

3.4 响应曲面法

王正明 易泰河

系统工程学院 军事建模与仿真系

2019 年 12 月 25 日

引言

例

某工程师需获得某一化学过程的最佳处理. 影响该过程转化率 y 的试验因子有两个: 反应时间 ξ_1 和反应温度 ξ_2 . 当前处理为 $\xi_1 = 35\text{min}$, $\xi_2 = 155^\circ\text{C}$, 转化率大约为 $y = 40\%$. 如何设计试验找到使转化率最高的处理?

知识回顾

常见试验目标分类

- ① **比较处理**: 不同处理下系统响应的差异是否显著;
- ② **筛选因子**: 对试验因子的重要性排序, 确定引起响应变化的主要因子;
- ③ **辨识系统**: 辨识试验因子与响应之间的关系, 获得响应模型, 以预测响应;
- ④ **优化系统**: 找到使响应达到某特定值 (最大、最小以及达标) 或达到目标值且受干扰因子影响最小的处理;
- ⑤ **发现问题**: 发现使系统失效的处理, 通常需通过仿真试验.

知识回顾

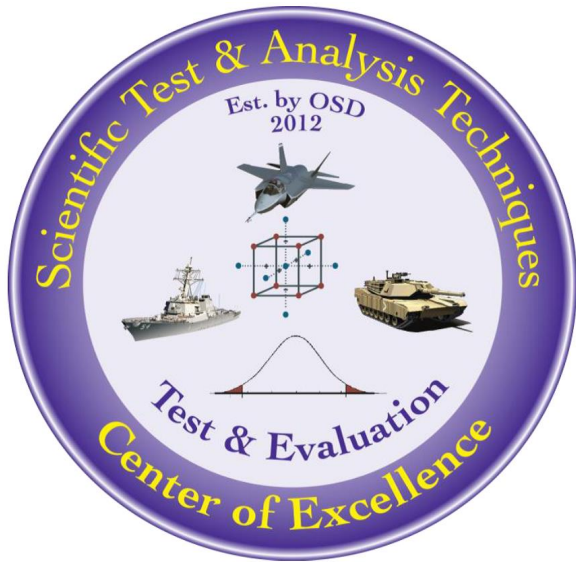
- 回归的正交设计: 使数据分析便于计算;
- 回归的最优设计: 使参数估计或响应预测的精度最高, 利用最优化理论解决试验设计问题;
- 二者均要求响应模型的形式已知.
- 响应曲面分析法: 解决模型未知情况下系统优化问题, 利用试验设计方法解决优化问题!

知识回顾

- 回归的正交设计: 使数据分析便于计算;
- 回归的最优设计: 使参数估计或响应预测的精度最高, 利用最优化理论解决试验设计问题;
- 二者均要求响应模型的形式已知.
- **响应曲面分析法**: 解决模型未知情况下系统优化问题, 利用试验设计方法解决优化问题!

Response Surface Designs are a collection of designs that spread test points to collect data throughout the experimental region such that a more detailed model of the pattern of responses can be ascertained. They are used to locate where in the design space (or under what conditions) responses are optimal, and often to "map" a system's performance across a variety of conditions. This often involves the inclusion of higher order models that can estimate curves instead of monotonic linear effects. These designs also allow estimates of lack of fit and experimental error by adding center points, replications, and axial runs to 2^k factorial or fractional factorial base designs.

——<https://testscience.org>



中心图案就是三因子二阶响应曲面的中心复合设计!

本节教学目标

- ① 对序贯设计形成初步概念;
- ② 掌握二阶响应曲面分析;
- ③ 理解二阶响应曲面的中心复合设计.

3.4 响应曲面法

3.4.1 响应曲面分析

- (1) 响应曲面法的概念
- (2) 最速上升法
- (3) 二阶响应曲面分析

3.4.2 中心复合设计

3.4.3 Box-Behnken 设计简介

- 考虑响应模型 $y = f(\mathbf{x}) + \varepsilon$, 因 y 与 $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_p]^T$ 之间可以用一个 p 维曲面来刻画, 称 $\mathbb{E}(y) = f(\mathbf{x})$ 为响应曲面.
- 因 f 未知, 在点 (a_1, a_2, \dots, a_p) 附近用 Taylor 级数来逼近:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(y) = & \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j(x_j - a_j) + \sum_{1 \leq j \leq k \leq p} \beta_{jk}(x_j - a_j)(x_k - a_k) \\ & + \sum_{1 \leq j \leq k \leq l \leq p} \beta_{jkl}(x_j - a_j)(x_k - a_k)(x_l - a_l) + \dots\end{aligned}$$

- Taylor 级数把不可数无穷维的函数 $f(\mathbf{x})$ 转化为可数无穷维的数列 $\{\beta_0, \beta_{ij}, \dots\}$.
- 把无穷转化为有限需截断 Taylor 级数, 本质是在方差与偏差之间做均衡.

