Розрахунок нелінійних функції регресії другого порядку при центральному композиційному ротатабельному плануванні експерименту з довільною кількістю факторів.

Тетяна Зінченко

Вступ. Центральне ротатабельне композиційне планування експерименту (ЦРКП) дозволяє отримати незалежні статистичні дані дослідів для розрахунку багатофакторних функцій регресії та встановлення взаємного впливу різних (кількох) факторів на якісну характеристику досліджуваного процесу.

Матеріали та методи. В задачах регресійного аналізу для знаходження загального (по кількості факторів) алгоритму розрахунку коефіцієнтів багатофакторних функцій регресії згідно з методом мінімальних квадратів необхідно знайти розв'язок системи лінійних розріджених алгебраїчних рівнянь.

Результати. Щоб отримати розв'язок системи за правилом Крамера, необхідно обчислити відповідну кількість визначників. Для розв'язання цієї задачі були отримані рекурентні та прямі формули обчислення розріджених визначників спеціального виду n – го порядку (4 типи). Це дозволило знайти розвязок системи n рівнянь спеціального виду з n невідомими при довільному (фіксованому) значенні n. В задачах регресійного аналізу невідомими є коефіцієнти багатофакторної функції регресії.

Висновки. Отримано алгоритм обчислення коефіцієнтів багатофакторних функцій регресії другого порядку для довільної (фіксованої) кількості факторів.

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

Вступ. В загальному випадку m - факторного центрального композиційного планування експерименту (ЦКП) для дослідження зв’язку між кількома змінними факторами та їх впливу на певну якісну ознаку досліджуваного процесу використовують рівняння множинної регресії першого, другого, рідше – третього порядку, параметри яких оцінюють за даними певної кількості експериментів. Важливою є задача обчислення коефіцієнтів функції регресії другого порядку для m - факторного ротатабельного експерименту (для довільного числа m).

Матеріали і методи. Для математичного моделювання багатофакторних досліджень центрального композиційного планування експерименту використовуються методи математичної статистики (теорія кореляції), методи лінійної алгебри (знаходження розв’язків систем лінійних рівнянь). Крім того, було використано метод математичної індукції для знаходження рекурентних формул обчислення визначників спеціального виду довільного (сталого) порядку .

Розрізняють дві моделі ЦКП – ортогональну та ротатабельну (відповідно рис.1 та рис.2 для двофакторного експерименту з координатами точок в кодованому вигляді) [ ].

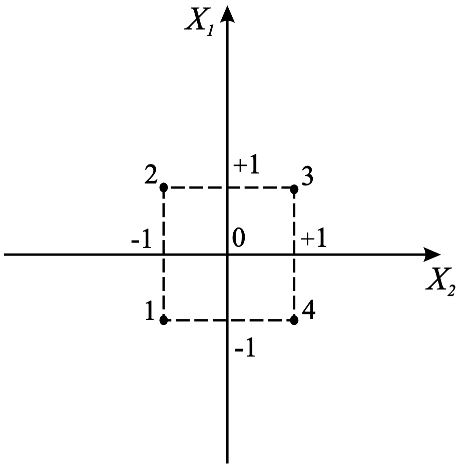

Рис. 1. Схема двофакторного ортогонального ЦКП.

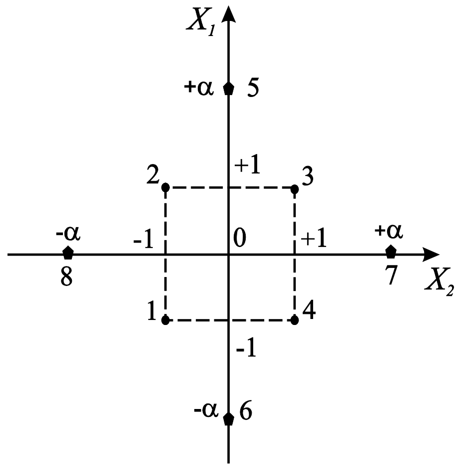

Рис. 2. Схема двофакторного ротатабельного ЦКП (α - величина «плеча») .

