# Планирование эксперимента при поиске экстремальной области

# Результат ПФЭ, ДФЭ:

Уравнение ***локального*** ***участка*** (линейная модель)

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2$$
$$+ b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3$$

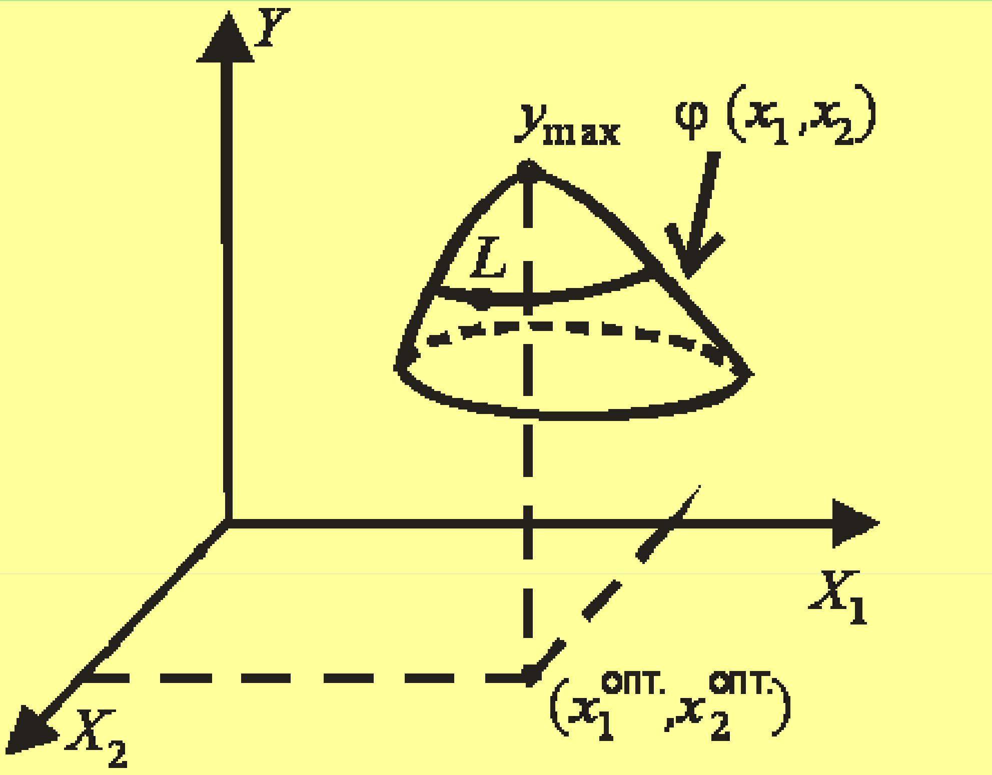
Задача химика, химика-технолога: использовать полученную модель для оптимизации процессов или свойств многокомпонентных систем

# Оптимизация процесса

$$y = \varphi(x_1, x_2, ..., x_k)$$

$$x_1^{опт}, x_2^{опт}, ..., x_k^{опт}$$

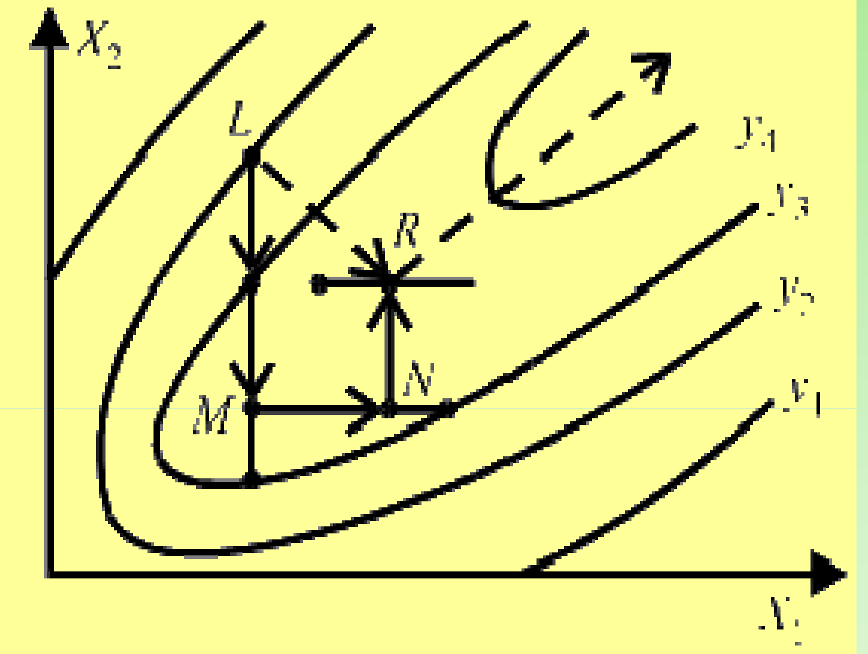
# Поверхность отклика двухфакторного эксперимента