- 考虑响应模型 $y = f(\mathbf{x}) + \varepsilon$, 因 y 与 $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_p]^T$ 之间可以用一个 p 维曲面来刻画, 称 $\mathbb{E}(y) = f(\mathbf{x})$ 为**响应曲面**.
- 因 f 未知, 在点 (a_1, a_2, \dots, a_p) 附近用 Taylor 级数来逼近:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(y) = & \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j(x_j - a_j) + \sum_{1 \leq j \leq k \leq p} \beta_{jk}(x_j - a_j)(x_k - a_k) \\ & + \sum_{1 \leq j \leq k \leq l \leq p} \beta_{jkl}(x_j - a_j)(x_k - a_k)(x_l - a_l) + \dots\end{aligned}$$

- Taylor 级数把不可数无穷维的函数 $f(\mathbf{x})$ 转化为可数无穷维的数列 $\{\beta_0, \beta_{ij}, \dots\}$.
- 把无穷转化为有限需截断 Taylor 级数, 本质是在方差与偏差之间做均衡.

- 考虑响应模型 $y = f(\mathbf{x}) + \varepsilon$, 因 y 与 $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_p]^T$ 之间可以用一个 p 维曲面来刻画, 称 $\mathbb{E}(y) = f(\mathbf{x})$ 为响应曲面.
- 因 f 未知, 在点 (a_1, a_2, \dots, a_p) 附近用 Taylor 级数来逼近:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(y) = & \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j(x_j - a_j) + \sum_{1 \leq j \leq k \leq p} \beta_{jk}(x_j - a_j)(x_k - a_k) \\ & + \sum_{1 \leq j \leq k \leq l \leq p} \beta_{jkl}(x_j - a_j)(x_k - a_k)(x_l - a_l) + \dots\end{aligned}$$

- Taylor 级数把不可数无穷维的函数 $f(\mathbf{x})$ 转化为可数无穷维的数列 $\{\beta_0, \beta_{ij}, \dots\}$.
- 把无穷转化为有限需截断 Taylor 级数, 本质是在方差与偏差之间做均衡.

例

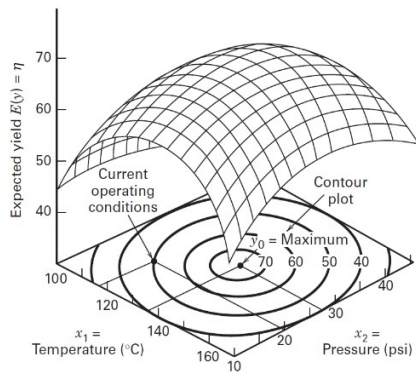
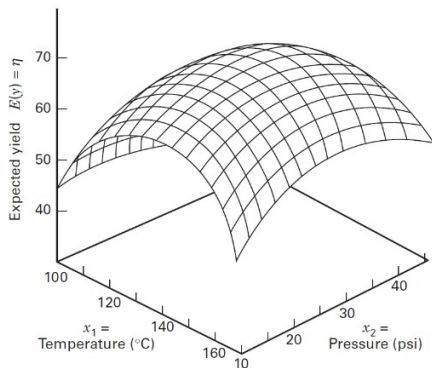
某工程师希望找到使产量 y 达到最大的最佳的温度 x_1 与压强 x_2 . 产量是温度和压强的函数,

$$y = f(x_1, x_2) + \varepsilon,$$

其中 ε 表示误差或噪声. 记 $\mathbb{E}(y) = f(x_1, x_2) = \eta$, 响应曲面为

$$\eta = f(x_1, x_2).$$

通常, 函数 f 是未知的, 采用函数逼近的方法用一些低阶多项式来近似它.



