

Khái niệm qui hoạch thực nghiệm

Chương 1

- Khái niệm chung về qui hoạch thực nghiệm
- Nguyên tắc cơ bản của qui hoạch thực nghiệm
- Các bước thực hiện qui hoạch
- Các phương pháp nghiên cứu
- Ứng dụng

1.1. Khái niệm chung

- **Thực nghiệm** là một quá trình hoặc một nghiên cứu mà kết quả là thu được các số liệu, thông tin. Các kết quả này trước đó chưa biết. Thường về mặt thống kê, các thực nghiệm được tiến hành trong các điều kiện mà nhà nghiên cứu có thể quản lý và kiểm soát được các yếu tố không liên quan đến mục tiêu nghiên cứu.
- **Qui hoạch thực nghiệm** là một quá trình hoạch định nghiên cứu đạt các mục tiêu xác định. Hoạch định đúng rất quan trọng nhằm đảm bảo đúng loại dữ liệu, kích thước mẫu đủ lớn để trả lời được các câu hỏi liên quan càng rõ ràng, càng hiệu quả càng tốt

Qui hoạch thực nghiệm nhằm:

- Giảm thiểu đáng kể số lượng thực nghiệm cần thiết. Giảm thời gian và phí tổn tiến hành thực nghiệm
- Thu thập được nhiều thông tin hiệu quả và rõ ràng hơn khi đánh giá được tương tác giữa các yếu tố và ảnh hưởng của chúng đến đáp ứng. Xây dựng được mô hình toán học thống kê thực nghiệm; đánh giá được sai số trong tổng thể bối cảnh thực nghiệm; đánh giá ảnh hưởng của các yếu tố với mức độ tin cậy cần thiết
- Cho phép xác định được điều kiện tối ưu của đối tượng nghiên cứu khá chính xác bằng các công cụ toán học thay cho cách giải gần đúng; tìm được tối ưu cục bộ.

- Quá trình phát triển khảo sát thực nghiệm từ cổ điển với phương pháp thử sai đến các qui hoạch thí nghiệm gắn kết nhiều với toán học thống kê.
- Quá trình phát triển này tiến hành từ tiến hành thực nghiệm dọ dẫm từng bước thực nghiệm tiến đến hoạch định tổng thể trước khi tiến hành thực nghiệm. Cách làm này cho phép rút ngắn thời gian và có kết quả đánh giá tổng thể hơn.

Liên quan đến qui hoạch thực nghiệm có các loại

- **Thực nghiệm sàng lọc**: có nhiệm vụ xác định các yếu tố quan trọng đối với hệ thống thực nghiệm
- **Thực nghiệm mô phỏng**: liên quan đến việc xây dựng mô hình toán học diễn tả sự vận hành của hệ thống
- **Thực nghiệm tối ưu**: có thể xem đây là bước phát triển của thực nghiệm mô phỏng. Nhiệm vụ của loại thực nghiệm này là xác định được điểm tối ưu của hệ thống

1.2. Nguyên tắc cơ bản

- Nguyên tắc không lấy toàn bộ đầu vào
- Nguyên tắc phức tạp dần mô hình toán học
- Nguyên tắc đối chứng với sai số
- Nguyên tắc ngẫu nhiên hóa
- Nguyên tắc tối ưu hóa qui hoạch thực nghiệm

Nguyên tắc không lấy toàn bộ trạng thái đầu vào

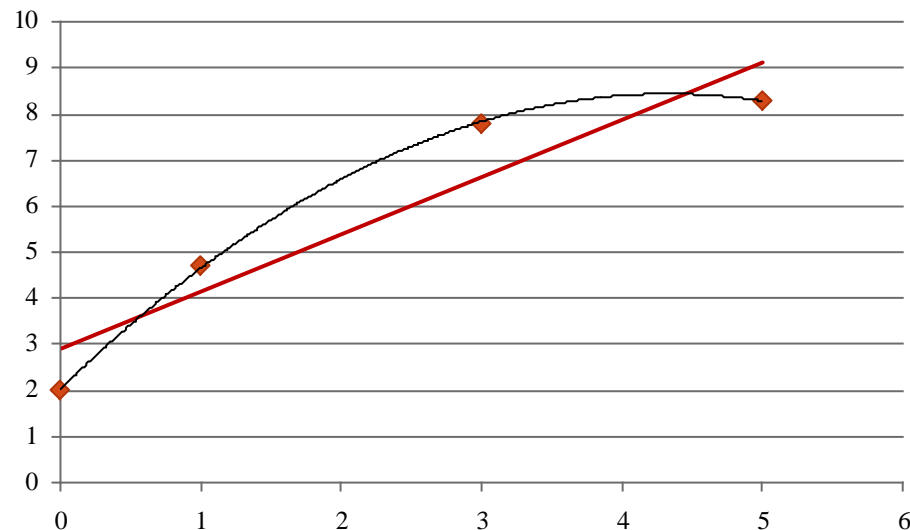
- Lấy biến số rời rạc
- Chọn mức biến đổi thích hợp
 - Sự lựa chọn cần có cơ sở toán học; gắn liền với hàm mô phỏng dạng bề mặt đáp ứng
 - Dạng hàm mô phỏng thường là bậc một hoặc hai, do đó mức biến đổi thường là hai hoặc ba.

Nguyên tắc phức tạp dần mô hình toán học

- Quan điểm thực nghiệm có trình tự
- Khi chưa có đầy đủ thông tin thì sử dụng mô hình đơn giản để giảm thiểu thời gian và chi phí
- Việc kiểm tra tính tương thích của mô hình là cần thiết để quyết định tiến hành mô hình phức tạp hơn

Nguyên tắc đối chứng với sai số

- Độ chính xác của mô hình phải tương xứng với độ lớn của sai số. Sai số càng nhỏ thì mô hình càng phải phức tạp. Sai số càng lớn thì nên xây dựng mô hình xây dựng đơn giản hơn



Nguyên tắc ngẫu nhiên hóa

- Thể hiện ở cách tiến hành thực nghiệm cho phép ngẫu nhiên hóa các yếu tố tác động lên đối tượng nghiên cứu một cách có hệ thống, nhưng không thể hoặc khó kiểm tra được để từ đó coi chúng như những đại lượng ngẫu nhiên và xử lý theo phương pháp thống kê.
- Nguyên tắc nhằm loại bỏ ảnh hưởng của các yếu tố không kiểm soát được
- Nguyên tắc được thực hiện bằng cách tiến hành các thực nghiệm trong qui hoạch theo nguyên tắc ngẫu nhiên hóa

Nguyên tắc tối ưu của qui hoạch thực nghiệm

- Kế hoạch thực nghiệm phải có những tính chất tối ưu nào đó theo quan điểm của một hay nhóm tiêu chuẩn tối ưu đã xác định trước của loại kế hoạch này - thí dụ tiêu chuẩn D nhằm vào việc tối thiểu hóa biến lượng chung của yếu tố.
- Dạng cụ thể của tiêu chuẩn tối ưu phụ thuộc vào loại nhiệm vụ thực nghiệm, ý nghĩa, công cụ của kế hoạch
- Xu hướng “tiến hành ít thực nghiệm hơn – thu thập nhiều thông tin hơn – chất lượng kết quả cao hơn”

