

УДК 517(07)

**Розрахунок функцій множинної регресії другого порядку
в задачах центрального композиційного планування експерименту.**

Тетяна Зінченко, Антонелла Дорохович

Національний університет харчових технологій

Анотація.

Вступ. Центральне ротатбельне композиційне планування експерименту (ЦРКП) дозволяє отримати незалежні статистичні дані дослідів для розрахунку багатофакторних функцій регресії другого порядку.

Матеріали та методи. Для розрахунку формул обчислення коефіцієнтів багатофакторних функцій регресії другого порядку (дво- і трифакторних) використано метод мінімальних квадратів та матричну математичну модель лінійної множинної регресії.

Результати. Для двох моделей ЦКП – ортогонального та ротатбельного – розраховані формули для обчислення коефіцієнтів функцій регресії другого порядку. Для ортогонального ЦКП можна розрахувати функцію множинної регресії (для кількох факторів) вищого порядку лише у неповній формі; для ротатбельного ЦКП можна розрахувати функцію множинної регресії вищого порядку у повній формі.

Висновки. Для розв'язання задачі знаходження коефіцієнтів функції множинної регресії другого порядку в загальному вигляді для довільної кількості факторів потрібно додатково використати методи лінійної алгебри. Результати будуть представлені в окремій статті.

Ключові слова: експеримент, планування, фактори, множинна регресія, коефіцієнти.

**Calculation of functions of multiple regression of the second order
in the tasks of the central composition planning of experiment.**

Tetiana Zinchenko, Antonella Dorokhovich
The National University of Food Technologies

Abstract

Introduction.

The central rotatable compositional planning of experiment (CRCP) allows to get independent statistical information of experiments for the calculation of multivariable functions of regression of the second order.

Material and methods.

For the calculation of formulas of calculation of coefficients of multivariable functions of regression of the second order (two- and threefactor) is used the method of minimum squares and matrix mathematical model of linear multiple regression.

Results.

For two models of CCP – ortogonal and rotatable are expected formulas for the calculation of coefficients of functions of regression of the second order. It is possible to expect the function of multiple regression (for a few factors) of higher order only in an incomplete form for ortogonal CCP ; it is possible to expect the function of multiple regression of higher order in a complete form for rotatable of CCP .

Conclusions.

For the decision task of finding of coefficients of function of multiple regression the second order in a general view for the arbitrary amount of factors it is needed additionally to use the methods of linear algebra. Results will be presented in the separate article.

Keywords: experiment, planning, factors, multiple regression, coefficients.

Расчет функций множественной регрессии второго порядка в задачах центрального композиционного планирования эксперимента.

Татьяна Зинченко, Антонелла Дорохович

Аннотация

Введение. Центральное ротатабельное композиционное планирование эксперимента (ЦРКП) позволяет получить независимые статистические данные опытов для расчета многофакторных функций регрессии второго порядка.

Материалы и методы. Для расчета формул вычисления коэффициентов многофакторных функций регрессии второго порядка (двух- и трехфакторных) использован метод минимальных квадратов и матричная математическая модель линейной множественной регрессии.

Результаты. Для двух моделей ЦКП – ортогональной и ротатабельной – получены формулы расчета коэффициентов функций регрессии второго порядка. Для ортогонального ЦКП можно сформировать функцию множественной регрессии (для нескольких факторов) высшего порядка только в неполной форме; для ротатабельного ЦКП можно сформировать функцию множественной регрессии высшего порядка в полной форме.

Выводы. Для решения задачи определения коэффициентов функции множественной регрессии второго порядка в общем виде для произвольного количества факторов необходимо дополнительно использовать методы линейной алгебры. Результаты будут представлены в отдельной статье.

Ключевые слова: эксперимент, планирование, факторы, множественная регрессия, коэффициенты.

Вступ. Центральне композиційне планування експерименту (ЦКП) набуло широкого розповсюдження в харчових технологіях, зокрема, при оптимізації рецептур кондитерських виробів [1,2]. В загальному випадку можна розглядати m - факторний експеримент, в якому досліджується вплив m незалежних параметрів (факторів) процесу на його результат (ефективність).

