Краткие сообщения по физике № 2 февраль 1972

ОБ ОДНОЙ МЕТОДИКЕ ПОЛУЧЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА НА ОСНОВЕ ЭКСТРЕМАЛЬНОГО ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

А. Г. Баланов, А. И. Исаков,
Г. Н. Соловьев, В. Д. Чалый

Методы планирования эксперимента /I/ находят все более широкое применение в различных областях науки и техники.

Уже есть первые и весьма удачные опыты применения /2,3/ такого подхода для управления линейными и циклическими ускорителями элементарных частиц с помощью электронных вычислительных машин (ЭВМ).

В настоящее время хорошо разработаны методы, позволяющие получать математические модели объектов или устройств до второго порядка включительно /I/.

Постановка новых задач, связанных с проектированием и управлением таким сложными физическими объектами, как оптические квантовые генераторы, линейные и циклические ускорители элементарных частиц, термоядерные установки и т.д., требует повышения порядка уравнений, описывающих эти объекты.

В настоящей работе предлагается достаточно простой ортогональный план, с помощью которого легко получить статическую математическую модель объекта третьего порядка с использованием метода планирования эксперимента. Применение этого плана на практике значительно расширяет возможности исследования и управления сложных физических объектов с помощью ЭВМ.

Уравнение регрессии 3-го порядка имеет вид

$$Y = b_o + \sum_{i=1}^{n} b_i x_i + \sum_{i<j}^{n} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} b_{ii} x_i^2 + \sum_{i<j<k}^{n} b_{ijk} x_i x_j x_k + \sum_{i=1}^{n} b_{iii} x_i^3, \qquad (I)$$

где Y – функция отклика; x_i – независимые переменные; b_o – свободный член уравнения регрессии; b_i; b_{ij}; b_{ii}; b_{ijk}; b_{iii} – коэффициенты регрессии при линейных членах, парных взаимодействиях, квадратных членах, тройных взаимодействиях и кубичных членах соответственно.

За основу при построении плана 3-го порядка был взят ортогональный центральный композиционный план (ЦКП) с некоторыми изменениями.

Для большей наглядности рассмотрим двумерный случай. Вместо уровней варьирования переменных $\pm I$ возьмем уровни $\pm c$ и к точкам ядра $\pm c$ добавим ядро с уровнем $\pm a$ (рис. I). Уровни варьирования переменных $\pm a$ и $\pm c$ не строго фиксированные, поскольку для обеспечения ортогональности, при разном числе переменных, соотношение между a и c должно быть вполне определенным.

В таблице I приведена матрица для расчета коэффициентов уравнения регрессии для трех переменных ($n = 3$). В общем случае число опытов можно определить по формуле:

$$N = 2^{n+1} + 2n + 1. \qquad (2)$$

Проверим, выполняется ли требование ортогональности матрицы. Поскольку количество величин $+c$, $+a$, $+\alpha$ и $-c$, $-a$, $-\alpha$ в столбцах матрицы выбрано поровну, то выполняются следующие равенства:

$$\sum_{u=1}^{N} x_{ou}x_{iu} = o \qquad i = 1,2\ldots n, \qquad (3)$$

$$\sum_{u=1}^{N} x_{ou}(x_{iu}x_{ju}) = o \qquad i<j \;\; j = 2,3\ldots n, \qquad (4)$$

$$\sum_{u=1}^{N} x_{ou}(x_{iu}x_{ju}x_{ku}) = o \qquad i<j<k \;\; k = 3,4\ldots n, \qquad (5)$$

$$\sum_{u=1}^{N} x_{ou}(x_{iu}^{3}) = o \qquad i = 1,2\ldots n. \qquad (6)$$

Проверка ортогональности остальных столбцов матрицы по аналогии с формулами (3)-(6) позволяет установить следующее:

Таблица I

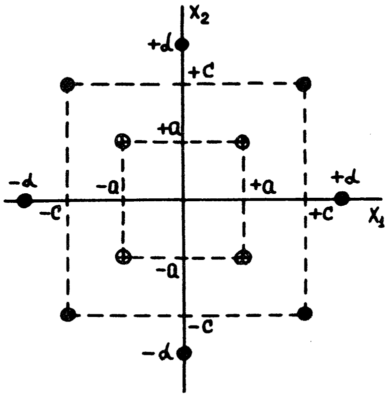
Матрица типа $N = 2^{n+1} + 2n + 1$ $(n = 3)$ для расчета коэффициентов уравнения регрессии третьего порядка.