(a)

# Поверхность отклика двухфакторного эксперимента

**Традиционный поиск экстремума:**

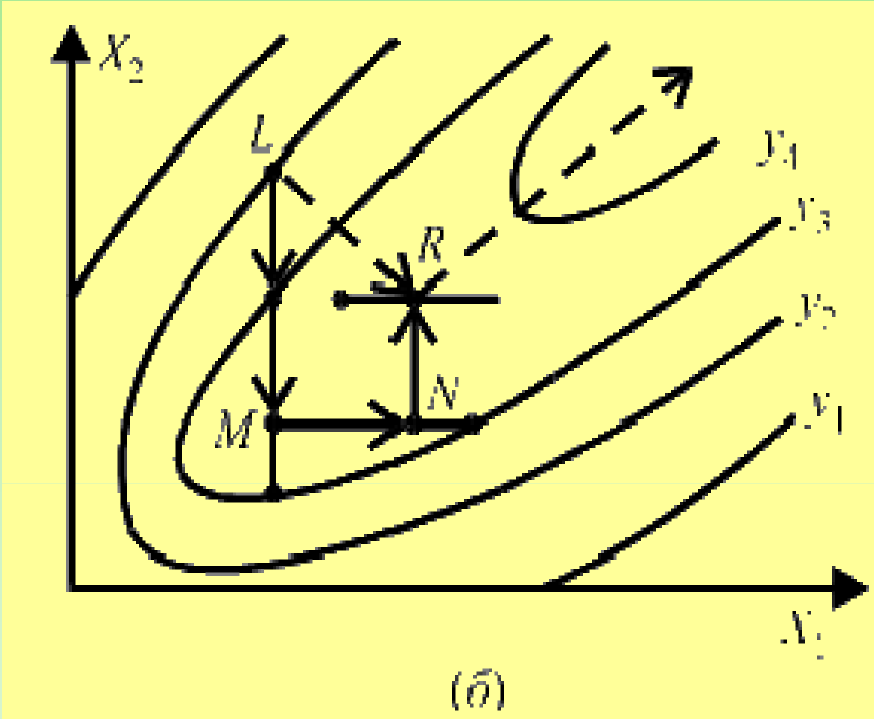


(б)

**Контурные сечения**

# Поверхность отклика двухфакторного эксперимента

**Более эффективно:**




**движение по градиенту перпендикулярно изолиниям *y = const***

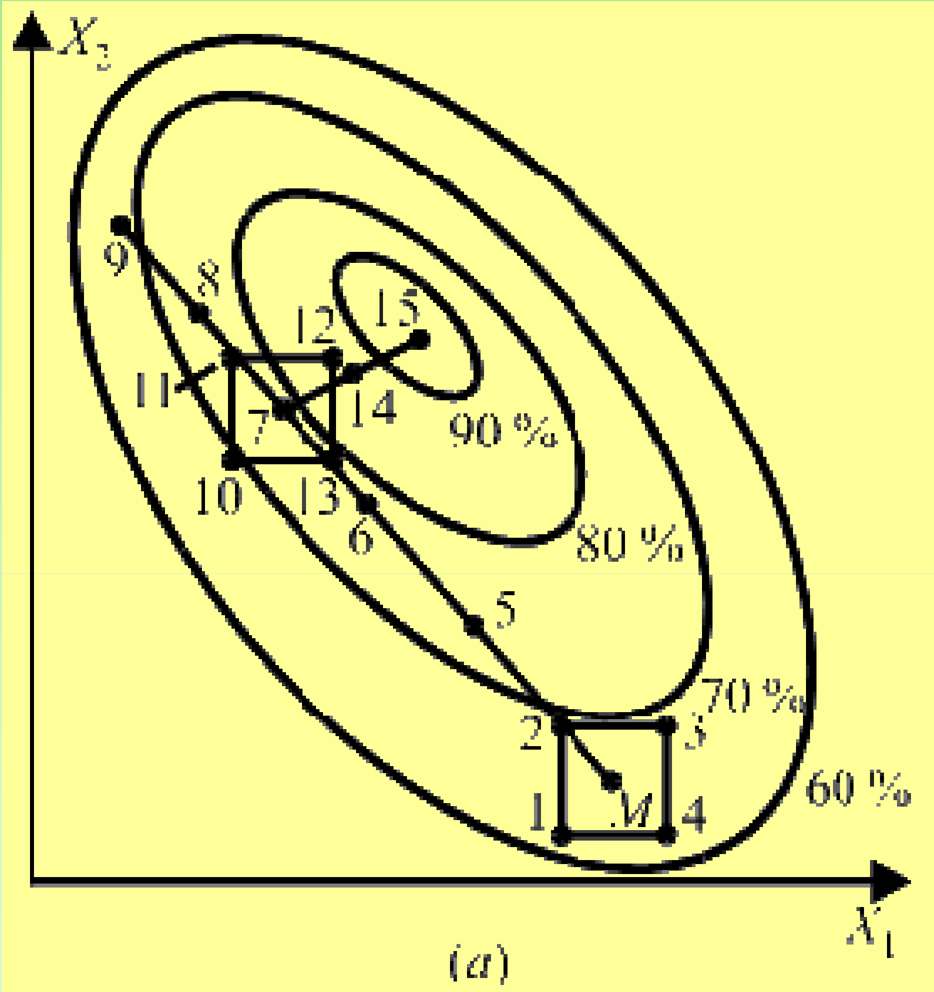
# Метод крутого восхождения Бокса и Уилсона

