - a] - [b - (1)]\}, \tag{19}$$

Ефект взаємодії факторів АВ вважають за третій фактор.

При вивченні великої кількості факторів, можна вивчити більшу кількість ефектів взаємодії факторів. Кількість ефектів взаємодії факторів розраховують за залежністю:

$$C_k^m = \frac{k!}{m!(k-m)!}, \tag{20}$$

де *к!* – факторіал кількості факторів, *к!* = 1,2,3,….,*к*; *m!* – факторіал кількість взаємодіючих факторів, *m!*=1,2,3,…, *m*.

Порядок взаємодії факторів визначається так: ефекти факторів взаємодії нульового порядку; парні ефекти – є ефектами взаємодії першого порядку; потрійні ефекти – є ефекти взаємодії другого порядку тощо.

Ортогональність матриць планування дозволяє при обробці даних методом найменших квадратів, отримати незалежні один від одного оцінки коефіцієнтів рівняння регресії. Це значить, що величина любого коефіцієнта не залежить від того, які величини мають інші коефіцієнти.

Ефекти взаємодії третього порядку фізично є невизначеними та є не значимими.

Незалежність оцінок коефіцієнтів моделі, які оцінюють ефекти, можна отримати тільки при спеціально запланованому експерименті, табл.6.

Наведена матриця задовольняє вимогам симетричності, нормуванню ортогональності та ротатабельності. Кодове позначення досліду експерименту любого типу передбачає записування рядком латинськими буквами, де прийнята така умовність: позначається латинськими буквами відповідний фактор на верхнім рівні *(a, в, c, d, …)* якщо декілька факторів в досліді на верхнім рівні, (*ав, вс, cd, або авс, abd, abe або abcd, abce, abc* тощо); якщо всі фактори в досліді на нижнім рівні то ставлять (1). Таким чином, матриця ПФЕ 2^2 запишеться: *ав, в, а,* (1) а матриця типу 2^3 запишеться: *авс,вс, ас, с, ав, в, а,* (1) тощо. Матрицю для любого числа факторів (*к*) можна побудувати за одним із правил:

- для побудови матриці ПФЕ любого числа факторів *к* , необхідно двічі повторити матрицю планування для випадку (*к* = 1), спочатку при значенні нового (*к*-того) фактора на верхньому рівні, а потім на нижньому (див. табл.7);

- правило перемноження стовпчиків матриці, передбачає порядкове перемноження рівнів вихідної матриці отримують додатковий стовпчик добутку. Потім повторюємо отриманий план, а у отриманого додаткового стовпчика знаки змінюємо на зворотній. Цей же прийом повторюємо при отриманні матриць будь-якої розмірності. Так, при отриманні матриці плану типу 2^3 з планом типу 2^2, використовуємо добуток $x_1 x_2$, при отриманні матриці плану типу 2^4 із плану типу 2^3, використовуємо добуток $x_1 x_2 x_3$ і так далі;

- правило чергування знаків в першому стовпчику знаки змінюються почергово, у другому – через два рази, у третьому - через чотири рази, в четвертому – через вісім тощо. Тобто знаки чергуються через $2^{к-1}$, починаючи з другого стовпчика.

Побудована матриця планування дає можливість досліднику здійснити експеримент з дослідами потрібної повторності. Після цього, оцінюються ефекти факторів, які кількісно виражаються через значення відповідного коефіцієнта регресії. Значення вільного члена рівня регресії ($в_0$) розраховують як середнє арифметичне всіх значень параметра оптимізації: N

$$в_0 = \frac{\sum_{1}^{N} y_u}{N}, \tag{21}$$

де y_u – значення параметру оптимізації в u - ому досліді, $u = 1,2,3,...,N$; N – кількість дослідів у матриці, $N = 2^к$.

Лінійні коефіцієнти регресії розраховують за залежністю:

$$в_i = \frac{\sum_{1}^{N} x_{iu} y_u}{\sum_{1}^{N} x_{iu}^2} = \frac{\sum_{1}^{N} x_{iu} y_u}{N}, \tag{22}$$

де x_{iu} – кодоване значення фактора дослідів.

Так, при реалізації матриці, табл.5, записаної в загальному вигляді, ефекти факторів (значення коефіцієнтів) розраховуємо за залежностями, які записуються через дані таблиці

$$в_0 = \frac{y_1 + y_2 + y_3 + y_4}{4},\ в_1 = \frac{+y_1 - y_2 + y_3 - y_4}{4} \text{ та } в_2 = \frac{+y_1 + y_2 - y_3 - y_4}{4}. \tag{23}$$

Таблиця 5.

Матриця планування 2^2

Номер досліду	x_0	x_1	x_2	y
1	+	+	+	y_1
2	+	-	+	y_2
3	+	+	-	y_3
4	+	-	-	y_4

Звідси математична модель запишеться в загальному вигляді:

$$y = в_0 + в_1 x_1 + в_2 x_2.$$

Таким же чином отримують лінійну модель з 1,2,3,…$к$ кількістю факторів, яка використовується для описування поверхні відгуку або для пошуку значень критеріїв (параметрів) оптимізації технологічної (технічної) системи.

Отримана лінійна модель дає можливість досліднику прийняти відповідні рішення інтерпретуючи належним чином модель. Переведення моделі з абстрактної математичного змісту на зміст зрозумілий експериментатором і є інтерпретацією моделі. Інтерпретація передбачає:

- оцінку величини і напрямку впливу окремих факторів і їх взаємодії;
- порівняння впливу сукупності факторів;
- перевірку правильності апріорної інформації;
- перевірка висунутих гіпотез про механізм досліджуваних процесів, явищ.

При цьому виникає безліч ситуацій, які відрізняються за адекватністю чи неадекватностю моделі, значимості чи не значимості коефіцієнтів регресії, положенням оптимуму тощо, рис.4, 5 і 6.