№ п/п	X_0	X_1	X_2	X_3	X_1X_2	X_1X_3	X_2X_3	X_1^2	X_2^2	X_3^2	$X_1X_2X_3$	X_1^3	X_2^3	X_3^3
1	+1	$-c$	$-c$	$-c$	$+c^2$	$+c^2$	$+c^2$	c^2	c^2	c^2	$-c^3$	$-c^3$	$-c^3$	$-c^3$
2	+1	$+c$	$-c$	$-c$	$-c^2$	$-c^2$	$+c^2$	c^2	c^2	c^2	$+c^3$	$+c^3$	$-c^3$	$-c^3$
3	+1	$-c$	$+c$	$-c$	$-c^2$	$+c^2$	$-c^2$	c^2	c^2	c^2	$+c^3$	$-c^3$	$+c^3$	$-c^3$
4	+1	$+c$	$+c$	$-c$	$+c^2$	$-c^2$	$-c^2$	c^2	c^2	c^2	$-c^3$	$+c^3$	$+c^3$	$-c^3$
5	+1	$-c$	$-c$	$+c$	$+c^2$	$-c^2$	$-c^2$	c^2	c^2	c^2	$+c^3$	$-c^3$	$+c^3$	$+c^3$
6	+1	$+c$	$-c$	$+c$	$-c^2$	$+c^2$	$-c^2$	c^2	c^2	c^2	$-c^3$	$+c^3$	$-c^3$	$+c^3$
7	+1	$-c$	$+c$	$+c$	$-c^2$	$-c^2$	$+c^2$	c^2	c^2	c^2	$-c^3$	$-c^3$	$-c^3$	$+c^3$
8	+1	$+c$	$+c$	$+c$	$+c^2$	$+c^2$	$+c^2$	c^2	c^2	c^2	$+c^3$	$+c^3$	$+c^3$	$+c^3$
9	+1	$-a$	$-a$	$-a$	$+a^2$	$+a^2$	$+a^2$	a^2	a^2	a^2	$-a^3$	$-a^3$	$-a^2$	$-a^3$
10	+1	$+a$	$-a$	$-a$	$-a^2$	$-a^2$	$+a^2$	a^2	a^2	a^2	$+a^3$	$+a^3$	$-a^2$	$-a^3$
11	+1	$-a$	$+a$	$-a$	$-a^2$	$+a^2$	$-a^2$	a^2	a^2	a^2	$-a^3$	$-a^3$	$+a^2$	$-a^3$
12	+1	$+a$	$+a$	$-a$	$+a^2$	$-a^2$	$-a^2$	a^2	a^2	a^2	$+a^3$	$+a^3$	$+a^2$	$-a^3$
13	+1	$-a$	$-a$	$+a$	$+a^2$	$-a^2$	$-a^2$	a^2	a^2	a^2	$-a^3$	$-a^3$	$-a^2$	$+a^3$
14	+1	$+a$	$-a$	$+a$	$-a^2$	$+a^2$	$-a^2$	a^2	a^2	a^2	$+a^3$	$+a^3$	$-a^2$	$+a^3$
15	+1	$-a$	$+a$	$+a$	$-a^2$	$-a^2$	$+a^2$	a^2	a^2	a^2	$-a^3$	$-a^3$	$+a^2$	$+a^3$
16	+1	$+a$	$+a$	$+a$	$+a^2$	$+a^2$	$+a^2$	a^2	a^2	a^2	$+a^3$	$+a^3$	$+a^2$	$+a^3$
17	+1	$-\alpha$	0	0	0	0	0	α^2	0	0	0	$-\alpha^3$	0	0
18	+1	$+\alpha$	0	0	0	0	0	α^2	0	0	0	$+\alpha^3$	0	0
19	+1	0	$-\alpha$	0	0	0	0	0	α^2	0	0	0	$-\alpha^3$	0
20	+1	0	$+\alpha$	0	0	0	0	0	α^2	0	0	0	$+\alpha^3$	0
21	+1	0	0	$-\alpha$	0	0	0	0	0	α^2	0	0	0	$-\alpha^3$
22	+1	0	0	$+\alpha$	0	0	0	0	0	α^2	0	0	0	$+\alpha^3$
23	+1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

$$\sum_{u=1}^{N} x_{ou}(x_{iu}^2) \neq 0 \qquad i = 1,2...n, \tag{7}$$

$$\sum_{u=1}^{N} x_{iu}(x_{iu}^3) \neq 0 \qquad j = 1,2...n, \tag{8}$$

$$\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2(x_{ju}^2) \neq 0 \qquad i \neq j \; i = 1,2...(n-1). \tag{9}$$



Р и с. I. Расположение точек в факторном пространстве для двумерного случая: • – точки ЦКП; о – точки плана третьего порядка; α – "звездные точки".

