

Домашнє завдання з дисципліни «Планування наукового експерименту і комп'ютерна обробка результатів.»

Укладач: д.х.н., проф. Чумак.В.Л.

Вимоги до виконання та захисту домашнього завдання

Завдання для виконання домашньої роботи є індивідуальним для кожного студента (за варіантами і за видами хіміко-технологічного процесу). Домашнє завдання студенти виконують вдома, а потім його захищають викладачеві.

Завдання для виконання домашнього завдання (денна форма навчання) та контрольної (домашньої) роботи (заочна форма навчання) розміщено нижче, його мета полягає у засвоєнні теоретичного і практичного матеріалу тем модуля № 1 та самостійного опрацювання матеріалу з вивчення методів, що використовуються у плануванні екстремального експерименту при знаходженні екстремумів унімодальних функцій.

Студент відповідно до вказаного провідним викладачем варіанту самостійно виконує завдання, оформлює його відповідним чином і захищає.

Тема домашнього завдання:

Аналіз методу найшвидшого спуску на змодельованому експерименті

Теоретичні відомості.

У загальному випадку вигляд поверхні функції відгуку невідомий. З огляду на це при плануванні екстремального експерименту з використанням планів ПФЕ або ДФЕ вважаємо, що деяка область поверхні функції відгуку описується поліномом першого степеня. Здебільшого це не відповідає дійсності, але дає змогу визначити правильний напрям руху в область оптимуму. Наочна ілюстрація дій при пошуку області оптимуму, наведена на рис. 6.11, передбачає наявність деякої функції відгуку, що характеризується існуванням однієї точки максимуму.

Щоб докладно описати послідовність проведення дослідів та розрахунків у разі використання методу найшвидшого спуску, розглянемо приклад (модель), коли залежність функції відгуку від факторів відома, і використаємо її для визначення «експериментальних значень». Залежність функції відгуку від двох факторів запишемо у вигляді простого квадратного рівняння

$$y = a - (b - X_1)^2 - k(c - X_2)^2,$$

де a, b, k, c — деякі сталі коефіцієнти, а X_1, X_2 натуральні — значення факторів.

Маючи залежність функції відгуку від двох факторів у аналітичному вигляді, можна побудувати проєкції перерізів поверхні відгуку на площину X_1OX_2 , тобто ізолінії — лінії однакових значень функції відгуку (як на географічних картах зображують лінії, що показують висоту поверхні. За наявності ізоліній на площині X_1OX_2 можна наочно проілюструвати поетапність пошуку точки оптимуму методом найшвидшого спуску.

Розглянемо приклад на визначення оптимальних умов проведення біосинтезу антибіотика з метою знаходження максимального виходу продукту біосинтезу. Таким чином, у досліді потрібно вивчити вплив двох факторів — температури X_1 , та рН (X_2) на вихід продукту y_N (мкг/мл). Досліди можна проводити при температурі приблизно від 15 до 30°C та при рН приблизно від 4 до 12.

Для визначення напрямку руху до максимального значення функції відгуку (вихід продукту) вибираємо вихідні значення (основний рівень значень факторів) $X_{10} = 20$ °C, та $X_{20} = 5$; інтервал варіювання: $\lambda_1 = 0,5$; $\lambda_2 = 0,2$, а далі згідно з планом ПФЕ 2² ставимо чотири досліди. Значення виходу y_N («експериментальні значення») будемо розраховувати згідно з рівнянням

$$y_N = 300 - (28 - X_1)^2 - 20(8 - X_2)^2. \quad (6.13)$$

(Із цього рівняння випливає, що $y_{N,\max} = 300$ мкг/мл при температурі 28 °C та рН = 8). Вихідні дані зведено в табл. 6.15.

