

ФАКТОРЫ И УРОВНИ ПРИ ПЛАНИРОВАНИИ ЭКСПЕРИМЕНТА, ЭФФЕКТИВНЫЙ ВЫБОР С УЧЕТОМ ОГРАНИЧЕНИЙ

Ключевые слова: планирование эксперимента, уровни факторов, редукция модели, значимость параметра, энтропия параметра, дискретизация по вероятности, одномеризация.

Введение

При планировании эксперимента один из важнейших этапов, предопределяющих эффективность его проведения, — это выбор наиболее значимых параметров ситуации в качестве факторов и, самое главное, выбор числа и значений для уровней этих факторов. В теории планирования эксперимента эти вопросы оказались на периферии внимания, по-видимому, по причинам исторического характера — в прикладных задачах, стимулировавших такие исследования, они не особо содержательны. Однако с развитием технических и компьютерных возможностей они естественным образом появляются и важность их растет. Для множества допустимых значений каждого фактора разумно использовать разбиение его на непересекающиеся подмножества, целиком его покрывающие, а в качестве уровня фактора выбирать одно представительное значение для каждого подмножества — элемента разбиения. При этом естественно возникает вопрос эффективного выбора как самого разбиения, так и соответствующих представительных значений. Любое реальное экспериментальное исследование может проводиться ограниченное количество раз, поэтому возникают ограничения и на число представительных значений для изменяющихся параметров в изучаемой системе. Отсюда ясно, что одна из важнейших задач планирования факторного эксперимента — корректный и эффективный выбор представительных значений (уровней) для выбранных параметров (факторов) эксперимента.

Таким образом, для сложной системы, подвергаемой экспериментальному исследованию, прежде чем применять весьма развитые методы планирования факторного эксперимента [1], предварительно приходится строить упрощенные математические модели, основанные на ее неполных сокращенных описаниях. При этом используются не все объективно существующие независимые переменные системы, а лишь наиболее значимые — это вынужденная мера вследствие естественных ограничений ресурсов, выделяемых на экспериментальное исследование. Эти же ограничения лимитируют и число значений, принимаемых каждым из параметров. Формализацию такого рода проблем с акцентом на моделирование ситуаций принятия решений можно найти в [2].

Метод Хансела

Среди методов формирования упрощенных дискретизированных моделей сложных систем выделяется метод Хансела [3], основанный на идее назначения числа представительных значений всем параметрам пропорционально их значимости $N_l = kZ_l$. Под значимостью Z_l l -го независимого параметра понимается произведение его релевантности на энтропию: $Z_l = R_l H_l$. Чем более значимым оказывается параметр, тем большее число уровней выделяется ему как фактору эксперимента.

Релевантность R_l представляет оценку степени влияния значений параметра на результат и определяется как отношение разброса значений наблюдаемой ве-

личины (результата эксперимента) для различных значений этого параметра к его среднему значению при фиксированных номинальных значениях других параметров. Релевантность характеризует влияние отдельного параметра и обычно нормируется по всем параметрам, т.е. представляет собой весовой коэффициент сравнительной влияния этого параметра. Для вычисления релевантности нужно знать (или установить экспериментально) зависимость наблюдаемой величины от всех независимых параметров (факторов) модели. Далее значения релевантностей для всех параметров считаются известными.

Энтропия l -го независимого параметра H_l — это мера неопределенности задания его значений (уровней фактора), для переменной величины, конечно же, их должно быть несколько. Подходящая метрика для энтропии дается формулой Шеннона для соответствующего количества информации: $H_l(N_l, P_j) = -\sum_j P_j \ln(P_j)$, где N_l — число уровней l -й переменной, а P_j — вероятность реализации j -го уровня этой переменной. Энтропия характеризует информационную сложность задания соответствующей дискретной переменной. Непрерывные переменные предварительно дискретизируются выбранными значениями уровней (представительными значениями соответствующих подмножеств разбиения).

Таким образом, более значимыми будут те переменные, изменение которых оказывает большее влияние на результат наблюдений (показатель — релевантность), и которые сложнее организованы в информационном смысле (показатель — энтропия). Действительно, разумно считать, что более значимые параметры при планировании эксперимента следует наделять большим числом уровней для более глубокого исследования их влияний.

