

Uitwerkingen

In de uitgewerkte voorbeelden worden vanwege de leesbaarheid afgeronde tussenresultaten gepresenteerd. De eindresultaten zijn echter altijd berekend zonder tussentijds afronden.

Hoofdstuk 8

Antwoord 8.1

De coördinaten van alle vertices worden berekend uitgaande van de factoren in tabel 8.1. Voor 3 variabelen worden 4 vertices berekend met de volgende factoren:

Vertex nr.	x_1	x_2	x_3
1	0	0	0
2	1	0	0
3	0,5	0,866	0
4	0,5	0,289	0,817

De coördinaten van alle vertices worden berekend met de volgende formule (blz. 189):
coördinaat factor = startpunt + (factor uit tabel 8.1) \times stapgrootte.

Bijvoorbeeld voor de coördinaat voor vertex 3 van variabele x_2 wordt dit:
coördinaat factor = 30 + 0,866 \times 8 = 36,9.

Alle coördinaten in onderstaande tabel worden op een overeenkomstige wijze berekend.

startpunt	10	30	20
stapgrootte	10	8	5
Vertex nr.	x_1	x_2	x_3
1	10,0	30,0	20,0
2	20,0	30,0	20,0
3	15,0	36,9	20,0
4	15,0	32,3	24,1

Antwoord 8.2

Vertex	Factoren				Respons	Volgorde
	A	B	C	D		
4	19	33,5	48,2	20	23	W
3	19	40,4	40	20	77	B
1	15	30	40	20	33	N ₁
2	23	30	40	20	61	N ₂
5	19	33,5	42	26,3	62	N ₃
som zonder W	76	133,9	162	86,3		
$\mathbf{c} = \text{som}/4$	19,00	33,48	40,50	21,58		
$\mathbf{c} - \mathbf{w}$	0,00	-0,02	-7,70	1,58		
$\mathbf{r} = \mathbf{c} + (\mathbf{c} - \mathbf{w})$	19,00	33,45	32,80	23,15		
Gemodificeerde simplexmethode						
$\mathbf{e} = \mathbf{c} + 2(\mathbf{c} - \mathbf{w})$	19,00	33,43	25,10	24,73		
$\mathbf{c}_R = \mathbf{c} + 0,5(\mathbf{c} - \mathbf{w})$	19,00	33,46	36,65	22,36		
$\mathbf{c}_W = \mathbf{c} - 0,5(\mathbf{c} - \mathbf{w})$	19,00	33,49	44,35	20,79		

Antwoord 8.3

Het centrum C van het startdesign ligt bij een temperatuur van $T_C = 19$ °C en een substraatconcentratie $S_C = 0,75$ g/L. De stapgrootte is gelijk aan het verschil tussen het hoge en lage niveau van een factor in het design. Voor de temperatuur T is de stapgrootte $S_T = +2$ °C en voor de substraatconcentratie S is deze $S_S = +0,5$ g/L.

Het gemiddelde effect van de temperatuur T is b_1 volgens:

$$b_1 = \frac{\{(y_4 - y_3) + (y_2 - y_1)\}}{2} = \frac{50,8 - 43,3 + 20,1 - 17,7}{2} = 4,95\%$$

Het gemiddelde effect van de substraatconcentratie S is b_2 volgens:

$$b_2 = \frac{\{(y_3 - y_1) + (y_4 - y_2)\}}{2} = \frac{43,3 - 17,7 + 50,8 - 20,1}{2} = 28,15\%$$

Effecten hebben grootte en richting. Ze kunnen dus ook als vectoren worden beschouwd. De vectoren voor de effecten zijn: $T (= \mathbf{b}_1)$ en $S (= \mathbf{b}_2)$.

De *zoekrichting* voor het optimum is gelijk aan de tangens van de hoek tussen de richtingsvector \mathbf{R} en \mathbf{b}_1 : $b_2/b_1 = (28,15/4,95) = 5,6869$.

De lengte van de resulterende richtingsvector \mathbf{R} is:

$$|\mathbf{R}| = \sqrt{b_1^2 + b_2^2} = \sqrt{4,95^2 + 28,15^2} = 28,5819$$

De verandering van de temperatuur ΔT voor nieuwe metingen buiten het startdesign is:

$$\Delta T = \frac{b_1}{|\mathbf{R}|} \cdot S_T \cdot 2 = \frac{4,95}{28,5819} \cdot 2 \cdot 2 = 0,6927$$

De verandering van de substraatconcentratie ΔS voor nieuwe metingen buiten het startdesign is:

$$\Delta S = \frac{b_2}{|\mathbf{R}|} \cdot S_S \cdot 2 = \frac{28,15}{28,5819} \cdot 0,5 \cdot 2 = 0,9849$$

Uitgaande van het startdesign worden in de richting van het steilste pad twee nieuwe responsiemetingen ($i = 1$ en $i = 2$) buiten het design uitgevoerd.

De coördinaten van nieuwe meetpunten i buiten het design kunnen als volgt worden berekend:

$$T_i = T_C + i \cdot \Delta T \text{ met } i = 1 \text{ en } i = 2$$

$$S_i = S_C + i \cdot \Delta S \text{ met } i = 1 \text{ en } i = 2$$

Uitgaande van het startdesign zijn de coördinaten van de nieuwe meetpunten:

$$T_1 = 19 + 1 \cdot 0,6927 = 19,7; S_1 = 0,5 + 1 \cdot 0,9849 = 1,7; \text{ (run 5)}$$

$$T_2 = 19 + 2 \cdot 0,6927 = 20,4; S_2 = 0,5 + 2 \cdot 0,9849 = 2,7; \text{ (run 6)}$$