Таблиця 6.15

Вихідні дані для планування експерименту з визначення оптимальних умов проведення біосинтезу антибіотика

Значення	X_1 °C	X_2
Основний рівень (X_{i0})	20,0	5
Максимальний рівень X_{imax}	30,0	12
Мінімальний рівень X_{imin}	15,0	4
Інтервал варіювання λ_i	0,5	0,2

Спочатку побудуємо проєкції перерізів поверхні відгуку на площину X_1OX_2 . Для цього беремо певні значення y_N , наприклад 0, 100, 200, 250, 280, 295, і далі, підставляючи значення X_2 з інтервалу, який обмежується умовою

$$300 - y - 20(8 - X_2)^2 \geq 0,$$

розраховуємо відповідні значення

$$X_1 = b \pm \sqrt{a - y - k(c - X_2)^2} = 28 \pm \sqrt{300 - y - 20(8 - X_2)^2}.$$

Далі будуємо сім'ю залежностей $X_1 = f(X_2)$ при різних значеннях y_N . Для розрахунків та побудови графіків ізольній функції відгуку зручно використовувати MS EXCEL (рис. 6.26).

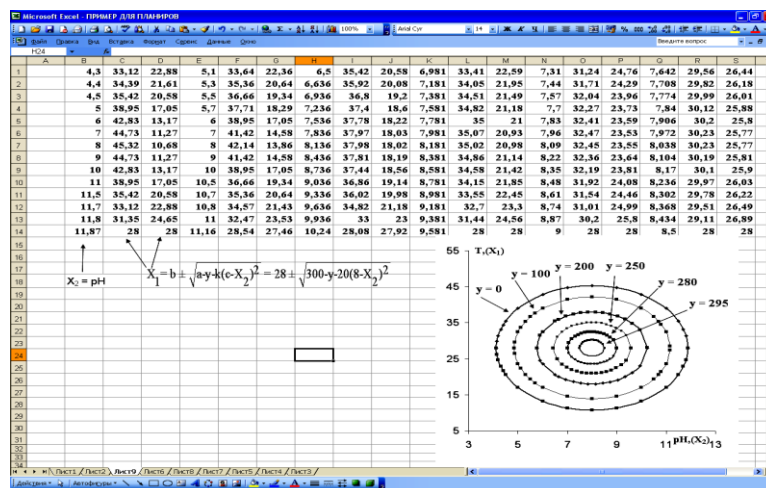


Рис. 6.26. Побудова ізольній функції відгуку

Для розгляду кроків, які мають привести нас у область оптимуму, поставимо чотири досліді згідно з планом ПФЕ 2^2 у відповідних точках (табл. 6.16) і визначимо y_N («експериментальні значення») згідно з рівнянням (6.13). Результати наведено на рис. 6.26.

Таблиця 6.16

Значення факторів для проведення першої серії дослідів за планом ПФЕ 2^2

№	Кодовані змінні		Натуральні значення	
	x_1	x_2	$t, ^\circ\text{C}$	pH
1	-1	-1	19,5	4,8
2	1	-1	20,5	4,8
3	-1	1	19,5	5,2
4	1	1	20,5	5,2

Провівши першу серію дослідів за планом ПФЕ 2^2 , подамо функцію відгуку у вигляді такого рівняння регресії (коєфіцієнти рівняння, розраховані в середовищі MS EXCEL, наведено на рис. 6.27):

$$y_N = 54,95 + 8x_1 + 24x_2.$$

Згідно з цим рівнянням значення функції відгуку зростають, якщо одночасно зростають значення обох факторів.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	x_1	x_2	y_N	X_1	X_2		y_N	X_1	X_2		
2		-1	-1	22,95	19,5	4,8	283,20	24	7,8		
3		1	-1	38,95	20,5	4,8	290,20	25	7,8		
4		-1	1	70,95	19,5	5,2	283,20	24	8,2		
5		1	1	86,95	20,5	5,2	290,20	25	8,2		
6	Перша серія дослідів					Друга серія дослідів					
8	$\sum_{k=1}^N \bar{y}_k$					$\sum_{k=1}^N \bar{y}_k$					
10	$b_0 = \frac{\sum_{k=1}^N \bar{y}_k}{N} = 54,95$					$b_0 = \frac{\sum_{k=1}^N \bar{y}_k}{N} = 286,70$					
12	$\sum_{k=1}^N x_{1k} \bar{y}_k$					$\sum_{k=1}^N x_{1k} \bar{y}_k$					
14	$b_1 = \frac{\sum_{k=1}^N x_{1k} \bar{y}_k}{N} = 8,00$					$b_1 = \frac{\sum_{k=1}^N x_{1k} \bar{y}_k}{N} = 3,50$					
16	$\sum_{k=1}^N x_{2k} \bar{y}_k$					$\sum_{k=1}^N x_{2k} \bar{y}_k$					
18	$b_2 = \frac{\sum_{k=1}^N x_{2k} \bar{y}_k}{N} = 24,00$					$b_2 = \frac{\sum_{k=1}^N x_{2k} \bar{y}_k}{N} = 0,00$					

