61. ВИЗНАЧЕННЯ КОЕФІЦІЄНТІВ ФУНКЦІЇ НЕЛІНІЙНОЇ МНОЖИННОЇ РЕГРЕСІЇ З ДОВІЛЬНОЮ КІЛЬКІСТЮ КОДОВАНИХ ЗМІННИХ

Тетяна Зінченко
Національний університет харчових технологій

Вступ. Розглядається задача розрахунку функцій множинної регресії другого порядку з довільною кількістю змінних, представлених в кодованій формі, наприклад, для організації центрального композиційного ротатабельного планування експерименту з метою оптимізації процесу чи об'єкту.

Методи. Для розв'язання поставленої задачі використані методи математичної статистики, а також методи лінійної алгебри (знаходження розв'язків систем лінійних рівнянь).

Рівняння множинної регресії 2-го порядку (нелінійне) має вигляд

$$y = a_0 + \sum_{i=1}^{k} a_i x_i + \sum_{i=1}^{k} \sum_{r=1, r>i}^{k} a_{ir} x_i x_r + \sum_{i=1}^{k} a_{ii} x_i^2 , \tag{1}$$

де x_i - змінні аргументи, $i = \overline{1,k}$, a_0, a_i, a_{ir}, a_{ii} - коефіцієнти, які визначаються за результатами експериментів. Заміною змінних можна перетворити це рівняння до лінійної форми

$$y = b_0 + b_1 z_1 + b_2 z_2 + \ldots + b_m z_m , \tag{2}$$

де m - кількість нових змінних. Оцінка параметрів цього рівняння – коефіцієнтів $b_0, b_1, b_2, \ldots b_m$ - виконується за даними вибірки (за результатами N експериментів) $z_{j1}, z_{j2}, .. z_{jm}, y_j$, $j = 1, 2, \ldots N$, за методом найменших квадратів.

Для знаходження $(m+1)$ коефіцієнтів функції (1) необхідно забезпечити відповідний ранг матриці ортогональних кодованих планів, тому композиційне планування необхідно організувати за ротатабельним принципом: ортогональний план в 2^n точках і в $2n$ «зіркових точках» з певною величиною плеча α.

Результати. Згідно методу мінімальних квадратів коефіцієнти функції (2) знаходимо як розвязок задачі:

$$Q(b_0,b_1,...b_m)=\sum_{j=1}^{N}\left(y_j-(b_0+\sum_{i=1}^{m}b_iz_i)\right)^2\to min. \qquad (3)$$

Прирівнюючи частинні похідні функції $Q(b_0,b_1,...b_m)$ до нуля, отримуємо систему $(m+1)$ рівнянь для визначення невідомих коефіцієнтів, де кількість m дорівнює:

$$m=k+\frac{k(k-1)}{2}+k=\frac{k^2}{2}+\frac{3k}{2}=\frac{k^2+3k}{2},$$

k – кількість змінних аргументів x_i функції регресії (1).

Щоб отримати розв'язок системи за правилом Крамера, необхідно обчислити відповідну кількість визначників. Задача ускладнюється тим, що порядок визначників є загальним, має параметричний характер. Для розв’язання цієї задачі за допомогою методу математичної індукції були отримані рекурентні та прямі формули обчислення визначників спеціального виду n – го порядку, серед яких, наприклад, використовуються такі:

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

$$J_n=(-1)^{n+1}-J_{n-1}; \qquad A_n=(-1)^{n+1}-A_{n-1}.$$

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

Введемо позначення:

$$S_0=\sum_{j=1}^{N}y_j;\;\; S_i=\sum_{j=1}^{N}y_jx_{ji};\;\; S_{ii}=\sum_{j=1}^{N}y_jx_{ij}^2;\;\; S=\sum_{i=1}^{m}S_{ii};\;\; i=\overline{1,k};\, r=\overline{1,k};$$

для $r>i: S_{ir}=\sum_{j=1}^{N}y_jx_{ij}x_{rj};\;\; c=2^k+2\alpha^2;\;\; p=N(2\alpha^4+k2^k)-kc^2.$ (4)

Формули для знаходження коефіцієнтів функції регресії другого порядку набувають вигляду:

$$\alpha_0=-\frac{c}{p}\cdot S+\frac{2\alpha^4+k2^k}{p}\cdot S_0;\;\; a_i=\frac{1}{c}S_i,\;\; i=\overline{1,k};$$

для $i=\overline{1,k}$, $r>i:\; a_{ir}=\frac{1}{2^k}\cdot S_{ir};\;\; a_{ii}=\frac{1}{2\alpha^4}\cdot S_{ii}+\frac{1}{2\alpha^4}\cdot\frac{c^2-N2^k}{p}\cdot S-\frac{c}{p}\cdot S_0.$ (5)

Висновки. Отримані формули (4), (5) дозволяють розрахувати коефіцієнти функції регресії другого порядку для довільної кількості змінних, представлених в кодованій формі. Їх можна використовувати для досліджень з використанням центрального композиційного ротатабельного планування експерименту з метою оптимізації процесу чи об'єкту.

ЛІТЕРАТУРА

1. Адлер, Ю.П. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий / Ю.П. Адлер, Е.В. Маркова, Ю.В. Грановский. – Изд.2-е. – М.: Наука, 1976.
2. Грачев, Ю.П. Математические методы планирования эксперимента / Ю.П. Грачев, Ю.М. Плаксин. – М.: ДеЛи принт, 2005. – 296 с.
3. Зінченко, Т. Розрахунок функцій множинної регресії другого порядку в задачах центрального композиційного планування експерименту / Т. Зінченко, А. Дорохович. // Ukrainian Food Jornal. – 2014. – Vol. 3, Issue 5.
4. Бадрук, В.В. Оптимізація рецептурних композицій кондитерського виробу маршмелоу дієтичного призначення / В.В. Бадрук, Т.В. Зінченко, А.М. Дорохович // Обладнання та технології харчових виробництв. Збірник наукових праць Донецького національного університету економіки і торгівлі ім.. М. Туган-Барановського – 2013. – № 30. – С. 320 – 326.