При этом нужно учитывать, что $N = \prod_{l=1}^L N_l$ — определяемое ресурсными ограничениями число, отвечающее полному набору всех возможных сочетаний уровней всех факторов и характеризующее комбинаторный размер дискретной модели. Очевидно, что N — объем испытаний для соответствующего полного факторного эксперимента (ПФЭ), сложность других типов ФЭ не превышает его и определяется известными зависимостями от N . Таким образом, ресурсные ограничения для эксперимента выбранного типа позволяют найти верхнюю оценку для N , считающуюся известной.

Поскольку значимость параметра представляется как произведение его релевантности на энтропию, а энтропия зависит от того же числа значений N_l , сам набор чисел N_l можно искать как неподвижную точку многомерного отображения L -мерного пространства в себя:

$$N_l = kR_l H_l(N_l, P_j), \quad 1 \leq l \leq L.$$

В. Хансел рассмотрел зависимости $H_l(N_l, P_j)$ для трех вариантов вероятностного распределения P_j : нормального, Вейбула и логарифмически нормального при разбиениях области значений переменной на интервалы равной длины [2]. Полученные им весьма сложные аналитические выражения объединяет только одно — логарифмическую зависимость от N_l .

Таким образом, задача сводится к нахождению неподвижной точки многомерного нелинейного отображения. Хансел предлагает воспользоваться итерационным методом. Однако известно, что при отсутствии сжимающих свойств такого отображения итерационный процесс практически безнадежен, разве что повезет угадать начальное приближение вблизи неподвижной точки.

Отметим следующие слабые места изложенного метода.

1. Выбор начального приближения произволен, какие-либо рекомендации отсутствуют.

2. Сходимость итераций L -мерного отображения указанного типа теоретически не обоснована и на практике встречается крайне редко.

3. Целочисленное округление значений N_l в процессе вычислений усугубляет сложность нелинейного отображения.

Безусловным преимуществом метода является разумный выбор пропорциональной зависимости числа уровней от значимости фактора и подмеченная возможность сведения к нахождению неподвижной точки, а недостатком — его сложность и отсутствие каких-либо гарантий сходимости.

Модификация метода

Для устранения указанных недостатков при сохранении преимуществ описанного метода предлагается учитывать следующее.

1. Равновероятное разбиение (вместо разбиения на интервалы равной длины) для дискретизации и выбора представительных значений порождает равномерное распределение $P_l = 1/N_l$, работает для любых вероятностных распределений непрерывной переменной, обеспечивает равномерную загрузку в ходе эксперимента всех назначаемых представительных значений, обладает свойством энтропийной максимальной, наиболее подходящим для ситуаций с неполной информацией. Точное выражение для энтропии Шеннона равномерного распределения $H(N_l) = \ln(N_l)$.

2. Переход от много- до однопараметрического представления нелинейного отображения и соответствующего итерационного процесса. Для этого используем получившееся выражение для неподвижной точки $N_l = kR_l \ln(N_l)$, из которого заключаем, что для определения всех N_l достаточно найти только один (!) коэффициент пропорциональности k — скалярный параметр.

3. Нахождение коэффициента пропорциональности k по фактору средней релевантности и расчет для остальных факторов с последующим итерационным уточнением.

Первые два пункта достаточно ясны, поясним последнее положение. Для нахождения начального приближения для k используем выражение $kR_l = N_l / \ln(N_l)$,

подставляя в него в качестве N_l среднее геометрическое $\sqrt[L]{N}$ для $N = \prod_{l=1}^L N_l$,

сопоставляемое с числом уровней параметра, обладающего средней релевантностью. Очевидно, что если бы все параметры обладали одинаковой релевантностью, каждый из них получил бы одинаковое число уровней — как раз среднее геометрическое из N . Значит, параметр, релевантность которого близка к средней,

$R_l \approx 1/L$, также должен получить близкое к $\sqrt[L]{N}$ число уровней. Получаем начальное

приближение $k_0 = \frac{\sqrt[L]{N}}{R_l \ln(\sqrt[L]{N})} \approx \frac{L^2 \sqrt[L]{N}}{\ln(N)}$. Далее из уравнения $k_0 R_l = N_l / \ln(N_l)$ нахо-

дим начальное приближение для числа уровней всех остальных параметров. Затем

сравниваем произведение полученных значений $\prod_{l=1}^L N_l$ с заданным N , и если N

оказывается меньше этого произведения, значит, N_l нужно уменьшать, уменьшаем коэффициент пропорциональности $k_1 < k_0$, в противном случае увеличиваем $k_1 > k_0$.