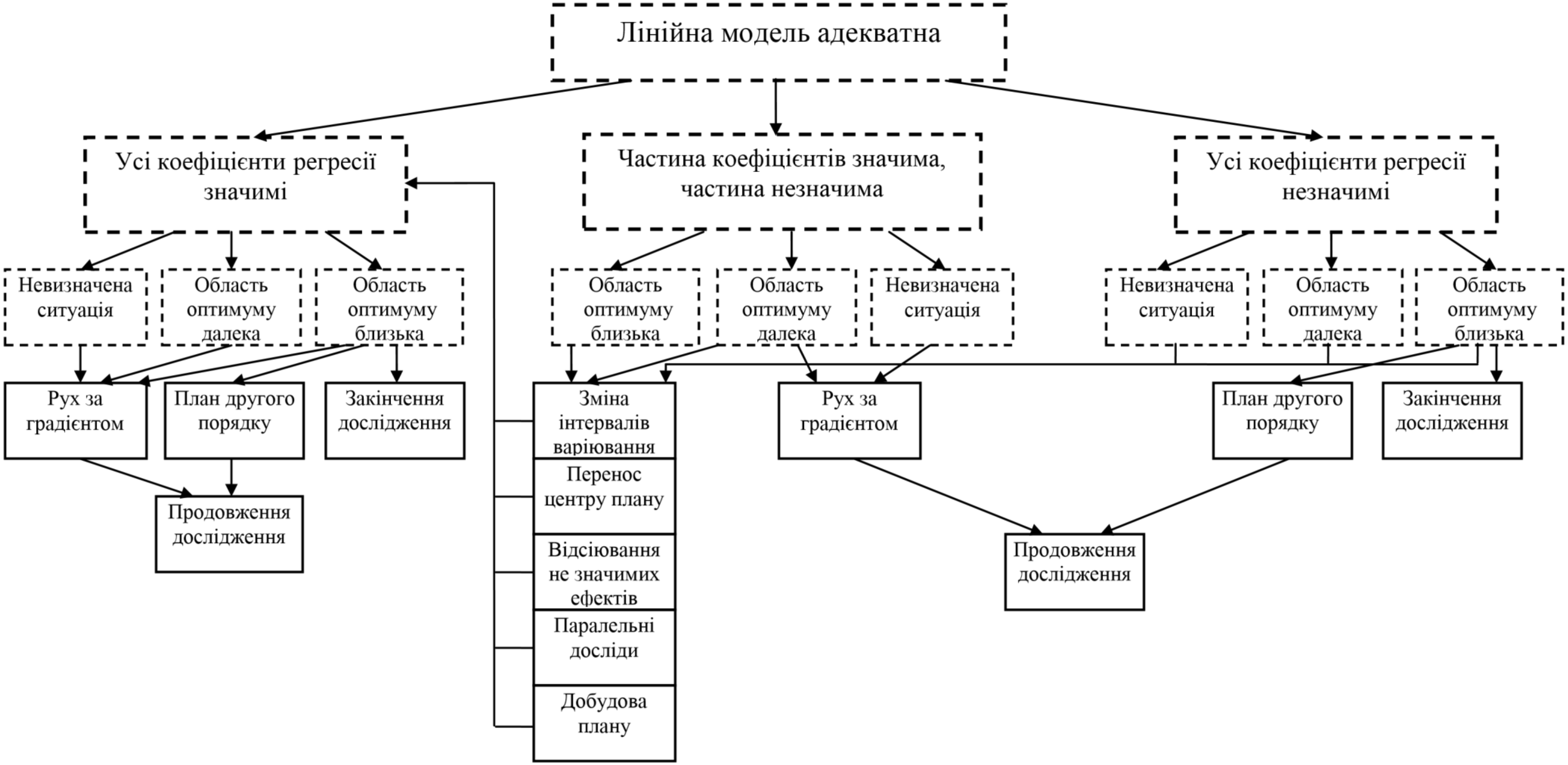


Рис. 4. Блок-схема приймання рішення в оптимальних задачах при адекватній лінійній моделі

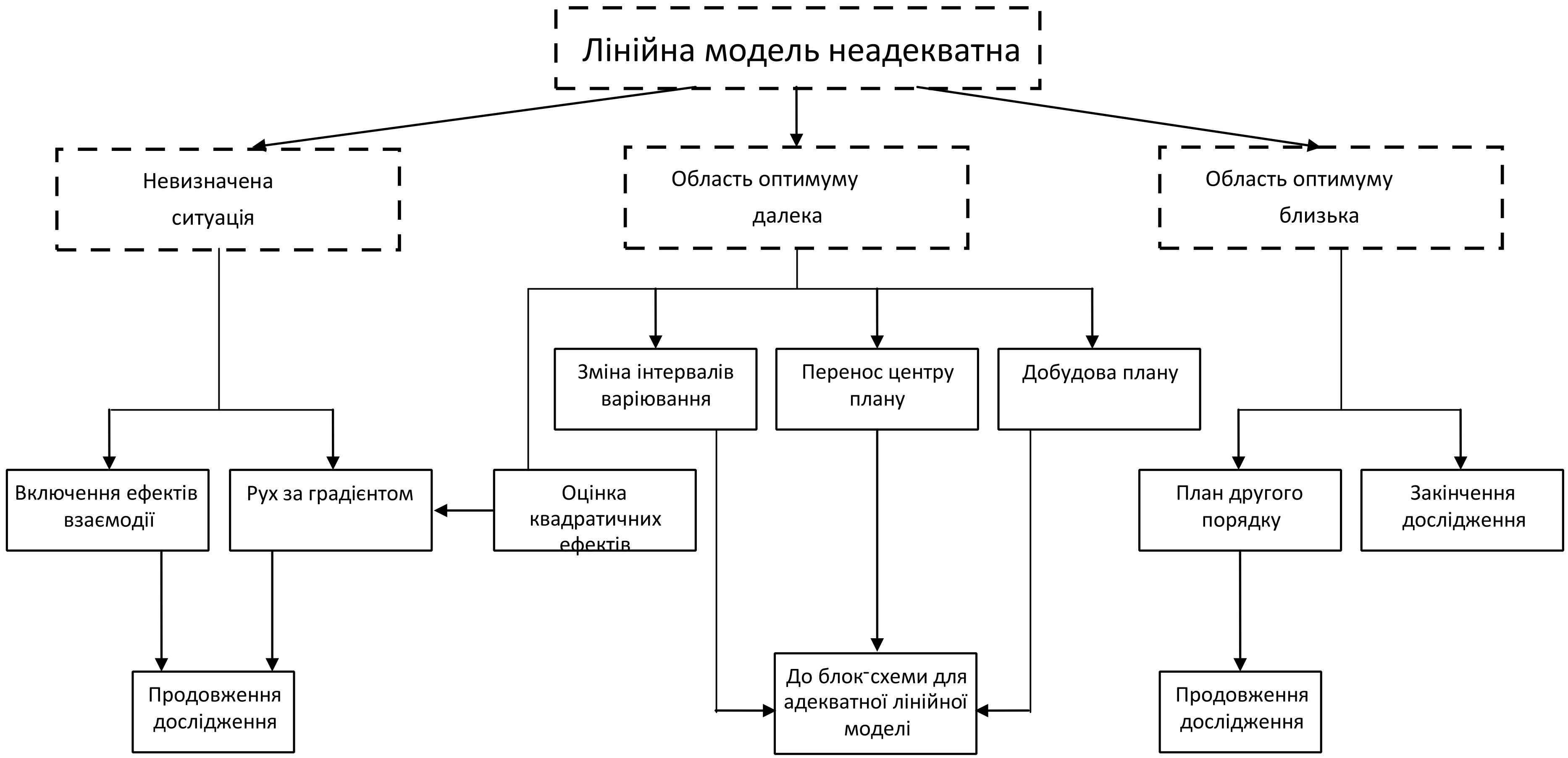


Рис. 5. Блок – схема приймання рішення в оптимальних задачах при неадекватних лінійних моделях

