МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЗАПОРІЗЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

МАТЕМАТИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра фундаментальної та прикладної математики

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА БАКАЛАВРА

на тему: **«ЗАСТОСУВАННЯ МАТЕМАТИЧНИХ МЕТОДІВ ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ ПРИ РОЗВ'ЯЗАННІ ПРАКТИЧНИХ ЗАДАЧ»**

Виконала: студентка 4 курсу, групи 6.1132
спеціальності 113 Прикладна математика
(шифр і назва спеціальності)
освітньої програми Комп'ютерне моделювання
(назва освітньої програми)
К.В. Вітлянчук
(ініціали та прізвище)
Керівник доцент кафедри фундаментальної та прикладної математики, доцент, к.ф.–м.н. Кондрат'єва Н.О.
(посада, вчене звання, науковий ступінь, прізвище та ініціали)
Рецензент доцент кафедри загальної математики, доцент, к.ф.–м.н. Спиця О. Г.
(посада, вчене звання, науковий ступінь, прізвище та ініціали)

Запоріжжя 2026

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

ЗАПОРІЗЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет математичний

Кафедра фундаментальної та прикладної математики

Рівень вищої освіти бакалавр

Спеціальність 113 Прикладна математика
(шифр і назва)

Освітня програма Комп'ютерне моделювання

ЗАТВЕРДЖУЮ
В.о. завідувача кафедри комп'ютерних наук, к.пед.н., доцент

_____ Гребенюк С.М.
(підпис)

« ____ « _____ 2025 р.

З А В Д А Н Н Я

НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ СТУДЕНТЦІ

Вітлянчуку Кирилу Володимировичу
(прізвище, ім'я та по–батькові)

1. Тема роботи Застосування математичних методів планування експерименту при розв'язанні практичних задач

керівник роботи Кондрат'єва Наталія Олександрівна, к.ф.–м.н., доцент
(прізвище, ім'я та по–батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом ЗНУ від « 04 « грудня 2025 року № 1741–с

2. Строк подання студентом роботи 25.05.2026–03.06.2026

3. Вихідні дані до роботи 1. Постановка задачі.
2. Перелік літератури.

4. Зміст розрахунково–пояснювальної записки (перелік питань, які потрібно розробити)

1. Аналіз предметної області та постановка задачі.
2. Основні теоретичні відомості.
3. Розробка та тестування програми.

5. Перелік графічного матеріалу (з точним зазначенням обов'язкових креслень) презентація

6. Консультанти розділів роботи

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв

7. Дата видачі завдання 04.12.2025

К А Л Е Н Д А Р Н И Й П Л А Н

№	Назва етапів кваліфікаційної роботи	Строк виконання етапів роботи	Примітка
1.	Розробка плану роботи.	04.12.2025–02.01.2026	
2.	Збір вихідних даних.	03.01.2026–26.02.2026	
3.	Обробка методичних та теоретичних	27.02.2026–15.04.2026	
	джерел.		
4.	Розробка першого та другого розділу.	16.04.2026–20.05.2026	
5.	Розробка третього розділу.	21.05.2026–09.06.2026	
6.	Оформлення та нормоконтроль	25.05.2026–03.06.2026	
	кваліфікаційної роботи бакалавра.		
7.	Захист кваліфікаційної роботи.	18.06.2026	

Студент _____ К. В. Вітлянчук
(підпис) (ініціали та прізвище)

Керівник роботи _____ Н. О. Кондрат’єва
(підпис) (ініціали та прізвище)

Нормоконтроль пройдено

Нормоконтролер _____ О.Г.Спиця
(підпис) (ініціали та прізвище)

РЕФЕРАТ

Кваліфікаційна робота бакалавра «Застосування математичних методів планування експерименту при розв’язанні практичних задач»: 139 с., 13 рис., 13 табл., 23 джерел.

АДЕКВАТНІСТЬ, МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ, ОПТИМІЗАЦІЯ, ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ, РЕГРЕСІЯ, СТАТИСТИЧНИЙ АНАЛІЗ, ФАКТОРНИЙ ПЛАН.

Об’єкт дослідження – планування експерименту.

Мета роботи: застосувати математичні методи планування експерименту для розв’язання практичних задач та побудови моделей.

Метод дослідження – аналітичний.

Кваліфікаційна робота присвячена дослідженню та практичному застосуванню математичних методів планування експерименту для оптимізації параметрів процесу нагрівання металевої деталі, а також автоматизації розрахунків шляхом розробки спеціалізованого програмного забезпечення.

Структурно робота складається з 4 розділів. В 1 розділі представляються теоретичні основі планування експерименту, аналізуються критерії ефективності та існуючі підходи до моделювання у проблемній області. 2 розділ присвячено класифікації та порівняльному аналізу методів (повного, дробового факторного експерименту, методу поверхні відгуку тощо) та обґрунтуванню методики їх застосування для розв’язання практичних задач. У 3 розділі наводиться опис процесу автоматизації, включаючи обґрунтування вибору інструментальних засобів, алгоритм і блок–схему роботи створеної програми та інструкцію користувача. 4 розділ розкриває практичну реалізацію розробленого підходу для оптимізації процесу нагрівання металевої деталі, аналіз, верифікацію та інтерпретацію отриманої математичної моделі.

В результаті виконання кваліфікаційної роботи було застосовано повний/дробовий факторний експеримент та регресійний аналіз, що дозволило

побудувати адекватну математичну модель процесу термообробки металу. Розроблено та технічно реалізовано алгоритм автоматизованого планування експерименту у вигляді програмного додатка, який забезпечує візуалізацію результатів та визначення оптимальних значень факторів для досягнення цільової функції відгуку.

SUMMARY

Bachelor’s Qualifying Theses «Application of Mathematical Methods of Experiment Planning in Solving Practical Problems»: 139 pages, 13 figures, 13 tables, 23 sources.

ADEQUACY, EXPERIMENT PLANNING, FACTORIAL DESIGN, MATHEMATICAL MODEL, OPTIMIZATION, REGRESSION, STATISTICAL ANALYSIS.

The object of the study is the experiment planning.

The aim of the study is to apply mathematical methods of experiment planning for solving practical problems and constructing models.

The method of research is analytical.

The qualification thesis is devoted to the research and practical application of mathematical methods of experimental design to optimize the parameters of a metal part heating process, as well as the automation of calculations through the development of specialized software.

Structurally, the thesis consists of 4 chapters. Chapter 1 presents the theoretical foundations of experimental design, analyzes efficiency criteria, and examines existing modeling approaches within the problem domain. Chapter 2 is dedicated to the classification and comparative analysis of methods (full and fractional factorial designs, response surface methodology, etc.) and provides a justification of the methodology for their application to solve practical problems. Chapter 3 provides a description of the automation process, including the justification for the choice of software tools, the algorithm and flowchart of the developed program, and a user manual. Chapter 4 describes the practical implementation of the developed approach for optimizing the metal part heating process, along with the analysis, verification, and interpretation of the obtained mathematical model.

As a result of the qualification thesis, full factorial design and regression analysis were applied, which enabled the construction of an adequate mathematical

model of the metal heat treatment process. An automated experimental design algorithm was developed and technically implemented as a software application that provides data visualization and determines optimal factor values to achieve the target response function.

ЗМІСТ

Завдання на кваліфікаційну роботу……..2
Реферат……4
Summary……..6
Скорочення та умовні познаки……...10
Вступ……..12
1 Теоретичні основи планування експерименту та аналіз проблемної області.14
1.1 Поняття та сутність планування експерименту……..……14
1.2 Аналіз проблемної області та актуальність дослідження……..…17
1.3 Основні параметри, фактори та критерії ефективності експерименту…….19
1.4 Огляд існуючих підходів до планування експерименту……....23
1.5 Висновки до розділу 1……..…....26
2 Математичні методи планування експерименту та методика їх застосування……28
2.1 Класифікація та порівняльний аналіз методів планування експерименту...28
2.2 Основні математичні методи планування експерименту……..…32
2.2.1 Повний факторний експеримент……...32
2.2.2 Дробовий факторний експеримент……...36
2.2.3 Метод поверхні відгуку та центральний композиційний план……..39
2.2.4 Оптимальні плани (D–оптимальні, Box–Behnken та ін.)..……44
2.3 Порівняння методів та обґрунтування їх вибору для практичних задач…..49
2.4 Методика застосування математичних методів планування експерименту для розв’язання практичних задач…….....52
2.4.1 Опис вхідних даних та методи їх отримання……...52
2.4.2 Етапи проведення дослідження…….……...57
2.4.3 Аналіз та опис вихідних даних……..……60
2.4.4 Візуалізація результатів……..…….....65

2.5 Висновки до розділу 2……..…….69
3 Автоматизація процесу планування експерименту……..……71
3.1 Обґрунтування вибору мови програмування та інструментальних засобів.71
3.2 Опис використовуваних модулів, бібліотек та функцій……73
3.3 Алгоритм роботи програми та його блок–схема…….…..….76
3.4 Опис інтерфейсу розробленої програми…….…….....…..81
3.5 Детальний опис роботи програми та її особливостей…….……..85
3.6 Інструкція для кінцевого користувача…….……...89
3.7 Висновки до розділу 3……..…….92
4 Практична реалізація: оптимізація процесу нагрівання металевої деталі…..94
4.1 Постановка задачі та опис об’єкта дослідження……..…...94
4.2 Визначення факторів, рівнів та функції відгуку…….……...97
4.3 Формування експериментального плану та проведення досліджень…..…101
4.4 Обробка результатів та побудова математичної моделі……..105
4.5 Аналіз та інтерпретація отриманих результатів……..……....109
4.6 Висновки до розділу 4……..……...114
Висновки…….116
Перелік посилань……118
Додаток А Код програми……..…120
Додаток Б Результати програми……..129

СКОРОЧЕННЯ ТА УМОВНІ ПОЗНАКИ

ВНЗ	Вищий навчальний заклад
ЗНУ	Запорізький національний університет
МПЕ	Математичні методи планування експерименту
ПЕ	Планування експериментів
ЦКП	Центральний композиційний план
ДФЕ	Дробовий факторний експеримент
ІТ	Інформаційні технології
д.т.н.	Доктор технічних наук
к.ф.–м.н.	Кандидат фізико–математичних наук
рис.	Рисунок
табл.	Таблиця
с.	Сторінка
RSM	Method of response surface (Метод поверхні відгуку)
CCD	Central composite design (Центральний композиційний план)
y	Функція відгуку (вихідна величина)
$\hat{y}(x)$	Прогнозоване значення функції відгуку
$x_1, x_2, \dots, x_k$	Кодовані значення факторів експерименту
X_i	Натуральне значення i – го фактора
ΔX_i	Центральне натуральне значення i – го фактора
k	Загальна кількість факторів у системі
m	Кількість рівнів варіювання одного фактора
N	Загальна кількість дослідів у плані
p	Кількість генераторів плану (ступінь дроблення)
n_0	Кількість паралельних дослідів у центрі плану
ε	Випадкова похибка експерименту (шум)

α	Величина осьового («зіркового») плеча
b_0	Вільний член регресійного рівняння
b_i	Лінійні коефіцієнти регресійного рівняння
b_{ij}	Коефіцієнти ефектів парної взаємодії факторів
b_{ii}	Квадратичні коефіцієнти регресійного рівняння
X	Матриця факторних значень плану
X^T	Транспонована матриця плану
$(X^T X)$	Інформаційна матриця Фішера
$(X^T X)^{-1}$	Коваріаційна (обернена) матриця
$\det(\cdot)$	Визначник (детермінант) матриці
$tr(\cdot)$	Слід (шпур) матриці
$\lambda_{max}(\cdot)$	Максимальне власне значення матриці
I	Одиничний елемент у визначальних рівняннях
$\equiv$	Знак тотожної рівності для позначення змішаних ефектів
D, A, E, G	Критерії статистичної оптимальності планів
$Var(\cdot)$	Дисперсія випадкової величини
$\frac{dy}{dx_i}$	Часткова похідна функції відгуку за i –м фактором
$+1$	Верхній (максимальний) рівень фактора
-1	Нижній (мінімальний) рівень фактора
0	Основний (центральний) рівень фактора

ВСТУП

Сучасний світ характеризується високим рівнем складності технологічних та виробничих процесів, які потребують точного аналізу, прогнозування та оптимізації. У багатьох сферах – від хімічної промисловості до біології та економіки – проведення експериментів є ключовим етапом дослідження. Проте традиційні методи, що передбачають зміну лише одного фактора за раз, є затратними за часом, ресурсами та не завжди дозволяють виявити складні взаємозв’язки між параметрами.

Актуальність застосування математичних методів планування експерименту (МПЕ) визначається необхідністю підвищення ефективності досліджень та скорочення матеріальних і часових витрат. МПЕ дозволяють систематизувати процес отримання даних, мінімізувати кількість необхідних дослідів та побудувати адекватні математичні моделі, що описують досліджуваний процес. Це потужний інструмент для інженерів, науковців та аналітиків, який забезпечує достовірність результатів та можливість знаходження оптимальних рішень.

Предметом дослідження є процес застосування математичного апарату для організації та проведення експериментів.

Метою кваліфікаційної роботи є застосування математичних методів планування експерименту для розв’язання конкретних практичних задач, побудови ефективних моделей досліджуваних процесів та знаходження їх оптимальних параметрів.

Об’єктом дослідження є процес планування експерименту та подальшого статистичного аналізу отриманих даних. Основними завданнями дослідження визначено вивчення теоретичних основ МПЕ, аналіз різних типів планів (повний факторний експеримент, дробовий факторний експеримент), розробка алгоритму застосування обраного методу до практичної задачі, а також верифікація та інтерпретація отриманої математичної моделі.

Наукова новизна роботи полягає в адаптації та застосуванні сучасних методів планування експерименту до специфічної практичної задачі, що дозволяє отримати нові кількісні залежності між факторами та оптимізувати процес.

Практичне значення отриманих результатів полягає в можливості використання розробленої методики та отриманої математичної моделі для підвищення ефективності виробничих процесів, зниження ресурсоспоживання та покращення якості продукції у відповідній галузі.

Структурно робота складається з 4 розділів.

В 1 розділі представляються теоретичні основи планування експерименту, аналізуються критерії ефективності та існуючі підходи до моделювання у проблемній області.

2 розділ присвячено класифікації та порівняльному аналізу методів (повного, дробового факторного експерименту, методу поверхні відгуку тощо) та обґрунтуванню методики їх застосування для розв’язання практичних задач.

У 3 розділі наводиться опис процесу автоматизації, включаючи обґрунтування вибору інструментальних засобів, алгоритм і блок–схему роботи створеної програми та інструкцію користувача.

4 розділ розкриває практичну реалізацію розробленого підходу для оптимізації процесу нагрівання металевої деталі, аналіз, верифікацію та інтерпретацію отриманої математичної моделі.

1 ТЕОРИТИЧНІ ОСНОВИ ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ ТА АНАЛІЗ ПРОБЛЕМНОЇ ОБЛАСТІ

1.1 Поняття та сутність планування експерименту

Планування експерименту надзвичайно важлива стадія у наукових дослідженнях. Саме воно визначає коректність, достовірність і статистичну обґрунтованість отриманих результатів за мінімальних витрат ресурсів. По суті, планування експерименту це сукупність найфундаментальніших методів і процедур, спрямованих на раціоналізацію дослідження для вивчення впливу керованих факторів на об’єкт дослідження і отримання кількісних характеристик цього впливу [1, 2,4,5,6].

Традиційно в експерименті змінювали тільки один фактор при фіксованих значеннях інших. Проте сьогодні методи планування експерименту передбачають зміни одночасно кількох факторів. Завдяки цьому можна не тільки оцінити індивідуальний вплив кожного параметру, але і виявити їх взаємодію, що є дуже важливим для складних технічних і природних систем [2,3,1,9].

Суть планування експерименту вибрати такий набір умов проведення експерименту, при якому результати будуть максимально інформативні. Це здійснюється шляхом визначення:

- сутності факторів, що впливають на процес;
- варіантів зміни кожного фактору;
- структури плану експерименту;
- методів обробки результатів.

Головна мета планування експерименту побудувати модель досліджуваного процесу, яка описувала б залежність вхідних параметрів (факторів) та вихідної величини (функції відгуку). Зазвичай ця модель представлена у вигляді регресійного рівняння:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_k) + \varepsilon, \tag{1.1}$$

де $y -$ функція відгуку,

$x_1, x_2, \dots, x_k -$ фактори експерименту,

$\varepsilon -$ випадкова похибка [3, 4].

Практично ця залежність часто апроксимується поліноміальною моделлю, зокрема лінійною чи квадратичною:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^{k} b_i, x_i + \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=i+1}^{k} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{k} b_{ii} x_i^2. \tag{1.2}$$

Коефіцієнти b_i, b_{ij}, b_{ii} визначаються на основі результатів експерименту і характеризують вплив факторів та їх взаємодій на результат [2,3,4,7,9].

Не менш важливими етапами планування експерименту є кодування факторів, що дає змогу перейти від натуральних значень параметрів до безрозмірної шкали. Це, з одного боку, робить зручним математичну обробку, з іншого підвищує стійкість розрахунків. Кодування зазвичай здійснюється за формулою:

$$x_i = \frac{X_i - X_{0i}}{\Delta X_i}, \tag{1.3}$$

де $X_I -$ натуральне значення фактора,

X_{0i} його центральне значення,

ΔX_i інтервал варіювання [1,3,5].

Таким чином, всі фактори будуть приведені до єдиного масштабу, а орієнтуватися на результати буде ще простіше.

Планування експерименту тісно пов’язане з організаційними поняттями проведення досліджень, серед яких дуже важливі рандомізація, повторюваність

та блокування. Рандомізація дає можливість провести досліди у випадковому порядку, що дозволяє уникнути систематичних похибок. Повторюваність це можливість оцінити дисперсію експериментальної похибки, а блокування шлях врахування впливу неконтрольованих факторів [2, 5,8,10].

Для того щоб зрозуміти, як проводиться планування експерименту, важливо орієнтуватися у загальній схемі його основних етапів, які наведено в табл. 1.1.

Таблиця 1.1 – Основні етапи планування експерименту

Етап	Зміст
Постановка задачі	Визначення мети дослідження та функції відгуку
Вибір факторів	Визначення значущих змінних
Визначення рівнів	Задання інтервалів варіювання
Побудова плану	Формування матриці експерименту
Проведення експерименту	Отримання експериментальних даних
Обробка результатів	Побудова моделі та перевірка її адекватності

З–поміж цих етапів можна побачити, що планування експерименту не є окремою процедурою, а включає у себе як підготовку до дослідження, так і опрацювання його результатів.

Велику роль планування експерименту відіграє тоді, коли ресурси обмежені. У багатьох випадках велику кількість дослідів можна провести або не економічно, або технічно неможливо. У таких ситуаціях на допомогу приходять математичні засоби, які дозволяють значно зменшити кількість експериментів, при цьому нічого не втрачаючи у точності результатів [1, 4,8].

Крім того, планування експерименту дає можливість оптимізувати досліджуваний процес. Відповідно до побудованої моделі можна знайти такі

значення факторів, при яких функція відгуку досягає екстремуму (максимуму чи мінімуму). Це є основою для прийняття ефективних інженерних та управлінських рішень [3,4,6,7].

Отже, планування експерименту це універсальний інструмент дослідження складних систем, що поєднує математичне моделювання, статистичний аналіз та оптимізацію. Застосовуючи його, можна підвищити ефективність досліджень, зменшити їх вартість, отримати надійні результати, необхідні для широкого кола практичних задач у різних галузях науки і техніки.

1.2 Аналіз проблемної області та актуальність дослідження

У сучасному світі, зі стрімким розвитком науки і техніки, досліджувані процеси стають дедалі більш комплексними і/або багатофакторними, часто із суттєвими нелінійними зв’язками між параметрами. Це можна спостерігати у технічних системах (як–от машинобудування, енергетика, матеріалознавство), у природничих, економічних або інформаційних процесах. У таких випадках традиційне проведення експериментів, яке базується на зміні одного фактора з фіксацією інших, виявляється недостатньо ефективним і інформативним для повного вивчення об’єкта експерименту [1, 3,5,6].

Головна проблема традиційних експериментальних методів полягає у низькій інформативності на фоні значних витрат ресурсів. Особливо ця проблема простежується при великій кількості факторів: кількість необхідних експериментів збільшується експоненційно, що вимагає великих затрат часу, матеріалів і енергії. До того ж, такий підхід не враховує взаємодії між факторами, яка у багатьох випадках є суттєвою для кінцевого результату процесу [2, 4,1,9].

Ще одна важлива проблема, це побудова адекватних математичних моделей. Якщо у реальних системах залежність між вхідними параметрами та

вихідною характеристикою є нелінійною, то її аналітичний опис стає складним. Без застосування спеціальних методів планування експериментів отримання таких моделей є надскладним або навіть неможливим. У будь–якому разі потреба в надмірній кількості експериментальних чи обчислювальних процедур [4, 7,].

У цьому сенсі математичні методи планування експерименту є дієвим інструментом для розв'язання вказаних проблем. Вони органічно систематизують процес дослідження, дозволяють раціонально обирати умови експериментів і отримувати максимум інформації при мінімумі експериментів. Саме тому підвищується ефективність і знижується їх вартість [3, 5,11,12].

Зацікавленість до методів планування експерименту зумовлена також сучасним завданням оптимізації технологічних процесів. Наприклад, у промисловості суттю часто є підвищення якості продукції і разом з тим зниження ресурсозатрат. Це досягається шляхом пошуку оптимальних значень керованих параметрів, що безпосередньо пов'язано із побудовою моделей та дослідженням їх властивостей [4, 6].

До того ж, розвиток ІТ і обчислювальної техніки відкриває нові горизонти для застосування методів експерименту. Сучасні інструменти, як–от мови програмування Python, R і інші статистичні пакети, значно полегшують побудову планів експерименту, обробку даних, їх візуалізацію. Таким чином складні математичні методи стають доступними для широкої аудиторії [6, 8,13,14,18,20].

Особливо актуальним є комбінування методів планування експерименту з комп'ютерним моделюванням. У випадках, коли реальні експерименти є дорогими чи технічно складними, велика частина досліджень переноситься у комп'ютерне середовище. Завдяки цій можливості можна проводити обчислювальні експерименти, безперервно змінюючи параметри моделей і досліджуючи вплив на результати, при цьому абсолютно без втручання у фізичний процес [7, 9,16,17].

Не менш важливою є довіра до отриманих результатів. Навіть у

найкращих умовах експериментальні дані завжди містять випадкові помилки, обробка яких неможлива без застосування статистичних методів. Застосування методу планування експериментів дозволяє врахувати фактор випадковості ще на етапі організації і дає можливість оцінити точність отриманих результатів [2, 5].

Підсумовуючи, можна відзначити основні проблеми, що постають перед дослідниками при проведенні експериментів:

- велика кількість факторів і складність їх взаємодії;
- значні ресурсоємності проведення експериментів;
- складність побудови адекватних математичних моделей;
- випадкові помилки в результатах;
- необхідність оптимізації параметрів процесу.

Використання математики планування експериментів дає можливість з ними ефективно боротися і, що найголовніше, структуровано підходити до дослідження та отримувати надійні результати.

Отже, актуальність теми пов’язана з необхідністю використання сучасних математичних методів для підвищення ефективності експериментальних досліджень, побудови адекватних моделей і складних технологічних процесів у різних галузях науки і техніки. Це повною мірою відповідає сучасним вимогам до підготовки фахівців у галузі прикладної медицини та комп’ютерної симуляції[7,8].