1.3. Các bước thực hiện qui hoạch

- Thu thập thông tin tiên nghiệm
- Chọn đáp ứng và yếu tố khảo sát.
- Chọn mô hình thực nghiệm. Xác định vùng khảo sát
- Thiết lập phương án giảm thiểu sai số.
- Chọn độ lớn qui hoạch
- Xây dựng qui hoạch thực nghiệm
- Tiến hành thực nghiệm, thu thập thông tin
- Phân tích số liệu. Đánh giá sự tương thích của mô hình thực nghiệm
- *Tối ưu hóa hàm mục tiêu*
- *Kiểm chứng bằng thực nghiệm*

1.3.1. Thu thập thông tin tiên nghiệm

- Phần lớn đối tượng nghiên cứu đều có mô hình tương tự đã được nghiên cứu bằng lý thuyết hoặc thực nghiệm. Đây là những thông tin sơ bộ định hướng việc qui hoạch thực nghiệm. Các thông tin tiên nghiệm có thể lấy từ
 - Kết quả nghiên cứu lý thuyết
 - Ý kiến chuyên gia
 - Thực nghiệm thăm dò
 - Thực nghiệm sàng lọc

1.3.2. Chọn đáp ứng và yếu tố khảo sát

- Đáp ứng là các mục tiêu cần đánh giá. Các mục tiêu này thường được đánh giá trực tiếp qua giá trị của chúng tại điểm thực nghiệm bằng cách cân, đong, đo, đếm trực tiếp trong quá trình thực nghiệm hay qua phép tính tỉ lệ (ví dụ hiệu suất phản ứng). Đôi khi đáp ứng là một tổng hợp các mục tiêu trực tiếp (ví dụ hiệu quả kinh tế của quá trình)

Biến số được chọn làm yếu tố khảo sát cần phải:

- Là các biến độc lập, thay đổi được
- Thường là các yếu tố định lượng
- Có hiệu ứng ảnh hưởng rõ nét đến hàm mục tiêu đánh giá đối tượng nghiên cứu

- Khi mới bắt đầu có rất nhiều yếu tố, do đó cần tiến hành thực nghiệm sàng lọc. Các qui hoạch yếu tố toàn phần và từng phần thích hợp cho thực nghiệm sàng lọc
- Khoảng biến thiên của các yếu tố cần chọn lựa cẩn thận. Nếu khoảng biến thiên quá nhỏ thì hiệu ứng của yếu tố bị trùng lấp với sai số. Nếu khoảng biến thiên quá lớn thì mối quan hệ giữa các yếu tố và đáp ứng quá phức tạp không tương thích với mô hình được chọn. Trong trường hợp này đáp ứng có thể không hiện thực trong vùng khảo sát.
- Mức biến đổi của các yếu tố gắn liền với hàm mô phỏng dạng bề mặt đáp ứng

- Biến số định lượng thường lấy giá trị trên một khoảng biến thiên $u_{i,\min} \leq u_i \leq u_{i,\max}$ ($i = 1, 2, 3, \dots$)
- Để khái quát hóa và giải thích kết quả thực nghiệm, các biến u_i được thay thế bởi biến chuẩn x_i , không thứ nguyên

$$x_i = (u_i - u_{i,0}) / \Delta_i \quad (i = 1, 2, 3, \dots)$$

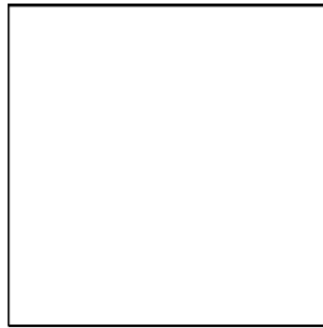
với $u_{i,0} = (u_{i,\min} + u_{i,\max}) / 2$

$$\Delta_i = u_{i,\max} - u_{i,0} = u_{i,0} - u_{i,\min}$$

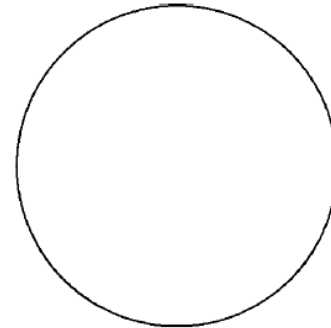
Vùng thực nghiệm

- Nếu giới hạn của các biến là độc lập thì ở dạng biến chuẩn, x_i , vùng thực nghiệm có dạng khối lập phương (3 biến) hoặc hình vuông (2 biến). Vùng thực nghiệm này thường áp dụng cho các biến định lượng
- Nếu giới hạn của các biến có dạng $\sum x_i^2 \leq r^2$, thì vùng thực nghiệm có dạng hình cầu (3 biến) hoặc tròn (2 biến). Vùng thực nghiệm có tính đẳng hướng

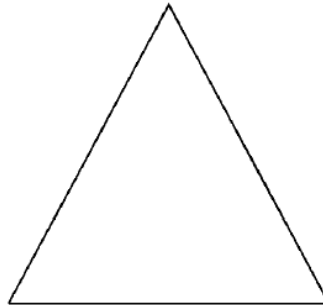
- Đối với trường hợp như trong hệ 3 cấu tử, sự thay đổi nồng độ một cấu tử sẽ làm thay đổi nồng độ của 2 cấu tử còn lại, hay biểu thức giới hạn có dạng $\Sigma x_i = 1$, vùng thực nghiệm có dạng đơn hình (c)
- Trong một số trường hợp có sự kềm chế không cho 2 biến cùng đạt giá trị cao, thí dụ nhiệt độ và thời gian lưu hóa cao su cùng cao, vùng thực nghiệm có dạng như hình (d).



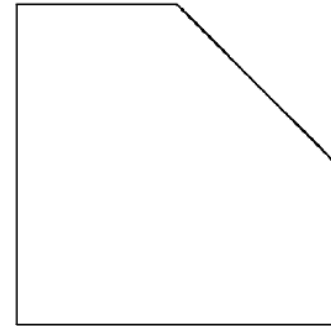
(a)



(b)



(c)



(d)

Một số dạng vùng qui hoạch

- (a): dạng hình vuông (dạng khối lập phương cho $m > 2$)
- (b): dạng hình tròn (hoặc cầu)
- (c): dạng đơn hình (simplex) cho các thực nghiệm hỗn hợp
- (d): dạng nhằm tránh 2 biến cùng đạt giá trị cao một lượt

1.3.3. Thực hiện biện pháp giảm sai số

- Nếu các yếu tố phụ ảnh hưởng khác nhau đáng kể trong các thực nghiệm thì để tăng độ chính xác của thực nghiệm, các thực nghiệm tương tự được khảo sát theo nhóm
- Việc chọn cấu trúc nhóm thích hợp rất quan trọng và cần có kinh nghiệm của người nghiên cứu. Trong các thực nghiệm kỹ thuật vật liệu thì bề mặt vật liệu thường là nguồn biến đổi quan trọng, ảnh hưởng của chúng có thể giảm nếu lấy nhóm là bề mặt vật liệu.