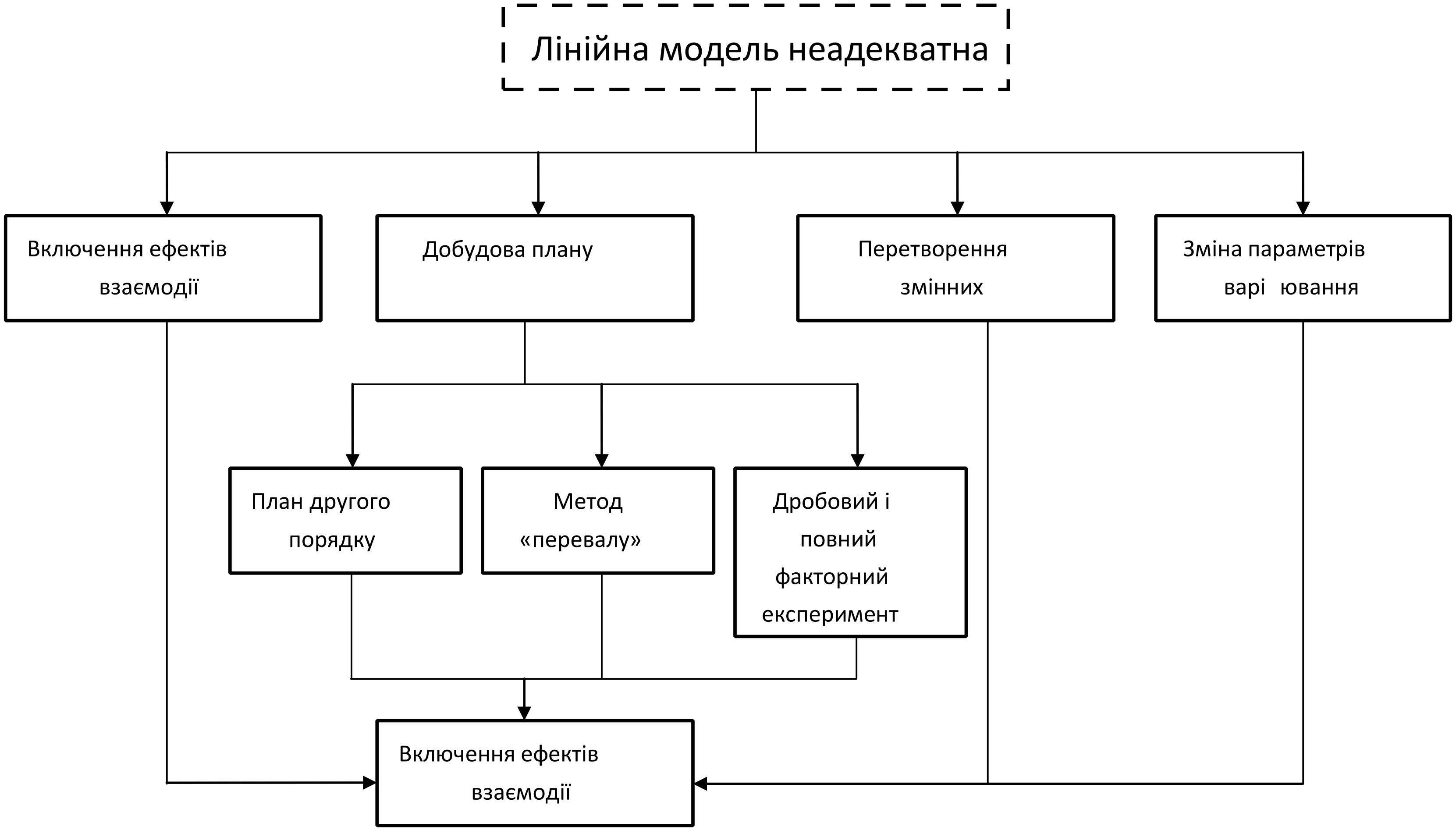


Рис. 6. Блок-схема приймання рішення при неадекватній лінійній моделі для отримання інтерполяційної залежності

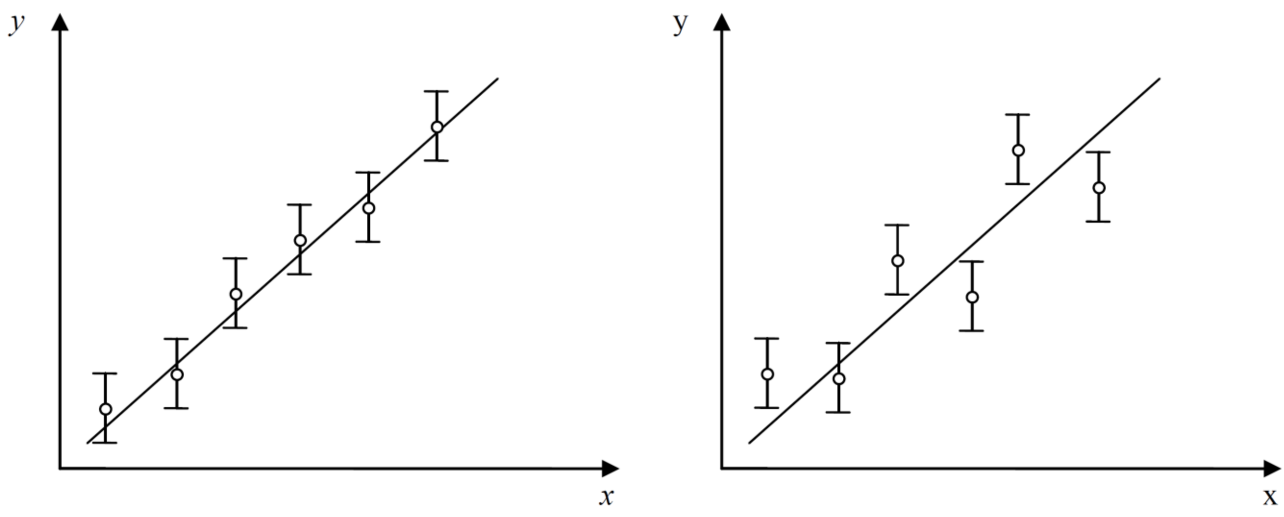
Для лінійної адекватної моделі, рис.4 зі значимими коефіцієнтами регресії можливе: рух по градієнту, план другого порядку, закінчення дослідження. Якщо частина коефіцієнтів незначима, то можливі такі рішення, які дозволяють незначимі коефіцієнти перевести у значимі: зміна інтервалів варіювання факторів, перенесення центру плану, відсіювання не значимих факторів, паралельні досліди, добудова плану. Окрім того, можна рухатись за градієнтом, а якщо область оптимуму близько, то реалізувати план другого порядку або закінчити експеримент.

Якщо всі коефіцієнти не значимі, то вибирають рішення у реалізації плану другого порядку або закінчення досліджень (область оптимуму близько) або рішення, які дозволяють отримати значимі коефіцієнти регресії при далекій області оптимума та невизначеній ситуації.

Коли лінійна модель неадекватна, рис.5, і область оптимуму близько, то дослідження або закінчують або виконують план другого порядку. При цьому, коли область оптимуму далеко, то змінюють інтервали варіювання, переносять центр плану, добудовують план і рухаються за градієнтом. Якщо має місце невизначена ситуація то включають в план експерименту ефекти взаємодії, рухаються за градієнтом та продовжують дослідження.

При складанні інтерполяційної формули коли має місце неадекватна лінійна модель діють за алгоритмом блок-схеми, рис.6.

Отримана лінійна модель перевіряється на значимість коефіцієнтів та адекватність моделі процесу (явищу), який вона описує. При цьому перевірка базується на таких передумовах: параметр оптимізації є випадкова величина з нормальним розподіленням, дисперсія якого не залежить від його значення; фактори є невипадкові величини з певним взаємозв’язком. Якщо записати лінійну модель: $y=в_0+вx$, то в графічній формі, з точки зору вимог адекватності моделі, ця модель зобразиться, рис. 7 а.



а) б)

Рис. 7. До перевірки адекватності моделі: – вірогідний інтервал $\Delta x \pm 2S_y$.

На рис.7 наведено два рисунки з однаковим розміщенням експериментальних точок, з однаковим значенням Δx відносно лінії моделі, але з різним середнім розкидом (різна дисперсія відтворюваності). Розкид в точках показано відрізками прямих, рівних: $\Delta x \pm 2S_y$

Модель є адекватною на рис.7а, так як розкид у точках такого ж порядку, що і відносно лінії. На рис. 7б адекватного буде нелінійна модель, так як лінійна залежність описує не точно результати експерименту. Це якісна і наглядна оцінка. Кількісну оцінку адекватності моделі здійснюють через значення залишкової суми квадратів на одну ступінь свободи. Числом ступенів свободи є різниця між кількістю дослідів *N* та кількістю коефіцієнтів, які розраховані за результатами дослідження:

$$f_{a\partial} = \mathrm{N} - (\mathrm{k}+1), \tag{24}$$

де $к$ +1 – число факторів плюс вільний коефіцієнт $в_0$. Тоді N

$$S_{a\partial}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{N} \Delta y_i^2}{f_{a\partial}}, \tag{25}$$

є залишковою або дисперсією адекватності. Щодо визначення $f_{ад}$, то необхідно пам'ятати правило: в плануванні експерименту кількість ступенів свободи для дисперсії адекватності рівне числу дослідів, результати яких використовуються при розрахунках коефіцієнтів регресії мінус число коефіцієнтів, які ми розраховуємо. Оцінку адекватності моделі виконують порівнюючи розрахункове значення критерія Фішера (F_p) та табличне ($F_{табл.}$) і воно має бути:

$$F_p \le F_{табл}, \tag{26}$$

а

$$\mathrm{F_p} = \frac{S_{a\partial}^2}{\mathrm{S_y^2}}, \tag{27}$$

де $S_{ад}{}^2$ – дисперсія адекватності;

$S^2{}_y$ – дисперсія параметра оптимізації або дисперсія відтворюваності при одній і тій же кількості паралельних дослідів (повторностей)

$$S_y^2 = \frac{\sum_{1}^{N} \sum_{1}^{n} (y_{im} - \bar{y}_i)^2}{N(n-1)}, \tag{28}$$

де $\bar{y}_i$ – середнєарифметичне значення i-того досліду, i= 1,2,3,…,$N = p^k$; y_{im} – поточне значення i-того досліду при m повторностях, m = 1,2,3,…, n.