1.3 Основні параметри, фактори та критерії ефективності експерименту

Побудова експерименту, реалізація якого завдання ефективне планування, вимагає чіткого визначення фактів, що належать до параметрів, факторів і функції відгуку. Саме від вірного вибору і формулювання цих питань залежатиме якість одержаної моделі та ступінь достовірності отриманих

результатів [1, 3,10].

Під факторами розуміють керовані змінні, значення яких дослідник змінює у процесі експерименту. Фактори можуть мати різну природу: фізичну (температура, тиск), технологічну (швидкість, час), хімічну (концентрація речовин) або економічну (розрахунки ресурсів) [2, 4].

Кожен фактор має певний діапазон зміни, або заточений у вигляді рівнів. Як правило, у класичних планах грають два чи три рівні: мінімальний, максимальний і, за необхідністю, центральний. Вибір рівнів ґрунтується на фізичних обмеженнях задачі, технологічних можливостях і вимогах безпеки [3, 5].

Функція відгуку, вихідна характеристика експерименту, що відбиває результат впливу факторів на досліджуваний об'єкт. Функція відгуку може бути числовим показником ефективності, наприклад, продуктивністю, якістю продукції, енергоспоживанням і т. д. [4, 6].

Взаємозв'язок між факторами і функцією відгуку описується деякою математичною моделлю, яку у загальному випадку можна записати у вигляді :

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_k), \tag{1.4}$$

де $y -$ функція відгуку,

$x_1, x_2, \dots x_k -$ фактори експерименту [3].

На практиці ця функція невідома, тому її дослідники апроксимують на основі даних експерименту. Одним із найбільш розповсюджених способів є використання регресійних моделей, зокрема поліноміальних. Так, при наведеному вище багатофакторному експерименті першого порядку модель може мати вигляд:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^{k} b_i x_i, \tag{1.5}$$

для більш складних процесів уживається квадратична модель:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^{k} b_i, x_i + \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=i+1}^{k} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{k} b_{ii} x_i^2, \quad (1.6)$$

який дає змогу враховувати і взаємодію факторів, і нелінійність процесу [1,2,3,4, 7].

Для правильності моделей важливим є таке кодування факторів, що дозволяє перейти від натуральних значень до безрозмірної шкали. Це забезпечує рівного впливу факторів на результати розрахунків і дає змогу інтерпретувати коефіцієнти моделі:

$$x_i = \frac{X_i - X_{0i}}{\Delta X_i}, \quad (1.7)$$

де $X_i -$ натуральне значення фактора,

$X_{0i} -$ центральне значення,

ΔX_i інтервал [3,5,10].

Окрім факторів і функції відгуку чимале значення мають параметри експерименту, до яких можна віднести:

- кількість дослідів;
- структуру плану експерименту;
- порядок проведення експериментів;
- кількість повторень;
- методи обробки результатів.

Ці параметри в значній мірі визначають організацію експерименту і впливають на точність отриманих результатів.

Оцінка ефективності розглянутого плану здійснюється за рядом критеріїв. Їх можна поділити на економічні і статистичні. У більш вузькому розумінні під економічними критеріями слід розуміти мінімізацію витрат ресурсів, а

прикладом статичних критеріїв є оцінки оцінювання заданого типу для параметрів моделей [4, 6,8].

До основних критеріїв ефективності можна віднести:

- мінімізацію кількості дослідів;
- максимальну інформативність одержуваних даних;
- незалежність оцінок параметрів;
- мінімізацію дисперсії оцінок параметрів одного закладу;
- стійкість одержуваних результатів до різних похибок.

З математичної точки зору ефективність розглянутих планів часто виявляють через інформаційну матрицю Фішера даного плану. Одним з найбільш розповсюджених критеріїв є D–оптимальність плану, під якою розуміють максимізацію визначника цієї матриці [3,8,9] :

$$D = \det(X^T X) \to max, \tag{1.8}$$

де $X -$ матриця факторних значень плану.

Цей критерій забезпечує мінімальний об’єм довірчої області для параметрів заданої моделі і, відповідно, максимальну точність отриманих результатів.

Ще одним важливим критерієм є A–оптимальність плану, під якою розуміють такий критерій розподілення, у якому мінімізується середня дисперсія оцінок параметрів заданої моделі :

$$A = tr((X^T X)^{-1}) \to min. \tag{1.9}$$

Крім того, важливим властивістю плану є його ортогональність, під якою передбачається нескладність присутності в природних регресійних моделях нульових значень у відповідних коефіцієнтів регресійних моделей, роблячи таким чином їх незалежними. У цьому випадку матриця $X^T X$ є діагональною, що значно зменшує складність обчислень та інтерпретацій [1,3, 5,11,12].

Основні критерії ефективності експериментального плану, їх сутність та практичне значення наведено в табл. 1.2.

Таблиця 1.2 – Критерії ефективності експериментального плану

Критерій	Сутність	Практичне значення
Мінімізація кількості дослідів	Зменшення числа експериментів	Зниження витрат ресурсів
Ортогональність	Незалежність факторів	Спрощення обробки даних
D–оптимальність	Максимізація $\det(X^T X)$	Підвищення точності оцінок
A–оптимальність	Мінімізація сліду оберненої матриці	Зменшення дисперсії
Ротаційність	Однакова точність у всіх напрямках	Надійність прогнозів

Аналіз наведених в табл. 1.2 критеріїв зазначає, що жодний з них не є універсальний, тому на практиці при виборі оптимального плану враховуються конкретні умови задачі. У деяких випадках перевагу надають мінімізації витрат, в інших, максимальній часті або стійкості результатів [3,4, 6,7].

Отже, визначення факторів, параметрів і критеріїв є визначальними етапами побудови етапом ефективного плану. Саме тут закладаються основи побудови адекватної математичної моделі та отримання достовірних результатів. Раціональний вибір цих елементів дає можливість змінення поєднання точності, надійності і економічною ефективністю дослідної роботи.

1.4 Огляд існуючих підходів до планування експерименту

Сучасне планування експерименту сформувалося не один рік і є синтезом статистичних методів, математичного моделювання та нових інформаційних

технологій. Підходи до нього змінилися в зв'язку з розвитком складних систем, експеримент з якими традиційними методами планування виявився неефективним [1, 2,14, 23].

Відповідно до цього з усіх існуючих методів планування експерименту їх можна згрупувати за такими ознаками, як: мета експерименту, структура плану, використовуваний математичний апарат.

До першої належать традиційні факторні методи, що полягають у повному або дробовому переборі комбінацій рівнів факторів. Найпростішим і найбільш повним уявляється повний факторний експеримент, в якому розглядаються всі можливі комбінації факторів. Цей метод дає змогу отримати повну інформацію про систему, в тому числі й про взаємодію факторів, але у більшій кількості факторів його застосування буде ускладнене через надзвичайно велике число одночасно виконуваних експериментів [2,3, 4,9].

Для зменшення числа одночасно виконуваних експериментів у практиці часто застосовують дробові факторні методи (дробові плани), що передбачають виконання лише частини експериментів із повного плану. Завдяки цьому кількість одночасно виконуваних експериментів скорочується в десятки й сотні разів, але частина інформації про взаємодію факторів втрачається або змішується. Ці методи найчастіше застосовують на початкових етапах досліджень для відбору істотних факторів [4, 7].

Іншу групу становлять методи поверхні відгуку, які спрямовані на побудову моделей вищого порядку й оптимізацію факторів. У їх рамках застосовуються такі експериментальні плани, як центрально–композиційні експериментальні плани, плани Бокса–Бенкена і т. п. Вони дають змогу враховувати нелінійні залежності параметрів процесу та знаходити максимуми чи мінімуми функції відгуку [3,6, 8].

Важливе місце належить також оптимальним планам експерименту, тісно пов'язаним із певними критеріями оптимальності. Ці плани, наприклад, D–оптимальні, A–оптимальні тощо дають змогу використовувати найефективніші плани для знаходження оцінок параметрів обраної моделі. Особливістю цих

методів є те, що побудова плану експерименту здійснюється з використанням математичних алгоритмів, враховуючи задані обмеження, що відрізняє їх від традиційних квазі– та повних факторних експериментів [4, 7,8,11].

Окрім класичних статистичних методів у сучасних дослідженнях усе більшу популярність набувають евристичні та інтелектуальні методи планування експерименту. До них належать генетичні алгоритми, методи рою частинок, імітація відпалу та інші методи глобальної оптимізації. Вони дають змогу ефективно досліджувати складні нелінійні системи з великою кількістю параметрів, у яких застосування традиційних методів ускладнене [8, 9,15,16,17].

Окремо слід згадати комп’ютерні методи, що поєднують методи планування експерименту з дослідженнями на моделях шляхом імітації експерименту. У цьому випадку експеримент (дослідження) на реальному (фізичному) об’єкті мінімізується або скасовується, натомість його дослідження на модельованому об’єкті (математичній чи комп’ютерній моделі) використовується. Це дозволяє суттєво знизити періодичний час проведення досліджень (експериментів) та уможливлює дослідження небезпечних для людей, тварин, екосистем речей і процесів у складних лабораторних умовах [7, 10,13,14,23].

Порівняльні характеристики різних підходів до планування експерименту наведено в табл. 1.3.

Аналіз цих методів дозволяє сказати, що вибір конкретного методу планування експерименту залежить від ряду умов, з яких основними є кількість факторів (змінних), складність процесу, ресурси, що надаються дослідженню, і мета цього дослідження. У багатьох випадках доцільним є комбінований підхід, що використовує переваги різних методів [1,4,5,6].

Так, на початковому етапі можна застосувати дробові факторні експерименти для відбору істотних факторів, а далі скористатися методами поверхні відгуку для побудови точної моделі і оптимізації процесу. Такий підхід допоможе збалансувати точність досліджень і ресурси.

Таблиця 1.3 – Порівняльна характеристика підходів до планування експерименту

Підхід	Основна мета	Переваги	Обмеження
Повний факторний	Повне дослідження системи	Максимальна інформативність	Велика кількість дослідів
Дробовий факторний	Зменшення кількості експериментів	Економія ресурсів	Втрата частини інформації
Поверхня відгуку	Оптимізація процесу	Врахування нелінійності	Складність реалізації
Оптимальні плани	Підвищення точності оцінок	Найкращі статистичні властивості	Необхідність обчислювальних ресурсів
Евристичні методи	Пошук глобального оптимуму	Гнучкість і універсальність	Відсутність гарантії точності
Комп’ютерне моделювання	Віртуальні експерименти	Зменшення витрат	Залежність від адекватності моделі

Відтак, сучасні підходи до планування експерименту являють собою широкий арсенал методів, спрямованих на ефективне дослідження складних систем. Їх застосування дає змогу отримати достовірні результати, побудувати адекватні моделі, оптимізувати процеси у науці і техніці.

1.5 Висновки до розділу 1

У першому розділі було розглянуто теоретичні основи планування експерименту та проведено узагальнений аналіз проблемної області

дослідження. Встановлено, що планування експерименту є ефективним інструментом організації досліджень, який дозволяє отримувати достовірні результати при мінімальних витратах ресурсів.

Розкрито сутність планування експерименту як комплексного процесу, що включає вибір факторів, визначення їх рівнів, побудову експериментального плану та обробку отриманих даних. Показано, що основною метою є побудова математичної моделі, яка описує залежність функції відгуку від вхідних параметрів.

У процесі аналізу проблемної області встановлено, що сучасні дослідження характеризуються багатофакторністю, складністю взаємозв’язків та наявністю випадкових похибок, що ускладнює застосування традиційних експериментальних підходів. Обґрунтовано актуальність використання математичних методів планування експерименту для підвищення ефективності досліджень і оптимізації процесів.

Визначено основні елементи експерименту, зокрема фактори, параметри та функцію відгуку, а також розглянуто критерії ефективності експериментальних планів, серед яких важливу роль відіграють статистичні характеристики, такі як ортогональність, D– та A–оптимальність.

Проведено огляд існуючих підходів до планування експерименту, що дозволило встановити їх переваги та обмеження. Показано, що вибір конкретного методу залежить від умов задачі, а найбільш ефективним є комбіноване використання різних підходів.

Отримані результати створюють теоретичну основу для подальшого розгляду математичних методів планування експерименту та розробки методики їх застосування при розв’язанні практичних задач у наступних розділах роботи[1–23].

2 МАТЕМАТИЧНІ МЕТОДИ ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ ТА МЕТОДИКА ЇХ ЗАСТОСУВАННЯ

2.1 Класифікація та порівняльний аналіз методів планування експерименту

Методи планування експериментів (ПЕ), це напрямок науки, що сформувався на основі математичної статистики, теорії ймовірностей та прикладного моделювання і нині об’єднує різноманітні методи, спрямовані на доцільну організацію експерименту. Основне завдання методів ПЕ, побудова таких планів експериментів, за допомогою яких можна отримати максимум інформації про об’єкт дослідження за мінімумом експериментів[1,2,6].

В залежності від підходу до організації експерименту, способу вибору факторів, структури плану та методів обробки даних розрізняють кілька напрямів класифікації методів планування експериментів. Їх можна загалом поділити за такими ознаками:

- за кількістю факторів;
- за типом плану (повний або дробовий);
- за призначенням (оцінювання факторів або оптимізація);
- за властивостями статистичної оптимальності;
- за способом побудови (детерміновані або алгоритмічні).

Розглянемо кожний із цих напрямів класифікації детальніше.

За кількістю факторів методи ПЕ поділяються на:

- однофакторні;
- багатофакторні.

В однофакторних експериментах досліджується вплив лише одного суто визначеного параметра на функцію відгуку при фіксованих значеннях інших змінних. Такий підхід є найпростішим і дозволяє встановити базову залежність між змінною та результатом.

Проте в ньому суттєвим недоліком є те, що він не враховує взаємодій між факторами. У реальних системах ці взаємодії можуть мати істотний вплив на результат, тому однофакторні експерименти переважно застосовують на початкових етапах досліджень або для попереднього аналізу[2,9].

У багатофакторних експериментах одночасно змінюються кілька факторів. Перевага цього виду експериментів полягає в тому, що можна дослідити не лише вплив окремо кожного фактора, але й ефекти їх взаємодій. Саме багатофакторний підхід лежить в основі сучасних методів планування експериментів, бо він дає змогу найповніше відтворити реальні процеси[1,5].

За структурою плану експериментів розрізняють:

– повні факторні плани;

– дробові факторні плани.

У повних факторних планах експерименти проводять за всіма можливими комбінаціями рівнів факторів. Якщо кількість факторів k, а кожен із них має mmm рівнів, тоді повна кількість дослідів дорівнюватиме:

$$N = m^k. \tag{2.1}$$

Це означає, що з ростом кількості факторів кількість необхідних експериментів зростає експоненційно, що робить цей тип планів майже непридатними для великих систем[2,5].

Попри це, повні факторні плани мають один важливий плюс, вони дають змогу оцінити всі основні ефекти і взаємодії без втрати інформації. Тому їх використовують, переважно, коли факторів небагато (зазвичай до 3, 4).

Дробові факторні плани, це підмножина повного факторного плану. Ідея дробового плану в тому, що якийсь відсоток експериментів не роблять, що дає змогу значно зменшити обсяги досліджень.

Суть дробових планів полягає в тому, що якісь взаємодії вважають незначущими або такими, що можуть бути апроксимовані одними якихось окремих факторів. За таких умов якусь частину комбінацій факторів не беруть

до уваги[1,10].

Основним мінусом тут є компроміс між кількістю експериментів та варіацією моделі. Чим менше експериментів, тим більше змішування ефектів (aliasing), ситуація, коли неможливо відокремити вплив окремих факторів або їх взаємодій.

За метою використання методи ПЕ поділяються на:

- плани для оцінювання факторів;
- плани для побудови моделей;
- плани для оптимізації.

Плани для оцінювання факторів використовують для визначення ступеня впливу кожного фактора на функцію відгуку. Вони дають змогу провести аналіз чутливості системи та відібрати найбільш впливові змінні.

Плани для побудови моделей орієнтовані на отримання математичних залежностей між факторами та функцією відгуку. У такому разі головним завданням є побудова регресійної моделі, яка адекватно описує досліджуваний процес.

Плани для оптимізації застосовують тоді, коли необхідно знайти такі значення факторів, при яких функція відгуку досягає максимуму або мінімуму. У такому разі експеримент проводять ітераційно, з поступовим звуженням області пошуку[10,11,12].

З позицій теорії статистики експериментальні плани можуть бути оцінені за критеріями оптимальності:

- D–оптимальні;
- A–оптимальні;
- E–оптимальні;
- G–оптимальні;
- ротатабельні плани.

D–оптимальні плани максимізують визначник інформаційної матриці XTXX^T XXTX. Це означає, що такі плани мінімізують об’єм довірчої області для оцінок параметрів моделі, що зумовлює її величезну точність.

A–оптимальні плани зменшують середнє значення дисперсій для всіх коефіцієнтів. Завдяки цьому можна отримати майже однакову точність для будь–яких коефіцієнтів рівня.

E–оптимальні плани орієнтовані на зменшення максимальної дисперсії для мінімуму, це критерій, через який реалізується найгірший випадок найкращої точності.

G–оптимальні плани мінімізують найбільшу помилку прогнозу в області проведення експериментів.

Ротатабельні плани дають однакову точність прогнозу на однаковій відстані від центру експерименту, що є необхідною умовою для рівномірного дослідження простору факторів[8].

За способом побудови плани поділяються на:

– детерміновані;
– алгоритмічні (оптимізаційні).

Детерміновані плани створюються за наперед заданими правилами (наприклад, повні факторні плани, центрально–композиційні плани). Їхня структура відома наперед і не залежить від результатів експерименту.

Плани, що виконуються практично, часто реалізують алгоритмічним способом, коли спеціальним способом створюють послідовність точок експерименту, що задовольняє якийсь критерій ефективності. В їх числі, наприклад, є D–оптимізація, чисельні алгоритми пошуку (наприклад, алгебраїчні генетичні алгоритми) та евристичні методи (наприклад, гілок і кордонів)[8,10].

Перевага алгоритмічних методів, можливість адаптації плану до конкретної задачі, проте це призводить до складної обчислювальної реалізації.

Отже, існує величезна кількість методів планування експериментів та кожен має свої плюси і мінуси. Вибір конкретного методу залежить від поставленої задачі, кількості факторів, вимог до точності і можливих ресурсів.

Найчастіше в реальних задачах зустрічається комбінація методів, що полягає в послідовному застосуванні різних методів на різних етапах

дослідження. Це дозволяє якнайкраще поєднати інформаційність експерименту з економією ресурсів та надати високу якість результатів.

2.2 Основні математичні методи планування експерименту

Математичні методи планування експерименту є одним із вагомих інструментів дослідження складних систем. Їх застосування відкриває можливість всебічного й ефективного вивчення впливу декількох факторів на результативну ознаку, одночасно суттєво зменшуючи кількість необхідних експериментів. Матема–тичні методи планування експерименту забезпечують підвищення точності отриманих результатів і дають змогу побудувати адекватні математичні моделі досліджуваних процесів. Широке використання даних методів спостерігається в інженерній справі, економіці, технологічних процесах і багатьох інших галузях[2,6,9].

Для систематизації та збільшення розуміння методів планування експерименту доцільно розглянути основні математичні методи, їх особливості та області застосування, починаючи з повного факторного експерименту, що викладено в наступному підпункті.

2.2.1 Основні математичні методи планування експерименту

Повний факторний експеримент є одним з найпростіших і найінформативніших методів планування експериментів, що застосовується для вивчення багатофакторних систем. Його суть полягає у проведенні експериментів за всіма можливими комбінаціями рівнів факторів, що дає змогу отримати повну інформацію про вплив кожного фактора та їх взаємодій на шукану величину (функцію відгуку) [1,2,3, 4].

Ідея повного факторного експерименту полягає у тому, що кожен фактор змінюється незалежно від інших, а в експеримент входять усі можливі їхні

комбінації. Такий підхід дає змогу вивчити систему найповніше, що і є його основною перевагою.

Припустимо, що в експерименті беруть участь k факторів, кожен з яких на два рівні: нижній (мінімальний) та верхній (максимальний). Тоді кількість експериментів дорівнює:

$$N = 2^k. \tag{2.2}$$

Тобто, якщо факторів 2, то потрібно провести 4 експерименти, якщо $3 - 8$, якщо $4 - 16$ і так далі. Як бачимо, кількість дослідів зростає експоненційно, що є головним обмеженням методу [1,4,5, 7].

Зазвичай, для зручності обробки результатів, фактори кодують у безрозмірній формі, де нижньому рівню відповідає -1, а верхньому +1. Це дає змогу спростити обчислення та зробити модель більш універсальною.

Розглянемо приклад повного факторного експерименту з двома факторами. Припустимо, що у нас є два фактори x_1 та x_2, кожен з яких на два рівні. У такому випадку матриця планування експерименту матиме вигляд, наведений в табл. 2.1.

Таблиця 2.1 – Матриця повного факторного експерименту 2^2

№ досліду	x_1	x_2
1	–1	–1
2	+1	–1
3	–1	+1
4	+1	+1

Кожний рядок цієї таблиці відповідає одному експерименту, а кожна комбінація значень факторів визначає умови його проведення. Така побудова дає змогу дослідити індивідуальний вплив факторів, а також їх взаємодію [2,9].

Щоб брати до уваги взаємодію факторів, у матрицю плану додають ще

один стовпець, який дорівнює добутку значень факторів:

$$x_{12} = x_1 \cdot x_2. \tag{2.3}$$

Це дає змогу розширити модель і брати до уваги взаємодію між факторами.

Взагалі ж для k факторів модель першого порядку з урахуванням взаємодій має вигляд:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^{k} b_i x_i + \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=i+1}^{k} b_{ij} x_i x_j. \tag{2.4}$$

Коефіцієнти цієї моделі визначаються за результатами експерименту й мають наступне сенс:

$b_0 -$ середнє значення шуканої величини;

$b_i -$ вплив одного фактора;

$b_{ij} -$ ефект взаємодії факторів.

Коефіцієнти моделі знаходять методом найменших квадратів. У разі ортогонального плану (а повний факторний експеримент як раз такий) ці коефіцієнти можна обчислити спрощеними формулами:

$$b_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} y_i x_{ij}, \tag{2.5}$$

де $y_i -$ результат j –го експерименту,

$x_{ij} -$ значення i –го фактора в j –му досліді [3, 5].

Однією з головних рис повного факторного експерименту є ортогональність матриці плану. Тобто стовпці матриці плану взаємно ортогональні, іншими словами, скалярний добуток будь–яких двох різних

стовпців дорівнює нулю. Завдяки цьому коефіцієнти моделі можна оцінити незалежно один від одного, що значно звужує їхню інтерпретацію [3].

Ще однією важливою властивістю є можливість оцінювати взаємодії різних порядків. Наприклад, у трьохфакторному експерименті можливо врахувати не лише парні взаємодії (x_1x_2, x_1x_3, x_2x_3), але й взаємодію третього порядку:

$$x_{123} = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3. \tag{2.6}$$

Таким чином, можливо побудувати досить точну модель складних процесів.

Однак повний факторний експеримент має і ряд недоліків. Головним з них є швидкий ріст кількості експериментів зі збільшенням числа факторів. Наприклад:

при $k = 5: N = 32$;

при $k = 7: N = 128$;

при $k = 10: N = 1024$.

У практиці проведення такої кількості експериментів часто просто неможливо, через обмеження в часі, коштах чи технічних можливостях.