Матеріали та методи. Для проведення ЦКП необхідно вибрати фізичні характеристики планування – початкові значення всіх факторів x_{i0} , величини інтервалів їх варіювання Δx_i , $i=1,2...m$. Для спрощення математичних досліджень замість фізичних значень використовують кодовані значення:

$$x_{10} = x_{20} = \dots = x_{m0} = 0, \quad x_{1\hat{a}} = x_{2\hat{a}} = \dots = x_{m\hat{a}} = +1, \quad x_{1\tilde{a}} = x_{2\tilde{a}} = \dots = x_{m\tilde{a}} = -1,$$

де $x_{i\hat{a}}$, $x_{i\tilde{a}}$ - значення верхнього та нижнього рівня i -го параметра.

Розрізняють дві моделі ЦКП – ортогональна та ротатабельна (відповідно рис.1 та рис.2 для двофакторного експерименту з координатами точок в кодованому вигляді).

Для аналізу результатів частіше всього застосовують методи математичної статистики [2,4]. Рівняння регресії представляють у вигляді многочлена першого чи другого порядку (рідко – третього).

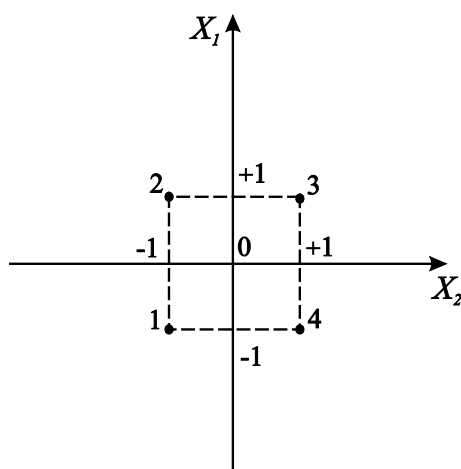


Рис. 1. Схема двофакторного ортогонального ЦКП.

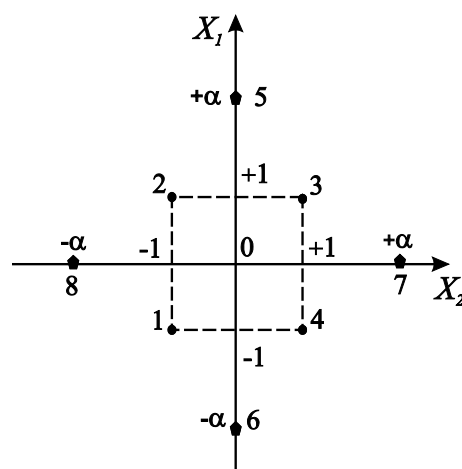


Рис. 2. Схема двофакторного ротатабельного ЦКП.

Рівняння множинної регресії I порядку (лінійне) має вигляд

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_mx_m, \quad (1)$$

де m - кількість факторів. Оцінка параметрів цього рівняння – коефіцієнтів $b_0, b_1, b_2, \dots, b_m$ - виконується за даними вибірки (за результатами N дослідів) за методом мінімальних квадратів. В загальному випадку коефіцієнти рівняння регресії (1) обчислюються за формулою в матричній формі [4]:

$$\bar{b} = (X^T X)^{-1} \cdot X^T \cdot \bar{y}, \quad (2)$$

де $\bar{b} = (b_0, b_1, b_2, \dots, b_m)^T$ - вектор оцінок параметрів-коефіцієнтів,

$\bar{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$ - вектор значень критерію в N дослідях,

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{N1} & x_{N2} & \dots & x_{Nm} \end{pmatrix} - \text{матриця розміром } N \times (m+1). \quad (3)$$

Результати та обговорення. У випадку *двофакторного* ортогонального ЦКП (рис.1) часто для аналізу результатів експерименту використовують функцію регресії другого порядку в неповній формі

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2. \quad (4)$$

У цьому випадку дані експериментів представлені в табл. 1, матриця X в кодованій формі має вигляд:

Таблиця 1.