Для выполнения условий ортогональности, т.е. равенства нулю выражений (7)-(9), необходимо сделать некоторые замены переменных, а именно, вместо x_{iu}^2 возьмем $x_{iu}^2 - \eta$, а вместо x_{iu}^3 возьмем $(x_{iu}^2 - \xi)x_{iu}$. Поставим в выражения (7)-(9) преобразованные значения x_{iu}^2 и x_{iu}^3 и потребуем, чтобы эти выражения равнялись нулю. Проведя соответствующие преобразования, получим матрицу для расчетов коэффициентов уравнения регрессии X (таблица 2), ортогональную при выполнении условий

$$\eta = \sqrt{\frac{2^n}{N}(c^4 + a^4)}, \qquad а)$$

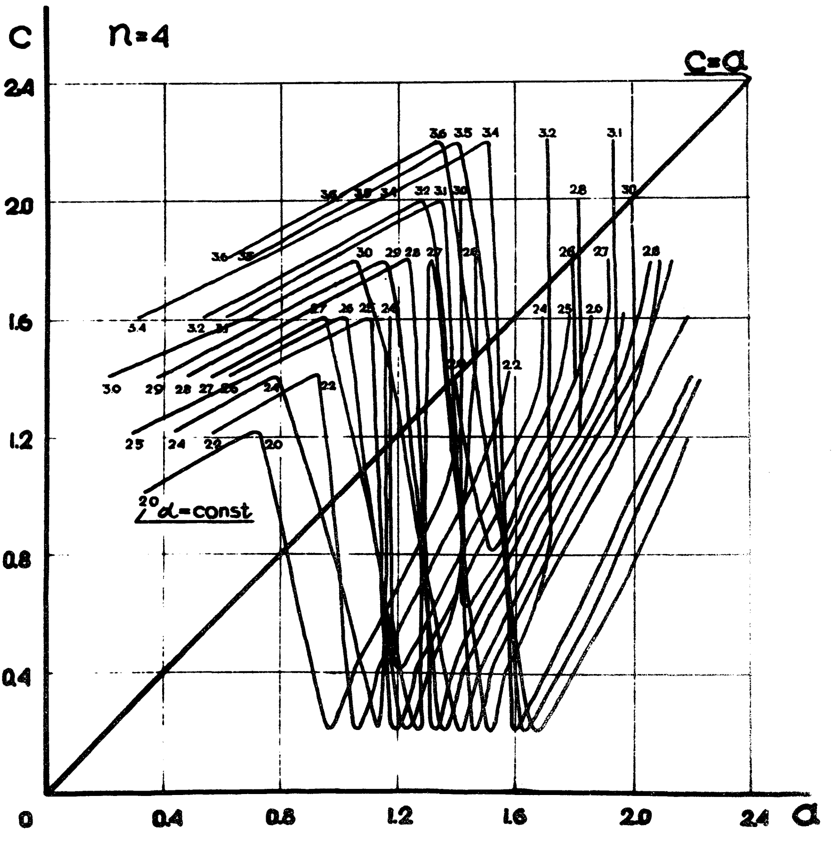
$$\xi = \frac{2^n(c^4 + a^4) + 2\alpha^4}{N\eta}, \qquad б) \qquad (10)$$

$$\left[2^{n-1}(c^2 + a^2) + \alpha^2\right]^2 = 2^{n-2}N(c^4 + a^4), \qquad в)$$

Таблица 2

Ортогональная матрица типа $N = 2^{n+1} + 2n + 1$ $(n = 3)$ для расчета коэффициентов уравнения регрессии третьего порядка.