	Treatments				
	T_1	T_2	T_3	T_4	T_5
Block 1	7.62	8.14	7.76	7.17	7.46
Block 2	8.00	8.15	7.73	7.57	7.68
Block 3	7.93	7.87	7.74	7.80	7.21

TN khảo sát ảnh hưởng của việc bón phân đến độ bền sợi

T: hàm lượng Kali bón trên đồng

Nhóm là các mảnh ruộng khác nhau. Các mảnh ruộng này tương tự về thổ nhưỡng

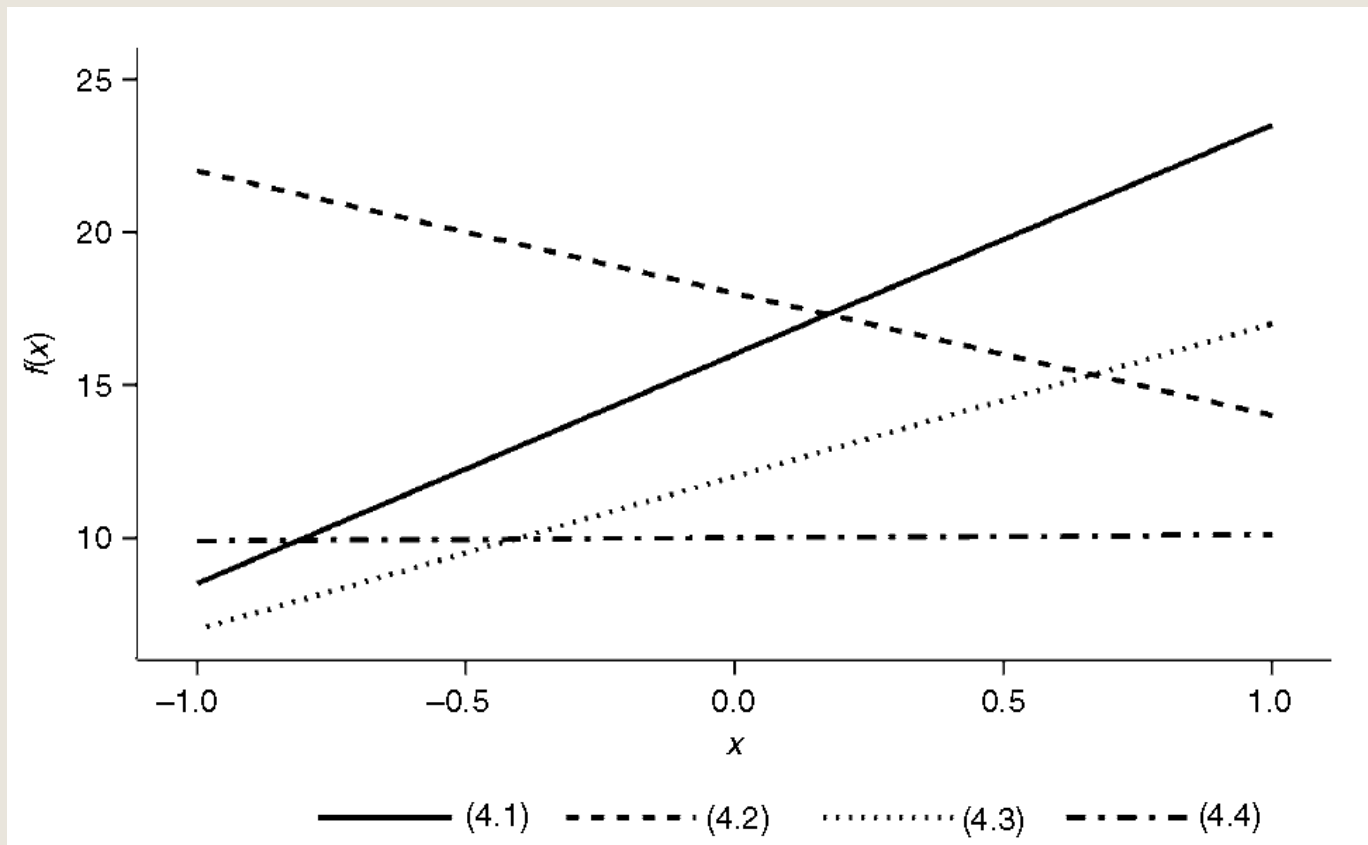
1.3.3. Chọn kích thước mô hình qui hoạch

- Kích thước mô hình qui hoạch bị giới hạn bởi nguồn lực – thường là chi phí và thời gian.
- Độ chính xác của thông số gia tăng với số lần lặp lại thực nghiệm, nhưng cũng phụ thuộc vào vị trí của điểm khảo sát.
- Có nhiều tiêu chí thiết kế nhằm tối đa hoá thông tin về một khía cạnh nào đó của mô hình – thường dùng tiêu chí tối ưu D, trong đó sẽ tối thiểu hóa biến lượng chung của yếu tố

1.3.4. Chọn mô hình thực nghiệm

- Qui hoạch thực nghiệm tốt tùy thuộc vào mô hình quan hệ giữa đáp ứng và yếu tố. Mô hình phải đáp ứng được việc tính gần đúng những đặc tính chính của dữ liệu, nhưng không quá phức tạp để tránh mất nhiều công sức để tính một khối lượng lớn yếu tố.
- Nếu sử dụng qui hoạch chuẩn – thí dụ hoạch định yếu tố toàn phần, thì điều quan trọng là phải xem xét tất cả các đặc trưng của thực nghiệm như cấu trúc vùng thực nghiệm, cơ sở phân nhóm thực nghiệm
- Nếu không chọn qui hoạch chuẩn thì qui hoạch thực nghiệm tối ưu là phương án thích hợp nhất

- Qui hoạch được gọi là trực giao khi tích của ma trận qui hoạch là ma trận trực giao ($A^T A = A A^T = I$). Mục tiêu của qui hoạch trực giao nhằm đạt đến việc khi vận hành phần này của qui hoạch sẽ không gây các ảnh hưởng phụ đến các phần khác của qui hoạch. Tính trực giao của một qui hoạch cho phép việc xây dựng các qui hoạch phức tạp trở nên khả thi và gọn nhẹ.
- Qui hoạch được gọi là tâm quay là qui hoạch trong đó biến lượng của đáp ứng chỉ phụ thuộc khoảng cách từ tâm vùng thực nghiệm đến điểm khảo sát.