Рис. 6.27. Результати розрахунків коефіцієнтів рівняння регресії після першої та другої серії дослідів

Визначаємо запас руху Δ_i в напрямі найшвидшого спуску:

$$\Delta_1 = X_{1\max} - X_{01} = 30 - 20 = 10; \Delta_2 = X_{2\max} - X_{02} = 12 - 5 = 7.$$

Розраховуємо «критичність» кожного фактора ($\Delta_i/b_i\lambda_i$):

$$\Delta_1/b_1\lambda_1 = 10/8 \cdot 0,5 = 2,5; \Delta_2/b_2\lambda_2 = 7/24 \cdot 0,2 = 1,47 \approx 1,5.$$

У нашому випадку $\Delta_1/b_1\lambda_1 > \Delta_2/b_2\lambda_2$, а тому критичним фактором є другий. Вибираємо кількість кроків для найшвидшого спуску. Нехай це буде 7.

За найбільш критичним фактором вибрано кількість кроків, що дорівнює 7, і дає змогу визначити крок ΔX_2 :

$$\Delta X_2 = \Delta_2/7 = 1.$$

Далі розраховуємо значення кроку $\Delta X_1 = \Delta X_{\text{крит}}(b_1\lambda_1)/(b_{\text{крит}}\lambda_{\text{крит}}) = 1 \cdot 8 \cdot 0,5/24 \cdot 0,2 = 0,83 \approx 1$. Вибираємо крок $\Delta X_1 = 1,5$.

Таким чином, далі потрібно провести сім експериментальних визначень [у нашому змодельованому експерименті — згідно з рівнянням (6.13)]. Результати наведено в табл. 6.17.

Таблиця 6.17

Значення y_N у напрямі максимуму після першої серії дослідів

«Експериментальні значення» y_N	$X_1, ^\circ\text{C}$	X_2
56	20,0	5
178	21,5	6
255	23,0	7
288	24,5	8
276	26	9
220	27,5	10
119	29,0	11

Із табл. 6.17 випливає, що локальний максимум відповідає значенням факторів $X_1 = 24,5$ і $X_2 = 8$.

Для визначення подальшого напрямку руху до максимального значення функції відгуку потрібно провести другу серію дослідів згідно з планом ПФЕ 2^2 . Знову вибираємо основний рівень значень факторів $X_1 = 24,5$ °C та $X_2 = 8$; інтервал варіювання $\lambda_1 = 0,5$; $\lambda_2 = 0,2$, а далі згідно з планом ПФЕ 2^2 ставимо чотири досліди при відповідних значеннях факторів (табл. 6.18).

Таблиця 6.18

Значення факторів для проведення другої серії дослідів за планом ПФЕ 2^2

№ дослідю	Кодовані змінні		Натуральні значення	
	x_1	x_2	$t, ^\circ\text{C}$	pH
1	-1	-1	24	7,8
2	1	-1	25	7,8
3	-1	1	24	8,2
4	1	1	25	8,2

Провівши другу серію дослідів за планом ПФЕ 2^2 , подамо функцію відгуку у вигляді такого рівняння регресії:

$$y_N = 286,7 + 3,5x_1 + 0 \cdot x_2.$$

Згідно з цим рівнянням значення функції зростають зі зростанням значення тільки першого фактора.

Напрямок руху до області максимуму після першої та другої серії дослідів зображено на рис. 6.28, з якого випливає, що після першої серії дослідів рух іде по прямій AC, а після другої серії дослідів — по прямій BD.