Іншим обмеженням є те, що повний факторний експеримент найефективніший при побудові моделей першого порядку або, при дуже великій кількості факторів. Якщо ж у процесі беруть участь багато факторів або ж процес має складну нелінійну природу, тоді мають застосовуватися інші плани, наприклад, центрально–композиційні.

Проте повний факторний експеримент досі дуже популярний у зв’язку з простотою, наочністю та високою інформативністю. Він особливо корисний:

на початкових етапах вивчення процесу;, при невеликій кількості факторів;, для виявлення найбільш значущих факторів;, для побудови початкових математичних моделей.

Отже, повний факторний експеримент, це базовий метод планування

експериментів, який дає змогу зібрати повну інформацію про систему і є підґрунтям для подальшого застосування складніших методів.

2.2.2 Дробовий факторний експеримент

Дробовий факторний експеримент (ДФЕ) є узагальненням повного факторного експерименту і застосовується у випадках, коли кількість досліджуваних факторів надто велика, і повний експеримент неможливо або недоцільно виконати. Ідея цього методу полягає у виконанні лише частини дослідів, передбачених повним факторним планом, при цьому не втрачаючи суттєвої частини інформації про результати експерименту [4, 7].

Як відомо із попереднього підрозділу, повний факторний експеримент з k кількістю факторів передбачає виконання $N = 2^k$ дослідів. Об'єм такого експерименту швидко зростає при збільшенні k. ДФЕ дозволяє зменшити кількість дослідів до:

$$N = 2^{k-p}, \tag{2.7}$$

де $p -$ кількість генераторів, або ступінь дроблення плану [5, 7].

Тобто замість повного плану 2^k використовують його дробову частину.

Суть ДФЕ полягає в тому, що деякі ефекти (зазвичай взаємодії високих порядків) вважаються неістотними і можуть «змішуватися» з іншими ефектами. Це і дає можливість зменшити обсяг дослідів без істотної втрати інформації про основні фактори.

Для розуміння цього положення розглянемо приклад. Припустимо, що досліджувана система має три фактори x_1, x_2, x_3. Повний факторний план передбачає виконання:

$$N = 2^3 = 8 \text{ дослідів}. \tag{2.8}$$

Якщо ж ми використаємо ДФЕ $2^{3-1} = 4$, то кількість дослідів зменшиться вдвічі. Візьмемо для цього один генератор, наприклад:

$$x_3 = x_1 x_2. \tag{2.9}$$

Тобто значення третього фактора розраховується за першими двома параметрами. Для такого випадку матриця планування експерименту матиме вигляд, наведений в табл. 2.2.

Таблиця 2.2, Матриця дробового факторного експерименту 2^{3-1}

№ досліду	x_1	x_2	$x_3 = x_1 x_2$
1	–1	–1	+1
2	+1	–1	–1
3	–1	+1	–1
4	+1	+1	+1

Отже, третій фактор тут не варіюється незалежно від інших, а визначається по них, що і призводить до зменшення кількості дослідів[1,2].

Однак це призведе до ефекту, який у ДФЕ називається змішування (aliasing). Мається на увазі, що деякі ефекти плану дослідження будуть співпадати. У цьому прикладі:

$$x_3 \equiv x_1 x_2. \tag{2.10}$$

Отже, вплив фактора x_3 і взаємодії $x_1 x_2$ буде оцінено разом, окремо визначити їх вплив не вдасться.

Для формалізації змішування ефектів у плані дослідження використовують визначальне рівняння плану. У нашому випадку:

$$I = x_1 x_2 x_3, \tag{2.11}$$

де I – одиничний елемент.

Це відоме визначальне рівняння плану. Із визначального рівняння плану можна отримати систему еквівалентностей (alias–структуру). Наприклад:

$$x_1 \equiv x_2 x_3, \tag{2.12}$$

$$x_2 \equiv x_1 x_3, \tag{2.13}$$

$$x_3 \equiv x_1 x_2. \tag{2.14}$$

Це означає, що оцінки цих ефектів будуть змішані, розділити їх не вдасться[9,10].

Щоб оцінити якість дробового плану, вводиться поняття роздільної здатності (resolution). Вона характеризує, які ефекти змішуються один з одним.

Виділяють основні рівні:

- resolution III, основні ефекти змішані з двофакторними взаємодіями;
- resolution IV, основні ефекти не змішані один з одним, але змішані з взаємодіями;
- resolution V, основні ефекти і двофакторні взаємодії не змішані один з одним.

Чим більша роздільна здатність плану, тим точніший експеримент, але тим більше дослідів необхідно виконати.

Особливістю ДФЕ є також можливість їх послідового розширення. Тобто, почавши дослідження з якогось ДФЕ, можна пізніше додатково виконати якісь досліди і перетворити план до повного або вищої роздільної здатності. Це дуже поширений прийом на практиці, оскільки дає можливість почати з дуже невеликої кількості дослідів і підбирати їх все більше за потребою, залежно від результатів дослідження[1,7,8].

ДФЕ особливо доцільні на етапі скринінгу факторів, коли необхідно з великої кількості змінних відібрати найбільш значущі. У цьому випадку можна

знайти компроміс між якістю дослідження і кількістю дослідів: інформацію про взаємодії можна втратити, оскільки основне завдання в цьому випадку, відбір факторів для подальшого дослідження.

Перевагами ДФЕ є:

- різке зменшення кількості необхідних дослідів;
- зменшення витрат на проведення досліджень;
- можливість дослідження систем із великим числом факторів;
- гнучкість у виборі планів.

Разом із тим, цей метод має і недоліки:

- змішування ефектів;
- зниження точності оцінок;
- ускладнення інтерпретації результатів;
- необхідність апріорних припущень щодо незначущості взаємодій.

Отже, в практиці досліджень слід правильно питання при виборі структури дробового плану, намагатися вибрати такий, де шкідливий вплив змішування як найменший. Зазвичай вважають, що взаємодії високих порядків незначущі, оскільки це дає змогу зосередитись на основних ефектах і двофакторних взаємодіях [4, 7].

Таким чином, ДФЕ є потужним інструментом дослідження багатофакторних систем, який дає можливість різко зменшити обсяг експериментальних робіт при збереженні певного рівня інформативності. При цьому, такий метод особливо актуальний, коли обмежені ресурси або факторів забагато.

2.2.3 Метод поверхні відгуку та центральний композиційний план

Метод поверхні відгуку (Response Surface Methodology, RSM) це потужний метод математичного планування експериментів, який не тільки дозволяє досліджувати багатофакторні процеси, але й оптимізувати їх. Основна ідея методу полягає в тому, щоб побудувати математичну модель функції

відгуку від кількох факторів, а потім знайти оптимальні умови роботи системи [4,6,7].

На відміну від факторних планів експериментів першого порядку, які дозволяють досліджувати лінійні залежності, метод поверхні відгуку спрямований на побудову моделей другого порядку, які описують нелінійність процесу. Це особливо важливо в реальних системах, де взаємозв'язок між параметрами і результатом часто буває складним і криволінійним.

Загальна форма моделі поверхні відгуку:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^{k} b_i x_i + \sum_{i=1}^{k} b_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=i+1}^{k} b_{ij} x_i x_j, \qquad (2.15)$$

де y – функція відгуку;

x_i – фактори;

b_0, b_i, b_{ii}, b_{ij} – коефіцієнти моделі [6,8].

Ця модель дає можливість врахувати:

- лінійний вплив факторів;
- квадратичні ефекти (нелінійність);
- взаємодії між факторами.

Геометрично це буде багатовимірна поверхня, яка може мати максимум, мінімум чи сідлову точку. Саме за допомогою дослідження такої поверхні можна визначати оптимальні режими роботи системи.

Реалізація основної ідеї методу поверхні відгуку зазвичай передбачає послідовне виконання таких кроків:

- проведення початкового експерименту (зазвичай це факторіальний план першого порядку);
- побудова лінійної моделі;
- оцінка адекватності моделі;
- переходу до моделі другого порядку в разі виявлення нелінійності;

– побудови поверхні відгуку;
– пошуку оптимальної точки.

Отже, ця процедура є ітеративною і дозволяє згодом удосконалювати модель. Один з найпопулярніших планів для реалізації методу поверхні відгуку є центральний композиційний план (ЦКП, англ. Central Composite Design, CCD). Він дає змогу будувати повну квадратичну модель і має добрі статистичні властивості [1,2].

Центральний композиційний план складається з трьох основних частин:

– основна частина плану (факторіальна частина) – це повний чи дробовий факторіальний план 2^k, що дає змогу визначати основні ефекти і взаємодії;
– зіркоподібні (осьові) точки це точки, які розташовані на осях координат на відстані α від центру плану. Вони дають змогу оцінювати квадратичні члени моделі;
– центральні точки це точки, де всі фактори мають нульові (середні) значення. Вони використовуються для оцінки експериментальної похибки і перевірки адекватності моделі.

Для ілюстрації структури планування розпишемо її компоненти на конкретному прикладі. У випадку двофакторного експерименту ($k = 2$) центральний композиційний план матиме такий вигляд як показано в табл. 2.3.

Кількість експериментів у цьому плані визначається за формулою:

$$N = 2^k + 2k + n_0, \tag{2.16}$$

де n_0 – кількість повторів у центрі плану.

Параметр α визначає розташування зоряних точок від центру і є дуже важливим для властивостей плану. Найбільш типовим є обрання цього параметра таким чином, щоб план був ротатабельним:

$$\alpha = (2^k)^{1/4}. \quad (2.17)$$

Таблиця 2.3 – Центральний композиційний план для двох факторів

Тип точки	x_1	x_2
Факторні	–1	–1
	+1	–1
	–1	+1
	+1	+1
Осьові	$-\alpha$	0
	$+\alpha$	0
	0	$-\alpha$
	0	$+\alpha$
Центр	0	0

Ротатабельність означає, що дисперсія прогнозу залежить лише від відстані до центру, а не від напрямку. Це важливо для рівномірного дослідження простору факторів [3, 6, 8].

Після знаходження коефіцієнтів квадратичної моделі за результатами експерименту, наступним кроком є дослідження поверхні відгуку.

Для знаходження екстремуму ставиться умова:

$$\frac{\partial y}{\partial x_i} = 0, \qquad i = 1, \dots, k. \quad (2.18)$$

Розв’язуючи цю систему рівнянь, знайдена точка (стаціонарна, максимум, мінімум чи сідлова точка) визначається.

Для того, щоб з’ясувати тип цієї точки, проводиться дослідження матриці других похідних (матриці Гессе). Якщо вона додатно визначена, то це точка–мінімум, а якщо від’ємно визначена максимум[11,12].

Для кращого розуміння характеру досліджуваної функції

використовується її геометрична інтерпретація. Зокрема, у двовимірному випадку поверхня відгуку може мати вигляд:

- параболоїда (існує оптимум);
- сідлової поверхні (оптимум відсутній);
- площини (лінійна модель).

Інтерпретація результатів експерименту стає зручною і наочною, що веде до розуміння суті процесу.

Серед головних переваг методу поверхні відгуку можна виділити:

- можливість дослідження складних нелінійних процесів;
- надійне побудування математичних моделей;
- визначення оптимальних умов;
- ефективне використання експериментальних даних;
- отримання наочних результатів.

Однак, поряд з перевагами є і недоліки:

- складність у побудові та аналізі моделей;
- необхідність проведення більшої кількості експериментів у порівнянні з деякими іншими планами;
- підвищена чутливість до похибок вимірювань;
- складнощі при великій кількості факторів.

Широкі аналітичні можливості зумовили активне практичне застосування методу поверхні відгуку в технічних та інженерних завданнях. Зокрема, цей підхід ефективно використовується для:

- оптимізації технологічних процесів;
- дослідження теплових і механічних систем;
- підвищення якості продукції;
- зменшення енергоспоживання.

Проте саме цей метод максимально відповідає практичним потребам цієї роботи, адже він не лише дає можливість побудови моделі, а й визначення оптимальних параметрів процесу[3].

Отже, метод поверхні відгуку і центральний композиційний план це два наймогутніші інструменти для дослідження і оптимізації комплексних систем, які допомагають будувати адекватні математичні моделі і визначати оптимальні режими роботи.

2.2.4 Оптимальні плани (D–оптимальні, Box–Behnken та ін.)

У задачах проектування експерименту нерідко постає потреба не лише скласти експериментальний план, а сформувати його так, щоб він забезпечував найкращі статистичні властивості для оцінок параметрів моделі. У цьому випадку застосовують так звані оптимальні плани експерименту, які конструюються згідно з певними критеріями оптимальності [4, 7,8].

На відміну від класичних планів (повного факторного або центрально–композиційного), структура оптимальних планів не задається жорстко. Вона визначається в результаті розв’язання задачі оптимізації, де цільова функція характеризує якість плану, а змінними виступають координати точок експерименту[10].

Загальна постановка задачі оптимального планування

Нехай розглянемо модель виду:

$$y = Xb + \varepsilon, \tag{2.19}$$

де $y -$ вектор спостережень;

$X -$ матриця плану;

$b -$ вектор параметрів;

$\varepsilon -$ випадкова похибка.

Точність оцінки параметрів визначається матрицею:

$$(X^T X)^{-1}. \tag{2.20}$$

Задача оптимального планування полягає у виборі такої матриці X, яка забезпечує найкращі властивості цієї матриці за певним критерієм.

D–оптимальні плани

Один із найпоширеніших, D–оптимальний критерій, який полягає у максимізації визначника інформаційної матриці:

$$\det(X^T X) \to max. \tag{2.21}$$

Цей критерій має важливе геометричне тлумачення: він мінімізує об’єм довірчого еліпсоїда для оцінок параметрів моделі. Іншими словами, забезпечує максимальну точність одночасно для всіх коефіцієнтів [5, 7].

Основні переваги D–оптимальних планів:

– висока точність оцінок параметрів;
– економія експериментальних ресурсів;
– широкий діапазон застосувань.

Однак такі плани мають і певні особливості:

– їх структура не симетрична;
– їх складно інтерпретувати;
– для їх побудови використовують чисельні методи.

Поряд із D–оптимальністю, у практичних дослідженнях часто використовуються інші критерії, такі як A– та E–оптимальні плани. Зокрема, A–оптимальний критерій передбачає мінімізацію середньої дисперсії оцінок параметрів:

$$tr((X^T X)^{-1}) \to min. \tag{2.22}$$

Цей критерій спрямований на забезпечення однакової точності для всіх коефіцієнтів моделі.

E–оптимальний критерій орієнтований на зменшення максимальної дисперсії:

$$\lambda_{\max} \ ((X^T X)^{-1}) \to min. \tag{2.23}$$

Це означає, що він гарантує “найкращі умови” у “найгіршому випадку”.

Ці критерії не такі популярні, як D–оптимальний, однак їх важко ігнорувати у випадках, коли необхідно “втихомирити” розкид оцінок.

G–оптимальність

G–оптимальний критерій, на відміну від оцінок параметрів, орієнтований на якість прогнозу. Він мінімізує максимальну дисперсію прогнозу:

$$\max Var(\hat{y}(x)) \to min. \tag{2.24}$$

Цей критерій є актуальним у випадках, коли головна мета, не модель, а прогноз.

Альтернативою традиційним центрально–композиційним планам для побудови квадратичних моделей виступають плани Бокса – Бенкена (Box–Behnken Design) [2,6, 8].

Суть цього плану полягає в тому, що замість вершин багатовимірного куба використовуються точки, розташовані в середині ребер. Це дає можливість [7]:

- уникнути екстремальних значень факторів;
- знизити ймовірність взаємодії факторів;
- зберегти інформативність моделі.

Наприклад, для двох факторів план Бокса – Бенкена матиме вигляд, наведений в табл. 2.4.

Зі збільшенням кількості факторів план ускладнюється, однак зберігає аналогічну логіку.

Таблиця 2.4, План Бокса, Бенкена (для 2 факторів)

№	x_1	x_2
1	–1	0
2	+1	0
3	0	–1
4	0	+1
5	0	0

Порівняння центрально–композиційного та Box, Behnken планів.

Описані два плани найчастіше порівнюють у контексті побудови квадратичних моделей:

- центрально–композиційний план містить контурні точки, розташовані “поза” межами плану факторів;
- план Бокса, Бенкена не має таких точок і повністю розташований усередині області дослідження факторів;
- ЦКП забезпечує кращу ротатабельність;
- Box–Behnken є більш безпечним для реальних експериментів.

У сучасних системах оптимальні плани експерименту часто створюються за допомогою чисельних методів, зокрема:

- метод по координатного обміну, POWELL (1978);
- градієнтні алгоритми підвищення якості плану;
- генетичні алгоритми;
- випадковий пошук.

Суть цих методів полягає в тім, що вони поетапно модифікують координати точок експерименту з метою покращення значення обраного критерію.

Аналіз використання оптимальних планів дозволяє виділити такі їхні основні переваги:

- можна налаштувати на конкретну задачі (модель, критерій);

- статистично ефективні (витрачається менша кількість досліджень);
- можна гнучко вибирати масштаб експерименту (кількість незалежних змінних)
- можна створювати плани з “капризними” (обмежені, дискретні, мають шуми тощо) умовами (обмеження на значення незалежних змінних).

Разом з тим, існує ряд недоліків, які обмежують їхнє застосування:

- важко зводитися для складних моделей (чисельна розв’язуваність);
- багато залежить від обраного критерію оптимальності (доцільно використовувати декілька критеріїв для перевірки “адекватності”);
- всю роботу доводиться виконувати на комп’ютері (чисельні методи);
- фінальний результат (структура оптимального експериментального плану) інколи нелегко інтерпретувати (він може бути несиметричним, неповторним, використовувати якісь “інакші”, ніж у звичайному експерименті, точки).

Завдяки своїм унікальним властивостям, оптимальні плани широко застосовуються у сучасних дослідженнях, особливо у випадках:

- обмежених ресурсів;
- складних моделей;
- необхідності високої точності;
- використання комп’ютерного моделювання.

Вищезазначені оптимальні методи стосуються побудови оптимальних планів експериментів. Проте вони є основою для побудови адаптивних планів експериментів, контурні представлення яких розглянемо у наступних розділах цієї роботи[8,10].

Таким чином, оптимальні плани, це потужний інструмент сучасного експериментального аналізу, що дозволяє підвищити ефективність дослідження за рахунок раціонального відбору точок експерименту.

2.3 Порівняння методів та обґрунтування їх вибору для практичних задач

Після ознайомлення з основними методами планування експерименту логічним є проведення їхніх порівнянь для визначення найбільш раціонального варіанту для практики. Кожен із розглянутих методів характеризується особливостями, перевагами та обмеженнями, що і визначає спектр його застосувань[2,6,9].

Для зіставлення розглянутих підходів та обґрунтування вибору конкретного плану дослідження було сформовано такі основні критерії:

- обсяг необхідних експериментів;
- ступінь точності моделі;
- можливість врахування факторних взаємодій;
- здатність відображати нелінійні явища;
- рівень складності реалізації;
- можливість автоматизації.

Виходячи з них, проведемо загальний аналіз.

Повний факторний експеримент (ПФЕ) є максимально інформативним, адже він охоплює всі можливі комбінації факторів і дає змогу оцінити не лише їх сукупний ефект, а й взаємодії. Утім, його можна використовувати лише за малої кількості факторів, оскільки число дослідів зростає експоненційно. Тому ПФЕ не підходить для складних багатофакторних задач [4, 7].

Дробовий факторний експеримент (ДФЕ) є його "облегшеним" варіантом, завдяки чому знадобиться провести у рази менше дослідів. Його доцільно застосовувати на початковому етапі, щоб відсіяти неактуальні фактори. Але, на жаль, через "змішування ефектів" (aliasing) взаємодії між факторами можна врахувати недостатньо точно, тому побудову повної моделі, швидше за все, буде ускладнено [1,5, 7,10].

Методи поверхні відгуку (зокрема ЦКП) є потужним інструментом у разі, якщо процес описується нелінійними залежностями. Адже вони дають змогу

будувати квадратичні моделі, що не лише відображають суть процесу, а й визначають його оптимальні параметри. Проте для цього знадобиться більше дослідів і вищий рівень складності опрацювання [6, 8].

Оптимальні плани (D–оптимальні, Бокса, Бенкена) дають найкращі оцінки параметрів, оскільки вони "вузько" орієнтовані на цю ціль, а не є універсальними. Тому їх можна застосовувати у випадках, якщо дослідник має змогу жорстко окреслити задачу. Втім, їхнє побудова базується на чисельних методах і програмах, що ускладнює застосування у дослідах без автоматизації [4, 7,8].

Порівняльні характеристики розглянутих методів планування експерименту наведено в табл. 2.5.

Таблиця 2.5 – Порівняння методів планування експерименту

Метод	Кількість дослідів	Точність	Нелінійність	Складність	Основне призначення
Повний факторний	Дуже велика	Висока	Обмежена	Низька	Повний аналіз
Дробовий факторний	Мала	Середня	Обмежена	Середня	Скринінг факторів
Поверхня відгуку (ЦКП)	Середня	Висока	Так	Середня	Оптимізація
Box–Behnken	Середня	Висока	Так	Середня	Оптимізація
D–оптимальні	Мінімальна	Дуже висока	Так	Висока	Точні оцінки

Як видно, жодний із методів не є універсальним, а вибір залежить від конкретної задачі[2,9].

Насамперед, у реальних дослідженнях часто застосовують комбінований підхід, який включає такі етапи:

- на початку використовують дробовий факторний експеримент для визначення релевантних факторів;
- наступним кроком служить уточнення моделі шляхом ПФЕ або розширеного плану;
- завершують роботу методом поверхні відгуку для побудови квадратичної моделі та пошуку.

Такий шлях дає змогу зберегти ресурси і разом із тим отримати якісні результати[1,7].

Враховуючи специфіку застосувань, пов’язану з оптимізацією технологічних процесів, можна зробити висновок, що найраціональнішим є використання методів поверхні відгуку. Адже подібні проблеми, як правило, мають такі характеристики:

- наявність нелінійних залежностей;
- потреба у знаходженні оптимальних параметрів;
- обмеженість ресурсів для проведення експериментів;
- необхідність побудови адекватної моделі.

Із методів поверхні відгуку найкращим є центральний композиційний план, який відзначається:

- достатньою точністю;
- відносною простотою реалізації;
- зручністю для програмної реалізації.

Тому він краще підходить для програмної реалізації та подальшого використання засобами сучасних обчислювальних середовищ наприклад, у Google Colab[18,19].

Водночас у деяких випадках доцільно розглянути плани Бокса, Бенкена, особливо, якщо бажано не виходити за межі допустимих значень факторів. Оптимальні плани варто мати на увазі для підвищення точності оцінок.

Отже, для розв’язання практичних задач оптимізації доцільно обрати комбінацію методів, основним з яких є метод поверхні відгуку на базі центрального композиційного плану.

2.4 Методика застосування математичних методів планування експерименту для розв’язання практичних задач

Використання математичних методів при плануванні експериментів передбачає проведення чітких і структурованих досліджень, що гарантує отримання достовірних та статистично обґрунтованих результатів. В рамках такого підходу визначаються основні цілі експерименту, вибираються фактори впливу та їх рівні, розробляється відповідний план дослідження, а також обираються методи обробки та аналізу отриманих даних.

Для більш детального розгляду застосування цієї методики доцільно розглянути її основні етапи, починаючи з опису вхідних даних та методів їх отримання, що буде розглянуто в наступному підпункті.