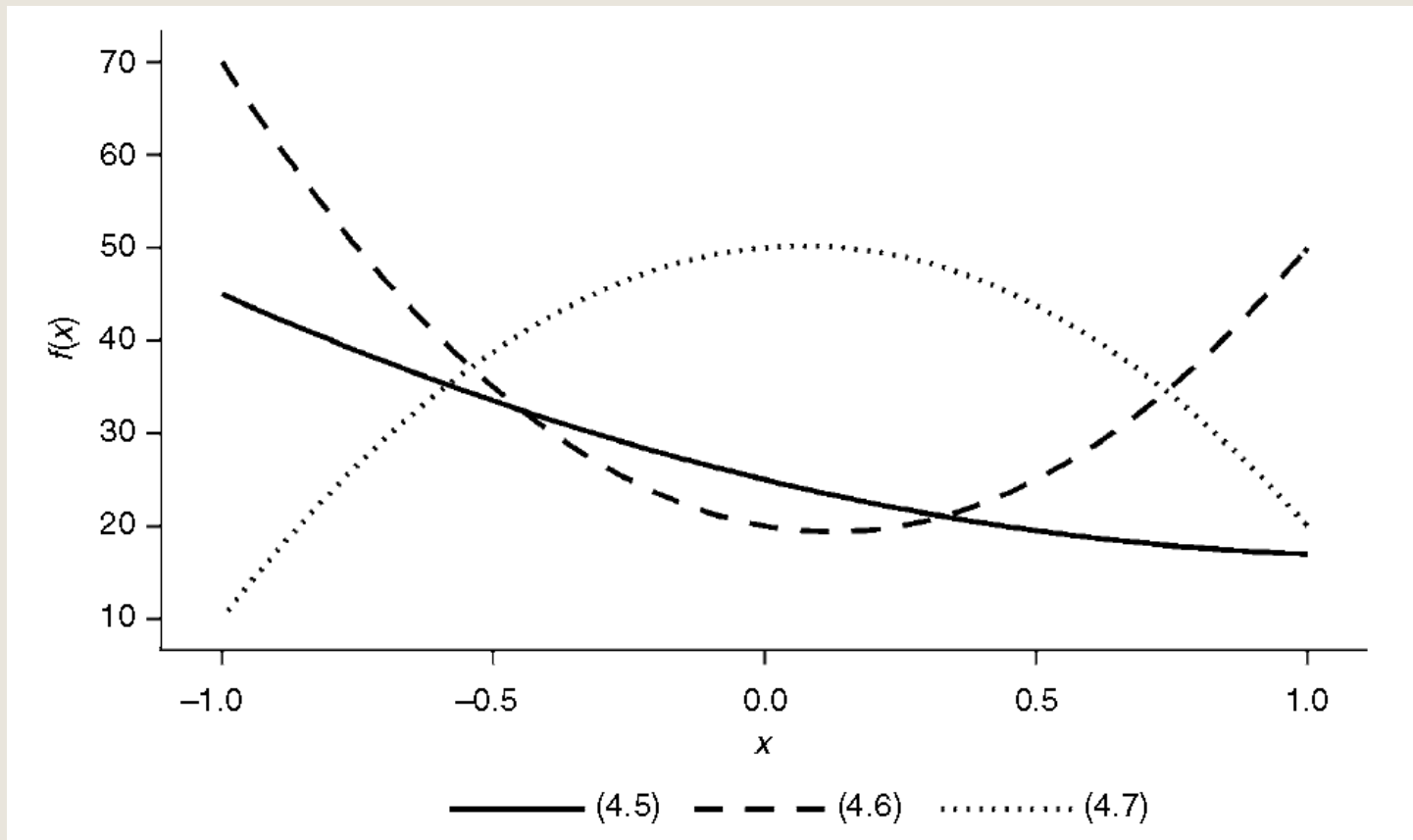
Qui hoạch bậc 1

$$\eta(x) = 16 + 7.5x \quad (4.1)$$

$$\eta(x) = 18 - 4x \quad (4.2)$$

$$\eta(x) = 12 + 5x \quad (4.3)$$

$$\eta(x) = 10 + 0.1x \quad (4.4)$$

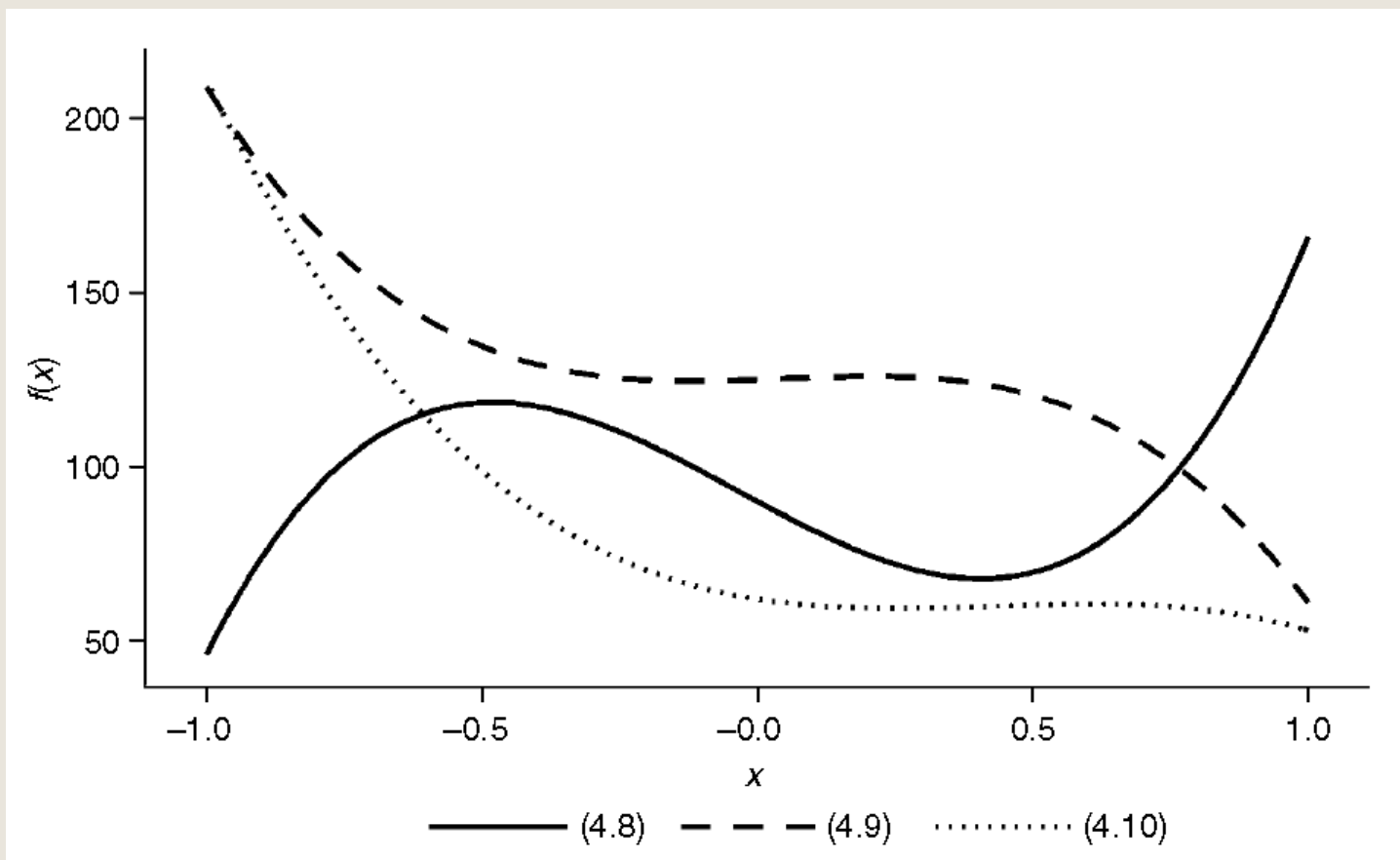


Qui hoạch bậc 2

$$\eta(x) = 25 - 14x + 6x^2 \quad (4.5)$$

$$\eta(x) = 20 - 10x + 40x^2 \quad (4.6)$$

$$\eta(x) = 50 + 5x - 35x^2 \quad (4.7)$$



Qui hoạch bậc 3

$$\eta(x) = 90 - 85x + 16x^2 + 145x^3 \quad (4.8) \quad \eta(x) = 125 + 6x + 10x^2 - 80x^3 \quad (4.9)$$