Зная k_1 , вычисляем следующее приближение и т.д. Как только $\prod_{l=1}^L N_l \approx N$, с точнос-

тью до целочисленного округления, решение получено. Итерационный процесс гарантировано сходится, поскольку рассмотрение малых и больших значений скалярного параметра k позволяет воспользоваться теоремой о промежуточном значении непрерывной функции [4].

Представим примеры использования предложенной процедуры.

Задача 1 (для больших значений N). Пусть в планируемом эксперименте ресурсные ограничения определяют оценку допустимого объема испытаний $N \approx 7600$. Схема эксперимента содержит три независимых параметра (три фактора). Имеющиеся оценки релевантности параметров соответственно $R_1 = 0,2$, $R_2 = 0,3$, $R_3 = 0,5$. Сколько уровней выделить каждому фактору?

Решение. Находим среднюю релевантность $R_s = 1/3$. Соответствующее число уровней: $N_s = \sqrt[3]{N} = \sqrt[3]{7600} = 19,66$. Из уравнения для N_s найдем коэффициент k ($N_s = kR_s H_s ([N_s], 1 / [N_s])$) $k = 22$. Находим неизвестные значения N_l : $N_1 = 10,23$; $N_2 = 19,66$; $N_3 = 40,79$. Сравниваем их произведение с N : $\prod_{l=1}^3 [N_l] = 10 \cdot 19 \cdot 40 = 7600$. Итераций не потребовалось, отметим позитивный эффект целочисленного округления. Формируем таблицу по результатам вычислений для различных больших N_l .

Таблица 1

N	1 100	3 000	7 600	8 000	10 000	14000
N_1	4	7	10	10	11	12
N_2	11	14	19	19	20	24
N_3	20	30	40	42	45	48
$\prod_{l=1}^3 [N_l]$	1100	2940	7600	7980	9900	13824

Как видно из табл. 1, произведение числа уровней не всегда удастся сделать точно равным заданному параметру N , для более точного приближения следует варьировать варианты округления (вверх–вниз).

Однако с уменьшением N будет уменьшаться и N_l — число уровней наименее значимого параметра, но оно не должно принимать значения меньше 2, иначе соответствующий параметр превращается из фактора просто в константу. Таким образом, $N_l = 2$ соответствует некоторое значение $\prod_{l=1}^3 [N_l]$ и не понятно, как действовать, если заданное N меньше его.

Рассмотрим этот случай отдельно.

Задача 2 (для малых значений N). Допустим, что для приготовления вкусной гречки у нас есть 50 попыток (ресурсные ограничения $N = 50$). В ходе приготовления мы можем варьировать количество, изменять количество воды, крупы и соли, в исследуемой модели три независимых параметра (три фактора). Важные компоненты блюда — гречневая крупа ($R_1 = 0,2$) и вода ($R_2 = 0,3$). Но вкус готовой каши сильно зависит от количества приправы — соли ($R_3 = 0,5$). Сколько порций для каждого компонента следует запланировать?

Решение. Поскольку значение N мало, для решения задачи назначения уровней факторов необходимо зафиксировать два уровня для фактора, имеющего минимальную релевантность среди заданных (в данном случае $N_1 = 2$).

С учетом этого находим среднюю релевантность для остающихся двух параметров $R_s = (0,3+0,5) / 2 = 0,4$ и соответствующее число уровней:

$$L-1 \sqrt{\frac{N}{N_1}} = \sqrt{25} = 5.$$

Из уравнения $[N_s] = kR_s \ln([N_s])$ найдем коэффициент пропорциональности: $k = 7,77$. Находим неизвестные значения N_l : $N_1 = 2$; $N_2 = 3$; $N_3 = 8$.