Матриця двофакторного ортогонального ЦКП для неповної функції регресії другого порядку.

Система дослідів	№ дослідів	X_1	X_2	X_1X_2	y_j
ПФЕ типу 2^n	1	-1	-1	+1	y_1
	2	+1	-1	-1	y_2
	3	+1	+1	+1	y_3
	4	-1	+1	-1	y_4

$$X = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Коефіцієнти функції регресії обчислюються за формулами:

$$b_0 = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 y_i; \quad b_1 = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 x_{i1} y_i; \quad b_2 = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 x_{i2} y_i; \quad b_{12} = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 x_{i1} x_{i2} y_i = \frac{1}{4} (y_1 - y_2 + y_3 - y_4).$$

У випадку *двофакторного* ротатбельного ЦКП з розміром “зіркового плеча” α , коли досліді виконуються в точках 1-8 (рис. 2), матриця координат X в кодованій формі має вигляд:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & +1 & +1 & -1 & 0 & \alpha & 0 & -\alpha \\ -1 & -1 & +1 & +1 & -\alpha & 0 & \alpha & 0 \end{pmatrix}^T. \quad (5)$$

За формулою (2) для лінійної функції регресії (4.3) отримуємо наступні формули знаходження коефіцієнтів:

$$b_0 = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^8 y_i; \quad b_1 = \frac{1}{2 + \alpha^2} \sum_{i=1}^8 x_{i1} y_i = \frac{1}{2 + \alpha^2} (-y_1 + y_2 + y_3 - y_4 + \alpha y_6 - \alpha y_8);$$

$$b_2 = \frac{1}{2 + \alpha^2} \sum_{i=1}^8 x_{i2} y_i = \frac{1}{2 + \alpha^2} (-y_1 - y_2 + y_3 + y_4 - \alpha y_5 + \alpha y_7) \quad . \quad (6)$$

Функція регресії другого порядку у повній формі представляється многочленом

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2. \quad (7)$$

Такі функції регресії можна використовувати при ротатбельному плануванні експерименту. При ротатбельному плануванні досліди виконуються в точках 1-8, дані дослідів в кодованому вигляді представлені в табл. 2, матриця X кодованих координат точок має форму (5) [2].

Таблиця 2.

Матриця двофакторного ротатбельного ЦКП
для функції регресії другого порядку .

Система дослідів	№ дослідів	X_1	X_2	$X_1 X_2$	X_1^2	X_2^2	y_j
ПФЕ типу 2^m	1	-1	-1	+1	+1	+1	y_1
	2	+1	-1	-1	+1	+1	y_2
	3	+1	+1	+1	+1	+1	y_3
	4	-1	+1	-1	+1	+1	y_4
Досліди в "зіркових" точках	5	$-\alpha$	0	0	α^2	0	y_5
	6	$+\alpha$	0	0	α^2	0	y_6
	7	0	$-\alpha$	0	0	α^2	y_7
	8	0	$+\alpha$	0	0	α^2	y_8
Досліди в центрі плану	9	0	0	0	0	0	y_9
	10	0	0	0	0	0	y_{10}
	11	0	0	0	0	0	y_{11}
	12	0	0	0	0	0	y_{12}
	13	0	0	0	0	0	y_{13}

Якщо ввести позначення

$$I_0 = \sum_{i=1}^8 y_i; \quad I_1 = \sum_{i=1}^8 x_{i1} y_i; \quad I_2 = \sum_{i=1}^8 x_{i2} y_i; \quad I_{12} = \sum_{i=1}^8 x_{i1} x_{i2} y_i; \quad I_{11} = \sum_{i=1}^8 x_{i1}^2 y_i; \quad I_{22} = \sum_{i=1}^8 x_{i2}^2 y_i,$$

$$\Delta = 16\alpha^4 (2 - \alpha^2)^2, \quad q = 2\alpha^4; \quad p = 2 + \alpha^2; \quad (8)$$