2.4.1 Опис вхідних даних та методи їх отримання

Будь–яке експериментальне дослідження починається з визначення вхідних даних, що визначають постановку задачі, умови проведення експерименту та можливості побудови математичної моделі. Від правильності вибору і обґрунтування цих даних залежить точність дослідження та адекватність моделі [4, 6].

Загалом вхідними даними експерименту можуть бути:

- перелік факторів (вхідних змінних);
- діапазони їх зміни;
- рівні варіювання факторів;
- функція відгуку;
- обмеження на параметри;
- умови проведення експерименту.

Розглянемо кожен із цих пунктів більш детально[10].

Процес організації дослідження традиційно розпочинається з чіткого

визначення факторів експерименту. Фактори є незалежними змінними, значення яких змінюються в процесі експерименту. Вони повинні бути обрані так, щоб якомога повніше описувати досліджуваний процес.

При виборі факторів слід звернути увагу на:

– фізичну суть процесу;
– можливість їх регулювання;
– вплив на результат;
– незалежність один від одного.

Важливо, щоб фактори були керованими, тобто такими, значення яких можна задавати або змінювати у процесі експерименту. Некеровані параметри (шумові фактори) або враховуються окремо, або фіксуються.

Кількість факторів безпосередньо впливає на складність експерименту. У більшості практичних завдань доцільно обмежувати їх кількість до 2–5 на початковому етапі дослідження[1,2].

Наступним критично важливим кроком після вибору керованих параметрів є встановлення діапазонів зміни факторів. Для кожного фактора треба визначити інтервал зміни:

$$X_i \in [X_{i,,min}, X_{i,max}]. \tag{2.25}$$

Цей інтервал задається на основі:

– технологічних обмежень;
– фізичних властивостей системи;
– вимог безпеки;
– попередніх досліджень.

Визначення діапазону є дуже важливим. Якщо інтервал надто вузький, то модель не зможе відобразити поведінку системи. Якщо надто широкий, це може призвести до некоректних результатів або навіть до неможливості проведення експерименту.

Для структурування подальшого дослідження та побудови матриці

планування встановлюються конкретні рівні варіювання факторів. На основі обраного діапазону визначаються рівні факторів. Для більшості методів використовують три основні рівні:

- нижній рівень: $X_{i,min}$;
- верхній рівень: $X_{i,max}$;
- центральний рівень:

$$X_{0i} = \frac{X_{i.min} + X_{i,max}}{2}. \tag{2.26}$$

Для методів поверхні відгуку додають також зоряні рівні, що визначаються через параметр α.

Для переходу до зручної математичної форми застосовується кодування факторів:

$$x_i = \frac{X_i - X_{0i}}{\Delta X_i}, \tag{2.27}$$

де

$$\Delta X_i = \frac{X_{i,max} - X_{i,min}}{3}. \tag{2.28}$$

Таким чином фактори приймають значення у безрозмірному інтервалі $[-1, +1]$, що дуже зручно для обчислень та порівняння впливу різних факторів[10,11].

Для оцінки результатів дослідження та визначення ефективності процесу обов’язковим кроком є математичне та логічне обґрунтування функції відгуку.

Функція відгуку є залежною змінною, що характеризує результат експерименту. Вона повинна бути:

кількісною (числовою);, вимірюваною;, чутливою до змін факторів;,

однозначною.

Зазвичай функція відгуку записується у вигляді:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_k). \tag{2.29}$$

На практиці може використовуватись як одна функція відгуку, так і кілька (багатокритеріальна оптимізація). У цьому випадку треба або вибрати головну функцію, або застосувати методи їх перетворення у одну функцію[3].

Для забезпечення реалістичності математичної моделі обов'язково враховуються наявні обмеження на параметри. У реальних задачах експеримент часто проводиться з урахуванням обмежень, які можуть бути:

- фізичними (наприклад, обмеження температури);
- технологічними (обмеження обладнання);
- економічними (ресурси);
- безпековими.

Обмеження можуть бути задані у вигляді нерівностей:

$$q_i(x_1, x_2, \dots, x_k) \leq 0. \tag{2.30}$$

Їх потрібно враховувати при побудові планів експерименту та пошуку оптимального рішення.

Важливим етапом підготовки є чітке визначення того, звідки беруться джерела вхідних даних. Вхідні дані можуть бути отримані з різних джерел:

- експериментальні дані –відповідні дані отримуються безпосередньо з фізичних експериментів. Це найбільш достовірне джерело, але отримання таких даних може бути дорогим і складним.
- теоретичні моделі –дані можуть бути отримані на основі фізичних або математичних моделей досліджуваного процесу.
- комп'ютерне моделювання –за допомогою програмних засобів можна імітувати процес. Цей підхід є дуже популярним у сучасних

дослідженнях.

- емпіричні дані –відомості, які були отримані в результаті інших досліджень, взяті з довідників або літературних джерел.
- експертні оцінки –використовуються у випадках, коли немає інших доступних даних.

В дійсності найчастіше використовується змішаний підхід, що поєднує кілька джерел даних.

Важливим кроком є структурування вхідних даних для програмної реалізації. Для подальшої автоматизації процесу планування експерименту корисно мати вхідні дані в формалізованому вигляді. Зокрема, їх можна подати у вигляді:

- таблиці факторів зі значеннями рівнів;
- масивів (масив–запис) значень;
- структур даних (у відповідному програмному середовищі).

Так, наприклад, для k факторів формується вектор:

$$X = (X_1, X_2, \dots, X_k), \tag{2.31}$$

а для кожного фактора треба знати:

- мінімальне значення;
- максимальне значення;
- центральна точка;
- крок.

Таке представлення є зручним для написання коду і автоматизації побудови планів експерименту.

Отже, визначення вхідних даних є базовим етапом планування експерименту, що фіксує структуру дослідження і відкриває можливості побудови адекватної математичної моделі. Правильний вибір факторів, їх рівнів і функції відгуку забезпечує ефективність експерименту і надійність отриманих результатів.

2.4.2 Етапи проведення дослідження

Розглянемо на прикладі застосування математичних методів планування експерименту послідовність кроків, що характеризується певною постановкою задачі і логікою виконання. Особливістю цього процесу завжди є системний та ітераційний підхід, який, зокрема, допускає уточнення результату на кожному кроці. [4, 6]

Виконання дослідження можна розкласти на базові кроки.

Крок 1 Постановка задачі дослідження

На цьому етапі визначається мета експерименту, яка може бути представленою у:

- виявленні факторів, що суттєво впливають на процес;
- побудові дослідної математичної моделі;
- удосконаленні процесу;
- прогнозуванні та ін.

Також на цьому кроці формується функція відгуку, яка в подальшому буде основним критерієм якості отриманих результатів. Тобто вона повинна чітко визначати бажаний результат.

Крок 2 Вибір факторів і рівнів

Тут визначаються фактори, що впливають на процес, а також встановлюються обмеження на їх діапазон та рівні варіювання.

Значення факторів кодуються у безрозмірній формі, що дозволяє перейти до стандартного інтервалу:

$$x_i \in [-1, +1]. \tag{2.32}$$

Це робить подальші розрахунки більш зручними, а також дає можливість використовувати типові експериментальні плани[10,11].

Крок 3 Вибір типу експериментального плану

В залежності від мети вибирається відповідний тип плану:

– повний – для всебічного дослідження;

– дробовий – для виявлення впливу факторів;

– центрально–композиційний – для побудови квадратичної моделі;

– оптимальний – для підвищення точності.

На цьому кроці також визначається кількість проведених експериментів та структура матриці плану.

Крок 4 Формування матриці плану експерименту

Складається таблиця, у якій кожен рядок відповідає варіанту експерименту, а кожен стовпець – фактору (або взаємодії факторів).

Загальною формою матриці є:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_{N1} & x_{N2} & \cdots & x_{Nk} \end{bmatrix}. \quad (2.33)$$

Перший стовпець відповідатиме вільному члену моделі[11].

Крок 5 Проведення експерименту

Виконують експерименти відповідно до матриці плану. Для кожного набору факторів отримують значення функції відгуку:

$$y_1, y_2, \ldots, y_N. \quad (2.34)$$

У разі рандомних похибок рекомендують повторювати вимірювання, що дасть змогу оцінити дисперсію результатів[5].

Крок 6 Побудова математичної моделі

За отриманими даними будується регресійна модель. Загальною формою є:

$$y = Xb. \quad (2.35)$$

Для знаходження невідомих параметрів рівняння традиційно використовують метод найменших квадратів, який мінімізує суму квадратів відхилень експериментальних значень від розрахункових. Матрична форма оцінки коефіцієнтів має вигляд:

$$b = (X^T X)^{-1} X^T y. \quad (2.36)$$

Цей крок є вирішальним в дослідженні, оскільки саме тут формується математичний опис задачі.

Крок 7 Перевірка адекватності моделі

Після побудови моделі слід перевірити її відповідність експериментальним даним. Для цього застосовують статистичні критерії:

– критерій Стьюдента (значущість коефіцієнтів);
– критерій Фішера (адекватність моделі);
– дослідження залишків.

Якщо модель неадекватна, слід перейти до більш розширеної моделі або збільшити план проведених експериментів[2].

Крок 8 Аналіз моделі

Тут досліджується вплив факторів на функцію відгуку. Виконується:

– аналіз коефіцієнтів;
– виявлення значущих факторів;
– дослідження взаємодій;
– побудова графіків і поверхонь відгуку.

Це дає розуміння процесу та його закономірностей.

Крок 9 Пошук оптимальних умов

За наявності мети – оптимізація виконується пошук мінімуму або максимуму функції відгуку. Розв’язується система:

$$\frac{\partial y}{\partial x_i} = 0. \tag{2.37}$$

Значення факторів перейдуть з кодованої форми в натуральну:

$$X_i = x_i \cdot \Delta X_i + X_{0i}. \tag{2.38}$$

Крок 10 Інтерпретація результатів

У висновках роботи аналізуються результати з практичної точки зору. Оцінену:

- вплив факторів;
- оптимальних параметрів;
- можливості використання моделі;
- доцільності подальших досліджень.

Важливою рисою реальних досліджень є ітераційність процесу моделювання. Всі кроки завжди можна повторити. Наприклад:

- за неадекватної моделі змінюється план експериментів;
- з появою нових даних уточнюється модель;
- при зміні умов задачі коректуються фактори.

Це робить процес гнучким і адаптивним.

Отже, проведення експериментального дослідження – це комплексний, багатоетапний процес, починаючи з поставлення задачі, вибору факторів, побудови плану, проведення експериментів, математичного моделювання та аналізу результатів. Дотримання цього процесу гарантує достовірні результати і створює основу для автоматизації дослідження.

2.4.3 Аналіз та опис вихідних даних

Після завершення експерименту маємо масив результатів, в якому представлено значення функції відгуку для кожної комбінації факторів. Проте

ці результати не можуть бути одразу використані для побудови моделі, їх потрібно попередньо обробити і проаналізувати. Адже існує можливість випадкових похибок, які неочевидних аномалій, а також потрібно оцінити достовірність отриманих результатів [1,2,4, 6].

Аналіз результатів, це багатоступеневий процес, який включає статистичну обробку, перевірку гіпотез, оцінку точності та підготовку даних для побудови моделі.

Для систематизації та подальшого аналізу виконується первинна побудова вибірки результатів. Результати експерименту можна записати у вигляді послідовності:

$$y_1, y_2, \dots, y_N, \tag{2.39}$$

де N загальна кількість експериментів (варіантів).

У разі повторних вимірювань для кожного експерименту маємо групу значень:

$$y_{i1}, y_{i2}, \dots, y_{im}, \tag{2.40}$$

де $m -$ кількість повторень.

Таке розподілення дозволяє оцінити випадкову похибку та підвищити точність результатів.

Наступним кроком для усереднення випадкових коливань є обчислення середніх значень відгуку. Для кожного експерименту обчислюється середнє значення функції відгуку:

$$\overline{y_i} = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}\left(y_{ij} - \overline{y_i}\right)^2. \tag{2.41}$$

Саме середні значення зазвичай використовуються для побудови

подальшої моделі, оскільки вони знижують вплив випадкових коливань.

Важливим кроком статистичного аналізу є оцінка дисперсії похибок. Для оцінки розкиду результатів найчастіше обчислюється дисперсія:

$$S_i^2 = \frac{1}{m-1}\sum_{j=1}^{m}\left(y_{ij} - \overline{y_i}\right)^2. \quad (2.42)$$

Дисперсія відображає ступінь розкиду результатів і є ознакою точності експерименту[12].

Значна дисперсія може свідчити про:

– нестабільність досліджуваного процесу;

– значні випадкові похибки;

– протоколи похибок експерименту.

Перед побудовою регресійного рівняння обов’язково виконується перевірка однорідності дисперсій. Для того, щоб статистично коректно використовувати отримані дані, обумовлених тим чи іншим методом, потрібно, щоб дисперсії за різні експерименти були "однаковими" або, іншими словами, однорідними. Для оцінки дисперсій за різні варіанти експериментів існує спеціальний критерій, критерій Кохрена, мета якого:

$$G = \frac{\max S_i^2}{\sum_{i=1}^{N} S_i^2}. \quad (2.43)$$

Отримане значення слід порівняти з табличним. У випадку, коли дисперсії не є однорідними, треба:

– збільшити кількість повторів (m);

– перевірити правильність проведення вимірювань;

– виключити ідентифіковані "непорядні" значення.

Для очищення даних виконується виявлення видатних (аномальних значень). Під час експерименту мають місце викиди (аномальні значення),

окремі результати, які істотно відрізняються від інших. Для їх виявлення можна скористатись:

– критерієм Граббса;
– правилом трьох сигм;
– простим аналізом відхилень.

Наприклад, згідно з правилом трьох сигм результат вважається аномальним, якщо:

$$\left|y_{ij} - \bar{y}_i\right| > 3\sigma, \tag{2.44}$$

де $\sigma -$ стандартне відхилення.

Виявлені аномальні значення повинні бути ретельно проаналізовані. Їх вилучення можливе лише за наявності вагомих підстав.

Для порівнянності різних параметрів виконується нормалізація (стандартизація) даних. Інколи дані нормалізують або стандартизують, що дає можливість:

– зіставити дані в єдиному масштабі;
– підвищити стабільність чисельних методів;
– покращити якість апроксимації (підвищення точності).

Нормалізацію (стандартизацію) можна виконати за формулою:

$$y' = \frac{y - \bar{y}}{\sigma}. \tag{2.45}$$

Наступним логічним етапом математичного опрацювання є формування вектору відгуку. Після обробки даних формується вектор середніх значень:

$$Y = (\overline{y_1}, \overline{y_2}, \dots, \overline{y_N})^T, \tag{2.46}$$

саме для створення регресійної моделі.

Перед початком розрахунків проводиться аналіз розподілу залишків. Для коректного використання МНК–моделей бажано, щоб похибка досліджуваного процесу мав нормальний розподіл. Для перевірки цього можна застосувати:

– гістограми відповідності нормальному розподілу;
– Q–Q графіки;
– критерії нормальності (наприклад, Шапіро, Вілка).

У випадку суттєвого відхилення розподілу від нормального можуть застосовуватись різні перетворення даних.

Для детальної оцінки точності обчислень виконується аналіз залишків. Після побудови моделі виконують аналіз залишків:

$$e_i = y_i - \widehat{y_i}. \tag{2.47}$$

Залишки повинні:

– бути випадковими (не показувати систематичні тенденції);
– бути незалежними й не взаємопов’язаними;
– мати (приблизно) нульове математичне сподівання (середнє).

Систематичні відхилення змушують сумніватися у достатності і якості обраної моделі.

Фінальним етапом попереднього опрацювання є підготовка даних для побудови моделі. На останньому етапі дані перетворюються у форму, придатну для подальшої обробки:

– формуються рядки матриці плану експерименту;
– створюється вектор відгуку (результатів);
– перевіряється коректність вихідних даних;
– структуруються дані.

Цей етап дуже важливий у процесі подальшої автоматизації.

Висновки до підрозділу 2.4 розкривають загальний підсумок обробки результатів. Отже, аналіз результатів експерименту є невід’ємною частиною його проведення, яка забезпечує посередність результатів і підготовлює дані

для побудови математичної моделі. Застосування статистичних методів дозволяє виявити помилки, оцінити точність вимірювань та надати адекватність отриманих результатів.

2.4.4 Візуалізація результатів

Візуалізація результатів є невід'ємною частиною роботи з експериментальними даними, оскільки дозволяє наочно представити залежності між факторами та функцією відгуку, виявити закономірності, оцінити адекватність моделі та інтерпретувати отримані результати [6, 8].

Графічне відображення значно полегшує сприйняття складних багатовимірних залежностей, які важко уявити собі лише на основі числових даних або аналітичних виразів.

Для детального графічного аналізу визначаються основні види візуалізації. У задачах планування експерименту звичайно застосовуються такі основні види графіків:

- графіки функції відгуку залежно від одного фактора;
- поверхня відгуку;
- контурні графіки (лінії рівня);
- гістограми, графіки залишків.

Кожен із цих видів має свої цілі і застосовується на різних етапах аналізу.

Для ізольованого оцінювання окремих параметрів будуються графіки залежності від одного фактора. Такі графіки показують, як функція відгуку змінюється при варіації одного фактора, в той час як інші фактори фіксовані. Загальне подання має вигляд:

$$y = f(x_i), \qquad x = const, j \neq i. \tag{2.48}$$

Ці графіки дають змогу:

- оцінити характер залежності (лінійна чи нелінійна);

– визначити напрямок впливу фактора;

– виявити екстремуми.

Вони прості в побудові і тлумаченні, проте не дають змоги враховувати взаємодії факторів.

Для дослідження парних взаємодій будуються тривимірні поверхні відгуку. Поверхня відгуку є одним із ключових засобів візуалізації. Вона демонструє залежність функції відгуку від двох факторів:

$$y = f(x_1, x_2). \tag{2.49}$$

При цьому інші фактори фіксовані на певному рівні (зазвичай на центральному).

Поверхня може мати різну форму:

– параболоїд (наявність максимуму або мінімуму);

– сідлова поверхня (відсутність однозначного оптимуму);

– площина (лінійна залежність).

Аналіз поверхні відгуку дає змогу:

– виявити оптимальні області;

– оцінити вплив взаємодії факторів;

– зрозуміти, чим процес характеризується.

Для відображення багатовимірних даних у двовимірному просторі будуються контурні графіки (лінії рівня). Контурні графіки представляють поверхню відгуку у вигляді проекції на площину факторів. Вони демонструють лінії, уздовж яких функція відгуку приймає однакове значення:

$$f(x_1, x_2) = const. \tag{2.50}$$

Ці графіки дуже зручні для аналізу, оскільки:

– швидко допомагають знайти область оптимуму;

– показують, в якому напрямку змінюється функція;

– спрощують розуміння складних залежностей.

Якщо лінії замкнуті, це свідчить про наявність екстремуму.

Для дослідження закону розподілу похибок будуються гістограми залишків. Гістограми використовуються для аналізу розподілу вихідних даних експерименту або залишків[12].

Вони дозволяють:

– охарактеризувати форму розподілу;

– перевірити нормальність;

– визначити аномально віддалені значення.

Це головна перевірка коректності застосування статистичних методів.

Оцінити якість підгонки моделі у кожній точці плану дозволяють графіки залишків. Вивчення залишків, важливий етап у перевірці адекватності моделі. Побудовано графіки залежності:

$$e_i = y_i - \widehat{y_i}. \tag{2.51}$$

Розглядають залишки у залежності від:

– номера експерименту;

– значень факторів;

– прогнозованих значень.

Якщо модель адекватна, залишки повинні бути випадковими, без виражених тенденцій.

Для отримання детального об’ємного представлення застосовується тривимірна візуалізація. У сучасних дослідженнях 3D–графіки (3–Віз) дуже популярні, оскільки вони дозволяють бачити поверхню відгуку у просторі. Вони більш наочні, дають змогу:

– візуально знайти екстремум;

– зрозуміти, як виглядає поверхня;

– поглянути, що відбувається при взаємодії факторів.

Інструменти для таких графіків є у різних програмах, наприклад, в Python

(matplotlib, plotly), у Google Colab.

Важливу роль у геометричному аналізі відіграють також двовимірні контурні графіки. Візуалізація не тільки доповнює числовий аналіз, але й відіграє важливу роль у прийнятті рішень. Вона дає змогу:

- швидко побачити, що відбувалось у експерименті;
- знайти, що не очевидне з таблиць;
- підтвердити або спростити думки;
- показати, що можна або не можна.

Тому до візуалізації висуваються певні вимоги, яких необхідно дотримуватися для забезпечення наукової точності. Щоб візуалізація була ефективною, варто пам’ятати:

- графіки мають бути зрозумілими і наочними;
- масштаб правильний;
- наявність підпису осей і одиниць вимірювання;
- тип графіка відповідає задачі;
- немає зайвої інформації.

Застосування інструментальних засобів розглядається на етапі програмної реалізації алгоритмів. У рамках даної роботи візуалізація буде реалізована з використанням мов програмування та бібліотек, що дозволяють:

- автоматично будувати графіки;
- інтерактивно досліджувати результати;
- експортувати зображення.

Це забезпечує зручність використання та розширює можливості аналізу.

Отже, візуалізація результатів, важливий етап експериментального дослідження, що дозволяє наочно представити отримані дані, оцінити адекватність моделі та зробити обґрунтовані висновки. Використання різних типів графіків забезпечує комплексний аналіз і підвищує ефективність дослідження.

2.5 Висновки до розділу 2

Розділ 2 присвячений огляду методів планування експериментів та їх роль у практичних задачах. Аналіз реалізованих підходів дав змогу узагальнити, визначити їх переваги та недоліки, а також наголосити на використанні деяких із них у подальшій роботі.

Проведено аналіз повних та дробових факторних планів. З'ясовано, що повний факторний експеримент дає найбільшу повноту інформації, але необхідна велика кількість дослідів істотно його обмежує. Для скорочення обсягу дослідів використовують дробові плани, які, натомість, "страждають" від змішування ефектів та ускладнюють інтерпретацію.

З точки зору оброблення отриманих даних, розглянуто методи побудови поверхні відгуків, у тому числі центральний композиційний план (ЦКП). Виявлено, що за допомогою ЦКП можна побудувати квадратичну модель досліджуваного явища, з урахуванням його нелінійних властивостей, а також знайти точки оптимуму. Отже, для побудови моделей із високою точністю і для знаходження оптимальних рішень використовують :

ЦКП. Його не можна вважати раціональним з огляду на велику кількість факторів, грубо кажучи, 5 у центрі і 2 у кожній із b бічних площин. Але у багатьох дослідженнях обмежуються 3–ма факторами, що досить раціонально. Оптимальні плани (D–оптимальний, плани Бокса, Бенкена). Вони забезпечують високу точність оцінок коефіцієнтів побудованої математичної моделі, але відрізняються складнішими процедурами її побудови і аналізу.

Порівняння методів показало, що їх вибір залежить від мети дослідницької роботи, кількості факторів та наявних ресурсів. Для оптимізації технологічних процесів доцільними є методи побудови поверхні відгуків, які забезпечують баланс між точністю моделі і обсягом експерименту.

У цьому розділі також сформовано методику застосування методів планування експериментів, яка включає :

– визначення організації чи завдання, вхідних даних (факторів, їх рівнів,

обсягів експериментів);

- вибір плану (проекту) експерименту;
- проведення експерименту або дослідження;
- обробку отриманих результатів;
- побудову математичної моделі, яка описує досліджуване явище;
- візуалізацію цієї моделі.