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

Результати. Рівняння множинної регресії I порядку (лінійне) має вигляд

$$y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + ... + b_m X_m, \tag{1}$$

де X_i - змінна i-го фактору, $i = \overline{1,m}$; m - кількість факторів. Оцінка параметрів цього рівняння – коефіцієнтів $b_0, b_1, b_2, ... b_m$ - 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] :

$$\overline{b} = \left(X^T X\right)^{-1} \cdot X^T \cdot \overline{y}, \tag{2}$$

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

$\overline{y} = (y_1, y_2, ... y_N)^T$ - вектор значень критерію в N дослідах,

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

Функція регресії другого порядку у повній формі для m факторів має вигляд:

$$y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + ... + b_m X_m + b_{12} X_1 X_2 + ... + b_{(m-1)m} X_{m-1} X_m + b_{11} X_1^2 + ... + b_{mm} X_m^2,$$

або

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^{m} b_i X_i + \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{k=i+1,}^{m} b_{ik} X_i X_k + \sum_{i=1}^{m} b_{ii} X_i^2 \quad , \tag{4}$$

де X_i - змінна i-го фактору, $i = \overline{1,m}$; $b_0, b_1, ..., b_m, b_{12}, ..., b_{(m-1)m}, b_{11}, ..., b_{mm}$ - коефіцієнти рівняння регресії, які інакше можна описати: b_0, b_i, b_{ik}, $i = \overline{1,m}$, $k = \overline{2,m}$, $i < k$ $(b_{ik} = b_{ki})$.

Якщо в рівнянні (4) зробити заміну змінних:

$$Z_1 = X_1; Z_2 = X_2; ... Z_m = X_m; Z_{m+1} = X_1 \cdot X_1; Z_{m+2} = X_1 \cdot X_2; ... Z_r = X_m \cdot X_m;$$

де кількість нових змінних дорівнює:

$$r = m + \frac{m(m-1)}{2} + m = 2m + \frac{m^2}{2} - \frac{m}{2} = \frac{m^2 + 3m}{2} \quad , \tag{5}$$

то функція регресії (4) трансформується в лінійну функцію:

$$y = a_0 + a_1 \cdot Z_1 + ... + a_m \cdot Z_m + a_{m+1} \cdot Z_{m+1} + ... + a_r \cdot Z_r = a_0 + \sum_{j=1}^{m} a_j \cdot Z_j + \sum_{j=m+1}^{r-m} a_j \cdot Z_j + \sum_{j=r-m+1}^{r} a_j \cdot Z_j , \quad (6)$$

де a_j -невідомі коефіцієнти. Для $j = \overline{1,m}$ вектор Z_j дорівнює:

$$Z_j = \begin{pmatrix} z_{1j} & z_{2j} & ... & z_{rj} \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} x_{1j} & x_{2j} & ... & x_{rj} \end{pmatrix}^T .$$

Для $j: \quad m < j \le r$ вектор Z_j визначається за правилом добутку відповідних координат:

$$Z_j = X_i X_k = \begin{pmatrix} x_{1i}x_{1k} & x_{2i}x_{2k} & ... & x_{ri}x_{rk} \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} z_{1j} & z_{2j} & ... & z_{rj} \end{pmatrix}^T .$$

Наприклад, 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 m - кількість факторів, 2^m - кількість точок ортогонального факторного експерименту, $2m$ - кількість “зіркових точок ”, n_0 - кількість дослідів в центрі плану. Кодовані значення даних за результатами дослідів для випадку $m = 3, n_0 = 6, N = 20$ представлені в табл.1.

Таблиця 1.

Матриця трифакторного ротатабельного ЦКП
для функції регресії другого порядку .