то за формулою (2) для квадратичної функції регресії (7) і матриці даних (5) можна отримати наступні формули знаходження коефіцієнтів:

$$\begin{aligned}
b_0 &= \frac{2q(4 + \alpha^4)}{\Delta} I_0 - \frac{2qp}{\Delta} (I_{11} + I_{22}); \quad b_1 = \frac{1}{2p} I_1; \quad b_2 = \frac{1}{2p} I_2; \quad b_{12} = \frac{1}{4} I_{12}; \\
b_{11} &= -\frac{2qp}{\Delta} I_0 + \frac{4[(2 - \alpha^2)^2 + q]}{\Delta} I_{11} + \frac{4(p^2 - 8)}{\Delta} I_{22}; \\
b_{22} &= -\frac{2qp}{\Delta} I_0 + \frac{4(p^2 - 8)}{\Delta} I_{11} + \frac{4[(2 - \alpha^2)^2 + q]}{\Delta} I_{22}.
\end{aligned} \tag{9}$$

Якщо для більш повного статистичного дослідження результатів експерименту досліди проводяться, крім точок 1-8, ще й n_0 разів в центрі плану - початку координат (точки з номерами 9-13, табл. 2), формули знаходження коефіцієнтів квадратичної функції регресії (7) мають вигляд:

$$\begin{aligned}
b_0 &= \frac{2q(4 + \alpha^4)}{\Delta_1} I_0 - \frac{2qp}{\Delta_1} (I_{11} + I_{22}); \quad b_1 = \frac{1}{2p} I_1; \quad b_2 = \frac{1}{2p} I_2; \quad b_{12} = \frac{1}{4} I_{12}; \\
b_{11} &= -\frac{2qp}{\Delta_1} I_0 - \frac{4p^2 - (4 + q)(8 + n_0)}{\Delta_1} I_{11} + \frac{4p^2 - 4(8 + n_0)}{\Delta_1} I_{22}; \\
b_{22} &= -\frac{2qp}{\Delta_1} I_0 + \frac{4p^2 - 4(8 + n_0)}{\Delta_1} I_{11} - \frac{4p^2 - (4 + q)(8 + n_0)}{\Delta_1} I_{22},
\end{aligned} \tag{10}$$

де $\Delta_1 = 2q[(8 + n_0)(4 + \alpha^4) - 4p^2]$; $q = 2\alpha^4$; $p = 2 + \alpha^2$;

$$I_0 = \sum_{i=1}^{8+n_0} y_i; \quad I_1 = \sum_{i=1}^{8+n_0} x_{i1} y_i; \quad I_2 = \sum_{i=1}^{8+n_0} x_{i2} y_i; \quad I_{12} = \sum_{i=1}^{8+n_0} x_{i1} x_{i2} y_i; \quad I_{11} = \sum_{i=1}^{8+n_0} x_{i1}^2 y_i; \quad I_{22} = \sum_{i=1}^{8+n_0} x_{i2}^2 y_i$$

У випадку *трифакторного* ортогонального ЦКП дані експериментів в кодованій формі представлені в табл. 3 [2,3].

Таблиця 3.

Матриця трифакторного ортогонального ЦКП для функції регресії другого порядку.

Система дослідів	№ досліду	X_1	X_2	X_3	y_j
ПФЕ типу 2^n	1	-1	-1	-1	y_1
	2	+1	-1	-1	y_2
	3	-1	+1	-1	y_3
	4	+1	+1	-1	y_4
	5	-1	-1	+1	y_5
	6	+1	-1	+1	y_6
	7	-1	+1	+1	y_7
	8	+1	+1	+1	y_8

$$X = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & +1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & +1 & -1 \\ 1 & +1 & +1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & +1 \\ 1 & +1 & -1 & +1 \\ 1 & -1 & +1 & +1 \\ 1 & +1 & +1 & +1 \end{pmatrix}$$

Для лінійної функції регресії

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 \quad (11)$$

За формулою (2) можна отримати наступні формули знаходження коефіцієнтів:

$$b_0 = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^8 y_i; \quad b_1 = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^8 x_{i1} y_i; \quad b_2 = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^8 x_{i2} y_i; \quad b_3 = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^8 x_{i3} y_i.$$

Часто для аналізу результатів експерименту використовують функцію регресії другого порядку в неповній формі

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

Для трифакторного ортогонального планування експерименту дані дослідів представлені в табл.4:

Таблиця 4.