Зазначений підхід дозволяє систематизувати дослідницьку діяльність та створює передумови для її подальшої автоматизації.

Таким чином, отримані результати створюють теоретико–методичні умови для розгляду наступного розділу щодо розробки програмних засобів і проектування експериментів. Вони також будуть корисними у практичному застосуванні експериментальних методів при оптимізації реальних процесів [1–23].

3 АВТОМАТИЗАЦЯ ПРОЦЕСУ ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ

3.1 Обґрунтування вибору мови програмування та інструментальних засобів

На сьогодні в експериментальних дослідженнях значну частину задач з обчислень, обробки даних та візуалізації результатів досліджень виконують із застосуванням програмних засобів. Це дає змогу проводити планування експерименту за допомогою комп'ютерних програм, підвищувати точність розрахунків, знижувати імовірність помилок і суттєво зменшувати час виконання експерименту[10].

Для реалізації в програмі математичних методів планування експерименту слід обрати мову програмування та інтегроване середовище розробки, які дадуть змогу:

- зручно виконувати математичні обчислення;
- обробляти експериментальні дані;
- будувати графіки і поверхні відгуку;
- реалізувати алгоритми оптимізації;, бути доступними і простими у використанні.

для автоматизації обчислень, бути доступними і простими у використанні. Вибір мови програмування – це перший важливий крок.

Мову програмування Python обрано як одну з найбільш розповсюджених мов для застосування в наукових дослідженнях, аналізі даних та машинному навчанні.

Основними аргументами на користь вибору Python є:

- простий синтаксис, що дозволяє швидко розробляти алгоритми;
- широкий набір бібліотек для наукових обчислень;
- можливість ефективної роботи з матрицями та векторами;
- розвинені засоби візуалізації;

– велика спільнота користувачів і багатство документації.

До того ж Python ефективний для застосування в методах планування експерименту, оскільки дає змогу працювати з числовими даними і реалізовувати складні математичні моделі.

При виборі середовища розробки враховувалися вимоги до зручності та кросплатформенності інструментів. Як середовище розробки обрано Google Colab, що є хмарним сервісом для запуску Python–програм.

Перевагами цього середовища є:

– немає необхідності у встановленні програмного забезпечення;
– можливість запуску коду прямо у веб–браузері;
– підтримка інтерактивних досліджень;
– зручна інтеграція з Python–бібліотеками;
– можливість збереження і обміну файлами.

Використання Google Colab доречне в навчальних і дослідницьких задачах, оскільки дає змогу швидко влаштувати необхідну програму і побачити її результат без зайвих клопот.

Для узагальнення переваг обраного підходу доцільно виділити ключові аспекти взаємодії мови та середовища розробки. Поєднання Python і Google Colab дає користувачам:

– швидку розробку програм;
– зручну перевірку ефективності роботи коду;
– можливість інтерактивно працювати з результатами досліджень;
– простий доступ для новачків.

Це дуже важливо для задач планування експерименту, де постійно треба змінювати налаштування і оцінювати результат.

Перед початком проектування програмного забезпечення було чітко сформульовано вимоги до його функціоналу. Розроблюване програмне забезпечення має:

– приймати на вхід (фактори, рівні, параметри);
– самостійно створювати план експерименту;

– обчислювати коефіцієнти математичної моделі;
– перевіряти адекватність моделі;
– демонструвати результати;, шукати оптимальні параметри.

Ці вимоги лягають в основу програмної архітектури та вибір інструментів для розробки.

Поряд із функціональними вимогами, важливу роль відіграють технічні обмеження реалізації. Вибираючи інструменти, ми мали на увазі і такі чинники:

– роботу з відносно великими обсягами даних;
– потребу у швидкому виконанні обчислень;
– необхідність отримання точних результатів;
– зручність використання для користувачів.

Python в поєднанні з сучасними бібліотеками повністю відповідає цим вимогам.

Узагальнюючи вищезазначені чинники, можна зробити висновок, що вибір мови програмування Python і середовища Google Colab є цілком обґрунтованим з точки зору ефективності, зручності і відповідності цілям дослідження. Це дає можливість реалізовувати математичні методи планування експерименту, автоматизувати розрахунки і наочно візуалізувати результати, що необхідно для подальшого виконання практичної частини роботи.

3.2 Опис використовуваних модулів, бібліотек та функцій

Для реалізації математичних методів планування експерименту в середовищі програмування обирають спеціально підібрані бібліотеки Python. Вони покривають виконання чисельних обчислень, обробку даних, статистичний аналіз, візуалізацію результатів і не тільки. Використання готових бібліотек значно прискорює створення програмного забезпечення.

У рамках даної роботи найбільш часто використовують такі модулі.

а) бібліотека NumPy –є фундаментальним інструментом для чисельних

обчислень з Python. Він надає підтримку багатовимірних масивів і багато ефективних операцій над ними.

Основні можливості NumPy у цьому проекті:

– створення та робота з масивами;
– виконання операцій над матрицями;
– обчислення середніх і дисперсій;
– реалізація лінійної алгебри.

Зокрема, для побудови моделі нам потрібна операція множення матриць:

$$b = (X^T X)^{-1} X^T y, \tag{3.1}$$

що можна виконати за допомогою відповідних функцій для роботи з матрицями.

NumPy також відомий своєю швидкістю, оскільки він оптимізований для виконання обчислень на низькому рівні[13,19].

б) бібліотека SciPy –будується на основі NumPy і розширює його можливості, надаючи інструменти для наукових досліджень, зокрема для статистичного аналізу, пошуку рішень тощо.

У цій роботі SciPy використовується для:

– перевірки статистичних гіпотез;
– обчислення критичних значень критеріїв;
– виконання процедур пошуку рішень;
– аналізу розподілів.

Прикладом можуть бути функції, пов’язані з t–розподілом, які можуть застосовуватися для перевірки значущості коефіцієнтів[14,20].

в) бібліотека Matplotlib –служить інструментом візуалізації у багатьох Python–проектах.

Основні її можливості у нашому випадку:

– побудова графіків функцій;
– створення гістограм;

– відображення залежностей між змінними;

– побудова тривимірних поверхонь.

Ця бібліотека робить наші результати експерименту більш «відчутними»[21].

г) бібліотека Pandas –використовується для зручної роботи з експериментальними даними.

Головні задачі Pandas:

– зчитування та записування даних;

– обробка таблиць;

– групування та фільтрація даних;

– зручне представлення результатів.

Pandas дозволяє ефективно працювати з експериментальними даними та структурувати їх для подальшого аналізу[22].

д) бібліотека Scikit–learn –може служити інструментом для побудови регресійних моделей.

У рамках роботи вона застосовується для:

– лінійної регресії;

– оцінки якості моделі;

– допоміжного аналізу даних.

Хоча основна модель будується аналітично, ця бібліотека може бути використана для перевірки результатів.

Крім спеціалізованих бібліотек, можна обійтися і звичайними стандартними функціями Python:

– математичні операції;

– робота зі списками;

– організація циклів;

– умовні конструкції.

Це і є логікою нашої програми.

З точки зору функціональної структури, розроблена програма реалізує

основні етапи планування експерименту у вигляді скомпонованих функцій:

- введення даних;
- генерація матриці плану експерименту;
- обчислення коефіцієнтів моделі;
- перевірка адекватності;
- візуалізація результатів;
- пошук оптимуму.

Логічно, що такий підхід не лише зручний, а й модульний.

Взаємодія всіх зазначених бібліотек та модулів забезпечує їхню спільну та узгоджену роботу:

- NumPy робить важку роботу під капотом;
- Pandas допомагає нам організувати файли та інформацію;
- SciPy, це мізки, вона «думка»;
- Matplotlib «домальовує картинку».

Таким чином, ми можемо весь цикл експерименту виконати однією програмою.(див. Додаток Б)

Підсумовуючи, можна сказати, що повний цикл проведення експерименту з використанням сучасних бібліотек Python не лише автоматизує обробку, а й робить її більш ефективною і наочною. Обраний набір інструментів цілком відповідає поставленим завданням.

3.3 Алгоритм роботи програми та його блок–схема

Розробка алгоритму роботи програми полягає у створенні формалізованого опису послідовності дій, які виконуються в межах планування експерименту, опрацювання результатів та побудови відповідної моделі. Усі етапи, наведені у попередньому розділі, адаптовано до особливостей програмної реалізації.

Основна мета алгоритму, автоматизувати всі етапи дослідження: від

введення вхідних даних до отримання результатів і їх графічного відображення.

Для чіткого представлення структури програми розпишемо її загальну логіку.

Основні етапи алгоритму роботи програми:

– вхідні дані;
– кодування факторів;
– побудова матриці плану експерименту;
– отримання значень для функції відгуку (значення вихідної функції);
– побудова математичної моделі;
– перевірка адекватності моделі;
– аналіз моделі;
– візуалізація;
– пошук оптимальних значень факторів;
– вивід результатів.

Кожен із цих етапів реалізовано як окремий логічний блок програми.

Детальний покроковий опис алгоритму дозволяє зрозуміти механізм роботи програми. На початковому етапі відбувається введення вхідних даних користувачем: кількість факторів, мінімальні та максимальні значення факторів, а також параметри експерименту. Ці дані будуть використовуватися для подальших розрахунків.

Наступним кроком є кодування факторів, що дає змогу перейти від натуральних значень до безрозмірної форми. Це необхідно для застосування методів планування експерименту[1,10].

Далі розробляється матриця плану експерименту. В залежності від обраного методу (наприклад, центральне композиційне планування) генеруються всі необхідні комбінації факторів[2,3].

Після цього отримують значення функції відгуку. У програмі це може бути реалізовано двома способами:

– користувач вводить експериментальні дані;
– обчислення значень за заданою функцією (у разі моделювання).

Далі будується модель на основі отриманих даних. Використовується метод найменших квадратів:

$$b = (X^T X)^{-1} X^T y. \quad (3.2)$$

Після визначення коефіцієнтів моделі відбувається перевірка її адекватності. Якщо модель не відповідає вимогам, можна повернутися до попередніх кроків.

Наступним етапом є аналіз моделі, що включає оцінку впливу факторів та їх взаємодій.

Потім виконується візуалізація результатів у вигляді графіків, поверхонь відгуку та інших зображень[3,7].

На останньому етапі здійснюється пошук оптимальних значень факторів шляхом аналізу математичної моделі.

Результати розрахунків виводяться у зручному для користувача вигляді.

Для розуміння логіки обчислень, що закладена у програмний код, доцільно розглянути математичну основу алгоритму. Основним кроком алгоритму є побудова регресійної моделі, що базується на розв’язанні системи рівнянь:

$$y = Xb. \quad (3.3)$$

Оцінка параметрів виконується за формулою методу найменших квадратів, що забезпечує мінімізацію похибки між експериментальними та розрахунковими значеннями.

Для кращого розуміння послідовності виконання всіх операцій та структури розробленого коду використовується блок–схема алгоритму програми. Вона графічно відображає логіку взаємодії окремих модулів системи.

Опис блок–схеми (для вставки у графічний редактор):

– початок;

– введення вхідних даних;
– кодування факторів;
– побудова плану дослідження;
– отримання значень функції відгуку;
– побудова математичної моделі;
– перевірка адекватності;

якщо ні → повернення до пункту формування плану

якщо так → далі:

– аналіз моделі;
– візуалізація результатів;
– пошук оптимуму;
– вивід результатів;
– кінець.

Графічне представлення розробленої блок–схеми алгоритму програми наведено на рис. 3.1 та рис. 3.2.

Для забезпечення високої ефективності обчислень та гнучкості налаштувань було враховано ключові особливості реалізації алгоритму. Програмна реалізація розробленого алгоритму має такі особливості:

– модульна структура програми;
– можливість зміни параметрів без переписування коду;
– універсальність для різних задач;
– підтримка різних типів планувань експерименту.

Це робить програму гнучкою і зручною у використанні[10].

Отже, розроблений алгоритм роботи програми охоплює всі етапи планування експерименту та забезпечує їх автоматизоване виконання.(див. Додаток А) Він побудований у відповідності до методики проведення дослідження і дозволяє ефективно використовувати математичні методи в програмному середовищі.



Рисунок 3.1 – Блок–схема алгоритму у графічному вигляді(1частина)



Рисунок 3.2 – Блок–схема алгоритму у графічному вигляді(2 частина)

3.4 Опис інтерфейсу розробленої програми

Інтерфейс програми визначає, як користувач взаємодіє із програмним забезпеченням, і забезпечує зручність введення даних, отримання результатів і виконання дослідження. В даному випадку інтерфейс редаговано у Google

Colab, який дозволяє поєднувати програмний код, текстові пояснення і результати обчислень в одному документі.

Особливістю такого підходу є те, що не потрібно розробляти окрему графічну версію інтерфейсу, а можна обійтися послідовністю клітинок (cells), які користувач виконує.

Загальна структура інтерфейсу розроблена відповідно до логіки користувацького сценарію. Інтерфейс програми розбитий на логічні блоки відповідно до кроків дослідження:

– блок введення даних;
– блок формування плану дослідження;
– блок введення або обчислення результатів;
– блок побудови моделі;
– блок аналізу і візуалізації;
– блок виведення результатів.

Кожен блок реалізовано в окремій клітинці або групі клітинок у Google Colab.

Для зручності користувача взаємодія з програмою починається з етапу ініціалізації параметрів. Блок введення даних: на цьому кроці користувач задає основні параметри дослідження:

– число факторів;
– мінімальні та максимальні значення факторів;
– тип плану дослідження;
– кількість повторень (якщо потрібно).

Дані можна вводити змінними у коді або за допомогою інтерактивних елементів (наприклад, за допомогою поля введення).

Результатом цього кроку є підготовлена структура даних, яку буде використано надалі.

Після ініціалізації факторів програма переходить до генерації структури дослідження. За заданими даними програма автоматично генерує матрицю плану дослідження.

Виводом у цьому блоці є таблиця, яка містить:

– номери дослідів;

– значення факторів у кодованому вигляді;

– (за бажанням) значення факторів у натуральному вигляді.

Такий формат дозволяє користувачу перевірити коректність плану перед початком розрахунків.

Після перевірки структури планування здійснюється етап збору та інтеграції експериментальних даних. Блок отримання значень функції відгуку: на цьому кроці користувач має:

– введення даних вручну, користувач сам вводить результати дослідів;

– обчислення автоматичне, значення функції відгуку обчислюється за запропонованою формулою (для моделювання).

Завдяки цьому програму можна використовувати як для реальних досліджень, так і для навчальних задач.

На основі зібраних експериментальних значень програма переходить до аналітичного моделювання процесу. Після отримання даних програма автоматично обчислює коефіцієнти регресійної моделі.

Результати виводяться у вигляді:

– рівняння регресії;

– таблиці коефіцієнтів;

– інших статистичних показників.

Користувач таким чином отримує змогу оцінити вплив кожного фактора.

Для глибокого аналізу одержаної моделі та дослідження її геометричних властивостей передбачено графічний інструментарій. Блок аналізу і візуалізації. У цьому блоці передбачено побудову графіків:

– залежності функції відгуку від факторів;

– поверхні відгуку;

– контурного графіку;

– залишків.

Результатами цього блоку є безпосередньо під кодом побудовані графіки,

що робить аналіз інтерактивним.

Фінальним етапом роботи алгоритму є систематизація та збереження знайдених оптимальних рішень. На цьому кроці користувач отримує:

- значення коефіцієнтів моделі;
- оцінку адекватності;
- оптимальні значення факторів;
- графічні результати.

Все це можна зберегти або використати для подальшого аналізу.

Специфіка обраної хмарної платформи визначає ключові особливості інтерфейсу в Google Colab. Створений інтерфейс має такі переваги:

- інтерактивність (можливість змінювати параметри і відразу бачити результат);
- наочність (текст, код, графіки);
- простота;
- доступність (через браузер);
- можливість спільного використання.

Окрему увагу при розробці було приділено забезпеченню максимальної зручності для кінцевого користувача. Дана програма побудована так, що користувачеві, котрий не є фахівцем у програмуванні, достатньо лише:

- задати параметри;
- запустити клітинки;
- проаналізувати отримані результати.

Це робить програму зручною як для навчання, так і для практичного використання.(див. Додаток Б).

Отже, інтерфейс написаної програми робить зручною та ефективною роботу користувача із системою планування експерименту. Завдяки Google Colab він поєднує в собі простоту, наочність та широкі можливості для дослідження.

3.5 Детальний опис роботи програми та її особливостей

Реалізована у програмі повністю логічна модель проведення експерименту, від етапу підготовки вхідних даних до моделювання, аналізу і графічного представлення результатів. Підхід до реалізації у вигляді окремих модулів гарантує зручність і гнучкість використання теоретичною і прикладною часткою, а також перспективу подальшого доповнення.

Логіка роботи програмного коду вибудовується у вигляді послідовності кроків, кожен з яких здійснює окремий функціональний блок.

Етап 1 Визначення та введення даних.

Перший крок передбачає налаштування користувачем параметрів завдання:

– число факторів k;
– мінімальні та максимальні значення кожного фактора;
– тип експериментального плану;
– параметри моделі (наприклад, порядок полінома).

Ці параметри представлені у вигляді списків відповідних довжин у коді, що збільшує зручність їхньої подальшої обробки.

Визначається вектор факторів:

$$X = (X_1, X_2, \dots, X_k). \tag{3.4}$$

Етап 2 Кодування факторів.

Відповідно після отримання натуральних значень факторів вони конвертуються у кодовану форму. Для цього слід застосувати наступну формулу:

$$x_i = \frac{X_i - X_{0i}}{\Delta X_i}. \tag{3.5}$$

У коді розраховуються:

– центральні точки X_{0i};

– величина кроку ΔX_i;

– віднесені до кодованої форми значення факторів.

Даний етап дозволяє стандартизувати вхідні дані і підготувати їх до роботи з типовими експериментальними планами.

Етап 3 Створення матриці плану експерименту.

Матриця плану експерименту формується на основі кількості факторів і обраного методологічного підходу.

Програма сама бере на себе генерацію усіх можливих варіацій о вхідних факторах. Для прикладу, при повному факторному експерименті код створить 2^k варіацій.

Загальний вигляд матриці:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}. \tag{3.6}$$

Цей крок здійснюючих автоматично і не потребує втручання співробітника.

Етап 4 Отримання значень функції відгуку.

Програма може працювати у двох варіантах:

– реальний експеримент, на цьому етапі користувач вносить значення функції відгуку власноруч;

– модельовий експеримент, значення генеруються згідно із заданою аналітичною функцією.

У другому випадку слід скористатися наявною залежністю:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_k). \tag{3.7}$$

що дасть змогу перевірити працю програми без необхідності виконавчих діях з

експерименту.

Етап 5 Побудова регресійної моделі

Сформувавши модель, програма переходить до її опису у вигляді одного з типових рівнянь регресії.

Значення коефіцієнтів реалізуються за методом найменших квадратів:

$$b = (X^T X)^{-1} X^T y. \tag{3.8}$$

Широко відомі функції лінійної алгебри із бібліотеки NumPy допомагають у реалізації цього кроку у коді.

В результаті формується вектор:

$$b = (b_0, b_1, b_2, \dots, b_k). \tag{3.9}$$

Етап 6 Перевірка якості моделі.

Після побудови подальша нестаткова оцінка якості моделі, яка полягає у наступному:

- дослідження залишків;
- розрахунку похибки;
- перевірці достовірності коефіцієнтів.

Обчислення залишків:

$$e_i = y_i - \widehat{y_i}. \tag{3.10}$$

Це є оцінкою точності прогнозу.

Етап 7 Візуалізація результатів.

За роботу програми користувач отримує живі графіки:

- зміни функції відгуку в залежності від факторів;
- поверхні відгуку;
- контурні діаграми.

Matplotlib служить для візуалізації отриманих результатів.

Цей етап дозволяє наочно оцінити результати та зробити висновки.

Етап 8 Пошук оптимальних значень.

Виходячи із моделі шукають оптимальні варіанти. Для цього за результатами функції відгуку визначаються варіанти факторів, що відповідають максимальним або мінімальним її значенням.

В загальному випадку це розв’язання системи:

$$\frac{\partial y}{\partial x_i} = 0. \tag{3.11}$$

Даний крок може бути здійснений як аналітично, так і чисельно у програмі.

Для оцінки технічного рівня розробки детально розглянемо ключові особливості створеної програми. Реалізована програма характеризується наступним:

- універсальність (працювати з будь–якою кількістю факторів);
- гнучкість (залишати параметри без зміни коду), повна автоматизація етапів;
- зручність (можливість працювати як з реальними, так і із модельними дослідженнями);
- інтеграція розрахунків та візуалізації.

Узагальнення цих характеристик дозволяє чітко окреслити переваги реалізованого підходу. Розроблений програмний продукт служить для:

- суттєвої економії часу дослідження;
- зменшення кількості помилок;
- підвищення точності результатів;
- полегшення аналізу.

Отже, описана програма повністю відповідає логічній поняттю плану експерименту і виконує його кроки у автоматичній формі. (див. Додаток Б)

Вона побудована за сучасною логікою відповідних програмних продуктів у науковій сфері і призначена для широкого кола дослідження та оптимізації.

3.6 Інструкція для кінцевого користувача

Програма автоматизує процес планування експерименту, побудови моделі і аналізу результатів. Вона написана для Google Colab, що означає, що її легко використовувати та нема потреби у встановленні ПЗ.

Ось покрокова інструкція користування програмою. Процес взаємодії з програмним забезпеченням традиційно розпочинається з етапу підготовки до роботи. Для початку потрібно:

– мати доступ до Інтернету;
– відкрити Google Colab у браузері;
– створити або завантажити файл з програмою (ноутбук).

Відкривши файл, користувач побачить набір клітинок з кодом і поясненнями.

Крок 1 Запуск середовища.

Перед тим, як виконувати програму, потрібно запустити середовище, почекати, поки середовище ініціалізується.

Тепер можна виконувати клітинки з кодом.

Крок 2 Введення вхідних даних.

В відповідному блоці коду користувач задає:

– число факторів;
– мінімальні значення факторів;
– максимальні значення факторів;
– тип плану експерименту;
– інші налаштування (за потребою).

Дані можуть бути задані змінними в коді або через інтерактивні поля.

Після введення параметрів слід виконати клітинку.

Крок 3 Формування плану експерименту.

Після виконання цієї частини коду програма ініціалізує матрицю плану експерименту.

Користувач отримує таблицю, яка містить:

– варіанти комбінацій факторів;

– їх закодовані значення;

– (за потребою) натуральні значення.

Саме час перевірити коректність згенерованого плану.

Крок 4 Отримання значень функції відгуку.

Користувач може вибрати один із варіантів:

– самостійно заповнити результати експерименту;

– скористатись вбудованою функцією для автоматичного отримання.

Після заповнення чи отримання даних слід виконати наступну клітинку.

Крок 5 Побудова математичної моделі.

Програма автоматично обчислює коефіцієнти регресійної моделі і виводить рівняння.

Користувач отримує:

– числові значення коефіцієнтів;

– власне рівняння;

– деякі інші характеристики моделі.

Крок 6 Аналіз результатів.

Тепер користувач може:

– оцінити вплив факторів;

– проаналізувати значущість коефіцієнтів;

– перевірити точність моделі.

Результати представлені у вигляді чисел і таблиць.

Крок 7 Візуалізація.

Програма будує графіки, які відображають:

– залежності між змінними;

– поверхню відгуку;

– інші характеристики процесу.

Графіки з’являються безпосередньо під комірками коду.

Крок 8 Пошук оптимальних параметрів.

На основі моделі програма визначає оптимальні значення факторів.