№ п/п	X_0	X_1	X_2	X_3	X_1X_2	X_1X_3	X_2X_3	$X_1^2-\eta$	$X_2^2-\eta$	$X_3^2-\eta$	$X_1X_2X_3$	$X_1(X_1^2-\xi)$	$X_2(X_2^2-\xi)$	$X_3(X_3^2-\xi)$
1	+1	$-c$	$-c$	$-c$	$+c^2$	$+c^2$	$+c^2$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$-c^3$	$-c(c^2-\xi)$	$-c(c^2-\xi)$	$-c(c^2-\xi)$
2	+1	$+c$	$-c$	$-c$	$-c^2$	$-c^2$	$+c^2$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$+c^3$	$+c(c^2-\xi)$	$-c(c^2-\xi)$	$-c(c^2-\xi)$
3	+1	$-c$	$+c$	$-c$	$-c^2$	$+c^2$	$-c^2$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$+c^3$	$-c(c^2-\xi)$	$+c(c^2-\xi)$	$-c(c^2-\xi)$
4	+1	$+c$	$+c$	$-c$	$+c^2$	$-c^2$	$-c^2$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$-c^3$	$+c(c^2-\xi)$	$+c(c^2-\xi)$	$-c(c^2-\xi)$
5	+1	$-c$	$-c$	$+c$	$+c^2$	$-c^2$	$-c^2$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$+c^3$	$-c(c^2-\xi)$	$-c(c^2-\xi)$	$+c(c^2-\xi)$
6	+1	$+c$	$-c$	$+c$	$-c^2$	$+c^2$	$-c^2$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$-c^3$	$+c(c^2-\xi)$	$-c(c^2-\xi)$	$+c(c^2-\xi)$
7	+1	$-c$	$+c$	$+c$	$-c^2$	$-c^2$	$+c^2$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$-c^3$	$-c(c^2-\xi)$	$+c(c^2-\xi)$	$+c(c^2-\xi)$
8	+1	$+c$	$+c$	$+c$	$+c^2$	$+c^2$	$+c^2$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$c^2-\eta$	$+c^3$	$+c(c^2-\xi)$	$+c(c^2-\xi)$	$+c(c^2-\xi)$
9	+1	$-a$	$-a$	$-a$	$+a^2$	$+a^2$	$+a^2$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$-a^3$	$-a(a^2-\xi)$	$-a(a^2-\xi)$	$a(a^2-\xi)$
10	+1	$+a$	$-a$	$-a$	$-a^2$	$-a^2$	$+a^2$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$+a^3$	$+a(a^2-\xi)$	$-a(a^2-\xi)$	$-a(a^2-\xi)$
11	+1	$-a$	$+a$	$-a$	$-a^2$	$+a^2$	$-a^2$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$+a^3$	$-a(a^2-\xi)$	$+a(a^2-\xi)$	$-a(a^2-\xi)$
12	+1	$+a$	$+a$	$-a$	$+a^2$	$-a^2$	$-a^2$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$+a^3$	$+a(a^2-\xi)$	$+a(a^2-\xi)$	$-a(a^2-\xi)$
13	+1	$-a$	$-a$	$+a$	$+a^2$	$-a^2$	$-a^2$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$+a^3$	$-a(a^2-\xi)$	$-a(a^2-\xi)$	$+a(a^2-\xi)$
14	+1	$+a$	$-a$	$+a$	$-a^2$	$+a^2$	$-a^2$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$-a^3$	$+a(a^2-\xi)$	$-a(a^2-\xi)$	$+a(a^2-\xi)$
15	+1	$-a$	$+a$	$+a$	$-a^2$	$-a^2$	$+a^2$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$-a^3$	$-a(a^2-\xi)$	$+a(a^2-\xi)$	$+a(a^2-\xi)$
16	+1	$+a$	$+a$	$+a$	$+a^2$	$+a^2$	$+a^2$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$a^2-\eta$	$+a^3$	$+a(a^2-\xi)$	$+a(a^2-\xi)$	$+a(a^2-\xi)$
17	+1	$-\alpha$	0	0	0	0	0	$\alpha^2-\eta$	$-\eta$	$-\eta$	0	$-\alpha(\alpha^2-\xi)$	0	0
18	+1	$+\alpha$	0	0	0	0	0	$\alpha^2-\eta$	$-\eta$	$-\eta$	0	$+\alpha(\alpha^2-\xi)$	0	0
19	+1	0	$-\alpha$	0	0	0	0	$-\eta$	$\alpha^2-\eta$	$-\eta$	0	0	$-\alpha(\alpha^2-\xi)$	0
20	+1	0	$+\alpha$	0	0	0	0	$-\eta$	$\alpha^2-\eta$	$-\eta$	0	0	$+\alpha(\alpha^2-\xi)$	0
21	+1	0	0	$-\alpha$	0	0	0	$-\eta$	$-\eta$	$\alpha^2-\eta$	0	0	0	$-\alpha(\alpha^2-\xi)$
22	+1	0	0	$+\alpha$	0	0	0	$-\eta$	$-\eta$	$\alpha^2-\eta$	0	0	0	$+\alpha(\alpha^2-\xi)$
23	+1	0	0	0	0	0	0	$-\eta$	$-\eta$	$-\eta$	0	0	0	0



Р и с. 2. График зависимости параметров плана третьего порядка $c = f(a)$, $\alpha = \mathrm{const}$ для числа переменных $n = 3$.