$$\eta(x) = 62 - 25x - 70x^2 - 54x^3 \quad (4.10)$$

1.3.5. Tiến hành thí nghiệm, thu thập thông tin

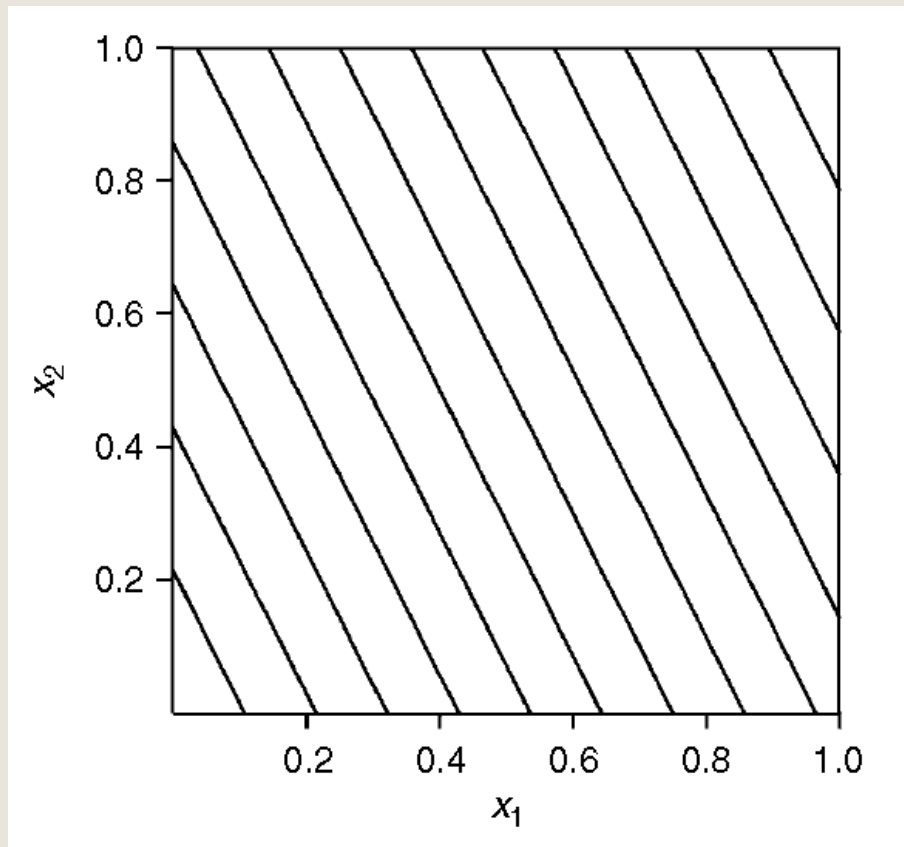
- Tất cả các thực nghiệm đều phải ghi nhận được các đáp ứng. Giá trị đáp ứng riêng rẽ thường độc lập mặc dù có thể có phần nào của các đáp ứng có mối quan hệ
- Nếu các đáp ứng tương thích với cùng một mô hình thì có thể bỏ qua mối quan hệ và xem đáp ứng là độc lập. Trái lại nếu một thực nghiệm được quan sát nhiều lần trong quãng thời gian dài thì giả thiết độc lập không áp dụng được và phải đưa yếu tố thời gian vào khi qui hoạch cũng như khi phân tích

- Nếu giá trị cài đặt của yếu tố không đúng thì phải ghi nhận giá trị thực của yếu tố này. Trường hợp việc cài đặt giá trị đúng có khó khăn thì qui hoạch thí nghiệm nên dùng ít giá trị cài đặt.

1.3.6. Phân tích số liệu, đánh giá tương thích

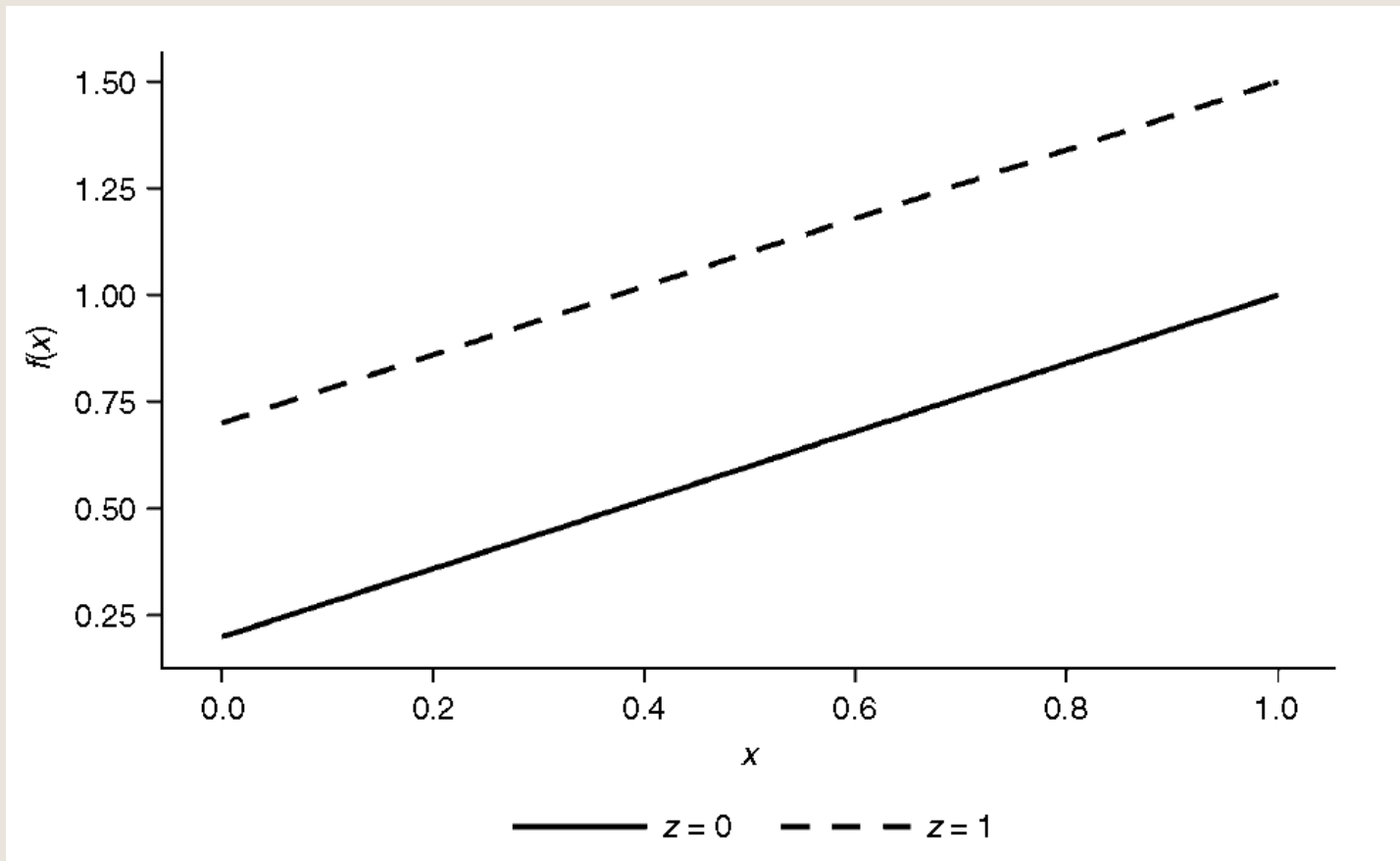
- Kết quả thí nghiệm thường được phân tích bằng phương pháp thống kê và tiến hành theo trình tự thật toán.
- Đôi khi việc phân tích được tiến hành bằng các giản đồ sau khi phân tích chính thức bằng thống kê
- Việc thực nghiệm mang tính lặp lại. Các kết quả phân tích trước sẽ định hướng qui hoạch sau.

- Tuy nhiên nhà thực nghiệm cần rà soát lại các quyết định trước đây. Các vấn đề phát sinh ở giai đoạn trung gian sẽ giúp hiểu rõ hơn tính chất của đối tượng
- Nếu mô hình không tương thích thì có thể là do mô hình quá đơn giản, hoặc do sai số và nhận các số liệu ghi nhận sai vào kết quả. Trong trường hợp này phải tiến hành lại từ bước 4 đến bước 6.



