Segédlet a gradiens-módszer használatához

Egyszerűbb esetekre a honlapon megtalálható példa számítási menete használható. Kérdés, hogy mi a helyzet akkor, ha kölcsönhatás is szerepel a redukált modellben.

Vegyünk egy olyan kísérleti tervet, ahol az alábbi 3 faktor azon tartományát szeretnénk megkeresni, amelyben a függő változónak szélsőértéke (a konkrét példában maximuma) van.

Jellemzők	z_1	z_2	z_3
Alsó szint	10	400	40
Fölső szint	25	450	90
Δz	7,5	25	25
z^0	17,5	425	65

1. táblázat

Egy 2^3-os kísérleti terv kiértékelése során, tegyük fel, hogy a következő redukált modellt kaptuk:

$$\hat{Y} = 300{,}4 + 10{,}9x_1 + 38{,}07x_2 + 11{,}59x_1x_2$$

A gradiens ekkor:

$$\underline{grad\hat{Y}} = (10{,}9 + 11{,}59x_2)\delta x_1 + (38{,}07 + 11{,}59x_1)\delta x_2$$

Tehát az együtthatók (a parciális deriváltak) tartalmazzák az x_1-et és x_2-t is. Ahogy lépünk, és változik az x-ek értéke, úgy változnak az együtthatók is. Ez azt jelenti, hogy nem számolhatjuk ki egyszer s mindenkorra a lépések nagyságát, ahogy az egyszerűbb példában láttuk, hanem minden egyes esetben az új együtthatókkal újra kell számolnunk a lépéseket.

A számolás menete:

1. Meghatározzuk a kiindulási pontot. Ebben az esetben tegyük föl, hogy az $x_1 = 0$ és $x_2 = 0$ helyről indulunk (itt a függő változó értéke 292,55). A centrumponti beállítások természetes egységekben:
$$z_1^0 = 17{,}5$$
$$z_2^0 = 425$$

2. Kiszámítjuk a gradiens-függvényekben szereplő együtthatók értékeit (c_j^i a j-edik együtthatót jelöli az i-edik lépésnél).
A kiindulási pontban x_1=x_2=0, így:
$$c_1^1 = 10{,}9 + 11{,}59x_2 = 10{,}9 + 11{,}59 \cdot 0 = 10{,}9$$
$$c_2^1 = 38{,}07 + 11{,}59x_1 = 38{,}07 + 11{,}59 \cdot 0 = 38{,}07$$

3. Kiszámítjuk a $c_j^i \Delta z_j$ szorzatokat (Δz_j a feladat elején meghatározott variációs intervallum)
$$c_1^1 \Delta z_1 = 10{,}9 \cdot 7{,}5 = 81{,}75$$
$$c_2^1 \Delta z_2 = 38{,}07 \cdot 25 = 951{,}75$$

4. Kiszámítjuk a lépést. Ehhez meg kell mondanunk, hogy az egyik faktorral mekkorát lépünk egyszerre (ezt érdemes mérlegelni a fizikai határok figyelembevételével). Vegyük azt az esetet, hogy a 2-es faktorral szeretnénk 30-at lépni, ekkor az 1-es faktorral teendő lépést a következőképpen számoljuk:

$$\frac{c_1^1 \Delta z_1}{c_2^1 \Delta z_2} \cdot 30 = \frac{81{,}75}{951{,}75} \cdot 30 = 2{,}58 \sim 2{,}6$$

Azaz, ha a 2-es faktorral 30-at lépünk, akkor az 1-es faktorral 2,6-ot kell lépnünk.

5. A szimulátorral generáljuk az új kísérlet eredményét a z_1^1=20,1 és z_2^1= 455 helyen. A példánkban ez 315,4-nek adódott. Örülünk, mert nagyobb értéket kaptunk az előzőnél, és a célunk a maximum megtalálása.

6. Szeretnénk újabb lépést tenni a maximum irányába. Az eddigi c_j^i együtthatók csak az előző pontban voltak érvényesek (hiszen, ahogy az elején megállapítottuk, c_j^i függ az *x*-ektől). Így ki kell számítanunk, hogy a transzformált változók értékei mekkorák az új helyen:

$$x_1^2 = \frac{z_1^1 - z_1^0}{\Delta z_1} = \frac{20{,}1 - 17{,}5}{7{,}5} = 0{,}35$$

$$x_2^2 = \frac{z_2^1 - z_2^0}{\Delta z_2} = \frac{455 - 425}{25} = 1{,}2$$

7. Kiszámítjuk az új c_j^i együtthatókat:

$$c_1^2 = 10{,}9 + 11{,}59 x_2 = 10{,}9 + 11{,}59 \cdot 1{,}20 = 24{,}81$$
$$c_2^2 = 38{,}07 + 11{,}59 x_1 = 38{,}07 + 11{,}59 \cdot 0{,}35 = 42{,}13$$

8. Innentől pedig a 3-5. pontot újra végre kell hajtani, ekkor kapjuk a következő pontban mért eredményt. A fentebb leírtakat addig ismételjük, amíg az y mérési eredmény csökkenni nem kezd. A talált maximum környezetében újabb kísérleti tervvel érdemes felderíteni, hogy valóban a maximumot találtuk-e meg (az is előfordulhat, hogy ebben a tér-részben nem érvényes az eredeti kísérleti terv tartományában felírt modell).

	x_1	x_2	z_1	z_2	y
Kiindulás	0,00	0,00	17,5	425	292,55
1. lépés	0,35	1,20	20,10	455	315,40
2. lépés	1,41	3,00	28,05	500	384,23

2. táblázat: A maximum megtalálásához végzett kísérletek eredményei és a kísérleti pontok természetes, illetve transzformált koordinátái