Сравниваем их произведение с N : $\prod_{l=1}^3 [N_l] = 48 < 50$, однако приближение не-плохое. Другие варианты округления дают $2 \cdot 2 \cdot 9 = 36$, $2 \cdot 3 \cdot 9 = 45$, что, конечно, хуже.

Если зафиксировать и второй параметр $N_2 = 2$, получим $k = 9,67$ и $N_3 = 12$, произведение $\prod_{l=1}^3 [N_l] = 48$, как и в предыдущем случае.

Какой из двух вариантов (2, 3, 8) или (2, 2, 12) лучше? По затратности они равноценны, с точки зрения информативности второй предпочтительнее — обеспечивает более тонкое варьирование наиболее значимого параметра.

Подобные вычисления для других малых значений числа испытаний дают следующие результаты (табл. 2).

Таблица 2

N	50	75	100	150	200	250
N_1	2	2	2	2	2	2
N_2	2	3	4	5	6	7
N_3	12	12	12	14	16	17
$\prod_{l=1}^3 [N_l]$	48	72	96	140	196	238

Из табл. 2 видно, как происходит «размораживание» и рост числа уровней второго фактора с ростом числа испытаний. Для наиболее значимого третьего фактора скорость роста, как и следует ожидать, несколько больше.

Заключение

Проведен анализ существующего метода решений данного типа задач планирования эксперимента, определены его главные недостатки и преимущества. На основе анализа предложена модификация метода, позволяющая устранить указанные недостатки и сохранить преимущества.

Перечислим ключевые идеи выполненной модификации.

1. Метод дискретизации: замена разбиения области значений параметра на интервалы равной длины разбиением на интервалы равной вероятности — универсальный подход для эффективного разбиения и точной оценки его энтропии.

2. Вскрытие сущностной одномерности ранее построенной модели и «одномеризация» итерационного процесса.

3. Выбор начального приближения на основе оценки среднего геометрического и гарантированная сходимость итераций.

В этой работе не рассмотрены вопросы получения априорных оценок релевантности различных факторов эксперимента в процессе его планирования. В условиях неполной информации (иначе эксперимент — излишество) соответствующие проце-

дуры не могут быть до конца формализованными, и основным вариантом остается использование оценок экспертов, представляется целесообразным воспользоваться как более надежным, менее подверженным ошибкам, подходом интервального оценивания и процедурой получения точечных оценок на этой основе, разработанной в [5]. Также представляется полезным — шире использовать энтропийные критерии оптимальности при построении оценок, основанных на субъективных подходах [6].

Дальнейшие разработки в направлении настоящего исследования видятся, с одной стороны, в использовании полученных результатов в прикладных задачах планирования эксперимента, а с другой — в явном учете нескольких ресурсных ограничений в виде оптимизационных критериев и решении соответствующих многокритериальных задач.

С.А. Смирнов

ФАКТОРИ І РІВНІ ПРИ ПЛАНУВАННІ ЕКСПЕРИМЕНТУ, ЕФЕКТИВНИЙ ВИБІР З УРАХУВАННЯМ ОБМЕЖЕНЬ

Досліджується задача планування експерименту з ресурсними обмеженнями. Для складної системи, призначеної до експериментального дослідження, перед тим як використовувати відомі розвинені методи факторного планування експерименту, потрібно попередньо створити спрощену математичну модель, що представляє неповний скорочений опис системи. При цьому спрощенні із всіх об'єктивно існуючих незалежних параметрів системи залишаються лише найбільш значимі, що є вимушеною процедурою внаслідок природних обмежень ресурсів, подібних для виконання експериментального дослідження. Ті ж самі обмеження лімітують і число значень, що призначають кожному з параметрів (рівні факторів). Стаття присвячена модифікації існуючого методу дискретизації такої моделі з раціональним вибором параметрів дискретизації відповідно до існуючих обмежень, однак з вкрай ненадійною щодо збіжності ітераційною процедурою розв'язання. Головні ідеї модифікованого підходу наступні: 1) вибір числа рівнів факторів пропорційно значимості відповідних параметрів та зведення задачі до пошуку нерухомої точки (як у відомому методі); 2) розбиття за ймовірністю (замість розбиття на інтервали рівної довжини) для дискретизації та вибору представницьких значень параметру, що дозволяє знайти точний простий вираз для його ентропії Шенона; 3) перехід від багато- до однопараметричного (коефіцієнт пропорційності як показник параметризації) представлення нелінійного відображення, його декомпозиція і спрощення ітераційного процесу; 4) знаходження початкового значення коефіцієнту пропорційності за фактором з середньою релевантністю і розрахунки для інших факторів з подальшим ітераційним уточненням. Ітераційний процес гарантовано збігається, бо розгляд малих і великих значень скалярного параметру дозволяє використати теорему з проміжним значенням неперервної функції. Далі на основі розробленої процедури розв'язано дві задачі про призначення числа рівнів факторів для ситуацій з малим та великим ресурсним обмеженням, вказані відповідні ускладнення у розрахунках та способи їх подолання.