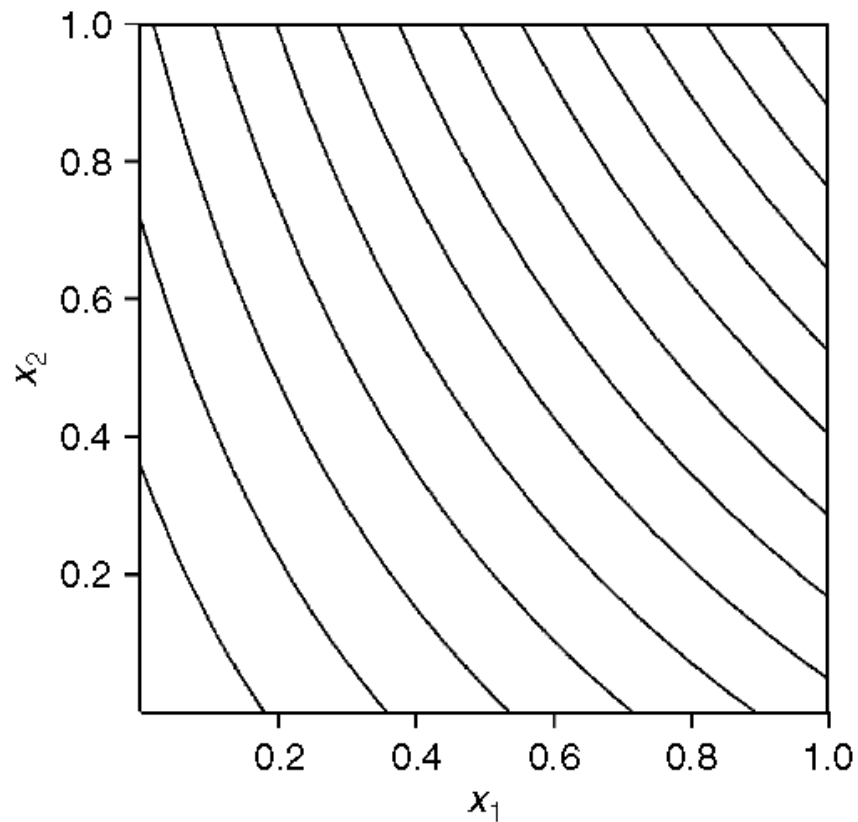
Bề mặt đáp ứng mô hình bậc 1, hai yếu tố