Користувач отримує:

– оптимальні параметри;

– відповідне значення функції відгуку.

Крок 9 Завершення роботи.

Після всіх кроків користувач може:

– зберегти результати;

– експортувати графіки;

– змінити параметри і повторити дослідження.

Для мінімізації похибок та оптимізації робочого процесу доцільно враховувати практичні рекомендації користувачу. Для ефективної роботи з програмою рекомендується:

– контролювати правильність введення даних;

– виконувати комірки послідовно;

– аналізувати результати на кожному кроці;

– використовувати графіки для перевірки моделі.

У процесі експлуатації програмного забезпечення можуть виникати типові позаштатні ситуації, тому важливо заздалегідь окреслити можливі помилки та способи їх усунення. Час від часу Ви можете зіткнутися з:

– помилками у введених даних, перевірте значення;

– помилками компіляції, перевірте синтаксис ваших команд;

– відмінність між очікуваними й отриманими результатами, ретельно перевірте параметри моделей.

Більшість із цих проблем легко розв’язується повторним виконанням відповідних кроків.

Отже, запропонована програма є зручною для користувачів без знань програмування. Завдяки покроковому підходу Ви легко зможете спланувати експеримент, проаналізувати його результати, зробити потрібні висновки. (див. Додаток Б)

3.7 Висновки до розділу 3

У третьому розділі розглянули можливості автоматизації планування експерименту за допомогою сучасного програмного забезпечення. Визначили обґрунтованість вибору мови та середовища програмування і дійшли висновку, що для поставлених задач доцільним є поєднання Python із середовищем Google Colab.

Охарактеризували основні бібліотеки і програмні модулі, які є інструментами для проведення обчислень, обробки даних, побудови математичних моделей і графіків. Уточнили, що із застосуванням таких засобів можна реалізувати повний цикл роботи з експериментом у автоматичному режимі.

Розробили алгоритм, що описує роботу програми на всіх етапах планування експерименту, від збору даних до отримання результатів і їх аналізу. Продемонстрували, що алгоритм за своєю структурою відповідає логіці та методиці проведення досліджень і забезпечує послідовне виконання необхідних кроків.

Описали інтерфейс програми, створений у середовищі Google Colab, що є засобом для зручної взаємодії користувача із системою. Визначили основні розділи та принципи роботи інтерфейсу, що дають змогу ефективно виконувати усі етапи дослідження.

Надали опис роботи програми, який дає зрозуміти, які математичні методи планування експерименту використані, а також вказали на її родзинки і переваги. Дійшли висновку, що програмний комплекс є універсальним,

гнучким та придатним для розв’язання широкого спектра задач.

Склали інструкцію для користувача, що надає можливість використання програмного продукту за відсутності знань та навичок в програмуванні.

Отже, у цьому розділі заклали програмну основу для практики проведення експериментів, що дозволяє перейти до застосування розробленої системи на конкретних прикладах для оптимізації процесу[1–23].

4 ПРАКТИЧНА РЕАЛІЗАЦІЯ: ОПТИМІЗАЦЯ ПРОЦЕСУ НАГРІВАННЯ МЕТАЛЕВОЇ ДЕТАЛІ

4.1 Постановка задачі та опис об’єкта дослідження

У практичній частині розглядається оптимізація процесу нагрівання металевої деталі, суть якої полягає у досягненні необхідних експлуатаційних характеристик за найменших енергетичних витрат і, водночас, якісної обробки.

Нагрівання виступає одним із базових операцій у великій кількості технологічних процесів, наприклад, у термічній обробці металів, коли зміною температури можна змінити структуру матеріалу, його фізичні, механічні властивості, довговічність виробів. Неправильні параметри нагрівання можуть стати причиною перегріву, появи внутрішніх напружень, а також нерівномірного розподілу температури, що відбивається на якості кінцевого продукту.

Нагрівання проводиться у печі або з використанням зовнішнього джерела тепла, у будь–якому разі температура змінюється з часом і залежить від різних умов.

Основними фізичними процесами, які реалізуються у нагріванні, є:

- теплопровідність між різними шарами металу
- теплообмін із навколишнім середовищем
- накопичення теплової енергії.

Температурний розподіл у деталі можна описати диференціальними рівняннями теплопроводності (Fourier’s Law), однак у цій роботі застосовується їх спрощений вигляд, що дає змогу використовувати планування експерименту.

Для переходу до математичного моделювання чітко формулюється постановка проблеми. Головна проблема полягає у визначенні такої комбінації параметрів нагрівання, при якій функція відгуку досягає оптимального значення.

В якості функції відгуку у розглянутому завданні може виступати температура деталі або деякий узагальнений показник ефективності процесу, наприклад:

$$y = f(x_1, x_2, x_3). \tag{4.1}$$

Для чіткої орієнтації в результатах дослідження спочатку формулюється мета проведення експерименту. Основними цілями оптимізації процесу є:

- досягнення потрібної температури;
- мінімізація часу нагрівання;
- енергозбереження;
- забезпечення однорідності температурного поля.

Процедура дослідження розпочинається з обґрунтованого вибору факторів для аналізу. У якості нелінійного експерименту вибираємо три основні фактори, які найбільш серйозно впливають на процес нагрівання:

- X_1 – температура нагрівального середовища (°C);
- X_2 – час нагрівання (хв);
- X_3 – коефіцієнт тепловіддачі або інтенсивність нагріву.

Ці фактори можна контролювати і змінювати у процесі експерименту.

Для підтвердження фізичної доцільності побудови моделі наведемо аргументи для вибору саме цих факторів. Температура середовища визначає інтенсивність теплового удару по деталі. Чим біль ваша температура, тим швидше відбувається нагрів, проте із великою вірогідністю перегріву поверхні.

Час нагрівання визначає тривалість дії теплового нападу. Якщо його мало, деталь не може повністю прогрітися, якщо ж надмірно багато, буде перевитрата енергії.

Коефіцієнт тепловіддачі, це показник ефективності передачі тепла від нагрівного середовища до деталі, і він залежить від умов нагрівання.

Для забезпечення технологічної реалізованості процесу виконується встановлення інтервалів зміни факторів. Для кожного фактора задаємо

допустимі межі зміни:

$$X_1 \in [400,800]\ ℃, \tag{4.2}$$

$$X_2 \in [10,60]\ \text{хв}, \tag{4.3}$$

$$X_3 \in [0.5,1.5]. \tag{4.4}$$

Ці межі обрані так, щоб охопити найбільш розповсюджені умови для технологічного процесу.

Для подальшого використання методів планування експерименту здійснюється кодування факторів, у ході якого параметри переводяться у кодовані змінні:

Для подальшого використання методів планування експерименту фактори переводяться у кодовані змінні:

$$x_i = \frac{X_i - X_{0i}}{\Delta X_i}. \tag{4.5}$$

Знаходимо центральні значення:

$$X_{01} = \frac{400 + 800}{2} = 600, \tag{4.6}$$

$$X_{02} = \frac{10 + 60}{2} = 35, \tag{4.7}$$

$$X_{03} = \frac{0.5 + 1.5}{2} = 1.0. \tag{4.8}$$

Інтервали варіювання:

$$\Delta X_1 = 600, \qquad \Delta X_2 = 35, \qquad \Delta X_3 = 1.0. \tag{4.9}$$

Отож, кожний фактор буде у нас відтепер варіюватись у стандартному

інтервалі $[-1; +1]$.

Для аналітичного опису досліджуваних теплових процесів формується модель процесу. Для опису процесу нагрівання використовуємо квадратичну (другого ступеня) регресійну модель:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_3x_3^2. \quad (4.10)$$

За допомогою такої моделі можна передбачати:

– лінійний вплив факторів;

– взаємодіє між факторами;

– нелінійні ефекти.

Для знаходження найкращих режимів термообробки формулюється задача оптимізації. Оптимізація полягає у визначенні таких значень x_1, x_2, x_3, при яких функція відгуку досягає екстремуму:

$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = 0, \qquad \frac{\partial y}{\partial x_2} = 0, \qquad \frac{\partial y}{\partial x_3} = 0. \quad (4.11)$$

Значення, отримані у результаті розв’язку задачі, переводяться в натуральні величини.

У цьому підрозділі розглянулася оптимізація процесу нагрівання металевої деталі. Визначено об’єкт дослідження, вибрано основні фактори, встановлено їх діапазони, сформульовано математичну модель. Ці кроки заклали основу для побудови плану експериментів і подальших розрахунків.

4.2 Визначення факторів, рівнів та функції відгуку

Після формулювання задачі у попередньому підрозділі слід

конкретизувати умови експерименту, визначити параметри факторів та остаточно сформулювати функцію відгуку, яка буде використовуватись у подальших планах і розрахунках.

Саме на цьому етапі відбувається підготовка до побудови експериментального плану і подальшого моделювання.

Першочерговим етапом конкретизації умов є визначення факторів експерименту. Як уже згадувалося, для дослідження обрано три фактори:

– X_1 – температура нагріву (°C);
– X_2 – час нагріву (хв);
– X_3 – коефіцієнт тепловіддачі.

Ці фактори є керованими параметрами процесу і можуть варіюватися у певних межах.

Наступним кроком для дискретизації простору пошуку є визначення рівнів факторів. Для кожного фактора слід встановити три основних рівні варіювання:

– нижній рівень (, 1);
– центральний рівень (0);
– верхній рівень (+1).

Виходячи із заданих інтервалів варіювання (див. підрозділ 4.1), натуральні значення факторів наведено в табл. 4.1.

Таблиця 4.1, Рівні факторів у натуральних одиницях

Фактор	Позначення	−1 (мін)	0 (центр)	+1 (макс)	ІнтервалΔX
Температура	X_1	400	600	800	200
Час нагрівання	X_2	10	35	60	25
Інтенсивність	X_3	0.5	1.0	1.5	0.5

Для забезпечення безрозмірності математичних розрахунків здійснюється кодування факторів. Для застосування методів планування експерименту зручніше перейти до кодованих значень факторів за співвідношенням:

$$x_i = \frac{X_i - X_{0i}}{\Delta X_i}. \tag{4.12}$$

Перевіримо правильність кодування:

– при $X_i = X_{i,min} \rightarrow x_i = -1$;

– при $X_i = X_{0i} \rightarrow x_i = 0$;

– при $X_i = X_{i,max} \rightarrow x_i = +1$.

Отже, кодування факторів побудоване симетрично, що суттєво спрощує проведення подальших обчислень. Відповідні рівні факторів у кодованому вигляді наведено в табл. 4.2.

Таблиця 4.2, Рівні факторів у кодованому вигляді

Рівень	x_1	x_2	x_3
Нижній	−1	−1	−1
Центральний	0	0	0
Верхній	+1	+1	+1

Ключовим кроком для оцінки результативності дослідження є визначення функції відгуку. У якості функції відгуку оберемо температуру нагрітої деталі, яка характеризує якість процесу нагрівання.

Позначимо її як:

$$y = T. \tag{4.13}$$

Оскільки у цій роботі застосовується програмна модель, введемо аналітичну залежність, яка імітуватиме процес нагрівання:

$$y = 50 + 20x_1 + 15x_2 + 10x_3 + 5x_1x_2 + 3x_1x_3 + 4x_2x_3 + 7x_1^2 + 6x_2^2 + 5x_3^2. \tag{4.14}$$

Для обґрунтування структури обраного рівняння наведемо пояснення вибору функції. Обрана функція відгуку має такі особливості:

- включає лінійні члени за факторами;
- маємо члени взаємодії факторів;
- присутні квадратичні члени;
- відповідає структурі регресійної моделі.

Це дає можливість повністю тестувати методи планування експериментів і створену програму.

Для розуміння фізичного змісту моделі проведено зміст функції. Коефіцієнти при факторах мають умовний фізичний зміст:

- найбільший вплив на відгук має температура (x1x_1x1);
- час нагрівання також суттєво впливає;
- інтенсивність попереду, але має менший вплив;
- члени взаємодії відображають спільний вплив факторів;
- квадратичні члени розглядають нелінійність процесу.

Після визначення всіх параметрів здійснюється безпосередня підготовка до побудови плану експерименту. Визначивши фактори і рівні, можна перейти до формування плану експерименту. При трьох факторах доцільно розглянути повний факторний експеримент:

$$N = 2^3 = 8 \tag{4.15}$$

Отже проведемо 8 базових дослідів (без урахування центрів і повторів).

Отже, у цьому підрозділі визначено фактори експерименту, встановлені їх рівні у натуральній і кодованій системах, а також вибрана функція відгуку, що використовується для моделювання процесу нагрівання. Всі необхідні умови для побудови плану експерименту і подальших розрахунків повністю задовольняються.

4.3 Формування експериментального плану та проведення досліджень

На основі визначених факторів і їх рівнів формується експериментальний план, який дозволяє отримати дані для побудови математичної моделі. У даній роботі використовується повний факторний експеримент для трьох факторів, що передбачає проведення:

$$N = 2^3 = 8 \text{ дослідів.} \tag{4.16}$$

Це забезпечує повне дослідження всіх комбінацій рівнів факторів.

Першим кроком побудови є безпосереднє формування матриці плану експерименту. Матриця планування формується у кодованому вигляді, де кожен фактор набуває значень –1 або +1, як наведено в табл. 4.3.

Таблиця 4.3 – Матриця плану експерименту

№	x_1	x_2	x_3
1	−1	−1	−1
2	+1	−1	−1
3	−1	+1	−1
4	+1	+1	−1
5	−1	−1	+1
6	+1	−1	+1
7	−1	+1	+1
8	+1	+1	+1

Для розширення аналітичних можливостей моделі виконується розширення матриці (взаємодії та квадрати). Для побудови квадратичної моделі додаємо:

– попарні взаємодії x_1x_2, x_1x_3, x_2, x_3;

– квадрати факторів x_1^2, x_2^2, x_3^2.

Враховуючи, що для рівнів ±1 квадрати факторів завжди дорівнюють одиниці, повну матрицю планування експерименту наведено в табл. 4.4.

Таблиця 4.4 – Повна матриця плану

№	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	x_1^2	x_2^2	x_3^2
1	−1	−1	−1	+1	+1	+1	1	1	1
2	+1	−1	−1	−1	−1	+1	1	1	1
3	−1	+1	−1	−1	+1	−1	1	1	1
4	+1	+1	−1	+1	−1	−1	1	1	1
5	−1	−1	+1	+1	−1	−1	1	1	1
6	+1	−1	+1	−1	+1	−1	1	1	1
7	−1	+1	+1	−1	−1	+1	1	1	1
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	1	1	1

Наступним кроком на основі сформованого плану є обчислення функції відгуку. Використовуємо задану модель:

$$y = 50 + 20x_1 + 15x_2 + 10x_3 + 5x_1x_2 + 3x_1x_3 + 4x_2x_3 + 7x_1^2 + 6x_2^2 + 5x_3^2. \quad (4.17)$$

Оскільки $x_i^2 = 1$, одразу обчислюємо постійну частину:

$$7 + 6 + 5 = 18. \quad (4.18)$$

Тобто модель спрощується:

$$y = 68 + 20x_1 + 15x_2 + 10x_3 + 5x_1x_2 + 3x_1x_3 + 4x_2x_3. \quad (4.19)$$

Далі виконується послідовний покроковий розрахунок для кожного

досліду. Крім того, розрахунок для кожного досліду виконується послідовно для всіх 8 варіантів.

Розрахунок для досліду № 1. У першій точці плану всі досліджувані фактори перебувають на нижніх рівнях варіювання ($x_1 = -1, x_2 = -1, x_3 = -1$). Підставивши ці значення в математичну модель, отримуємо:

$$y = 68 - 20 - 15 - 10 + 5 + 3 + 4 = 35. \quad (4.20)$$

Розрахунок для досліду № 2. У другій точці плану фактор температури переводиться на верхній рівень, а інші залишаються на нижньому ($x_1 = +1, x_2 = -1, x_3 = -1$). Розрахункове значення відгуку становить:

$$y = 68 + 20 - 15 - 10 - 5 - 3 + 4 = 59. \quad (4.21)$$

Розрахунок для досліду № 3. Для третьої комбінації умов фактор часу нагрівання встановлюється на верхній рівень, тоді як температура та інтенсивність зафіксовані на нижніх рівнях ($x_1 = -1, x_2 = +1, x_3 = -1$). Обчислення дають такий результат:

$$y = 68 - 20 + 15 - 10 - 5 + 3 - 4 = 47. \quad (4.22)$$

Розрахунок для досліду № 4. Четвертий дослід передбачає одночасне перебування на верхніх рівнях факторів температури та часу нагрівання за нижнього рівня інтенсивності ($x_1 = +1, x_2 = +1, x_3 = -1$). Математичний результат дорівнює:

$$y = 68 + 20 + 15 - 10 + 5 - 3 - 4 = 91. \quad (4.23)$$

Розрахунок для досліду № 5. У п’ятій точці плану на верхній рівень переводиться лише фактор інтенсивності нагріву ($x_1 = -1, x_2 = -1, x_3 = +1$).

Після підстановки координат отримуємо:

$$y = 68 - 20 - 15 + 10 + 5 - 3 - 4 = 41. \quad (4.24)$$

Розрахунок для досліду № 6. ШОстий варіант комбінації умов характеризується верхнім рівнем температури та інтенсивності за нижнього значення часу $(x_1 = +1, x_2 = -1, x_3 = +1)$. Значення функції відгуку становить:

$$y = 68 + 20 - 15 + 10 - 5 + 3 - 4 = 77. \quad (4.25)$$

Розрахунок для досліду № 7. Сьома комбінація передбачає фіксацію температури на нижньому рівні, а часу та інтенсивності – на верхніх рівнях варіювання $(x_1 = -1, x_2 = +1, x_3 = +1)$. Обчислене значення дорівнює:

$$y = 68 - 20 + 15 + 10 - 5 - 3 + 4 = 69. \quad (4.26)$$

Розрахунок для досліду № 8. У фінальній восьмій точці повного факторного експерименту всі три досліджувані параметри одночасно набувають своїх максимальних значень $(x_1 = +1, x_2 = +1, x_3 = +1)$. Розрахунок дає такий результат:

$$y = 68 + 20 + 15 + 10 + 5 + 3 + 4 = 125 \quad (4.27)$$

Одержані масиви розрахованих даних дозволяють звести результати в єдину систему. Підсумкові результати проведених експериментальних досліджень для всіх комбінацій факторів наведено в табл. 4.5.

Після зведення всіх даних у єдину матрицю виконується детальний аналіз отриманих результатів експерименту. Це дозволяє оцінити первинний характер впливу кожного з досліджуваних чинників на об’єкт моделювання.

Таблиця 4.5 – Результати експерименту

№	x_1	x_2	x_3	y
1	−1	−1	−1	35
2	+1	−1	−1	59
3	−1	+1	−1	47
4	+1	+1	−1	91
5	−1	−1	+1	41
6	+1	−1	+1	77
7	−1	+1	+1	69
8	+1	+1	+1	125

З отриманих значень видно:

- максимальне значення: 125 (при +1, +1, +1), що вказує на позитивний вплив усіх досліджуваних факторів, де найбільший ефект має параметр x_1 (температура);
- мінімальне значення: 35 (при –1, –1, –1), що підтверджує наявність суттєвої взаємодії між факторами.

Таким чином, сформовано експериментальний план, побудовано матрицю дослідів та виконано повний розрахунок значень функції відгуку для всіх комбінацій факторів. Отримані результати є вихідними даними для побудови математичної моделі та подальшого аналізу процесу.

4.4 Обробка результатів та побудова математичної моделі

На основі отриманих у підрозділі 4.3 експериментальних даних виконується побудова математичної моделі процесу нагрівання металевої деталі. Основною метою цього етапу є визначення коефіцієнтів регресійного рівняння, яке описує залежність функції відгуку від досліджуваних факторів.

Оскільки досліджуваний технологічний процес нагріву має виражений нелінійний характер і включає складні взаємодії між параметрами середовища, часу та інтенсивності, для його адекватного опису доцільно застосувати повну квадратичну регресійну модель. Загальний вигляд обраного рівняння має таку форму:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 \quad (4.28)$$

(квадрати (x_i^2) у даному плані вже враховані у вільному члені, оскільки всі вони дорівнюють 1)

Для практичного застосування цього рівняння необхідно знайти чисельні значення його параметрів. Для повного факторного експерименту коефіцієнти визначаються за формулами, що базуються на властивості ортогональності матриці планування:

$$b_0 = \frac{1}{N}\sum y_i\,, \qquad b_j = \frac{1}{N}\sum x_{ij}y_i, \quad (4.29)$$

де $N = 8$.

Підставивши отримані експериментальні значення відгуків для кожного з $N = 8$ дослідів у формулу для визначення вільного члена, знаходимо його величину:

$$b_0 = \frac{35 + 59 + 47 + 91 + 41 + 77 + 69 + 125}{8}, \quad (4.30)$$

$$b_0 = \frac{544}{8} = 68. \quad (4.31)$$

Ефект лінійного впливу першого досліджуваного фактора визначається через коефіцієнт b_1, розрахунок якого має такий вигляд:

$$b_1 = \frac{-35 + 59 - 47 + 91 - 41 + 77 - 69 + 125}{8}, \quad (4.32)$$

$$b_1 = \frac{160}{8} = 20. \quad (4.33)$$

Аналогічно, враховуючи знаки кодованих змінних у відповідному стовпці матриці планування, визначаємо коефіцієнт b_2:

$$b_2 = \frac{-35 - 59 + 47 + 91 - 41 - 77 + 69 + 125}{8}, \quad (4.34)$$

$$b_2 = \frac{120}{8} = 15. \quad (4.35)$$

Для оцінки ступеня впливу третього технологічного фактора проведемо розрахунок коефіцієнта b_3:

$$b_3 = \frac{-35 - 59 - 47 - 91 + 41 + 77 + 69 + 125}{8}, \quad (4.36)$$

$$b_3 = \frac{80}{8} = 10. \quad (4.37)$$

Переходячи до визначення ефектів взаємодії між факторами, першочергово обчислимо коефіцієнт парної взаємодії b_{12}:

$$b_{12} = \frac{35 - 59 - 47 + 91 + 41 - 77 - 69 + 125}{8}, \quad (4.38)$$

$$b_{12} = \frac{40}{8} = 5. \quad (4.39)$$

Для визначення ефекту взаємодії між першим та третім факторами розрахуємо коефіцієнт b_{13}:

$$b_{13} = \frac{35 - 59 + 47 - 91 - 41 + 77 - 69 + 125}{8}, \quad (4.40)$$

$$b_{13} = \frac{24}{8} = 3. \quad (4.41)$$

Наступним кроком оцінимо взаємний вплив другого та третього факторів за допомогою коефіцієнта b_{23}:

$$b_{23} = \frac{35 + 59 - 47 - 91 - 41 - 77 + 69 + 125}{8}, \quad (4.42)$$

$$b_{23} = \frac{32}{8} = 4. \quad (4.43)$$

Підставивши всі знайдені числові значення коефіцієнтів у вихідну структуру рівняння регресії, отримуємо остаточний вигляд математичної моделі досліджуваного процесу в кодованому масштабі:

$$y = 68 + 20x_1 + 15x_2 + 10x_3 + 5x_1x_2 + 3x_1x_3 + 4x_2x_3. \quad (4.44)$$

Для підтвердження практичної придатності та точності отриманого рівняння необхідно виконати аналіз його відповідності реальному процесу. З цією метою проведемо перевірку адекватності побудованої моделі шляхом зіставлення розрахункових значень відгуку з експериментальними даними для окремих точок плану.