Шаговый метод движения по поверхности отклика

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots$$

Движение из точки *L* начинается в направлении градиента линейного приближения *с определенным шагом* до тех пор, пока не прекращается прирост *y*

# Метод крутого восхождений Бокса и Уилсона



# Метод крутого восхождения Бокса и Уилсона

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2$$

1. Находят $\boldsymbol{b_1 \Delta z_1}$

2. выбирают шаг движения $\Delta z_1^*$

3. Вычисляют $$\gamma = \frac{\Delta \boldsymbol{z}_1^*}{\boldsymbol{b}_1 \Delta \boldsymbol{z}_1}$$

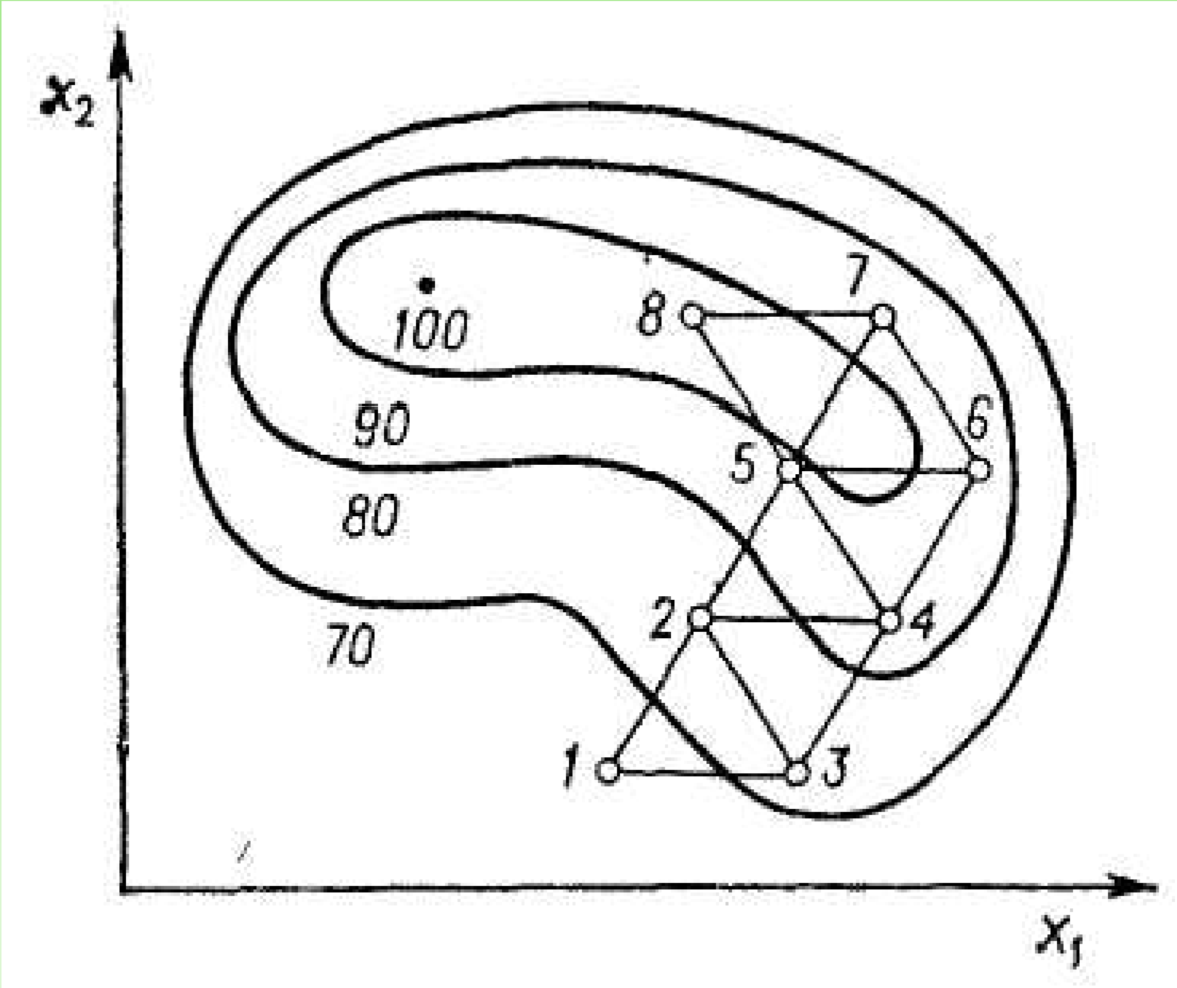
4. Для прочих факторов $\Delta \boldsymbol{z}_j^* = \gamma\, \boldsymbol{b}_j\, \Delta \boldsymbol{z}_j$