Система дослідів	№ досліду	Z_1	Z_2	Z_3	Z_4	Z_5	Z_6	Z_7	Z_8	Z_9	y_j
		X_1	X_2	X_3	X_1X_2	X_2X_3	X_1X_3	X_1^2	X_2^2	X_3^2	
ПФЕ типу 2^m	1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	+1	+1	y_1
	2	+1	-1	-1	-1	+1	-1	+1	+1	+1	y_2
	3	-1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	+1	y_3
	4	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1	+1	y_4
	5	+1	+1	-1	+1	-1	-1	+1	+1	+1	y_5
	6	-1	+1	+1	-1	+1	-1	+1	+1	+1	y_6
	7	+1	-1	+1	-1	-1	+1	+1	+1	+1	y_7
	8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	y_8
Досліди в “зіркових” точках	9	$-\alpha$	0	0	0	0	0	α^2	0	0	y_9
	10	$+\alpha$	0	0	0	0	0	α^2	0	0	y_{10}
	11	0	$-\alpha$	0	0	0	0	0	α^2	0	y_{11}
	12	0	$+\alpha$	0	0	0	0	0	α^2	0	y_{12}
	13	0	0	$-\alpha$	0	0	0	0	0	α^2	y_{13}
	14	0	0	$+\alpha$	0	0	0	0	0	α^2	y_{14}

Досліди в центрі плану	15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	y_{15}
	16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	y_{16}
	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 в результаті N експериментів були отримані значення якісної ознаки досліджуваного процесу y_n, $n = 1...N$, для знаходження коефіцієнтів функції (6) можна застосувати метод мінімальних квадратів:

$$Q = \sum_{n=1}^{N}\left[y_n - (a_0 + \sum_{j=1}^{r} a_j \cdot z_{nj}) \right]^2 \to min. \qquad (7)$$

Знайти коефіцієнти $\alpha_j (j = \overline{0,r})$ функції регресії (6) означає - знайти розв'язок системи рівнянь:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial Q}{\partial a_0} = 2\sum_{n=1}^{N}\left[y_n - (a_0 + \sum_{j=1}^{r} a_j \cdot z_{nj}) \right] \cdot (-1) = 0; \\ \dfrac{\partial Q}{\partial a_l} = 2\sum_{n=1}^{N}\left[y_n - (a_0 + \sum_{j=1}^{r} a_j \cdot z_{nj}) \right] \cdot z_{nl} = 0; \end{cases} \qquad \begin{cases} Na_0 + \sum_{n=1}^{N}\sum_{j=1}^{r} a_j \cdot z_{nl} = 0; \\ \sum_{n=1}^{N} y_n z_{nl} = \sum_{n=1}^{N}(a_0 + \sum_{j=1}^{r} a_j \cdot z_{nj}) \cdot z_{nl}. \end{cases} \qquad (8)$$

$$l = \overline{1,r}.$$

Система (8) є системою $\left(r+1\right)$ рівнянь:

$$\begin{cases} Na_0 + a_1 \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{n1} + a_2 \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{n2} + ... + a_r \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{nr} = \sum_{n=1}^{N} y_n = I_0; \\ a_0 \sum_{n=1}^{N} z_{n1} + a_1 \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{n1} \cdot z_{n1} + a_2 \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{n2} \cdot z_{n1} + ... + a_r \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{nr} \cdot z_{n1} = \sum_{n=1}^{N} y_n \cdot z_{n1} = I_1; \\ a_0 \sum_{n=1}^{N} z_{n2} + a_1 \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{n1} \cdot z_{n2} + a_2 \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{n2} \cdot z_{n2} + ... + a_r \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{nr} \cdot z_{n2} = \sum_{n=1}^{N} y_n \cdot z_{n2} = I_2; \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_0 \sum_{n=1}^{N} z_{nr} + a_1 \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{n1} \cdot z_{nr} + a_2 \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{n2} \cdot z_{nr} + ... + a_r \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{nr} \cdot z_{nr} = \sum_{n=1}^{N} y_n \cdot z_{nr} = I_r; \end{cases} \qquad (9)$$