При різній кількості повторностей:

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^{N} S_i^2 f_i}{\sum_{i=1}^{N} f_i}, \tag{29}$$

де S_i^2 – дисперсія порядкова з m повторностями $S_i^2 \approx \sigma_i^2 = \frac{\sum_i (\mathrm{y_{in}} - \bar{y}_n)^2}{m-1}$;

f_i – число ступенів свободи порядкової дисперсії $f_i = m_i - 1$; m_i – повторність в i- тому досліді.

Дисперсії (28) і (29) використовують лише коли вони є однорідними, тобто після перевірки за залежністю $G_p = \frac{\sigma_i^2{}_{\max}}{\sum_1^n \sigma_i^2}$,.

Отримавши S_y^2 розраховуємо F_p. За додатком В знаходимо значення $F_{табл.}$ і порівнюємо за залежністю (26). $F_{табл.}$ вибираємо за ступенями $f_{ад}$ та ступенем свободи дисперсії відтворюваності (параметра оптимізації):

$$f_{від} = N(m\text{-}1), \tag{30}$$

де m – кількість повторностей досліду.

Відомо, що один фактор впливає на параметр оптимізації більше, а інший – менше. Для оцінки цього впливу використовують перевірку значимості коефіцієнтів, як виразників впливу факторів. Перевірку значимості кожного коефіцієнту виконують окремо, двома рівноцінними способами. Перший спосіб, – це перевірка за t-критерієм Стьюдента, а другий – це побудова вірогідного інтервалу. За обома способами знаходять дисперсію коефіцієнтів регресії за залежністю:

$$S_{вi}^2 = \frac{S_y^2}{N}. \tag{31}$$

За t - критерієм оцінюємо значимість i - тих коефіцієнтів за формулою:

$$t_{ip} = \frac{|в_i|}{S_{вi}} = \frac{|в_i|}{\sqrt{S_{вi}^2}}, \tag{32}$$

де $в_i$ – абсолютне значення i - того коефіцієнта моделі.

При умові що

$$t_{ip} > t_{табл}, \tag{33}$$

де $t_{табл}$ – табличне значення критерія Стьюдента з числом свободи $f_{від}$ вибираємо з таблиці, значимість $в_i$ коефіцієнта є доказаною.

Другий спосіб передбачає для оцінки значимості коефіцієнтів використовувати вірогідний інтервал

$$\Delta в_i = \pm t_{табл} S_{вi}, \tag{34}$$

тоді порівнюють і призначають i-тий коефіцієнт значимим при умові:

$$|в_i| > |\Delta в_i|. \tag{35}$$

Дотримання умов залежностей (33) і (34) дає підстави експериментатору перейти до пошуку локальної області оптимуму.

Для пошуку області оптимуму на лінійній поверхні відгуку, використовують такі методи: метод крутого сходження, метод Гауса-Зейделя, метод симплексів, метод випадкового пошуку. Найбільш ефективним і розповсюдженим є модифікація методу найшвидшого спуску – метод крутого сходження по поверхні відгуку.

Мовою математики, якщо модель предмета дослідження описується лінійним поліномом $y = в_0 + в_1 x_1 + в_2 x_2 + \ldots + в_n x_n$, коефіцієнти моделі $в_i$ є окремими похідними розкладання функції y=f(X) в ряд Тейлора по степеням x_i, то область оптимуму шукають в напрямку градієнта з деяким кроком h_i:

$$grad\ y(X\square\square\square)=b_1\Delta X_1 + b_2\Delta X_2+\ldots+b_k\Delta X_k. \qquad (36)$$

Другим кроком крутого сходження є вибирання базового фактора з умови: max

$$(b_i \cdot \Delta X_i)=h_a,$$

тобто фактор, для якого добуток коефіцієнта регресії (b_i) на крок варіювання (ΔX_i) має бути максимальним.

Третім кроком є вибирання кроку для базового фактора h_a або іншого, за порадою фахівців чи експертів чи за апріорною інформацією.

Вибір кроку крутого сходження є в певній мірі довільним. При цьому дотримують таких правил: при складанні величини кроку з нульовим рівнем фактора, сума (число) має давати координату, яка дещо за межами експериментальної області; при виконані розрахунків, табл.6 необхідно мати на увазі, що при пошуку мінімуму вихідної змінної, знаки коефіцієнтів заміняємо на протилежні; якщо один із факторів в процесі руху до оптимуму досягає границі області визначення, то його можна зафіксувати і продовжувати рух до оптимуму за факторами, що залишились.

Таблиця 6

Вихідні данні і результати крутого сходження

<table>
<tr><td rowspan="2">Назва</td><td colspan="5">Фактори</td></tr>
<tr><td colspan="2">X_1</td><td colspan="2">X_2</td><td>X_3</td></tr>
<tr><td>Нульовий рівень X_{i0}</td><td colspan="2">0,7</td><td colspan="2">135</td><td>30</td></tr>
<tr><td>Інтервал варіювання ΔX_i</td><td colspan="2">0,2</td><td colspan="2">5</td><td>15</td></tr>
<tr><td colspan="6">Розрахунок</td></tr>
<tr><td>Коефіцієнти b_i</td><td colspan="2">1,78</td><td colspan="2">10,23</td><td>9,36</td></tr>
<tr><td>Добуток $b_i \Delta X_i$</td><td colspan="2">0,356</td><td colspan="2">5140</td><td>140,40</td></tr>
<tr><td>Крок h_a при зміні базового фактора X_2 на 5</td><td colspan="2">0,0346</td><td colspan="2">5</td><td>13,60</td></tr>
<tr><td>Заокруглений крок варіювання</td><td colspan="2">0,03</td><td colspan="2">5</td><td>14,00</td></tr>
<tr><td rowspan="2">Досліди</td><td colspan="3" rowspan="2">Круті сходження</td><td colspan="2">Зміна стану</td></tr>
<tr><td>y</td><td>y_u</td></tr>
<tr><td>9</td><td>0,73</td><td>140</td><td>44</td><td>44,92</td><td>-</td></tr>
<tr><td>10</td><td>0,76</td><td>145</td><td>58</td><td>69,09</td><td>-</td></tr>
<tr><td>11</td><td>0,79</td><td>150</td><td>72</td><td>88,17</td><td>66,70</td></tr>
<tr><td>12</td><td>0,82</td><td>155</td><td>86</td><td>109,06</td><td>-</td></tr>
<tr><td>13</td><td>0,85</td><td>160</td><td>100</td><td>-</td><td>72,50</td></tr>
<tr><td>14</td><td>0,88</td><td>165</td><td>114</td><td>-</td><td>68,40</td></tr>
</table>

Четвертим кроком є – перерахунок складових градієнта на довільне позитивне число. Отриманий добуток лежить на градієнті. Складові градієнта перераховують за вибраним кроком крутого сходження базового фактора:

$$\mathbf{h}_i = \frac{b_i \cdot \Delta X_i}{b_a \cdot \Delta X_a} \cdot h_a,$$

де (ΔX_i) – інтервал варіювання значних факторів.