Матриця трифакторного ортогонального ЦКП
для неповної функції регресії другого порядку .

Система дослідів	№ дослідів	X_1	X_2	X_3	X_1X_2	X_1X_3	X_2X_3	y_j
ПФЕ типу 2^m	1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	y_1
	2	+1	-1	-1	-1	-1	+1	y_2
	3	-1	+1	-1	-1	+1	-1	y_3
	4	-1	-1	+1	+1	-1	-1	y_4
	5	+1	+1	-1	+1	-1	-1	y_5
	6	-1	+1	+1	-1	-1	+1	y_6
	7	+1	-1	+1	-1	+1	-1	y_7
	8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_8

Коефіцієнти функції регресії (12) обчислюються за формулами:

$$b_0 = \frac{1}{8} I_0; \quad b_1 = \frac{1}{8} I_1; \quad b_2 = \frac{1}{8} I_2; \quad b_3 = \frac{1}{8} I_3; \quad b_{12} = \frac{1}{8} I_{12}; \quad b_{13} = \frac{1}{8} I_{13}; \quad b_{23} = \frac{1}{8} I_{23}.$$

Для з'ясування одночасного впливу трьох факторів інколи використовують функцію регресії третього порядку в неповній формі виду

$$y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3 + b_{12}X_1X_2 + b_{13}X_1X_3 + b_{23}X_2X_3 + b_{123}X_1X_2X_3. \quad (13)$$

Коефіцієнти цієї функції регресії обчислюються за формулами:

$$b_0 = \frac{1}{8} I_0; \quad b_1 = \frac{1}{8} I_1; \quad b_2 = \frac{1}{8} I_2; \quad b_3 = \frac{1}{8} I_3; \quad b_{12} = \frac{1}{8} I_{12}; \quad b_{13} = \frac{1}{8} I_{13}; \quad b_{23} = \frac{1}{8} I_{23}; \quad b_{123} = \frac{1}{8} I_{123}$$

$$\text{де } I_{123} = \sum_{i=1}^N x_{i1}x_{i2}x_{i3}y_i = -y_1 + y_2 + y_3 - y_4 + y_5 - y_6 - y_7 + y_8.$$

Рівняння регресії другого порядку в повній формі для *трифакторної* моделі має вигляд:

$$y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3 + b_{12}X_1X_2 + b_{13}X_1X_3 + b_{23}X_2X_3 + b_{11}X_1^2 + b_{22}X_2^2 + b_{33}X_3^2. \quad (14)$$

Для визначення десяти невідомих коефіцієнтів функції (13) даних табл.6 недостатньо.

У випадку *трифакторного* ротатабельного ЦКП число дослідів факторного планування та дослідів в “зіркових точках ” з розміром “зіркового плеча ” α разом становить чотирнадцять. Матриця кодованих значень факторів експерименту має вигляд:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & -\alpha & +\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 & +1 & 0 & 0 & -\alpha & +\alpha & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 & +1 & +1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\alpha & +\alpha \end{pmatrix}^T$$

Для повного статистичного дослідження математичної моделі додатково виконують певну кількість дослідів в точці центру факторного плану, так що загальна кількість дослідів становить $N = 2^m + 2m + n_0$, де n - кількість факторів, 2^m - кількість точок факторного експерименту, $2m$ - кількість “зіркових точок”, n_0 - кількість дослідів в центрі плану. Кодовані значення даних за результатами дослідів для випадку $m = 3$, $n_0 = 6$, $N = 20$ занесені в табл.5.

Таблица 5.

Матриця трифакторного ротatableного ЦКП
для функції регресії другого порядку .