Không tương tác



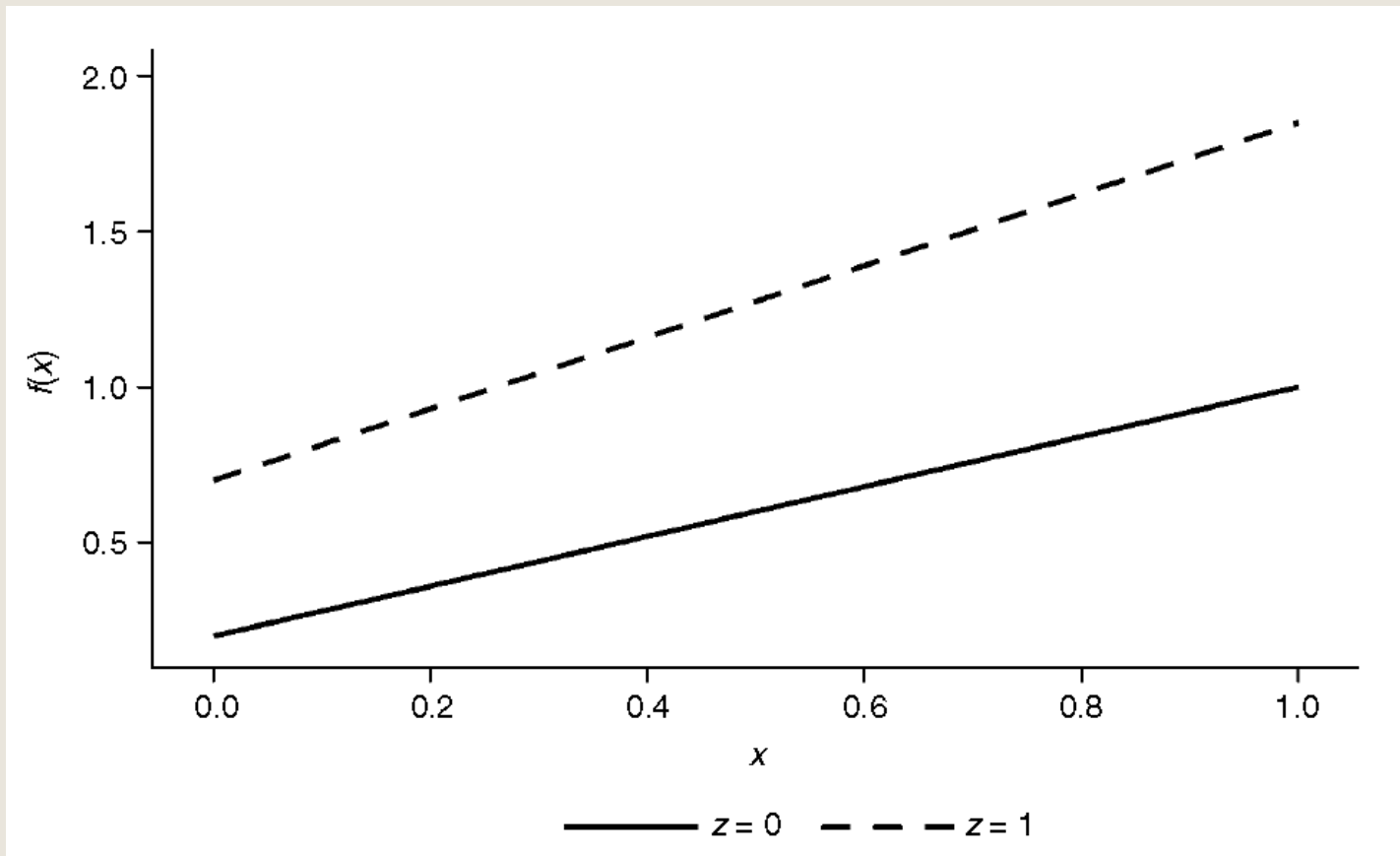
Phân tích tương tác

Không có tương tác giữa X và Z



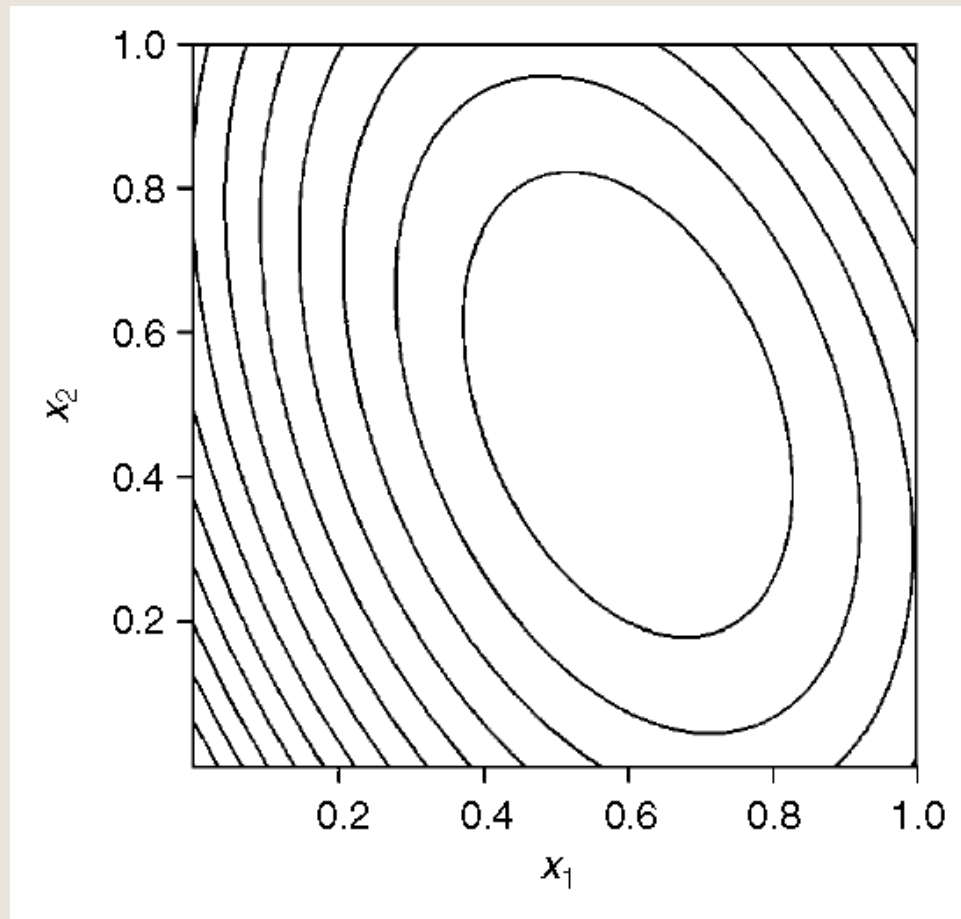
Bề mặt đáp ứng mô hình bậc 1, hai yếu tố

Có tương tác



Phân tích tương tác

Có tương tác

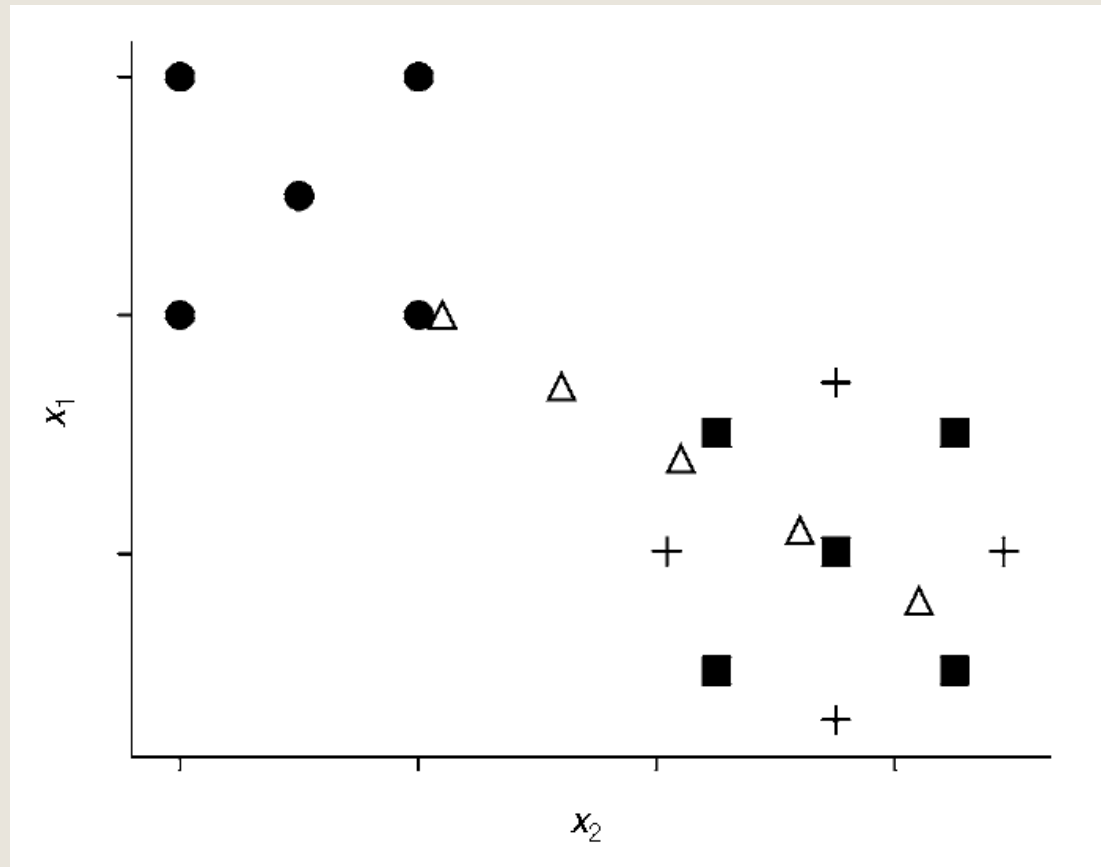


Bề mặt đáp ứng mô hình bậc 2, hai yếu tố

1.3.7. Tối ưu hóa hàm mục tiêu

Tối ưu hóa hàm mục tiêu có thể tiến hành bằng:

- Phương pháp thực nghiệm: phương pháp leo dốc đứng, phương pháp SIMPLEX
- Phương pháp toán học: trên cơ sở phương trình toán mô tả hàm mục tiêu có được từ thực nghiệm, dùng phương pháp toán để tìm điểm cực trị trong vùng khảo sát: phương pháp giải tích, phương pháp biến đổi Lagrange ...



Tối ưu hóa

- Qui hoạch bậc 1
- △ Leo dốc đứng
- + Qui hoạch bậc 2

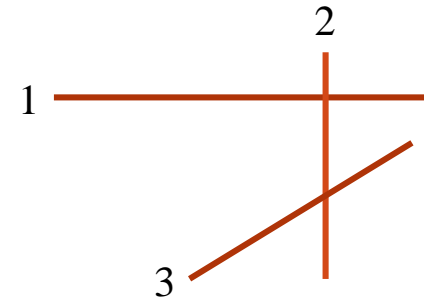
1.4. Các phương pháp QHTN

- Phương pháp thử tìm sai (trial and error)
- Phương pháp thay đổi lần lượt từng yếu tố
- Phương pháp qui hoạch yếu tố toàn phần hoặc bán phần
- Phương pháp TAGUCHI

Phương pháp thử tìm sai (trial and error)

- Phương pháp dựa vào kinh nghiệm
- Có thể cho kết quả nhanh chóng
- Không giải thích được kết quả.
- Khó đạt được tối ưu
- Có thể sử dụng như giải pháp tạm thời

