

УДК 519.237.5/.7: 519.242.5/.7: 519.688

Використання середовища Mathematica для оптимізації аналітичного запису рівнянь регресії n-го порядку

Баранецький В. І., Гадзаман І. В.

informatyka@drohobych.net

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра інформатики та обчислювальної математики, вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100

У статті розглянуто аналітичний метод побудови рівнянь регресії n-го порядку для q-мірного симплексу за допомогою системи Mathematica у афінній та декартовій системах координат.

Враховуючи складний характер явищ і процесів, що вивчаються у сучасних умовах, високу вартість експлуатації наукового устаткування, необхідність скорочення термінів переходу від лабораторних досліджень до практичного впровадження потрібно не тільки скоротити цей шлях, а й різко зменшити кількість необхідних експериментів, швидко виявити оптимум чи провести опис області оптимуму. Використання обчислювальної техніки для реалізації методів математичної статистики змінює традиційні підходи до проведення експерименту. Це дає можливість перейти від ручного управління, контролю, збору і обробки інформації до діалогової системи: експериментатор – ЕОМ, у основі якої є інтегровані універсальні математичні середовища Mathematica, Maple, MATLAB, STATISTICA і т.п.

Експериментально-статистичні методи дають змогу отримувати математичні моделі таких процесів, строгий детермінований, опис яких взагалі відсутній. Методи оптимального планування експерименту передбачають одночасну зміну всіх параметрів, які впливають на процес або явище. На практиці для побудови таких моделей набули широкого застосування плани Шеффе, Кіфера, Бокса, Дрейпера-Лоуренса, Налімова, ПФЕ [1–4]. Основою побудови математичних моделей для цих планів є апарат регресійного аналізу. Оскільки в більшості задач з вивчення поверхні відклику, залежність між відкликом і незалежними змінними (факторами) невідома, то, на першому етапі необхідно знайти апроксимуючу функцію, загальний вигляд якої можна подати у вигляді звичайного поліному степені n від q змінних, що містить C_{q+n}^n коефіцієнтів:

$$Y = b_0 + \sum_{1 \leq i \leq q} b_i x_i + \sum_{1 \leq i \leq j \leq q} b_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leq i \leq j \leq k \leq q} b_{ijk} x_i x_j x_k + \sum_{1 \leq i \leq j \leq k \leq l \leq q} b_{ijkl} x_i x_j x_k x_l + \dots, \quad (1)$$

де Y – функція відклику (вихідний параметр); x_i – вхідні змінні, фактори (регульовані керуючі параметри); b_0, b_i, b_{ij} і т.д. – коефіцієнти поліному (рівняння регресії); n – число вхідних змінних.

Під час планування експерименту при вивченні діаграм склад-властивість факторний простір – це правильний $(q-1)$ -мірний симплекс, для якого в афінній системі координат виконується співвідношення

$$\sum_{i=1}^q x_i = 1. \quad (2)$$

$q = 3$ правильний симплекс – це рівносторонній трикутник, де кожна з точок трикутника відповідає одному складу потрібної системи, і, навпаки, кожний склад визначається однією точкою. Для $q = 4$ правильний симплекс є тетраедром, кожна вершина якого відповідає 100% вмісту вихідних компонент. Таким чином, зберігається можливість графічної інтерпретації результатів (див. рис.1).

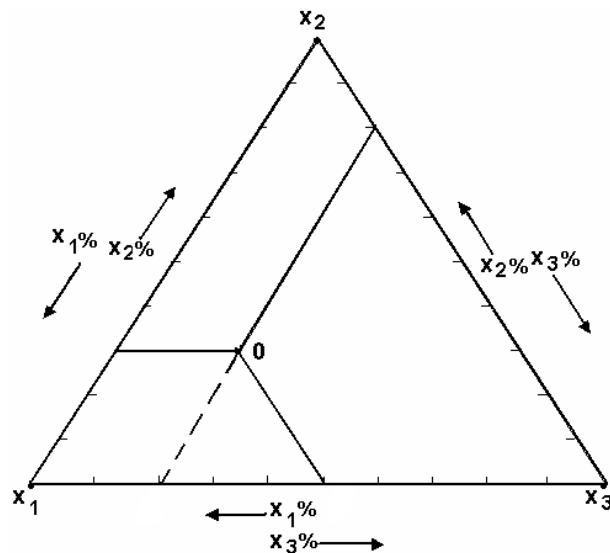


Рис.1. Концентраційний трикутник Розебума

Поряд з афінною системою координат, в планах Дрейпера-Лоуренса для трикомпонентних систем використовується декартова система координат, де початок відліку збігається з центром ваги трикутника, а одна із вершин трикутника лежить на одній із осей координат (див. рис.2), що уможливорює зменшити кількість (членів) доданків поліному (1) [5].