[illegible]

	17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	y_{17}
	18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	y_{18}
	19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	y_{19}
	20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	y_{20}

Якщо *трифакторну* функцію регресії (14) розглядати як лінійну функцію дев'яти змінних (по кількості змінних доданків), то, застосовуючи формулу (2) стосовно нових змінних, можна знайти формули (15) для обчислення коефіцієнтів функції регресії. Для спрощення формул введемо позначення:

$$I_0 = \sum_{i=1}^N y_i; \quad I_j = \sum_{i=1}^N x_{ij} y_i; \quad I_{jk} = \sum_{i=1}^N x_{ij} x_{ik} y_i; \quad I_{jj} = \sum_{i=1}^N x_{ij}^2 y_i; \quad j=1, \dots, n; k=1, \dots, n,$$

$$N = 20; w = 8 + 2\alpha^4; v = 8 + 2\alpha^2;$$

$$A = 20(w + 16) - 3v^2; B = 20(w + 8) - 2v^2; C = 20 \cdot 8 - v^2; q = 2\alpha^4.$$

Коефіцієнти функції регресії другого порядку в повній формі для *трифакторної* моделі (14) обчислюються за формулами:

$$b_0 = \frac{w+16}{A} I_0 - \frac{v}{A} (I_{11} + I_{22} + I_{33});$$

$$b_1 = \frac{1}{v} I_1; \quad b_2 = \frac{1}{v} I_2; \quad b_3 = \frac{1}{v} I_3; \quad b_{12} = \frac{1}{8} I_{12}; \quad b_{13} = \frac{1}{8} I_{13}; \quad b_{23} = \frac{1}{8} I_{23};$$

$$b_{11} = -\frac{v}{A} I_0 + \frac{B}{qA} I_{11} - \frac{C}{qA} (I_{22} + I_{33}); \quad b_{22} = -\frac{v}{A} I_0 + \frac{B}{qA} I_{22} - \frac{C}{qA} (I_{11} + I_{33});$$

$$b_{33} = -\frac{v}{A} I_0 + \frac{B}{qA} I_{33} - \frac{C}{qA} (I_{11} + I_{22}). \quad (15)$$

Висновки. Для двох моделей ЦКП – ортогонального та ротатабельного – розраховані формули для обчислення коефіцієнтів функцій регресії другого порядку. Для ортогонального ЦКП можна розрахувати функцію множинної регресії (для кількох факторів) вищого порядку лише у неповній формі; для ротатабельного ЦКП можна розрахувати функцію множинної регресії вищого порядку у повній формі.

Для розв'язання задачі знаходження коефіцієнтів функції множинної регресії другого порядку в загальному вигляді для довільної кількості факторів потрібно додатково використати методи лінійної алгебри. Результати будуть представлені в окремій статті.

Література.

1. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. Изд.2-е. – М.: Наука, 1976.
2. Грачев Ю.П. Математические методы планирования экспериментов. – М.: Пищевая промышленность, 1979. – 200 с.
3. Дорохович А.М., Оболкіна В.І., Гавва О.О. Оптимізація технологічних процесів галузі (Кондитерське виробництво): Курс лекцій. – К.: НУХТ, 2010. – 86 с.

4. *Мартиненко М.А., Нецадим О.М., Радзієвська О.І., Сафонов В.М.*
Математична статистика: Навчальний посібник. – К.: Четверта хвиля, 2005. – 208 с.
5. *Панфилов В.А.* Оптимизация технологических систем кондитерского производства. – М.: Пищевая промышленность, 1980.

Авторська довідка:

Тетяна Володимирівна Зінченко, кандидат технічних наук, доцент
кафедри вищої математики, НУХТ,
e-mail: zin.ta.vl@gmail.com, zin.val@gmail.com,
тел. 095 35 179 05, 097 06 117 15.

Антонелла Миколаївна Дорохович, доктор технічних наук,
професор, НУХТ,
e-mail: avmurzin@ukr.net
тел. 067 94 352 00.