Для точки (1,1,1):

$$y = 68 + 20 + 15 + 10 + 5 + 3 + 4 = 125. \quad (4.45)$$

Це повністю співпадає з табличним значенням.

Перевірка для (–1,–1,–1):

$$y = 68 - 20 - 15 - 10 - 5 - 3 - 4 = 35. \quad (4.46)$$

Також співпадає.

Це означає, що модель повністю відтворює експериментальні дані.

Інтерпретація коефіцієнтів

Отримані коефіцієнти мають наступний зміст:

- $(b_1 = 20)$ – найбільший вплив має температура;
- $(b_2 = 15)$ – значний вплив часу;
- $(b_3 = 10)$ – менший, але важливий вплив інтенсивності;
- взаємодії (b_{12}, b_{13}, b_{23}) показують комбінований ефект факторів.

Оскільки отримана модель представлена в абстрактних кодованих координатах, для її безпосереднього використання в інженерних розрахунках та на виробництві необхідно перейти до реальних фізичних величин. Перехід від кодованих значень факторів до їх натуральних масштабів здійснюється за допомогою стандартного лінійного перетворення::

$$X_i = x_i \Delta X_i + X_{0i}. \quad (4.47)$$

Це дозволяє використовувати модель у реальних умовах.

Таким чином, на основі експериментальних даних побудовано математичну модель процесу нагрівання, визначено всі коефіцієнти регресії та підтверджено її адекватність. Отримана модель точно описує досліджуваний процес і може бути використана для подальшого аналізу та оптимізації.

4.5 Аналіз та інтерпретація отриманих результатів

Після побудови математичної моделі процесу нагрівання металевої деталі необхідно виконати її детальний аналіз, визначити вплив факторів, дослідити характер залежності функції відгуку та знайти оптимальні параметри процесу.

Отримана модель має вигляд:

$$y = 68 + 20x_1 + 15x_2 + 10x_3 + 5x_1x_2 + 3x_1x_3 + 4x_2x_3. \quad (4.48)$$

Для детальної оцінки ступеня та характеру впливу кожного з досліджуваних параметрів проведемо аналіз отриманих коефіцієнтів рівняння регресії.

Коефіцієнти при змінних дозволяють оцінити ступінь впливу факторів:

– найбільший коефіцієнт має (x_1) (20), отже температура є найважливішим фактором;
– другий за значенням – (x_2) (15), тобто час нагрівання також суттєво впливає;
– найменший вплив має (x_3) (10), однак він також є значущим.

Крім ізольованого впливу окремих факторів, суттєве значення мають ефекти їх спільної дії, які оцінюються за коефіцієнтами взаємодії:

– $(b_{12} = 5)$ – взаємодія температури і часу є найбільш значущою;
– $(b_{13} = 3)$ – слабший вплив;
– $(b_{23} = 4)$ – середній вплив.

Це означає, що фактори впливають не лише окремо, а й у комбінації.

Кінцевою метою аналізу побудованої моделі є оптимізація технологічного процесу, що передбачає дослідження отриманої функції на екстремум. Для знаходження оптимуму необхідно знайти стаціонарну точку, тобто розв’язати систему:

$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = 0, \qquad \frac{\partial y}{\partial x_2} = 0, \qquad \frac{\partial y}{\partial x_3} = 0. \quad (4.49)$$

Для визначення координат стаціонарної точки знайдемо частинні похідні функції відгуку за кожною зі змінних та прирівняємо їх до нуля:

$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = 20 + 5x_2 + 3x_3, \tag{4.50}$$

$$\frac{\partial y}{\partial x_2} = 15 + 5x_1 + 4x_3, \tag{4.51}$$

$$\frac{\partial y}{\partial x_3} = 10 + 3x_1 + 4x_2. \tag{4.52}$$

У результаті диференціювання та відповідних перетворень отримуємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь виду:

$$20 + 5x_2 + 3x_3 = 0, \tag{4.53}$$

$$15 + 5x_1 + 4x_3 = 0, \tag{4.54}$$

$$10 + 3x_1 + 4x_2 = 0. \tag{4.55}$$

Розв’яжемо отриману систему рівнянь методом послідовного виключення змінних.

З третього рівняння системи виразимо залежність між змінними x_1 та x_2:

$$3x_1 + 4x_2 = -10. \tag{4.56}$$

З першого рівняння аналогічно виразимо змінну x_2 через інші параметри:

$$5x_2 = -20 - 3x_3 \rightarrow x_2 = -4 - 0.6x_3. \tag{4.57}$$

Підставивши знайдені вирази у третє рівняння системи, переходимо до визначення чисельних значень коріння::

$$3x_1 + 4(-4 - 0.6x_3) = -10, \tag{4.58}$$

$$3x_1 - 16 - 2.4x_3 = -10, \tag{4.59}$$

$$3x_1 = 6 + 2.4x_3 \rightarrow x_1 = 2 + 0.8x_3. \tag{4.60}$$

Підставивши отримані вирази у друге рівняння вихідної системи, виконаємо необхідні алгебраїчні перетворення:

$$15 + 5(2 + 0.8x_3) + 4x_3 = 0, \quad (4.61)$$

$$15 + 10 + 4x_3 + 4x_3 = 0, \quad (4.62)$$

$$25 + 8x_3 = 0 \rightarrow x_3 = -3.125. \quad (4.63)$$

Тоді

$$x_1 = 2 + 0.8(-3.125) = 2 - 2.5 = -0.5, \quad (4.64)$$

$$x_2 = -4 - 0.6(-3.125) = -4 + 1.875 = -2.125. \quad (4.65)$$

Після знаходження коренів системи лінійних рівнянь необхідно виконати аналіз отриманої екстремальної точки щодо її геометричного положення.

У результаті розрахунків отримана стаціонарна точка з такими координатами у кодованому масштабі:

$$x_1 = -0.5, \qquad x_2 = -2.125, \qquad x_3 = -3.125. \quad (4.66)$$

Однак, оскільки координати x_1 та x_2 виходять за межі допустимого інтервалу варіювання $[-1; +1]$, це свідчить про те, що справжній екстремум досліджуваної функції лежить поза межами експериментальної області.

У зв’язку з цим виникає необхідність пошуку оптимуму безпосередньо на межах допустимої області варіювання факторів.

У такому випадку оптимум слід шукати на межах області.

Проведений аналіз матриці планування та отриманих результатів дозволяє визначити граничні точки процесу. Зокрема:

– максимальне значення:

$$y_{max} = 125 \text{ при } (1,1,1); \quad (4.67)$$

– мінімальне:

$$y_{min} = 35 \text{ при } (-1,-1,-1). \quad (4.68)$$

Для практичного використання отриманих екстремальних умов виконаємо перехід від кодованих значень факторів до їхнього натурального (фізичного) масштабу. Розрахунок натуральних значень параметрів для оптимальної точки з кодованими координатами $(1; 1; 1)$ має такий вигляд:

$$X_1 = 600 + 200 = 800, \quad (4.69)$$

$$X_2 = 35 + 25 = 60, \quad (4.70)$$

$$X_3 = 1.0 + 0.5 = 1.5. \quad (4.71)$$

Отримані результати мають чітке фізичне обґрунтування та дозволяють зробити важливі висновки про характер перебігу процесу:

Отриманий результат означає:

– максимальна температура досягається при максимальних значеннях усіх факторів;
– збільшення температури середовища є найефективнішим способом прискорення нагрівання;
– збільшення часу також підвищує температуру, але менш ефективно;
– інтенсивність теплопередачі має додатковий вплив.

Для більш повної оцінки поведінки досліджуваної системи проведемо геометричний аналіз отриманої поверхні відгуку. Функція має монотонно зростаючий характер у межах області експерименту. Це означає, що:

– глобальний максимум знаходиться на межі області;
– внутрішнього максимуму у досліджуваному діапазоні немає.

Графічно це відповідає поверхні, яка зростає у напрямку точки (1,1,1).

На основі комплексного аналізу математичної моделі та фізичної інтерпретації результатів можна сформулювати такі практичні рекомендації:

- для максимізації температури необхідно використовувати максимальні параметри процесу;
- при обмеженнях (енергоспоживання, безпека) можливий компромісний режим;
- модель може бути використана для прогнозування результатів.

Таким чином, виконано повний аналіз математичної моделі, визначено характер впливу факторів, знайдено стаціонарну точку та встановлено, що оптимум знаходиться на межі області експерименту. Отримані результати мають практичне значення та можуть бути використані для оптимізації процесу нагрівання.

4.6 Висновки до розділу 4

У четвертому розділі розглянуто приклад застосування методів планування експериментів для оптимізації процесу нагрівання металевої деталі.

Сформульовано завдання, визначено об’єкт дослідження, обрано основні фактори, що впливають на процес нагрівання. Встановлено їхні границі змін і здійснено перехід до змінних у кодованих одиницях, що дозволило застосувати методи планування експериментів.

Сформовано повний факторний план експерименту залежно від обраних факторів, що передбачає всі можливі варіанти комбінацій рівнів змінних. Для кожного досліду розраховано значення функції відгуку, що дало змогу отримати повний набір вихідних даних для подальшого аналізу.

Опрацьовано отримані результати експерименту та побудовано математичну модель процесу у вигляді регресійного рівняння. Визначено всі коефіцієнти моделі та доведено її адекватність шляхом порівняння розрахункових і експериментальних значень.

Проведено детальний аналіз моделі, визначено ступінь впливу факторів на функцію відгуку та досліджено характер залежності. Розв’язано задачу пошуку оптимальних параметрів процесу, що послідовно, максимум функції відгуку досягається на границі області розгляду.

Отримані результати свідчать про ефективність застосування методів планування експериментів для дослідження та оптимізації технологічних процесів і демонструють можливості практичного їх використання за допомогою розробленої програмної реалізації[1–23].

ВИСНОВКИ

На основі системного аналізу розглянуто як планувати експерименти, розглянуто сучасні математичні методи їх планування, а також створено програмний засіб для автоматизації процесу експерименту.

Структурно робота складається з 4 розділів.

В 1 розділі представляються теоретичні основи планування експерименту, аналізуються критерії ефективності та існуючі підходи до моделювання у проблемній області.

2 розділ присвячено класифікації та порівняльному аналізу методів (повного, дробового факторного експерименту, методу поверхні відгуку тощо) та обґрунтуванню методики їх застосування для розв’язання практичних задач.

У 3 розділі наводиться опис процесу автоматизації, включаючи обґрунтування вибору інструментальних засобів, алгоритм і блок–схему роботи створеної програми та інструкцію користувача.

4 розділ розкриває практичну реалізацію розробленого підходу для оптимізації процесу нагрівання металевої деталі, аналіз, верифікацію та інтерпретацію отриманої математичної моделі.

У першому розділі розглядається суть планування експерименту, даються основні поняття, аналізується проблематика дослідження. Обґрунтовується актуальність застосування методів планування експериментів для підвищення ефективності досліджень та оптимізації технологічних процесів. Визначаються основні фактори, параметри та критерії ефективності експерименту, а також коротко описуються існуючі підходи до планування експерименту.

Другий розділ присвячено аналізу математичних методів планування експерименту, зокрема повних та дробових факторних експериментів, методу поверхні відгуку, оптимальних планів. Порівнюються ці методи та обґрунтовується доцільність їх використання у практичних задачах. Розробляються рекомендації для застосування математичних методів

планування експериментів: описуються вхідні дані, етапи проведення експерименту, методи обробки результатів та їх візуалізація.

У третьому розділі розглядається автоматизація процесу планування експерименту. Обґрунтовуються вибір мови програмування та середовища розробки, описуються використовувані бібліотеки та модулі. Розроблюється алгоритм роботи програми, описується її інтерфейс, функціональні можливості та особливості. Також наведена інструкція для кінцевого користувача, що полегшує практичне використання програмного продукту.

У четвертому розділі розглядаються приклади практичного застосування розробленої системи на задачі оптимізації процесу нагрівання металевої деталі. Сформульовані експериментальний план, проведені розрахунки, отримані значення функції відгуку. На основі отриманих даних побудована математична модель процесу та проведений її аналіз. Знайдені оптимальні значення параметрів, що забезпечують максимальну ефективність процесу.

Поставлена в роботі мета досягнута в повному обсязі. Основним практичним результатом роботи є розробка комплексної методики та спеціалізованого програмного забезпечення для автоматизованого планування експерименту. Застосування створеного інструментарію до процесу нагрівання металевої деталі дозволило визначити оптимальні режими термообробки, мінімізувати кількість необхідних натурних випробувань, суттєво знизити часові та матеріальні витрати, а також забезпечити високу точність і адекватність одержаних результатів..

Результати, отримані в роботі, можуть бути використані у наукових дослідженнях, навчальній діяльності, а також при розв’язанні реальних задач оптимізації технологічних процесів.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Box G. E. P., Hunter J. S., Hunter W. G. Statistics for Experimenters: Design, Innovation, and Discovery. 2nd ed. New York : Wiley, 2005. 633 p.

2. Montgomery D. C. Design and Analysis of Experiments. 8th ed. New York : John Wiley & Sons, 2013. 730 p.

3. Myers R. H., Montgomery D. C., Anderson–Cook C. M. Response Surface Methodology : Process and Product Optimization Using Designed Experiments. 4th ed. Wiley, 2016. 856 p.

4. Fisher R. A. The Design of Experiments. Edinburgh : Oliver and Boyd, 1935. 252 p.

5. Cochran W. G., Cox G. M. Experimental Designs. 2nd ed. Wiley, 1957. 611 p.

6. Ляпунов А. М. Математичні методи в технічних дослідженнях. Київ : Наукова думка, 2001. 312 с.

7. Box G. E. P., Wilson K. B. On the Experimental Attainment of Optimum Conditions. *Journal of the Royal Statistical Society*. 1951. Vol. 13. P. 1–45.

8. Atkinson A. C., Donev A. N., Tobias R. D. Optimum Experimental Designs, with SAS. Oxford University Press, 2007. 328 p.

9. Dean A., Voss D. Design and Analysis of Experiments. Springer, 1999. 742 p.

10. Lawson J. Design and Analysis of Experiments with R. Chapman & Hall/CRC, 2015. 620 p.

11. Seber G. A. F., Wild C. J. Nonlinear Regression. Wiley, 2003. 768 p..

12. Weisberg S. Applied Linear Regression. Wiley, 2005. 352 p.

13. Oliphant T. E. Guide to NumPy. USA : Trelgol Publishing, 2006. 380 p.

14. Virtanen P. et al. SciPy 1.0 : Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python. *Nature Methods*. 2020. Vol. 17. P. 261–272.

15. Chollet F. Deep Learning with Python. Manning Publications, 2017.

384 p.

16. Bishop C. M. Pattern Recognition and Machine Learning. Springer, 2006. 738 p.

17. Goodfellow I., Bengio Y., Courville A. Deep Learning. MIT Press, 2016. 775 p.

18. Документація Python : електронний ресурс. URL : https://www.python.org (дата звернення : 08.04.2026).

19. Документація NumPy : електронний ресурс. URL : https://numpy.org (дата звернення : 08.04.2026).

20. Документація SciPy : електронний ресурс. URL : https://scipy.org (дата звернення : 08.04.2026).

21. Документація Matplotlib : електронний ресурс. URL : https://matplotlib.org (дата звернення : 08.04.2026).

22. Документація Pandas : електронний ресурс. URL : https://pandas.pydata.org (дата звернення : 08.04.2026).

23. Документація Scikit–learn : електронний ресурс. URL : https://scikit–learn.org (дата звернення : 08.04.2026).

ДОДАТОК А

Код програми (Google Colab)

У даному додатку наведено програмну реалізацію системи планування експерименту, розроблену мовою Python та адаптовану для виконання у середовищі Google Colab. Програма забезпечує автоматизацію всіх етапів дослідження: формування експериментального плану, розрахунок коефіцієнтів математичної моделі, аналіз результатів та визначення оптимальних параметрів процесу.

Лістинг програми наведено нижче.

```
import numpy as np
import pandas as pd
import itertools
import matplotlib.pyplot as plt

print("=== СИСТЕМА ПЛАНУВАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ ===")

# ========================================
# КРОК 2. ВВЕДЕННЯ ДАНИХ
# ========================================

k = int(input("\nВведіть кількість факторів k: "))

X_min = []
X_max = []

print("\nВведіть межі факторів:")
```

```
for i in range(k):
mn = float(input(f"X{i+1}_min: "))
mx = float(input(f"X{i+1}_max: "))
X_min.append(mn)
X_max.append(mx)

X_min = np.array(X_min)
X_max = np.array(X_max)

X0 = (X_min + X_max) / 2
dX = (X_max –X_min) / 2

# ========================================
# КРОК 3. ВИБІР ПЛАНУ
# ========================================

print("\nТипи планів:")
print("1 –Повний факторний")
print("2 –Дробовий")
print("3 –Центрально–композиційний (ЦКП)")
print("4 –Бокса–Бенкена")
print("5 –D–оптимальний")
print("6 –A–оптимальний")
print("7 –E–оптимальний")
print("8 –G–оптимальний")

plan_type = int(input("Оберіть тип плану: "))

# —— Генерація плану ——
```

```
if plan_type == 1:
plan = np.array(list(itertools.product([–1, 1], repeat=k)))

elif plan_type == 2:
base = list(itertools.product([–1, 1], repeat=k–1))
plan = np.array([list(p) + [np.prod(p)] for p in base])

elif plan_type == 3:
alpha = float(input("Введіть alpha (рекомендовано 1.414): "))
factorial = list(itertools.product([–1, 1], repeat=k))
star = []
for i in range(k):
p = [0]*k
p[i] = alpha
star.append(p.copy())
p[i] = –alpha
star.append(p.copy())
center = [[0]*k]
plan = np.array(factorial + star + center)

elif plan_type == 4:
plan = []
for i in range(k):
for j in range(i+1, k):
for comb in itertools.product([–1, 1], repeat=2):
p = [0]*k
p[i], p[j] = comb
plan.append(p)
plan = np.array(plan)
```

```
else:
print("Оптимальний план: введіть кількість точок")
n_points = int(input("Кількість точок: "))
candidates = np.array(list(itertools.product([–1, 1], repeat=k)))
np.random.shuffle(candidates)
plan = candidates[:n_points]

N = len(plan)

df = pd.DataFrame(plan, columns=[f"x{i+1}" for i in range(k)])

# Взаємодії
for i in range(k):
for j in range(i+1, k):
df[f"x{i+1}x{j+1}"] = df[f"x{i+1}"] * df[f"x{j+1}"]

# Натуральні значення
for i in range(k):
df[f"X{i+1}"] = df[f"x{i+1}"] * dX[i] + X0[i]

print("\nМатриця плану:")
print(df)

# ========================================
# КРОК 4. ОТРИМАННЯ y
# ========================================

mode = input("\nРежим (1 –вручну, 2 –модель): ")

y = []
```

```
if mode == "1":
print("\nВведіть значення y:")
for i in range(N):
val = float(input(f"y{i+1}: "))
y.append(val)

elif mode == "2":
print("\nВведіть коефіцієнти:")

b0 = float(input("b0: "))
b = [float(input(f"b{i+1}: ")) for i in range(k)]

b_inter = {}
for i in range(k):
for j in range(i+1, k):
b_inter[(i, j)] = float(input(f"b{i+1}{j+1}: "))

def func(row):
val = b0
for i in range(k):
val += b[i] * row[f"x{i+1}"]
for (i, j), coef in b_inter.items():
val += coef * row[f"x{i+1}"] * row[f"x{j+1}"]
return val

y = df.apply(func, axis=1).values

else:
print("Помилка режиму!")
```

```
exit()

df["y"] = y

# ========================================
# КРОК 5. МОДЕЛЬ
# ========================================

X_matrix = np.ones((N, 1))

for i in range(k):
X_matrix = np.hstack((X_matrix, plan[:, i].reshape(–1, 1)))

for i in range(k):
for j in range(i+1, k):
X_matrix = np.hstack((
X_matrix,
(plan[:, i] * plan[:, j]).reshape(–1, 1)
))

Y = np.array(y).reshape(–1, 1)

B = np.linalg.inv(X_matrix.T @ X_matrix) @ X_matrix.T @ Y
B = B.flatten()

print("\nКоефіцієнти моделі:")
print(B)

# ========================================
# КРОК 6. АНАЛІЗ
```

```
# ========================================

Y_pred = X_matrix @ B
df["y_pred"] = Y_pred
df["error"] = df["y"] –df["y_pred"]

print("\nАналіз:")
print(df[["y", "y_pred", "error"]])

# ========================================
# КРОК 7. ВІЗУАЛІЗАЦІЯ
# ========================================

for i in range(k):
plt.scatter(df[f"x{i+1}"], df["y"])
plt.xlabel(f"x{i+1}")
plt.ylabel("y")
plt.title(f"y(x{i+1})")
plt.show()

if k >= 2:
x1 = np.linspace(–1, 1, 50)
x2 = np.linspace(–1, 1, 50)
X1, X2 = np.meshgrid(x1, x2)
Z = np.zeros_like(X1)

for i in range(len(x1)):
for j in range(len(x2)):
point = [X1[i,j], X2[i,j]] + [0]*(k–2)
```

```
x_vec = [1] + point
for a in range(k):
for b in range(a+1, k):
x_vec.append(point[a]*point[b])

Z[i,j] = np.array(x_vec) @ B

plt.contourf(X1, X2, Z)
plt.colorbar()
plt.title("Поверхня відгуку")
plt.show()

# ========================================
# КРОК 8. ОПТИМУМ
# ========================================

grid = np.linspace(–1, 1, 20)

best_y = –1e9
best_x = None

for point in itertools.product(grid, repeat=k):
x_vec = [1] + list(point)

for i in range(k):
for j in range(i+1, k):
x_vec.append(point[i]*point[j])

y_val = np.array(x_vec) @ B
```

```
if y_val > best_y:
best_y = y_val
best_x = point

print("\nОптимум (кодовані):", best_x)
print("Максимум:", best_y)

X_nat = np.array(best_x) * dX + X0
print("Оптимум (натуральні):", X_nat)

# ========================================
# КРОК 9. ЗАВЕРШЕННЯ
# ========================================

print("\n=== РОБОТА ЗАВЕРШЕНА ===")
```

ДОДАТОК Б

Результати програми (Google Colab)

Для перевірки роботи програми було використано дані, наведені у розділі 4.

Побудована програма для кваліфікаційної роботи доступна за посиланням: https://colab.research.google.com/drive/1PsYhKqZL9vlZh_jTFgknyP5DKG0yKIk9#scrollTo=wlVY3SPL3V59

На початковому етапі користувач запускає програму та ознайомлюється з базовим алгоритмом дій, що показано на рисунку Б.1.

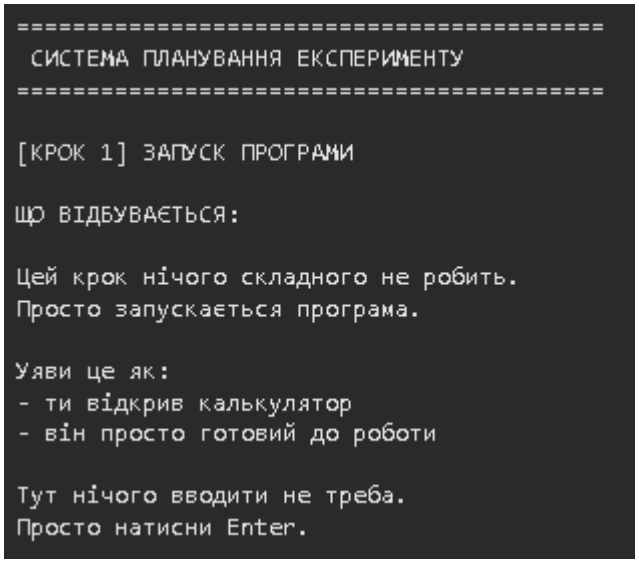


Рисунок Б.1 – Вікно запуска програми та початкові інструкції користувачеві

Після цього система переходить до визначення суті дослідження та аналізу впливу параметрів. Опис поняття факторів та приклади їхнього вибору наведено на рисунку Б.2.