При цьому b_i беруть зі своїми знаками, а кроки h_i округляють. За базовий фактор вибирають той, який має найбільший коефіцієнт $в_i$ та характеризує вплив самого значимого фактора. І нарешті, останнім кроком є додавання складових градієнта до нульового рівня факторів.

Отримують серію значень факторів крутого сходження. Тепер переводять їх у кодовану форму за рівнянням (12) та підставляють у рівняння регресії.
Отримують ряд прогнозованих значень параметра оптимізації $\acute{o}^{\wedge}$. Це так звані «уявні» досліди. Тобто необхідним є план експерименту типу 2^3, рандомизовану матрицю якого наводимо повністю, табл. 7.

В результаті обробки даних отримали: b_0=23,8; b_1=1,78; b_2=10,23; b_3=9,36; $S_{ад}2$ =0,97; $S_{bi}2$ =0,0144; S_{bi} =0,12; □ bi=0,31; $S_{відт}$ =0,115; $f_{відт}$=4; $f_{ад}$=4,12; F_p =8,4, тобто $F_p > F_m$, тобто лінійна модель неадекватна. Посилаючись на рішення рис.10, де можна було б змінити інтервали варіювання та повторити експеримент. Можна перейти до пошуку оптимальної області і за неадекватною моделлю, так як попередній шлях повторення експерименту вимагає додаткових затрат. Окрім цього ефекти лінійних факторів значимі. Приймання вищезазначеного рішення є ризикованим, але на практиці часто є оправданим.

Таблиця 7

Матриця плану та результати експерименту

Назва	Фактори		
	x_1	x_2	x_3
Нульовий рівень	0,7	135 5	30
Інтервал варіювання	0,2	140	15
Верхній рівень	0,9	130	45
Нижній рівень	0,5		15

Досліди	План				Змінна стану, y
	x_0	x_1	x_2	x_3	
1	+	+	+	+	46,80
2	+	+	-	+	20,47
3	+	-	-	+	16,80
4	+	-	-	-	5,08
5	+	+	+	-	24,15
6	+	+	-	-	8,89
7	+	-	+	-	16,63
8	+	-	+	+	46,45

Отже, здійснюємо пошук локальної області оптимуму методом крутого сходження, приймаємо за базовий фактор b_2=10,23.

Апріорна інформація стверджує, що теоретичний вихід параметра оптимізації досягає до y=95, в той час коли результати дослідження, табл. 7, показують, що y=46,80 максимальне значення. Це свідчить про те, що до оптимуму далеко, і переходити до планування другого порядку немає підстав.

Аналіз отриманої лінійної моделі $y=23{,}8+1{,}78x_1+10{,}23x_2+9{,}36x_3$, вказує на те, що вона є несиметричною відносно коефіцієнтів, так як b_1=1,78, а b_2=10,23 і b_3=9,36, тобто останні значення є суттєво більшими. Ці властивості можна поліпшити шляхом зміни інтервалів варіювання факторів та перенесенням центру експерименту в одну із кращих точок виконаного плану, табл. 7.

Вибраний крок для другого фактора x_2, h_2=5, а величину кроків для факторів x_1 і x_3 визначаємо за залежністю:

$$h_1=\frac{h_2(b_1\Delta X_1)}{b_2\Delta X_2}=\frac{5\cdot(1{,}78\cdot 0{,}2)}{10{,}23\cdot 5}=\frac{5\cdot 0{,}356}{51{,}65}=0{,}0346\approx 0{,}03,$$

$$h_3=\frac{h_2(b_3\Delta X_3)}{b_2\Delta X_2}=\frac{5\cdot(9{,}36\cdot 15)}{10{,}23\cdot 5}=\frac{5\cdot 143{,}05}{51{,}65}=13{,}60\approx 14.$$

Записуємо результати у табл. 7.

Ілюструємо викладене навчальним прикладом. Нехай нам необхідно записати деякий процес лінійною моделлю: $y=b_0+b_1x_1+b_2x_2+b_3x_3$,

Продовжуємо табл. 7, де подано розрахунок «уявних» дослідів, за схемою для досліду №9: X_1=0,73, де X_{10}=0,7, а округлення $h_{окр1}$=0,03, тоді кодоване значення

$$X_1=\frac{0{,}73-0{,}7}{0{,}2}=\frac{3}{2};$$

X_2=140, де X_{20}=135, а округлено $h_{окр2}$=5, тоді кодоване значення

$$X_2=\frac{140-135}{5}=1;$$

X_3=44, де X_{30}=30, а округлено $h_{окр3}$=14,тоді кодоване значення $X_3=\frac{44-30}{15}=\frac{14}{15}$; підставляємо у лінійну модель процесу

$$\hat{y}_9=23{,}8+1{,}78x_1+10{,}23x_2+9{,}36x_3=23{,}28+1{,}78\cdot\frac{3}{2}+10{,}23\ 1+9{,}36\ \frac{14}{15}=44{,}92.$$

Записуємо y=44,92 в таблицю 7. Аналогічно поступаємо і в «уявному» досліді №10 де $\hat{y}_{10}$ =66,09, теж $\hat{y}_{11}$=88,17, тобто результат зростає, що свідчить про приближення до області оптимуму. Ставимо у відповідності до умов досліду №11 натуральний експеримент і отримуємо y_{11} = 66,70, тобто значення суттєво менше значення $\hat{y}_{11} > y_{11}$. Це свідчить, що лінійна модель, не працює за межами області дослідження. Проте $\hat{y}_{12}$=109,06 дало зростання, y_{13}=72,5, що свідчить про зростання, тобто ці координати значення факторів близькі до теоретичного значення y=95. Виконуємо дослід №14 з його умовами, отримуємо y_{14}=68,40, що означає – параметр оптимізації знижується. Отже, ми перейшли екстремум і знаходимось в області оптимуму. В цих координатах x_1, x_2, x_3 можна ставити дослідження за планами другого порядку. Проте даний оптимум може виявитись локальним. Для перевірки цього припущення плануємо подальше круте сходження, вибравши центр близько до знайденого оптимуму.

5. План експерименту другого порядку

Після досягнення області оптимуму, перед дослідником встає задача детального вивчення поверхні відгуку з оцінкою екстремуму. Крутизну гіперплощини факторного простору, значимість ефектів взаємодії факторів та квадратичних ефектів можуть описати поліноми високих порядків, серед яких найбільш часто використовуваними є рівняння другого порядку:

$$y=b_0+\sum_{i=1}^{n}b_i x_i+\sum_{i,j=1}^{n}b_{ij}x_i x_j+\sum_{i=1}^{n}b_{ii}x_{i^2}. \tag{37}$$

Отримати модель (37) вищенаведеними способами неможливо із-за невиконання умов ортогональності. Для цього Боксом та Уілсоном у 1951р. розроблені композиційні (послідовні) плани. Графічна їх інтерпретація показана на рис. 8 при описуванні залежності $y=(x_1, x_2)$.