# Метод крутого восхождений Бокса и Уилсона

Движение к оптимуму прекращают :

1. Значения (одного или нескольких) факторов или функций отклика вышли на границы допустимых значений.
2. Достигнут экстремум критерия оптимальности ***y***. Тогда в области экстремума функции *y* ищут ее *новое* математическое описание (ПФЭ, ДФЭ)

# Метод последовательного симплекс-планирования



# Расчет симплекса на практике

линейное преобразование уровней факторов

$$x_j = \frac{z_j - z_j^{\text{o}}}{\Delta z_j}$$

# Расчет симплекса на практике

Координаты вершин симплекса при k = 5

$$X = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 \\ -1x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 \\ 0 & -2x_2 & x_3 & x_4 & x_5 \\ 0 & 0 & -3x_3 & x_4 & x_5 \\ 0 & 0 & 0 & -4x_4 & x_5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -5x_5 \end{bmatrix}$$

# Расчет симплекса на практике

Если сторону симплекса принять равной 1, то

$$x_j = \sqrt{\frac{1}{2j(j+1)}}$$

можно подсчитать числовые элементы матрицы *j – порядковый номер фактора*

# Расчет симплекса на практике

$$
\begin{array}{cc}
 & \begin{array}{cccccc} (x_j)\ x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & (y_i) \end{array} \\
X = & \left[\begin{array}{rrrrr}
0.5 & 0.289 & 0.204 & 0.158 & 0.129 \\
-0.5 & 0.289 & 0.204 & 0.158 & 0.129 \\
0 & -0.578 & 0.204 & 0.158 & 0.129 \\
0 & 0 & -0.612 & 0.158 & 0.129 \\
0 & 0 & 0 & -0.632 & 0.129 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -0.645
\end{array}\right]
\begin{array}{c} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \end{array}
\end{array}
$$

***значения факторов в кодированном виде***

# Расчет симплекса на практике

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{j=1}^{k} b_j x_j$$

$$b_0 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i, \quad b_j = 2\sum_{i=1}^{N} x_{ji} y_i$$

# Расчет симплекса на практике

$$s^2_{\text{воспр}} = \frac{\sum_{i=1}^{m} (y_i^1 - \overline{y^1})^2}{m-1}$$

$m$ – число параллельных опытов в точке 1

$$s^2(b_j) = \frac{s^2_{\text{воспр}}}{\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2} = 2 s^2_{\text{воспр}}$$

# Расчет симплекса на практике

$$z_j = z^0_j + \Delta z_j x_j$$

$$z_j^{k+2} = \frac{2}{k}\left(\sum_{i=1}^{k+1} z_{ji} - z_j^*\right) - z_j^*$$