Вектори $Z_1, Z_2, ..., Z_{r-m}$ є ортогональними (скалярні добутки рівні нулю: $Z_i Z_k = 0, i \neq k$), система рівнянь (9) є розрідженою:

$$
\begin{cases}
N\alpha_0 + \alpha_{r-m+1} \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{n,r-m+1} + \alpha_{r-m+2} \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{n,r-m+2} + ... + \alpha_r \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{nr} = \sum_{n=1}^{N} y_n = I_0; \\
a_1 \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{n1} \cdot z_{n1} = \sum_{n=1}^{N} y_n \cdot z_{n1} = I_1; \\
a_2 \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{n2} \cdot z_{n2} = \sum_{n=1}^{N} y_n \cdot z_{n2} = I_2; \\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\
a_{r-m} \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{r-m} \cdot z_{r-m} = \sum_{n=1}^{N} y_n \cdot z_{r-m} = I_{r-m}; \\
a_0 \sum_{n=1}^{N} z_{r-m+1} + a_{r-m+1} \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{r-m+1} \cdot z_{r-m+1} + a_{r-m+2} \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{r-m+2} \cdot z_{r-m+1} + ... + a_r \cdot \sum_{n=1}^{N} z_r \cdot z_{r-m+1} = \sum_{n=1}^{N} y_n \cdot z_{r-m+1} = I_{r-m+1}; \\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\
a_0 \sum_{n=1}^{N} z_{nr} + a_{r-m+1} \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{r-m+1} \cdot z_r + a_{r-m+2} \cdot \sum_{n=1}^{N} z_{r-m+2} \cdot z_r + ... + a_r \cdot \sum_{n=1}^{N} z_r \cdot z_r = \sum_{n=1}^{N} y_n \cdot z_{nr} = I_r.
\end{cases}
$$

Розвязати систему (9) допоможуть формули обчислення визначників спеціального виду, представлені в даній роботі. Для знаходження математичного розв'язку для r коефіцієнтів функції регресії (1) необхідно розв'язати систему r рівнянь, де

$$r = m + \frac{m(m-1)}{2} + m = 2m + \frac{m^2}{2} - \frac{m}{2} = \frac{m^2 + 3m}{2}. \tag{2}$$

Щоб отримати розв'язок системи за правилом Крамера, необхідно обчислити відповідну кількість визначників. Для розв’язання цієї задачі були отримані формули обчислення визначників спеціального виду $n-$ го порядку. Розглянемо визначники деяких важливих квадратних матриць, що мають n рядків і n стовпчиків [ ].

1. $$I_n = \left| \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & ... & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & ... & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & ... & 0 & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & 0 & ... & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & ... & -1 & 0 \end{pmatrix} \right|$$

$$I_n = (-1)^{n+1} \cdot (-1)^{n-1} = 1.$$

2. $$J_n = \left| \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & ... & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & ... & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & ... & 0 & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ 1 & 0 & 0 & ... & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & ... & 0 & -1 \end{pmatrix} \right|$$

$$J_n = (-1)^{n+1} \cdot n.$$

3. $$A_n = \left| \begin{pmatrix} a & 1 & 1 & ... & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & ... & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & ... & 0 & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ 1 & 0 & 0 & ... & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & ... & 0 & -1 \end{pmatrix} \right|$$

$$A_n = (-1)^{n+1} \cdot (n - 1 + a).$$

4. $$B_n = \left| \begin{pmatrix} b_1 & 1 & 1 & ... & 1 & 1 \\ b_2 & -1 & 0 & ... & 0 & 0 \\ b_3 & 0 & -1 & ... & 0 & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ b_{n-1} & 0 & 0 & ... & -1 & 0 \\ b_n & 0 & 0 & ... & 0 & -1 \end{pmatrix} \right|$$

$$B_n = (-1)^{n+1} \cdot (b_1 + b_2 + ... + b_n).$$

Введемо позначення:

$$I_0 = \sum_{k=1}^{N} y_k; \quad I_i = \sum_{k=1}^{N} y_k \cdot x_{ik}; \quad I_{ij} = \sum_{k=1}^{N} y_k x_i x_j; \quad I_{ii} = \sum_{k=1}^{N} y_k \cdot x_i^2; \quad S = \sum_{i=1}^{m} I_{ii}; \tag{11}$$

$$v = 2^m + 2\alpha^2; \quad R = M\left(2\alpha^4 + m \cdot 2^m\right) - m \cdot v^2.$$