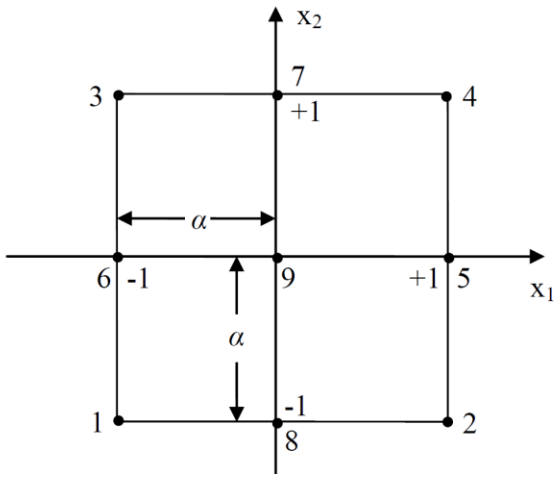
Таким чином, двохфакторна залежність з x_1 та x_2 не може бути описана ПФЕ типу 2^2, з дослідами 1-2-3-4, а необхідно добавити $2k$ досліди 5-6-7-8 (зірчасті точки), які розміщуються на осях x_1 та x_2 з координатами $(\pm\alpha;0)$, та $(0; \pm\alpha)$ та дослід ($n_0=1$) 9, в центрі квадрата , щоб в будь-якому напрямку (5-9-6), (1-9-4), (3-9-2), (7-9-8), тощо, розміщувалися три точки, які визначають кривизну поверхні в цьому напрямку.

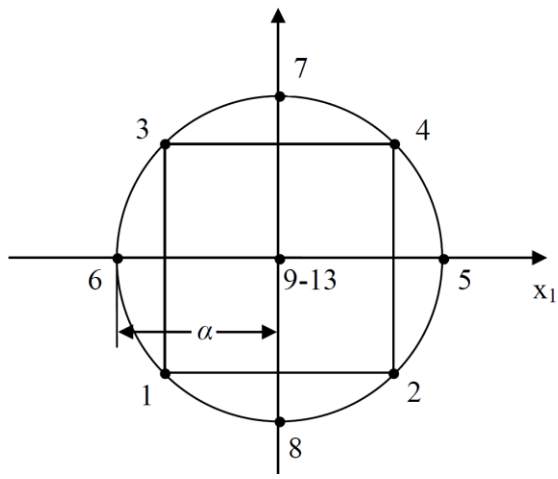
Загальну кількість дослідів і величину зірчастого плеча наведено в табл. 8.

Ядро композиційного плану складає при к < 5, ПФЕ типу $2^к$, а при к >5 – дробову реліку від нього, типу $2^{к-p}$.

Якщо лінійне рівняння неадекватне то, необхідно:

- добавляють $(2 \cdot k)$ або $2(k-p)$ зіркових точок, які розміщені на осях факторного простору $(\pm\alpha,0,0,\dots,0)$, $(0, \pm\alpha,0,\dots0)$,…,$(0,0,\dots, \pm\alpha)$, де α - зіркове плече;
- виконати n_0 дослідів, при значеннях факторів в центрі плану.





а) б)

Рис. 8. План другого порядку при k=2:
а) ортогональний; б) рототабельний.

Таблиця 8

Загальна кількість дослідів планів другого порядку з кількістю факторів *к*

Кількість факторів, к	Кількість точок ядра, $2^к$	Кількість зіркових точок, $2^к$	Кількість нульових точок, n_0	Загальна кількість дослідів, N
2	4	4	1	9
3	8	6	1	15
4	16	8	1	25
5*	16	10	1	27
6*	32	12	1	45

* – з напівреплікою

Таблиця 9

Композиційний план другого порядку

Номер досліду		Фактори						Результат
		x_0	x_1	x_2	$x_1\ x_2$	y_1^2	y_2^2	y_i
Ядро плану, $2^к$	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
Зіркові точки, $2^к$	5	+1	$+a$	0	0	a_2	0	y_5
	6	+1	$-a$	0	0	a_2	0	y_6
	7	+1	0	$+a$	0	0	a_2	y_7
	8	+1	0	$-a$	0	0	a_2	y_8
Центр плану, n_0	9	+1	0	0	0	0	0	y_9

При k факторів загальна кількість дослідів в матриці композиційного плану має бути:

$$N=2^k+2k+n_0 \qquad при\ k<5;$$

$$N=2^{к-р}+2(k-p)+n_0 \qquad при\ k>5 \tag{38}$$

Такі плани називаються центральними композиційними. При цьому величина зіркового плеча α та кількість дослідів у центрі плану n_0 залежить від виду композиційного плану. Такий композиційний план для k=2 і n_0 =1 подано в табл. 9.

6. Ортогональні композиційні плани другого порядку

План наведений в табл. 9 є не ортогональним, так як не дотримуються вимоги:

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

$$\sum_{1}^{N} x_{ij}^2 x_i^2=0. \tag{39}$$

Ортогональним цей план може стати, коли матиме місце умова:

$$\sum_{I}^{N} x_{oj} x'_{ij} = 0,$$

де
$$x'_{ij} = x_i^2 - \frac{\sum_{1}^{N} x_{ij}^2}{N} = x_i^2 - \overline{x}_i^2. \qquad (40)$$

величина $\overline{x}_i^2$ залежить від кількості факторів κ і плеча α

$$\overline{x}_i^2 = \frac{2^k - 2\alpha^2}{2^k + 2k + 1}.$$

Тоді математична модель матиме вигляд:

$$\overline{y} = x_0^1 + \sum_{s=1}^{k} b_i x_i + \sum_{i,j=1}^{k} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{k} b_{ii}^1 x_i^1. \qquad (41)$$

В подальшому композиційні плани приводять до ортогональних, вибираючи зіркове плече, табл. 10.

Таблиця 10

Значення зіркових плечей в ортогональних планах другого порядку

Кількість дослідів в центрі плану, n_0	Зіркові плечі α при різному числі факторів k			
	k=2	k=3	k=4	k=5 (в ядрі напіврепліки)
1	1,000	1,215	1,414	1,546
2	1,077	1,258	1,471	1,606
3	1,148	1,353	1,546	1,664
4	1,214	1,414	1,606	1,718
5	1,267	1,471	1,664	1,772
6	1,320	1,525	1,718	1,819
7	1,369	1,575	1,772	1,868
8	1,414	1,623	1,819	1,913
9	1,454	1,668	1,868	1,957
10	1,498	1,711	1,913	2,000

Зокрема ортогональний план другого порядку k=2, і n_0=1 подано в табл.11.
В таблиці 11

$$x'_{ij} = \mathbf{x}_{ij}^{\ 2} - \frac{\sum_{j=1}^{9} x_{ij}^2}{9} = \mathbf{x}_{ij}^{\ 2} - 2/3.$$

Матриця планування ортогональна, звідси коефіцієнти розраховують за залежностями:

$$\mathrm{b}_i = \frac{\sum_{j=1}^{N} x_{iy} y_i}{\sum_{j=1}^{N} x_{ij}^{\ 2}}, \quad \mathrm{b}_{ii} = \frac{\sum_{j=1}^{N} x'_{ij} y_i}{\sum_{j=1}^{N} x'^{\ 2}_{ij}}, \quad \mathrm{b}_{ij} = \frac{\sum_{j=1}^{N} x_{ij} \cdot x_{ui}}{\sum_{j=1}^{N} (x_{ij} \cdot x_{ui})^2}. \qquad (42)$$

а графічна інтерпретація подана рис. 8а.

Таблиця 11

Ортогональний центральний композиційний план другого порядку при к = 2

Номер досліду		Фактори						Результат
		x_0	x_1	x_2	$x_1 x_2$	x_1'	x_2'	y_i
Ядро плану, 2^k	1	+1	-1	-1	+1	$+1/3$	$+1/3$	y_1
	2	+1	+1	-1	-1	$+1/3$	$+1/3$	y_2
	3	+1	-1	+1	-1	$+1/3$	$+1/3$	y_3
	4	+1	+1	+1	+1	$+1/3$	$+1/3$	y_4
Зіркові точки, 2к	5	+1	α = +1	0	0	$+1/3$	$+1/3$	y_5
	6	+1	α = -1	0	0	$+1/3$	$+1/3$	y_6
	7	+1	0	α = +1	0	$-2/3$	$-2/3$	y_7
	8	+1	0	α = -1	0	$-2/3$	$-2/3$	y_8
Центр плану, n_0	9	+1	0	0	0	$-2/3$	$-2/3$	y_9

Суми в знаменниках різні для лінійних, квадратичних та ефектів взаємодії. Тут коефіцієнти визначаються незалежно один від другого,
де: N – кількість дослідів, $N=2^k$, $N=1, 2, 3,\ldots, u$; i – номер стовпчика в матриці, $i=1, 2, 3,\ldots, k$; j – номер рядка, повторність дослідів, $j=1, 2, 3,\ldots, m$.