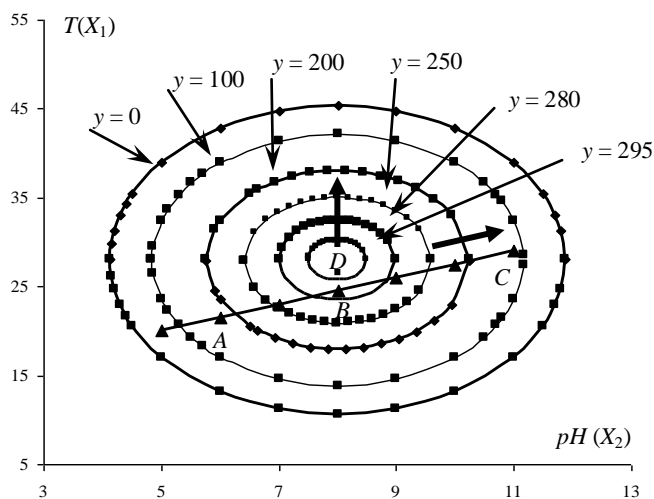


Рис. 6.28. Напрями руху до області максимуму після першої та другої серії дослідів

Розрахунок за цим методом необхідно повторювати доти, доки лінійне рівняння не стане неадекватним.

Далі потрібно провести кілька дослідів (наприклад, шість) змінюючи тільки один фактор X_1 (табл. 6.19).

Таблиця 6.19

Значення y_N в напрямі максимуму після другої серії дослідів

«Експериментальні значення» y_N	$X_1, ^\circ\text{C}$	X_2
291	25	8
296	26	8
299	27	8
300	28	8
299	29	8
296	30	8



Визначення області оптимальної функції відгуку на змодельованому експерименті

Мета роботи: опрацювання методики послідовності проведення дослідів, спрямованих на знаходження області оптимальної функції відгуку, та наочна ілюстрація дій при пошуку області оптимальної за допомогою методу найшвидшого спуску.

Розглянемо використання методу найшвидшого спуску, узявши як експериментальні величини значення функції відгуку, розраховані за певним рівнянням, згідно з яким функція відгуку залежить від двох факторів:

$$y_N = a - (b - X_1)^2 - k (c - X_2)^2,$$

де a, b, k, c — деякі сталі коефіцієнти; X_1, X_2 — натуральні значення факторів.

Завдання для розрахункової роботи

Визначити оптимальні умови проведення біосинтезу антибіотика з метою знаходження максимального виходу продукту біосинтезу. Потрібно вивчити вплив двох факторів — температури (X_1), що змінюється від 20 до 40 °С, та рН (X_2), що змінюється від 3 до 12 на вихід продукту y_N (у мкг/мл).

При проведенні першої серії дослідів за планом ПФЕ 2^2 узяти основний рівень значень факторів $X_1 = 20$ °С, та $X_2 = 4$; інтервал варіювання: $\lambda_1 = 0,5$; $\lambda_2 = 0,2$.

Необхідні вихідні дані для кожного варіанта наведено в табл. 6.20.

Таблиця 6.20

Вихідні дані для задачі в 30 варіантах

Варіант	a	b	k	c
1	265	25	10	6
2	335	26	11	7
3	441	27	12	8
4	589	28	13	9
5	337	29	14	6
6	435	30	15	7
7	577	31	16	8
8	769	32	17	9
9	441	33	18	6
10	567	34	19	7
11	745	35	20	8
12	750	25	21	9
13	324	26	22	6
14	456	27	23	7
15	648	28	24	8
16	906	29	25	9
17	340	30	10	6
18	420	31	11	7
19	536	32	12	8
20	694	33	13	9
21	452	34	14	6
22	560	35	15	7
23	481	25	16	8
24	486	26	10	9
25	293	27	11	6
26	372	28	12	7
27	489	29	13	8
28	650	30	14	9
29	381	31	15	6
30	488	32	16	7

Потрібно пам'ятати, що при побудові ізоліній функції відгуку $X_1 = f(X_2)$ розрахунки значень X_1 можливі в інтервалі значень X_2 , що визначається умовою:

$$a - y - k(c - X_2)^2 \geq 0.$$

Для наведених у табл. 6.19 вихідних даних згідно з поданим рівнянням побудувати графіки (5–6 графіків) проєкцій перерізів поверхні відгуку (ізоліній функції відгуку) на площину X_1OX_2 . Побудувати графіки залежності $X_1 = f(X_2)$ для покрокових значень факторів, визначених після першої та другої серій дослідів. Усі залежності навести на одному графіку.

Розрахувати значення коефіцієнтів рівняння регресії для функції відгуку після першої та другої серії дослідів.