Ключові слова: планування експерименту, рівні факторів, редукція моделі, значимість параметру, ентропія параметру, дискретизація за ймовірністю, одномеризація.

S.A. Smirnov

FACTORS AND LEVELS ON DESIGN OF EXPERIMENT, EFFECTIVE CHOICE UNDER CONSTRAINS

The problem of design of experiment with resource constraints is investigated. For a complex system intended for experimental research, before using the well known advanced methods of factorial design, you must first create a simplified mathematical

model that represents an incomplete abbreviated description of the system. At the same time, on this simplification from all objectively existing independent parameters of the system remain only the most important parameters, which is a forced procedure due to the natural limitations of the resources available to perform the experimental study. The same constraints limit the number of values assigned to each of the parameters (factor levels number). The article is devoted to the modification of the existing method of discretization of such a model with a rational choice of discretization parameters in accordance with the existing limitations, but with an extremely unreliable in terms of convergence iterative solution procedure. The main ideas of the modified approach are as follows: 0) The choice of the number of levels of factors is proportional to the importance of the relevant parameters and the reduction to the problem of finding a fixed point (as in the known method). 1) Probability partition (instead of partition into equal length intervals) for discretization and selection of representative values of the parameter, which allows to find an exact simple expression for its Shannon entropy. 2) Transition from multi- to one-parameter (coefficient of proportionality as an indicator of parameterization) representation of non-linear mapping, its decomposition and simplification of the iterative process. 3) Finding the initial value of the coefficient of proportionality for a factor with average relevance and calculations for other factors, followed by iterative refinement. The iterative process is guaranteed to coincide, because the consideration of small and large values of the scalar parameter allows us to use the theorem on the intermediate value of a continuous function. Then, with the help of the developed procedure, two tasks on the assignment of the number of factor levels for situations with small and large resource constraints are solved, the corresponding complications in the calculations and ways to overcome them are indicated.

Keywords: design of experiment, factor levels, model reduction, importance of parameter, entropy of parameter, discretization by probability, one-dimensioning.

1. Математическая теория планирования эксперимента. Под ред. С.М. Ермакова. М. : Наука. 1983. 392 с.
2. Мушик Э., Мюллер П. Методы принятия технических решений. М. : Мир. 1990. 208 с. https://doi.org/10.1007/978-3-7091-9522-2_5
3. Hansel V. Ein allgemeines Entscheidungskonzept zur Bearbeitung LNAai mehrzielorientierter Informationsmangel-probleme. Dissertation A. IH Zittau, 1984. <https://www.mathgenealogy.org/id.php?id=90311>
4. Assignments of factors levels for design of experiments with resource constraints. S. Smirnov, O. Glushchenko, K. Ilchuk, I. Makeenko, N. Oriekhova. *Continious and Distributed Systems. Theory and Applications. Ser. Solid Mechanics and Its Applications*. Springer. 2014. **211**. P. 81. https://doi.org/10.1007/978-3-319-03146-0_6
5. Смирнов С.А., Гонтаренко И.С. Гарантированный синтез скалярного критерия для решения задачи многокритериальной оптимизации. *Системні дослідження та інформаційні технології*. 2006. № 2. С. 99–106. <http://journal.iasa.kpi.ua/article/view/165229>
6. Канеман Д., Словик П., Тверски А. Принятие решений в неопределенности: Правила и предубеждения. Харьков: Гуманитарный центр, 2005. 632 с. <https://doi.org/10.1017/SBO9780511809477>

Получено 01.10.2021