Дисперсії коефіцієнтів моделі такі:

$$S_{bi}^{2}=\frac{S_{відт}^{2}}{\sum_{j=1}^{N}x_{ij}^{2}};\quad S'_{bi}{}^{2}=\frac{S_{відт}^{2}}{\sum_{j=1}^{N}x'_{ij}{}^{2}};\quad S'_{bu}{}^{2}=\frac{S_{відт}^{2}}{\sum_{j=1}^{N}(x_{ij}x_{uj})^{2}}. \tag{43}$$

Особливістю визначення коефіцієнтів регресії, які ми отримуємо за ортогональними планами другого порядку є їхня різна точність, в той час як ортогональні плани першого порядку забезпечували однакову точність, тому що план мав бути ще ротатабельним. Коефіцієнти математичної моделі та їх дисперсії зручно розраховувати за такими залежностями:

$$b'_0 = p_1(OY), \qquad S_{(b'_0)} = p_2 S_y,$$
$$b_i = p_3(iy), \qquad S_{(b_i)} = p_4 S_y,$$
$$b_{ii} = p_5(iiy), \qquad S_{(b_{ii})} = p_6 S_y,$$
$$b_{ij} = p_7(iiy), \qquad S_{(b_{ij})} = p_8 S_y,$$

$$b_0 = b'_0 - \frac{p_1}{p_3}\cdot\sum_{1}^{k} b_{ii},$$

$$S_{b_0}^2 = S_{b'_0}^2 + \left(\frac{p_1}{p_3}\right)^2 k S_{(b_{ii})}^2.$$

Значення p_i наведені у табл. 12.

Таблиця 12

Значення коефіцієнтів $p_i 10^5$ для ортогональних планів

P_i	Число факторів			
	2	3	4	5
P_1	11111	6667	4000	3704
P_2	16667	9141	5000	4811
P_3	50000	23041	12500	7220
P_4	25000	12500	6250	6250
P_5	33333	25820	20000	19245
P_6	40825	30234	22361	21934
P_7	70711	48001	35355	26870
P_8	5000	35535	25000	25000

При розрахунку за матрицею з перетвореними стовпчиками для квадратичних ефектів отримуємо рівняння регресії у вигляді:

$$\hat{y} = b'_0 + \sum_{i=1}^{k} b_i x_i + \sum_{i,u=1}^{k} b_{iu} x_i x_u + \sum_{i=1}^{k} b'_{ii} (x_i^2 - \bar{x}_i^2). \quad (44)$$

Для перетворення до звичайної форми моделі, необхідно перейти від b'_0 до коефіцієнта b_0, використовуючи вираз:

$$b_0 = b'_0 - \sum_{i=1}^{k} b'_{ii} \overline{x_i}^2. \quad (45)$$

Дисперсія цього коефіцієнту розраховується за співвідношенням:

$$S_{b_0}^2 = S_{b'_0}^2 + \sum_{i=1}^{k} S_{b_{ii}}^2 \cdot \bar{x}_i^2. \quad (46)$$

При відомій дисперсії відтворюваності, перевіряють значимість коефіцієнтів і адекватність моделі:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^{k} b_i x_i + \sum_{i,u=1}^{k} b_{iu} x_i x_u + \sum_{i=1}^{k} b_{ii} \overline{x_i}^2. \quad (47)$$

Значимість коефіцієнтів моделі перевіряється за критерієм Стьюдента:

$$t_i = \frac{|b_i|}{S_{bi}}, \quad (48)$$

і при $t_i > t_{табл}$ коефіцієнт моделі є значимим.

Адекватність моделі перевіряємо за критерієм Фішера:

$$F_p = \frac{S_{ад}^2}{S_{відт}^2}, \quad (49)$$

при $F_p < F_{табл}$,
де $m_1 = (n-I)$ - число ступенів свободи дисперсії адекватності; m_2 - число ступенів свободи дисперсії відтворюваності;

I - число коефіцієнтів у моделі другого порядку.

Число коефіцієнтів моделі другого порядку визначаємо:

$$I = \frac{(\kappa+2)!}{2} = \frac{(\kappa+2)(\kappa+1)}{2}, \tag{50}$$

Ортогональні плани дозволяють отримати незалежні оцінки коефіцієнтів моделі. Проте вимогам ортогональності і ротатабельності відповідають лише плани для побудови лінійних моделей.

Так, нехай критерій оптимізації залежить від двох факторів ($\kappa = 2$). Для випадку ортогонального планування другого порядку, матриця навчального прикладу буде мати вигляд табл.13.

Таблиця 13

План ортогонального планування при *k*=2

Номер досліду	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	$x_1'^2 = x_1^2 - \bar{x}_1^2 = \bar{x}_1^2 = x_1^2 - 2/3$	$x_2'^2 = x_2^2 - \bar{x}_2^2 = \bar{x}_2^2 = x_2^2 - 2/3$	Робоча матриця		
							y_1	y_2	y_n
1	+	+	+	+	0,33	0,33	2,5	120	50
2	+	-	+	-	0,33	0,33	1,3	120	67
3	+	+	-	-	0,33	0,33	2,5	20	70
4	+	-	-	+	0,33	0,33	1,3	20	60
5	+	-	0	0	0,33	0,67	1,3	70	70
6	+	+	0	0	0,33	0,67	2,5	70	56
7	+	0	-	0	-0,67	0,33	1,9	20	73
8	+	0	+	0	-0,67	0,33	1,9	120	60
9	+	0	0	0	-0,67	-0,67	1,9	70	62
Сума квадратів	9	6	6	4	2	2			

Зв’язок між кодованими та іменними величинами:

$$x_1 = \frac{c-1{,}9}{0{,}6}, \quad x_2 = \frac{t-70}{50},$$

де c і t – іменні величини (фактори) досліду.

На цій підставі отримуємо робочу матрицю табл.13. Тут же наведені і експериментальні дані (y_u). Розраховуємо коефіцієнти моделі

$$\tilde{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2,$$

за залежностями

$$\mathrm{b}_i = \frac{\sum_{j=1}^{N} x_{iju} y_i}{\sum_{j=1}^{N} x_{ij}^2}, \quad \mathrm{b}_{ii} = \frac{\sum_{j=1}^{N} x'_{ij} y_i}{\sum_{j=1}^{N} x'^2_{ij}}, \quad \mathrm{b}_{ij} = \frac{\sum_{j=1}^{N} x_{ij} \cdot x_{ui}}{\sum_{j=1}^{N} (x_{ij} \cdot x_{ui})^2}.$$

$$b_1 = \frac{1}{6}(50 - 65 + 70 - 60 - 70 - 56) = -3{,}50\ ,$$

$$b_2 = \frac{1}{6}(50 + 60 - 70 - 60 - 73 + 60) = -4{,}33\ ,$$

$$b_{12} = \frac{1}{4}(50 - 67 - 70 + 60) = -6{,}75\ ,$$

$$b_{11} = 0{,}5[0{,}33(50+67+70+60+70) - 0{,}67(73+50+62)] = -3{,}78,$$

$$b_{22} = 0{,}5[0{,}33(50+67+70+73+60) - 0{,}67(70+56+62)] = -0{,}30,$$

$$b'_0 = \frac{568}{9} = 63{,}11\ ,$$

$$b_0 = b'_0 - b_{11}\overline{x_1}^2 - b_{22}\overline{x_2}^2\ \text{, то}\ \ \overline{x_i}^2 = 2/3\text{, а}\ b_0 = b'_0 - 0{,}67 \cdot b_{11} - 0{,}67 b_{22} = 65{,}84.$$

Оцінка значимості b_{11} і b_{22} показали, що вони незначимі, тоді модель запишеться:

$$\tilde{y} = 65{,}84 + 3{,}50x_1 - 4{,}33x_2 - 6{,}75x_1x_2\ \ ,$$

Перевірка на значимість коефіцієнтів і адекватність моделі підтверджені.