Розвязок системи рівнянь (9) дозволяє отримати формули для обчислення коефіцієнтів функції регресії (4):

$$\begin{cases} b_i = \dfrac{1}{v} \cdot I_i, \; i = \overline{1,m}; \\ b_0 = I_0 \cdot \dfrac{2 \cdot \alpha^4 + m \cdot 2^m}{R} - \dfrac{v}{R} \cdot S; \\ b_{ii} = I_0 \cdot \left(-\dfrac{v}{R}\right) + \dfrac{v^2 - m2^m}{2\alpha^4 \cdot R} \cdot S + \dfrac{1}{2\alpha^4} \cdot I_{ii}; \\ b_{ij} = \dfrac{1}{2^m} \cdot I_{ij}, i < j, \end{cases} \tag{12}$$

$i, j = \overline{1,m}$; m - кількість факторів.

Якщо у формулах (4) і (12) – функції регресії та формулах обчислення коефіцієнтів – покласти, наприклад, $m = 3$, то отримані формули коефіцієнтів функції регресії для випадку трьох факторів повністю співпадають з розглянутими розвязками для відповідної задачі в роботі [ ].

Висновки. Якщо для дослідження впливу m змінних факторів на певну якісну ознаку досліджуваного процесу використовують центральне композиційне ротатабельне планування експерименту (ЦКРП) , і якщо в результаті N експериментів були отримані значення якісної ознаки досліджуваного процесу y_n, $n = 1...N$, для знаходження оптимального співвідношення між факторами можна використати аналіз властивостей багатофакторної функції регресії другого порядку та знаходження точок її екстремумів. Отримано алгоритм обчислення коефіцієнтів та знаходження функції регресії другого порядку для довільної (фіксованої) кількості факторів:

- за даними експериментів обчислити всі суми за формулами (11);
- обчислити коефіцієнти b_0, b_i, b_{ii}, b_{ij} за формулами (12);
- підставити значення коефіцієнтів b_0, b_i, b_{ii}, b_{ij} у формулу функції регресії (4).

Дослідження властивостей функції регресії є окремою (іншою) математичною задачею.

Література.

1. *Грачев Ю.П.* Математические методы планирования эксперимента / Ю.П.Грачев, Ю.М. Плаксин. – М.: ДеЛи принт, 2005. - 296 с.
2. *Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В.* Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. Изд.2-е. – М.: Наука, 1976.
3. *Tetiana Zinchenko, Antonella Dorokhovich* Calculation of functions of multiple regression of the second order in the tasks of the central composition planning of experiment.// Ukrainian Food Journal.2014. Volume 3. Issue 5. - P. 15-22.

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

оценки взаимного влияния различных (нескольких) факторов на качественную характеристику исследуемого процесса..

Материалы и методы. В задачах регрессионного анализа для нахождения обобщенного (по количеству факторов) алгоритма расчета коэффициентов многофакторных функций регрессии согласно методу минимальных квадратов необходимо найти решение ситемы линейных разреженных алгебраических уравнений.

Результаты. Для решения системы уравнений по правилу Крамера необходимо вычислить соответственное количество определителей. Для решения этой задачи были получены рекуррентные и прямые формулы вычисления разреженных определителей специального вида $n-$го порядка (4типа). Это позволило найти решение системы n уравнений специального вида с n неизвестными для произвольного (фиксированного) значения n. В задачах регресионного анализа неизвестными выступают коэффициенты многофакторной функции регрессии.

Выводы. Получен алгоритм расчета коэффициентов многофакторных функций регрессии второго порядка для произвольного (фиксированного) количества факторов.

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

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. +38 095 35 179 05, +38 097 06 117 15.