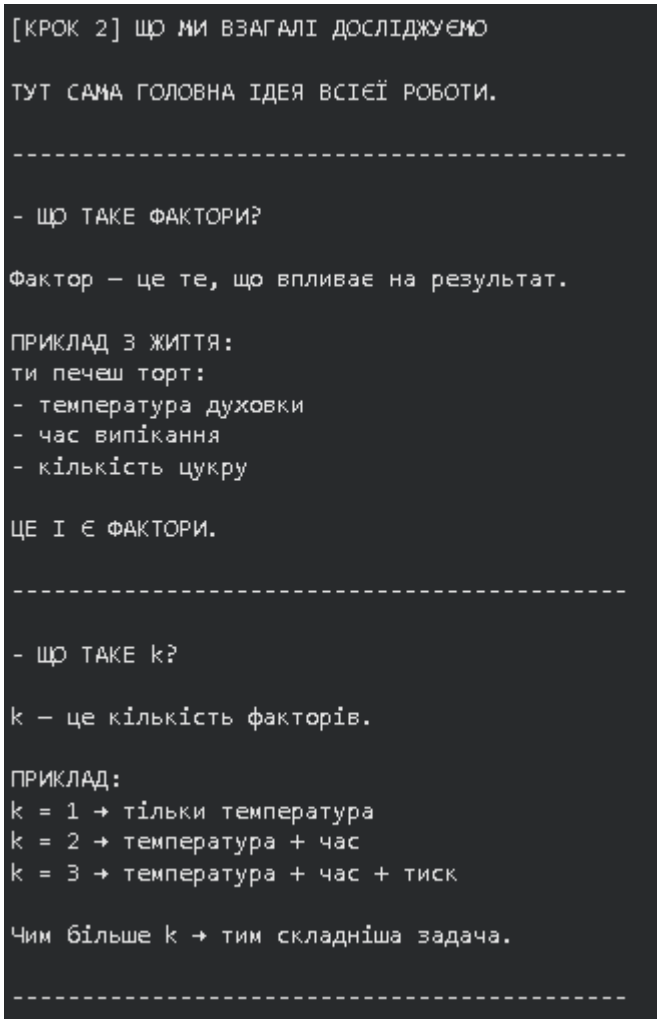


Рисунок Б.2 – Етап визначення та аналізу досліджуваних факторів

Кожен фактор безпосередньо впливає на кінцевий результат експерименту. На наступному етапі користувач задає граничні значення для кожного параметра. Процес введення мінімальних і максимальних меж та опис кодованих значень відображено на рисунку Б.3.

```
----------------------------------------

- ЩО МИ ЗАДАЄМО ДАЛІ?

Ми задаємо:
- мінімум значення фактора
- максимум значення фактора

ПРИКЛАД:
температура від 100 до 200

ЦЕ ОЗНАЧАЄ:
- ми НЕ перевіряємо все
- ми працюємо тільки в цьому діапазоні

----------------------------------------

Введіть кількість факторів k: 3

Тепер задаємо межі кожного фактора.

ПРИКЛАД:
Температура: 100 - 200
Тиск: 1 - 5

X1_min: 400
X1_max: 800
X2_min: 10
X2_max: 60
X3_min: 0.5
X3_max: 1.5

ПОЯСНЕННЯ:

X0 — це середина між мінімумом і максимумом
- "середнє нормальне значення"

dX — це половина діапазону
- використовується для переведення в кодовані значення
```

Рисунок Б.3 – Введення меж факторів та пояснення кодованих значень

На основі цих даних програма автоматично розраховує середнє нормальне значення та інтервал варіювання. На третьому кроці користувач обирає оптимальну стратегію для подальшого моделювання. Опис загального плану експерименту та характеристика повного плану представлені на рисунку Б.4.

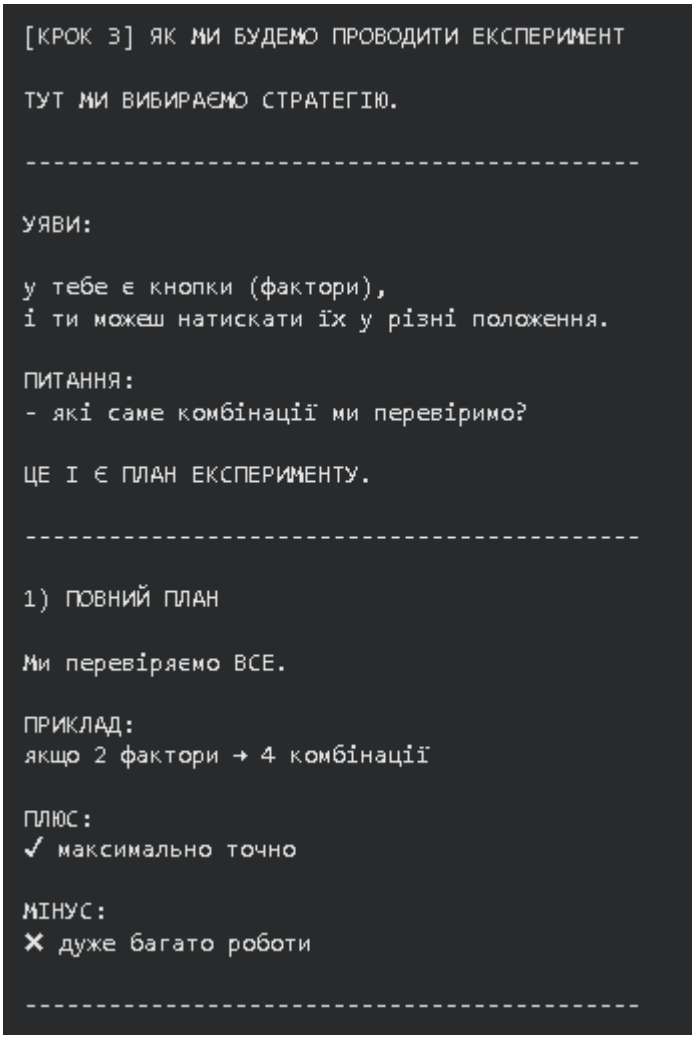


Рисунок Б.4 – Етап вибору стратегії та опис повного плану експерименту

Для оптимізації кількості дослідів програма пропонує альтернативні підходи. Опис дробового, складного (ЦКП) та плану Бокса–Бенкена наведено на рисунку Б.5.

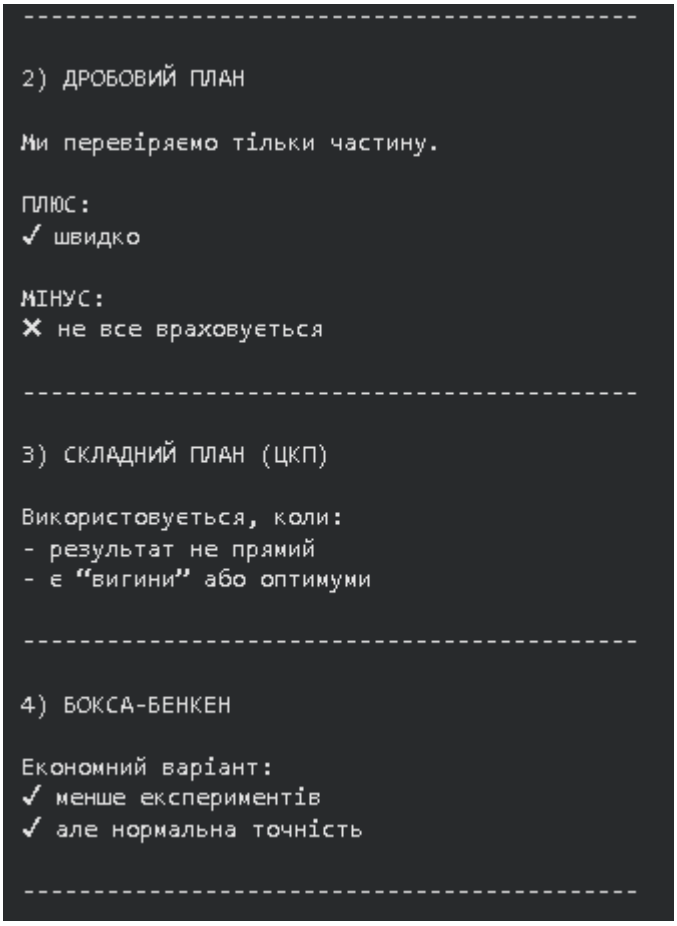


Рисунок Б.5 – Характеристика альтернативних планів проведення експерименту

Вибір конкретного плану залежить від поставлених вимог до точності та доступних ресурсів. Після аналізу всіх варіантів користувач обирає конкретний план моделювання та отримує згенеровану матрицю умов дослідів. Результат вибору першого плану та сформована матриця плану експерименту з реальними і кодованими значеннями факторів представлені на рисунку Б.6.

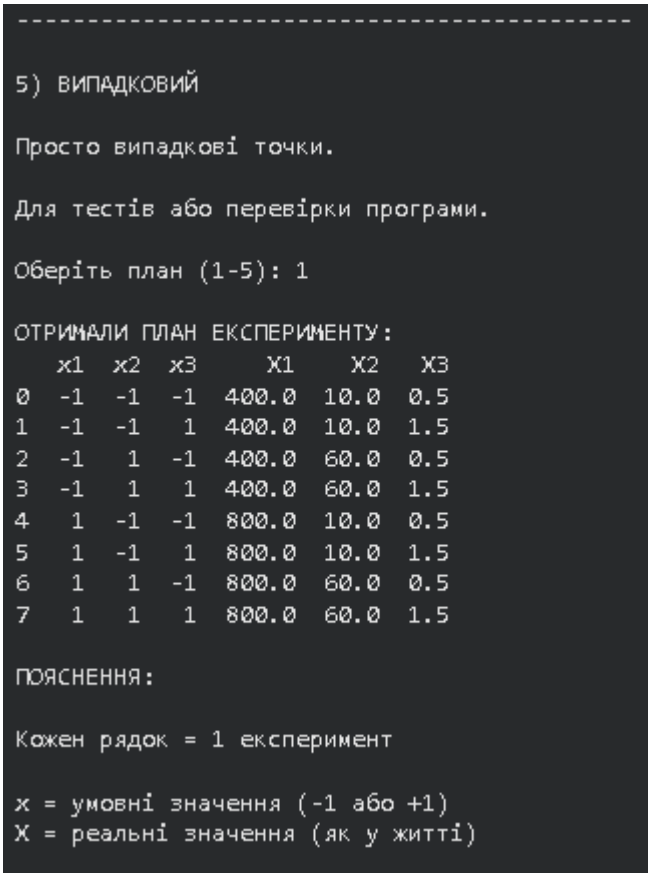


Рисунок Б.6 – Вибір плану моделювання та згенерована матриця експерименту

Кожен рядок отриманої таблиці відповідає одному окремому досліду із заданими фізичними параметрами. На четвертому кроці програма переходить до визначення відгуку системи, тобто результату експерименту, та способів його отримання. Процес вибору способу генерації даних за допомогою математичної моделі, а також задавання теоретичних коефіцієнтів і рівня випадкового шуму показано на рисунку Б.7.

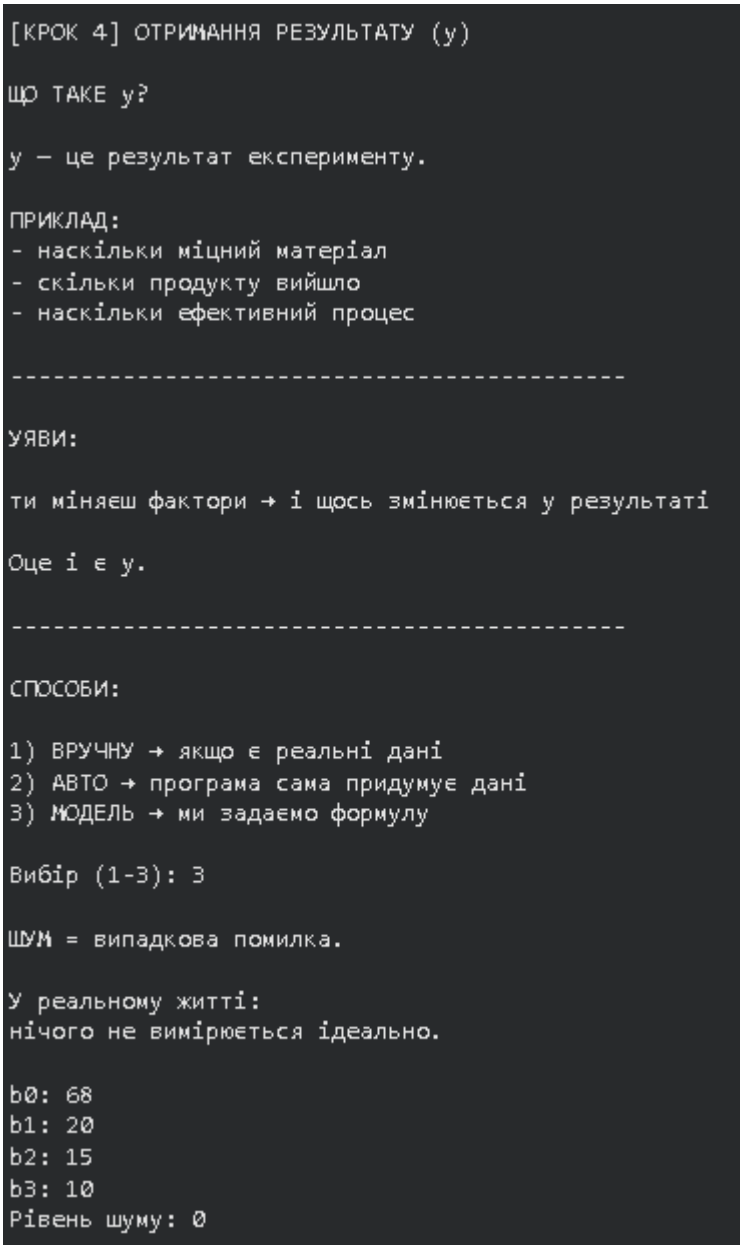


Рисунок Б.7 – Етап визначення відгуку експерименту та налаштування параметрів моделі

Задані коефіцієнти рівняння та нульовий рівень шуму дозволяють отримати ідеальні теоретичні значення для подальшого аналізу. На п’ятому кроці користувач обирає структуру математичної моделі, яка враховує або лінійні ефекти, або взаємодію факторів між собою. Вибір складнішої структури моделі та розраховані значення її коефіцієнтів представлені на рисунку Б.8.

```
[КРОК 5] МОДЕЛЬ

Ми намагаємось знайти формулу:

- як фактори впливають на y

1) проста модель
2) складніша (фактори впливають один на одного)

Вибір (1-2): 2

РЕЗУЛЬТАТ МОДЕЛІ:
b0 = 68.0
x1 = 20.0
x2 = 15.0
x3 = 10.0
x1x2 = -0.0
x1x3 = 0.0
x2x3 = 0.0
```

Рисунок Б.8 – Вибір структуру математичної моделі та розрахунок коефіцієнтів ефектів взаємодії

Отримані оцінки коефіцієнтів дозволяють перейти до статистичного оцінювання якості побудованої моделі. На шостому кроці програма виконує аналіз точності моделювання за допомогою розрахунку критеріїв MSE та коефіцієнта детермінації. Результати розрахунку показників точності та величини помилки наведено на рисунку Б.9.

```
[КРОК 6] АНАЛІЗ

MSE = помилка (менше = краще)
R² = точність (ближче до 1 = краще)

MSE = 0.0
R² = 1.0
```

Рисунок Б.9 – Статистичний аналіз якості та оцінка точності отриманої моделі

Значення коефіцієнта детермінації свідчить про високу адекватність побудованої математичної залежності. На сьомому кроці програма виконує графічну візуалізацію отриманих результатів моделювання для порівняння експериментальних даних із теоретичними. Графік залежності реальних точок експерименту та лінії ідеальної моделі представлено на рисунку Б.10.

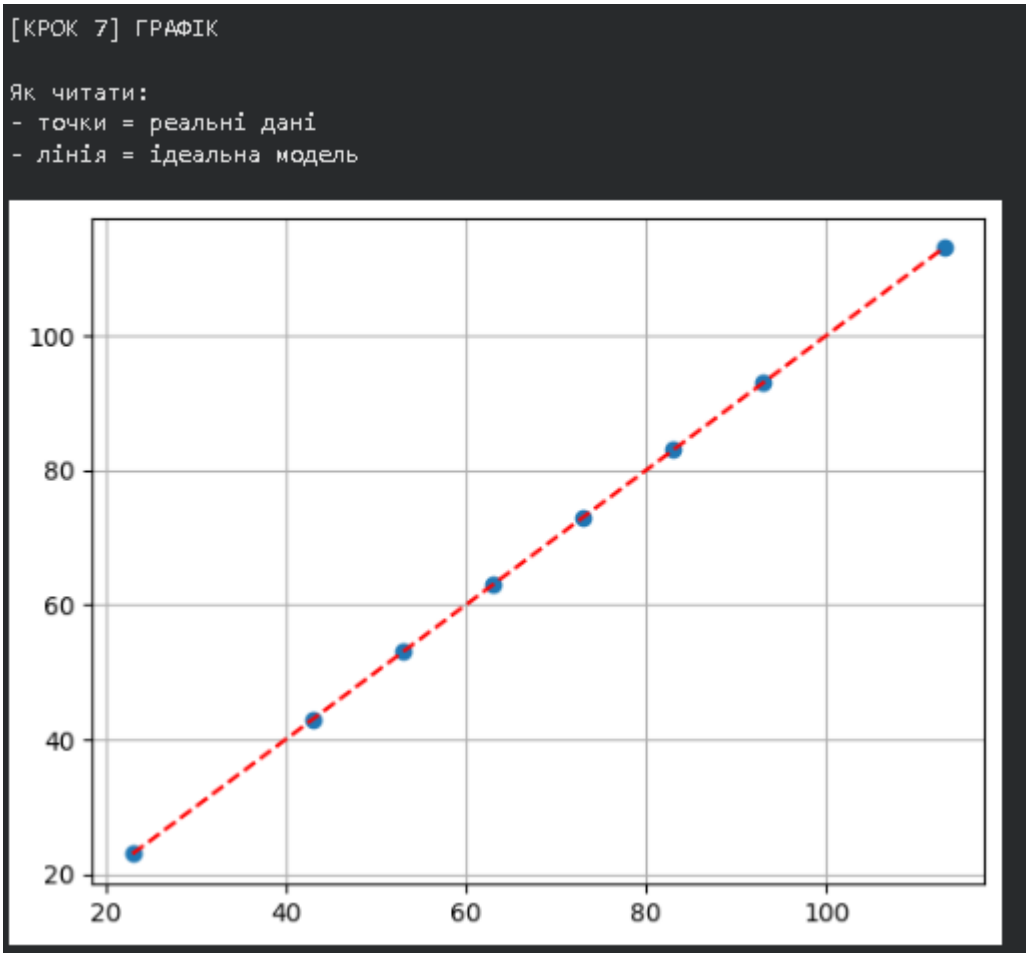


Рисунок Б.10 – Графік порівняння експериментальних даних та ідеальної моделі

Візуальний аналіз підтверджує точний збіг розрахункових та експериментальних значень. На завершальних етапах система здійснює пошук оптимальних умов процесу та виводить фінальне повідомлення. Результати визначення максимального значення відгуку на кроці 8 та завершення роботи програми на кроці 9 наведено на рисунку Б.11.

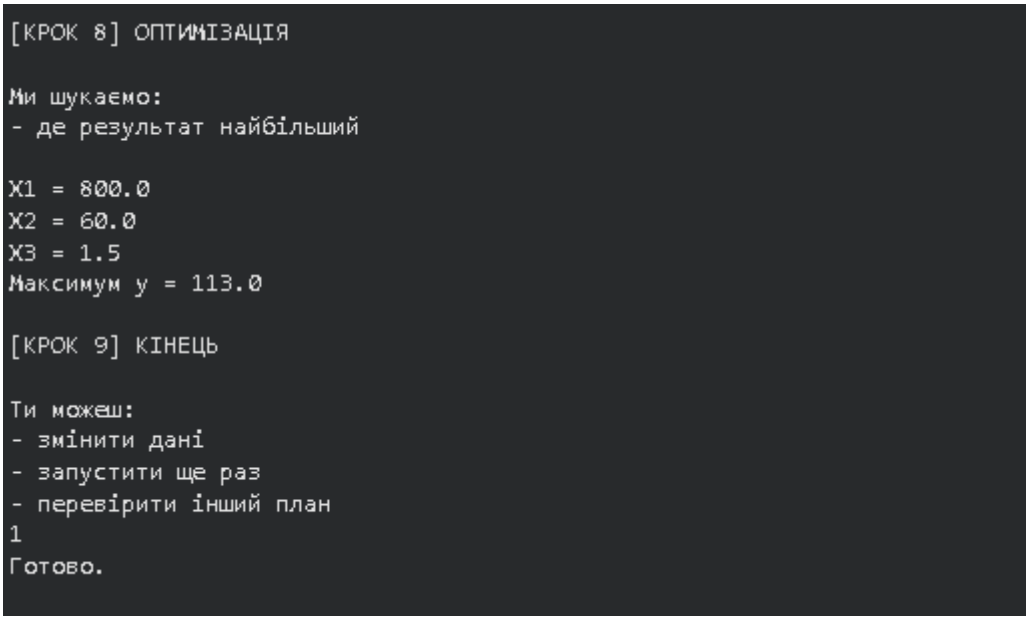


Рисунок Б.11 – Вікно результатів оптимізації та завершення роботи програми

Результати завершення обчислень та успішного виконання алгоритму в середовищі Google Colab представлені на рисунку Б.11.

Після завершення всіх розрахункових кроків та оптимізації програма виводить підсумкові дані моделювання.

У результаті виконання програми отримано:

– матрицю експериментального плану;
– значення функції відгуку;
– кількість факторів: $k = 3$;
– межі факторів:

$$X_1 \in [400; 800], \qquad X_2 \in [10; 60], \qquad X_3 \in [0.5; 1.5],$$

– коефіцієнти моделі:

$$b_0 = 68, \qquad b_1 = 20, \qquad b_2 = 15, \qquad b_3 = 10$$

У результаті виконання програми отримано:

– матрицю експериментального плану;
– значення функції відгуку;
– коефіцієнти регресійної моделі (які близькі до теоретичних);
– графіки залежності $y(x_i)$;
– поверхню відгуку;
– оптимальні параметри процесу.

Оптимальні значення:

$$x_1 = 1, \qquad x_2 = 1, \qquad x_3 = 1$$

у натуральному вигляді:

$$X_1 = 800, \qquad X_2 = 60, \qquad X_3 = 1.5$$

Максимальне значення функції відгуку:

$$y_{max} = 113$$

Отримані результати повністю узгоджуються з розрахунками, наведеними у розділі 4, що підтверджує коректність роботи програми.