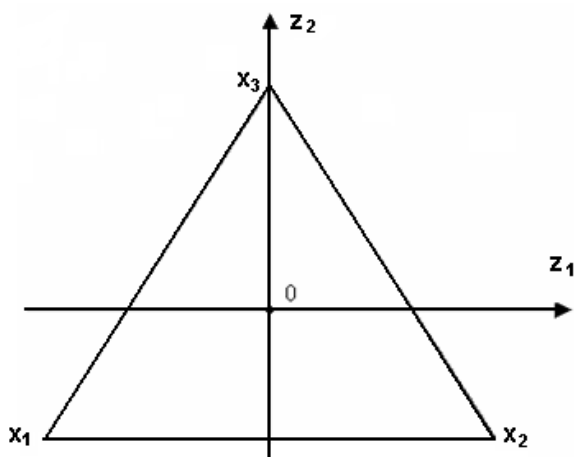


Рис.2. Система координат для планів Дрейпера-Лоуренса Розебума

Оскільки традиційно у фізико-хімічних дослідженнях використовується афінна система, яка є більш зручною для графічної інтерпретації матриці планування та аналізу поверхні відклику, то у ряді випадків доцільно здійснити перехід між цими двома системами координат. У випадку тримірного симплексу між афінною (x_1, x_2, x_3) і декартовою (z_1, z_2) системою координат існує такий зв'язок:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{3}(-3z_1 - z_2\sqrt{3} + m), \\ x_2 &= \frac{1}{3}(3z_1 - z_2\sqrt{3} + m), \\ x_3 &= \frac{1}{3}(2z_2\sqrt{3} + m), \\ z_1 &= \frac{1}{2}(-x_1 + x_2), \\ z_2 &= \frac{\sqrt{3}}{6}(-x_1 - x_2 + 2x_3), \end{aligned} \quad (3)$$

де m – довжина сторони концентраційного трикутника.

Поверхня відклику в багатокомпонентних системах має, як правило, дуже складний характер. У таких випадках для побудови адекватної математичної моделі застосовують плани від другого до восьмого порядків [1, 2]. Однак коли степінь поліному (1) перевищує 2, знаходження аналітичного запису рівняння регресії (в т. ч. при переході з однієї системи координат в іншу) складає певні труднощі та передбачає виконання значного обсягу рутинної роботи, де легко допустити помилки. Тому для знаходження аналітичного запису рівняння регресії доцільним є скористатися системами комп'ютерної математики. На прикладі однієї із них, а саме Mathematica, реалізуємо аналітичний запис рівняння регресії n -го порядку для q -компонентної системи [6].

Очевидно, що доданки рівняння регресії (1) не є чим іншим, як комбінацією x_i , $i = 1, 2, \dots, q$, які помножені на відповідні коефіцієнти b_i , b_{ij} , $b_{ijk} \dots$.

Для побудови таких комбінацій скористаємось командою `Tuples`. Загальний вигляд цієї команди такий:

`Tuples[list, n]`,

де `list` – масив елементів (у нашому випадку $\prod_{i=1}^q x_i$), n – порядок рівняння регресії. Після виконання цієї команди отримаємо вкладені списки всіх можливих n -кортежів елементів списку `list`. Для подальшого використання ці списки потрібно звести до одновимірному масиву та усунути однакові елементи за допомогою команд `Flatten` та `Union`. Перша з них зводить вкладені списки до одновимірному, а друга – відсіває однакові елементи.

```
n = 4; q = 3; m = 1; xx = Table[x[i], {i, q}];
xxx = Times@@xx; dodx = {};
Do[pd[i] = Union[Tuples[xxx, i]]; dodx = Union[dodx, pd[i]], {i, n}];
Do[step[j] = Exponent[dodx[[j]], xx]; el[j] = {};
Do[el[j] = Join[el[j], Table[b[i], {step[j][[[i]]}], {i, q}],
{j, Length[dodx]}]; Table[b[el[i]] * dodx[[i]], {i, Length[dodx]}];
y = b[{0}] + Plus@@#
b[{0}] + b[{1}] x[1] + b[{1, 1}] x[1]^2 + b[{1, 1, 1}] x[1]^3 +
b[{1, 1, 1, 1}] x[1]^4 + b[{2}] x[2] + b[{1, 2}] x[1] x[2] +
b[{1, 1, 1, 2}] x[1]^3 x[2] + b[{2, 2}] x[2]^2 + b[{1, 2, 2}] x[1] x[2]^2 +
b[{1, 1, 2, 2}] x[1]^2 x[2]^2 + b[{2, 2, 2}] x[2]^3 + b[{1, 2, 2, 2}] x[1] x[2]^3 +
b[{2, 2, 2, 2}] x[2]^4 + b[{3}] x[3] + b[{1, 3}] x[1] x[3] + b[{1, 1, 3}] x[1]^2 x[3] +
b[{1, 1, 1, 3}] x[1]^3 x[3] + b[{2, 3}] x[2] x[3] + b[{1, 2, 3}] x[1] x[2] x[3] +
b[{1, 1, 2, 3}] x[1]^2 x[2] x[3] + b[{2, 2, 3}] x[2]^2 x[3] +
b[{1, 2, 2, 3}] x[1] x[2]^2 x[3] + b[{2, 2, 2, 3}] x[2]^3 x[3] +
b[{1, 3, 3}] x[1] x[3]^2 + b[{1, 1, 3, 3}] x[1]^2 x[3]^2 + b[{2, 3, 3}] x[2] x[3]^2 +
b[{1, 2, 3, 3}] x[1] x[2] x[3]^2 + b[{2, 2, 3, 3}] x[2]^2 x[3]^2 + b[{3, 3, 3}] x[3]^3 +
b[{1, 3, 3, 3}] x[1] x[3]^3 + b[{2, 3, 3, 3}] x[2] x[3]^3 + b[{3, 3, 3, 3}] x[3]^4
```

Рис.3. Програмна реалізація побудови аналітичного вигляду рівняння регресії для $n = 4$, $q = 3$ у афінній системі координат

```
n = 4; q = 3; m = 1;
zz = Table[z[i], {i, q-1}]; zzz = Times@@zz;
dodz = {}; Do[pd[i] = Union[Tuples[zzz, i]];
dodz = Union[dodz, pd[i]], {i, n}];
Do[step[j] = Exponent[dodz[[j]], zz]; el[j] = {};
Do[el[j] = Join[el[j], Table[b[i], {step[j][[[i]]}],
{i, q-1}], {j, Length[dodz]}];
Table[b[el[i]] * dodz[[i]], {i, Length[dodz]}];
y = b[{0}] + Plus@@#
b[{0}] + b[{1}] z[1] + b[{1, 1}] z[1]^2 + b[{1, 1, 1}] z[1]^3 +
b[{1, 1, 1, 1}] z[1]^4 + b[{2}] z[2] + b[{1, 2}] z[1] z[2] +
b[{1, 1, 2}] z[1]^2 z[2] + b[{1, 1, 1, 2}] z[1]^3 z[2] +
b[{2, 2}] z[2]^2 + b[{1, 2, 2}] z[1] z[2]^2 +
b[{1, 1, 2, 2}] z[1]^2 z[2]^2 + b[{2, 2, 2}] z[2]^3 +
b[{1, 2, 2, 2}] z[1] z[2]^3 + b[{2, 2, 2, 2}] z[2]^4
```

Рис.4. Програмна реалізація побудови аналітичного вигляду рівняння регресії для $n = 4$, $q = 3$ у декартовій системі координат

Для того, щоб сформувати масив коефіцієнтів з відповідними індексами, необхідно скористатися командою `Exponent`, що визначає найбільший степінь полінома. Використавши її у циклі, побудуємо масив коефіцієнтів b_i , b_{ij} , $b_{ijk} \dots$.

На рис.3 і рис.4 наведена програмна реалізація рівняння (1) в афінній та декартовій системі координат.

Запропонований метод побудови рівняння регресії n -го порядку для q -мірного симплексу значно спрощує подальшу оцінку коефіцієнтів b_i , b_{ij} , $b_{ijk} \dots$, яку можна здійснити в Mathematica за допомогою функції `Fit`.

Бібліографія

- [1] Чалый В.Д. Планы эксперимента высоких порядков для идентификации объектов. – М.: МИФИ, 1987.
- [2] Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химической технологии. – М.: Высш. школа, 1985. – 327 с.
- [3] Монтгомери Д. К. Планирование эксперимента и анализ данных: Пер. с англ. – Л.: Судостроение, 1980. – 384 с.
- [4] Налимов В.В. Применение математической статистики при анализе вещества. М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1960. – 430 с.
- [5] Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ. К.: Диалектика, 2007. – 912 с.
- [6] Дьяконов В.П. Mathematica 4.1/4.2/5.0 в математических и научно-технических расчетах. М.: СОЛОН-Пресс, 2004. – 316 с.