ЗАСТОСУВАННЯ ПОЛЕНОМУ ЧЕБИШЕГО ДЛЯ ПОБУДОВИ БАГАТОФАКТОРНОЇ РЕГРЕСІЇ ГУСТИНИ ЕКСТРАКТУ

Стороженко І.П., Кайдаш М.В.

кафедра фізики, Національний фармацевтичний університет, Харків

e-mail: Storozhenko.Igor@gmail.com

У теперішній час при створенні лікарських засобів різних лікарських форм значного поширення мають методи математичного планування експерименту. Метою даної роботи є отримання багатофакторного рівняння регресії на основі багаточлена Чебишева для оптимізації процесу створення рослинного засобу. Об’єктом дослідження є зразки настоянок, які виготовлені методом мацерації з фітокомпозиції [1].

Поліноми Чебишева [1] мають ряд чудових властивостей, які дозволяють використовувати їх для побудови та опису моделей об'єктів у різних областях. Зокрема поліноми Чебишева є набором ортогональних функцій, які найменше відхиляється від нуля на інтервалі [–1, 1], що має особливе значення при визначенні множинної і криволінійної регресії. Чебишев запропонував загальну інтерполяційну формулу, при якій можливе інтерполювання в найрізноманітніших випадках. Ця інтерполяційна формула задовольняє умовам методу найменших квадратів і виражена за допомогою його ортогональних поліномів. Рішення задачі інтерполяції методом найменших квадратів приводиться до регресійного рівняння:

$$f = b_0 + \sum_{m=1}^{3}\sum_{i=1}^{3} b_{mi}T_m(x_i) + \sum_{i=1}^{2}\sum_{j=i+1}^{3} b_{1ij}T_1(x_i)T_1(x_j) + b_{1111}T_1(x_i)T_1(x_j),$$

де b – коефіцієнти регресії; $T_m(x_i)$ – ортогональні многочлени Чебишева 1-го роду порядку m. Для визначення $T_m(x_i)$ можна скористатися рекурентним співвідношенням:

$$T_{m+1}(x) = (x - \beta_{m+1})T_m(x) - \alpha_{m+1}T_{m-1}(x).$$

Коефіцієнти α і β визначаються з формул:

$$\alpha_{m+1} = \frac{\sum_{j=1}^{n} x_j^m T_m(x_j)}{\sum_{j=1}^{n} x_j^{m-1} T_{m-1}(x_j)} \qquad \beta_{m+1} = \frac{\sum_{j=1}^{n} x_j^{m+1} T_m(x_j)}{\sum_{j=1}^{n} x_j^m T_m(x_j)} - \frac{\sum_{j=1}^{n} x_j^m T_{m-1}(x_j)}{\sum_{j=1}^{n} x_j^{m-1} T_{m-1}(x_j)}$$

Тоді регресійні коефіцієнти:

$$b_m = \frac{\sum_{j=1}^{n} y_j x_j^m - \sum_{k=0}^{m-1} b_k \sum_{j=1}^{n} x_j^m T_k(x_j)}{\sum_{j=1}^{n} x_j^m T_m(x_j)}.$$

Ці вирази можна спростити, якщо за x_i взяти відхилення даних значень аргументу від його середнього $\bar{x}_i$ таким, чином що $\sum_{i=1}^{n} x_i = 0$. Тоді $T_0(x_i)$ дорівнюватиме 1. Тоді

$$b_{mi} = \frac{\sum_{k=1}^{n} y_j T_m(x_{ik})}{\sum_{k=1}^{n} T_m^2(x_{ik})}; \quad b_{mij} = \frac{\sum_{k=1}^{n} y_k T_m(x_{ik}) T_m(x_{jk})}{\sum_{k=1}^{n} (T_m(x_{ik}) T_m(x_{jk}))^2} \quad b_{m111} = \frac{\sum_{k=1}^{n} y_k T_m(x_{1k}) T_m(x_{2k}) T_m(x_{3k})}{\sum_{k=1}^{n} (T_m(x_{ik}) T_m(x_{jk}) T_m(x_{3k}))^2}.$$

$$T_0(x_i) = 1; \qquad T_1(x_i) = x_i; \qquad T_2(x) = x_i^2 - \alpha_{2i}; \quad \alpha_{2i} = \frac{\sum_{k=1}^{n} x_{ik}^2}{n};$$

$$T_3(x) = x_i - \beta_{3i}\left(x_i^2 - \alpha_{2i}\right) - \alpha_{3i} x = x_i^3 - \alpha_{3i} x; \quad \alpha_{3i} = \left(\frac{\sum_{k=1}^{n} x_{ik}^4}{\sum_{k=1}^{n} x_{ik}^2}\right) x.$$

Вихідною реплікою є щільність настоянки ρ, яка ймовірно залежить від трьох чинників присутніх в сировині: екстрагент x, час настоювання t і процентний вміст етилену в розчині c. Потрібно за випадковою незалежною вибіркою відновити закономірність у класі степеневих поліномів, тобто знайти функцію $f(x,t,c)$, найбільш близьку до $\rho(x,t,c)$. Щільність настоянки є складною функцією від c внаслідок залежності щільності етилового розчину ρ_0 від змісту етилену. Для виключення впливу ρ_0 вивчалася відносна щільність $y = \rho / \rho_0$. Всі фактори позначено через x_i: $x_1 = \frac{2(x - \bar{x})}{(x_{\max} - x_{\min})}$; $x_2 = \frac{2(t - \bar{t})}{(t_{\max} - t_{\min})}$; $x_3 = \frac{2(c - \bar{c})}{(c_{\max} - c_{\min})}$.

Модель, що враховує тільки статистично значимі коефіцієнти має коефіцієнт детермінації R^2 =0.98, значення F-критерію F=2,369, що менше критичного значення (F(0,95, 9, 3) = 8,81 і F(0,9, 9, 3) = 5,24, відповідно для 95 і 90% імовірності). Таким чином, отримана модель третього порядку є адекватною на рівні значущості 0,1 та 0,05. Регресійне рівняння, що враховує тільки статистично значимі коефіцієнти має наступний вигляд:

$$\frac{\rho}{\rho_0} = 1{,}02517 + 0{,}10122\left(x - \frac{1}{7{,}5}\right) + 3{,}149 \cdot 10^{-3}(t-9) + 8{,}864 \cdot 10^{-5}(C-60) -$$
$$- 6{,}394 \cdot 10^{-6}(C-60)^2 + 1{,}324 \cdot 10^{-6}(C-60)^3 + 2{,}480 \cdot 10^{-3}\left(x - \frac{1}{7{,}5}\right)(C-60)$$

де $\rho_0 = 0{,}985 - 1{,}876 \cdot 10^{-4} C - 1{,}676 \cdot 10^{-5} C^2$

Література

1. Шульга Л.І. Математичне планування як етап розробки складу та технології фітотерапевтичного засобу / Л.І.Шульга, І.П.Стороженко // Фармацевтичний часопис. – 2012. – № 2 (22). – С. 68 – 72.