7. Рототабельні плани другого порядку

Прийнятий критерій ортогональності для планів другого порядку є недостатнім в зв'язку з тим, що мають місце різні оцінки дисперсій коефіцієнтів моделі. Отже, в різних напрямках факторного простору модель забезпечує різну кількість інформації. В 1957 році Бокс і Хантер доказали, що оптимальним плануванням другого порядку є рототабельне планування, яке забезпечує рівномірну інформацію моделі. Це обумовлює раціональну оптимізацію та інваріантність плану відносно центру обертання. Досліднику відома область факторного простору, яка його цікавить. Умовою ротатабельності центрального композиційного плану є величина зірчастого плеча α:

$$\alpha = 2^{\frac{k}{4}}\ \textbf{при}\ K < 5,$$
$$\alpha = 2^{\frac{k-p}{4}}\ \textbf{при}\ K > 5, \qquad (51)$$

де k – кількість факторів; p – дробовість репліки, для ПФЕ p=0, для ½ репліки p=1, для ¼ репліки p=2 тощо.

Кількість точок в центрі плана n_0 збільшують, в порівнянні з ортогональним планом.

Загальну кількість дослідів рототабельного плану визначають із залежності:

$$N = 2^k + 2 \cdot k + n_0\ , \qquad (52)$$

Таблиця 14

Дані для побудови центральних композиційних рототабельних планів другого порядку

Кількість факторів, κ	Кількість точок				Величина плеча, α	Примітки (про ядро плану)
	ядра $n_я$	зіркових точок, n_α	нульових точок, n_0	Загальна кількість дослідів, N		
2	4	4	5	13	1,414	-
3	8	6	6	20	1,628	-
4	16	8	7	31	2,000	-
5	32	10	10	52	2,378	-
5	16	10	6	32	2,000	напіврепліка

6	64	12	15	91	2,828	-
6	32	12	9	53	2,378	напіврепліка
7	128	14	21	163	3,333	-
7	64	14	14	92	2,828	напіврепліка

Обґрунтування величини зіркового плеча α розглянемо на прикладі матриці рототабельного плану другого порядку для $к$=2 , табл.15.

Розміщення точок плану графічно подано на рис.8б. Для забезпечення рототабельності необхідно точки 5, 6, 7, 8 віддалити від центру плану на α=1,414 більше, аніж точки 1, 2, 3, 4 від осей факторів x_1 та x_2. Як наслідок всі точки плану, табл.15, будуть лежати на колі, що описує ці точки. Враховуючи суттєвий вплив на функцію відгуку випадкової помилки, в точці 9, доцільно ставити декілька паралельних дослідів.

Таблиця 15

Рототабельний план другого порядку, k=2

Номер досліду		Фактори						Результат вимірів
		x_0	x_1	x_2	$x_1 x_2$	x_1^2	x_2^2	
Ядро плану, 2^2	1 2 3 4	+1 +1 +1 +1	-1 +1 -1 +1	+1 +1 -1 -1	-1 +1 +1 -1	+1/3 +1/3 +1/3 +1/3	+1/3 +1/3 +1/3 +1/3	y_1 y_2 y_3 y_4
Зіркові точки, 2·2	5 6 7 8	+1 +1 +1 +1	0 0 1,414 1,414	0 0 1,414 1,414	0 0 0 0	2 2 0 0	0 0 2 2	y_5 y_6 y_7 y_8
Центр плану, n_0	9 10 11 12 13	+1 +1 +1 +1 +1	0 0 0 0 0	0 0 0 0 0	0 0 0 0 0	0 0 0 0 0	0 0 0 0 0	y_9 y_{10} y_{11} y_{12} y_{13}

При рототабельному плануванні другого порядку великий обсяг розрахункової роботи на стадії обробки експериментальних даних. Тому розрахунки доцільно при, k>5, виконувати на ЕОМ. При k<5 розрахунки можна виконувати вручну за відомими залежностями:

$$b_0 = \frac{2A}{N}\left[\overline{(\lambda_4^*)^2(k+2)}\sum_1^N y_u - C\lambda_4^* \sum_1^N \sum_1^k x_{iu}^2 y_u\right],$$

$$b_i = \frac{\sum_1^N x_{iu} y_u}{N - n_0},$$

$$b_{ij} = \frac{C^2}{N\lambda_4^*}\sum_1^{n_u} x_{iu} x_{ju} y_u,$$

$$b_{ii} = \frac{A \cdot C^2}{N}\left[(k+2)\lambda_4^* - k\right]\sum_1^N x_{iu}^2 y_u + \frac{AC^2}{N}(1-\lambda_4^*) \cdot \sum_1^N \sum_1^k x_{iu}^2 y_u - \frac{2AC}{N}\lambda_4^* \sum_1^N y_u,$$

$$C = \frac{N}{N - n_0},$$

$$A = \frac{1}{2\lambda_4^*\left[(k+2)\lambda_4^* - k\right]}.$$

При визначенні значимості коефіцієнтів моделі використовують такі формули дисперсій:

$$S_{bo}^{\ 2} = \frac{2A\lambda_4^*(k+2)}{N} \cdot S_{\bar{y}}^2,$$

$$S_{bi}^{\ 2} = \frac{S_{\bar{y}}^2}{N - n_0},$$

$$S_{bij} = \frac{C^2}{N} S_{\bar{y}}^2,$$

$$S_{bii} = \frac{AC^2\left[(k+1)\lambda_4^* - (k-1)\right]}{N} \cdot S_{\bar{y}}^2,$$

При використанні ротатабельних планів другого порядку, дисперсію відтворюваності можна оцінити за дослідами в центрі плану. Тому при перевірці адекватності моделі розраховують залишкову суму квадратів:

$$S_1^{\ 2} = \sum_{j=1}^{n} (y_i - \tilde{o})^2,$$

з числом ступенів свободи

$$m_1 = n - \frac{(k+2)(k+1)}{2}.$$

Суму квадратів відтворюваності:

$$S_2^{\ 2} = \sum_{j=1}^{n} (y_{oj} - \tilde{o}_{oj})^2,$$

з числом ступенів свободи

$$m_2 = n_0 - 1.$$

Суму квадратів, що характеризують неадекватність:

$$S_3^{\ 2} = S_1^{\ 2} - S_2^{\ 2},$$

з числом ступенів свободи

$$m_3 = m_1 - m_2.$$

Перевіряють адекватність за критерієм Фішера:

$$F_p = \frac{S_3^{\ 2} \cdot m_2}{S_2^{\ 2} \cdot m_3},$$

Модель адекватна коли $F_p < F_m$, тоді виконують оцінку оптимальних параметрів. При неадекватній моделі, зменшують інтервали варіювання факторів або переносять центр плану у іншу точку факторного простору. Якщо і в цьому ряді модель неадекватна, то переходять до планів третього порядку.

Слід відзначити, що при плануванні другого порядку при k=2…8, можна використовувати Д-оптимальні плани Бокса, Хартлі, Кіфера, Коно, які мають готові матриці планування і є оптимальними до мінімальної та максимальної дисперсій, дисперсій передбачених значень та визначника інформаційної матриці.