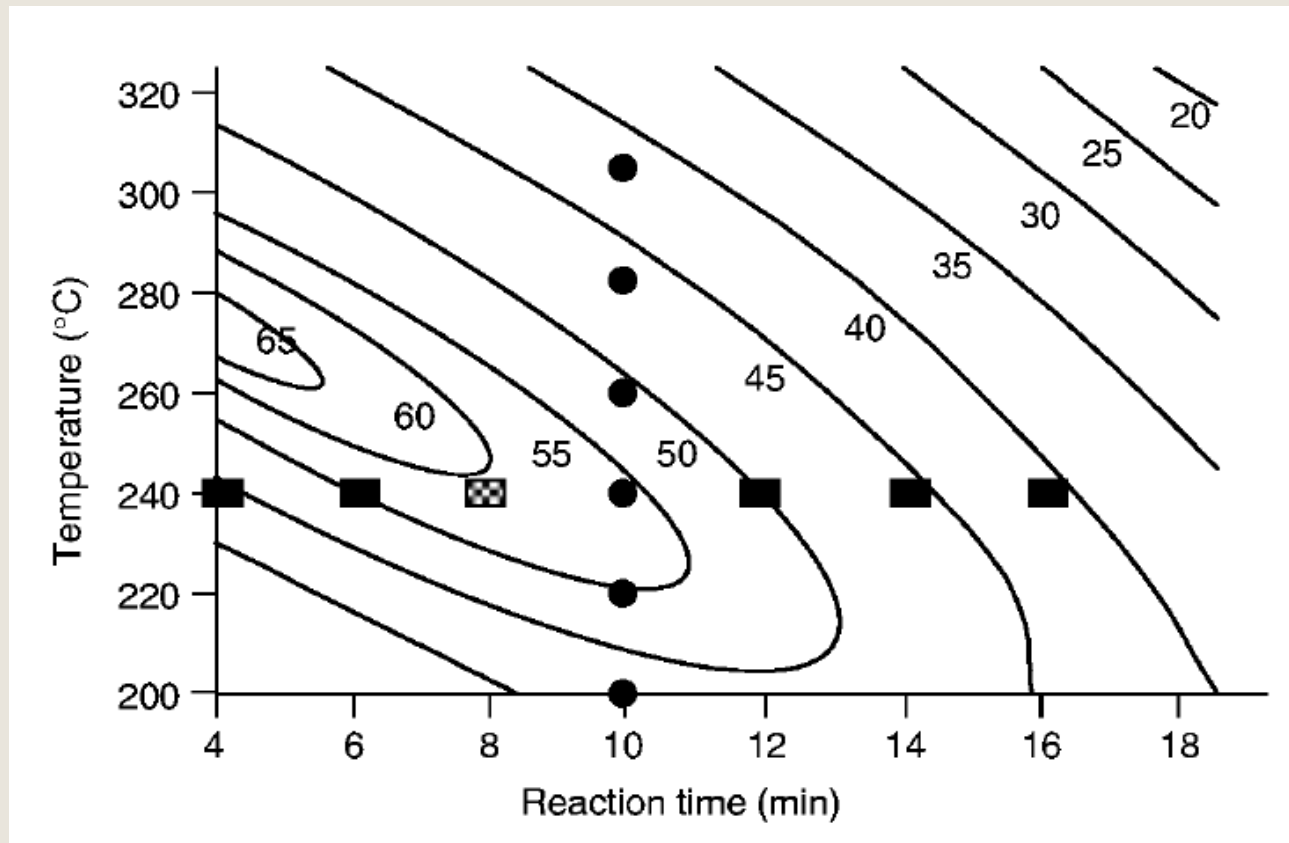
Đây là phương pháp “mò”. Không hiểu bản chất vấn đề



Phương pháp thay đổi từng yếu tố

Tiến hành với yếu tố thứ nhất. Quan sát kết quả. Chọn giá trị cho yếu tố thứ nhất, xong chuyển qua yếu tố tiếp theo

- Phải thực tiến hành nhiều thí nghiệm
- Không mô hình hóa được ảnh hưởng của các yếu tố
- Không đánh giá được tương tác giữa các yếu tố. Do đó kết quả chưa tối ưu cho tổng thể các yếu tố



Bề mặt đáp ứng

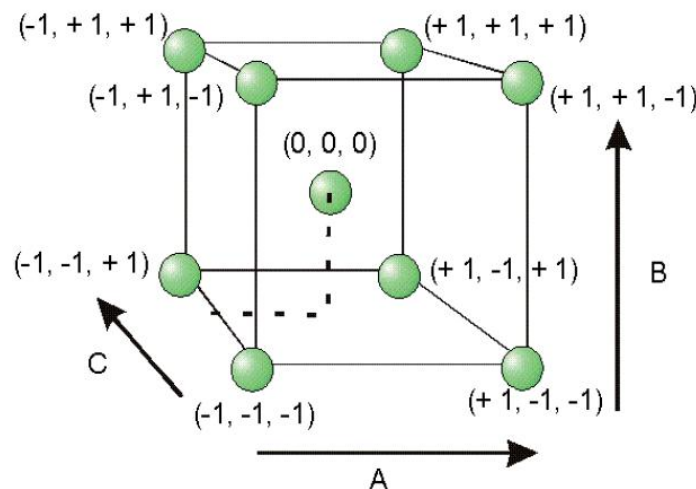
Trong thí nghiệm thứ 1: tiến hành ở thời gian 10 phút. Hiệu suất cao nhất ở 240°C

Trong thí nghiệm thứ 2: tiến hành ở 240°C, ở thời gian 8 phút cho hiệu suất cao nhất là 60%

Thực tế hiệu suất cao nhất là 70% ở nhiệt độ 270°C với thời gian phản ứng là 4 phút

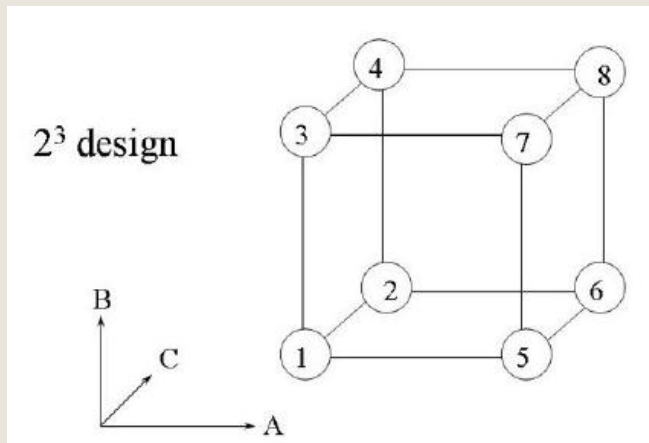
Phương pháp hoạch định yếu tố 2 mức độ

- Cho phép đánh giá được ảnh hưởng của các yếu tố và tương tác của chúng.
- Các hoạch định yếu tố bán phần giúp giảm thiểu số lượng thí nghiệm, nhưng ảnh hưởng của các yếu tố có thể lẫn vào nhau. Trong trường hợp này không có định hướng hoạch định thực nghiệm để làm rõ ảnh hưởng của các yếu tố quan trọng.
- Phương pháp đòi hỏi hiểu biết nhiều về thống kê



Phương pháp TAGUCHI

- Có thể khảo sát nhiều yếu tố đồng thời
- Số thực nghiệm ít cho khảo sát nhiều yếu tố. Có thể tách các yếu tố không quan trọng ra khỏi yếu tố quan trọng
- Trong hầu hết trường hợp cho kết quả chất lượng và khả năng tin cậy mà không gia tăng công sức và chi phí.
- *Dễ dàng phân tích lựa chọn các yếu tố để tránh các yếu tố gây nhiễu*
- *Không cần phải hiểu sâu về thống kê khi tiến hành xử lý số liệu và đánh giá ảnh hưởng của các yếu tố*



Orthogonal Array $L_8 (2^7)$

FACTORS							
TRIAL NUMBER	A	B	C	D	E	F	G
1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	1	1	1	1
3	0	1	1	0	0	1	1
4	0	1	1	1	1	0	0
5	1	0	1	0	1	0	1
6	1	0	1	1	0	1	0
7	1	1	0	0	1	1	0
8	1	1	0	1	0	0	1

So sánh HĐ yếu tố toàn phần và HĐ Taguchi

Với 8 thí nghiệm, hoạch định yếu tố toàn phần 2 mức độ chỉ khảo sát được 3 yếu tố trong khi hoạch định TAGUCHI khảo sát tối đa được 7 yếu tố