где N рассчитывается по формуле (2).

Проверим, например, ортогональность столбцов кубичных членов с учетом сделанных замен переменных

$$\sum_{u=1}^{N}(x_{iu}^2 - \xi)x_{iu}(x_{ju}^2 - \xi)x_{ju} = \sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2\, x_{ju}^2\, x_{iu}\, x_{ju} -$$

$$- \xi \sum_{u=1}^{N} x_{ju}^2 x_{iu} x_{ju} - \xi \sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 x_{iu} x_{ju} + \xi^2 \sum_{u=1}^{N} x_{iu} x_{ju} = 0,$$

поскольку каждый составляющий член этого выражения равен нулю.

В результате сделанных замен переменных для квадратных и кубичных членов, уравнение регрессии 3-го порядка запишется в следующем виде:

$$Y = b_o' + \sum_{i=1}^{n} b_i' x_i + \sum_{i<j}^{n} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} b_{ii}(x_i^2 - \eta) +$$

$$+ \sum_{i<j<k}^{n} b_{ijk} x_i x_j x_k + \sum_{i=1}^{n} b_{iii}(x_i^2 - \xi)x_i. \qquad (II)$$

Чтобы привести уравнение регрессии (II) к стандартной форме (I), введем следующие обозначения:

$$\left.\begin{aligned} b_o &= b_o' - \eta \sum_{i=1}^{n} b_{ii} \\ b_i &= b_i' - \xi b_{iii} \end{aligned}\right\} \quad i = 1,2\ldots n. \qquad (I2)$$

Так как матрица (таблица 2) ортогональна, то на основании общей теории регрессионного анализа /I/ можно записать формулы для расчета коэффициентов уравнения регрессии, выразив знаменатели формул через параметры матрицы

$$b_o' = \frac{\sum_{u=1}^{N} x_{ou} Y_u}{2^{n+1} + 2n + 1}, \qquad (I3)$$

$$b_i' = \frac{\sum_{u=1}^{N} x_{iu} Y_u}{2^n(c^2 + a^2) + 2\alpha^2} \qquad i = 1,2\ldots n, \qquad (I4)$$

$$b_{ij} = \frac{\sum_{u=1}^{N}(x_{iu}x_{ju})Y_u}{2^n(c^4 + a^4)} \qquad i<j \quad j = 2,3\ldots n, \qquad (15)$$

$$b_{ii} = \frac{\sum_{u=1}^{N}(x_{iu}^2 - \eta)Y_u}{2^n\left[(c^2 - \eta)^2 + (a^2 - \eta)^2\right] + 2(\alpha^2 - \eta)^2 + (2n - 1)\eta^2}$$

$$i = 1,2\ldots n, \quad (16)$$

$$b_{ijk} = \frac{\sum_{u=1}^{N}(x_{iu}\,x_{ju}x_{ku})Y_u}{2^n(c^6 + a^6)} \qquad i<j<k \quad k = 3,4\ldots n, \qquad (17)$$

$$b_{iii} = \frac{\sum_{u=1}^{N}\left[(x_{iu}^2 - \xi)x_{iu}\right]Y_u}{2^n\left[(c^2 - \xi)^2c^2 + (a^2 - \xi)^2a^2\right] + 2(\alpha^2 - \xi)^2\alpha^2} \qquad i = 1,2\ldots n.$$

$$(18)$$

Были построены графики $c = f(a)$, $\alpha = \text{const}$ для числа переменных $n = 3$-8 (рис. 2). По этим графикам легко выбрать параметры плана a, c и α.

Проверка работоспособности созданного ортогонального плана третьего порядка $N = 2^{n+1} + 2n + 1$ была осуществлена на примере получения математических моделей электронной пушки линейного ускорителя электронов на энергию 50 мэв ФИАН СССР.

Предложенный и разработанный ортогональный план 3-го порядка может быть применен для построения математических моделей различных физических объектов.

Поступила в редакцию
2 декабря 1971 г.

Литература

1. В. В. Налимов, Н. А. Чернова. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов. М., "Наука", 1965 г.
2. А. И. Исаков, Г. Н. Соловьев. Краткие сообщения по физике, № 6, 58 (1971).

3. Л. Д. Забродин, В. Д. Никитин, В. В. Пилюгин, Г. Н. Соловьев. К вопросу применения ЦВМ для управления ввода пучка в камеру циклического ускорителя. Сб. "Применение цифровых и аналоговых вычислительных машин в ядерной физике и технике". М, Атомиздат, 1971 г.