产量 y 与温度 x_1 和压强 x_2 之间的响应曲面.

响应曲面法以一阶和二阶展开来近似响应曲面:

- 首先在小范围内用**一阶模型**

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_j + \varepsilon$$

拟合 f , 得到近似的**最速上升方向**;

- 一步一步地使试验点过渡到极值点附近后, 再用**二阶模型**

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_j + \sum_{1 \leq j < k \leq p} \beta_{jk} x_j x_k + \varepsilon$$

来得到最佳的处理.

响应曲面法以一阶和二阶展开来近似响应曲面:

- 首先在小范围内用**一阶模型**

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_j + \varepsilon$$

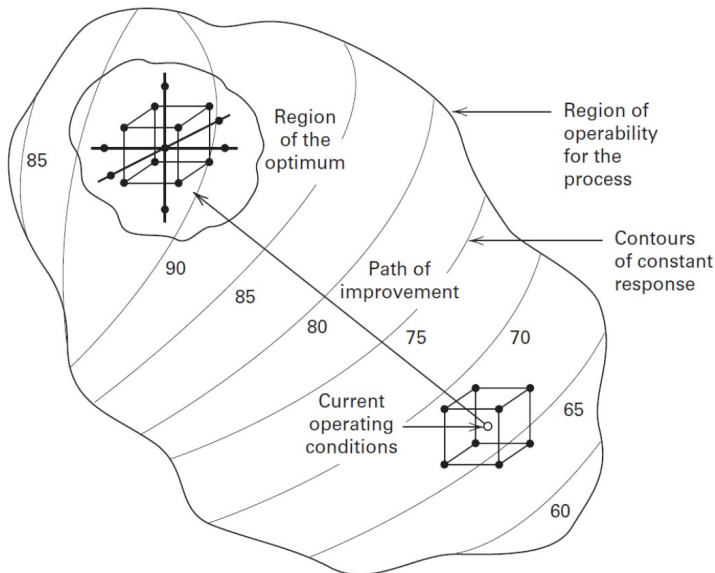
拟合 f , 得到近似的**最速上升方向**;

- 一步一步地使试验点过渡到极值点附近后, 再用**二阶模型**

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_j + \sum_{1 \leq j \leq k \leq p} \beta_{jk} x_j x_k + \varepsilon$$

来得到最佳的处理.

响应曲面法的序贯特性:



- 响应曲面法 = 响应曲面设计 + 响应曲面分析.
- 响应曲面分析:
 - 一阶模型分析: 最速上升法或最速下降法.
 - 二阶模型分析: 二次型的典范形式.
- 响应曲面设计:
 - 能使一阶模型中的参数都被估计出来的设计称为一阶模型设计.
 - 能使二阶模型中所有参数都被估计出来的设计称为二阶模型设计.

- 响应曲面法 = 响应曲面设计 + 响应曲面分析.
- 响应曲面分析:
 - 一阶模型分析: 最速上升法或最速下降法.
 - 二阶模型分析: 二次型的典范形式.
- 响应曲面设计:
 - 能使一阶模型中的参数都被估计出来的设计称为一阶模型设计.
 - 能使二阶模型中所有参数都被估计出来的设计称为二阶模型设计.

- 响应曲面法 = 响应曲面设计 + 响应曲面分析.
- 响应曲面分析:
 - 一阶模型分析: 最速上升法或最速下降法.
 - 二阶模型分析: 二次型的典范形式.
- 响应曲面设计:
 - 能使一阶模型中的参数都被估计出来的设计称为一阶模型设计.
 - 能使二阶模型中所有参数都被估计出来的设计称为二阶模型设计.

3.4 响应曲面法

3.4.1 响应曲面分析

- (1) 响应曲面法的概念
- (2) 最速上升法
- (3) 二阶响应曲面分析

3.4.2 中心复合设计

3.4.3 Box-Behnken 设计简介

- **最速上升法**(method of steepest ascent) 是一种使响应 y 朝着最速上升的方向序贯移动的方法;
- 若试验的目的是使 y 最小化, 那么该方法就变为**最速下降法**(method of steepest descent).
- 当当前试验点 x 可能远离最优试验点 x^* 时, 在 x 的邻域内用一阶模型近似真实曲面.

- 在当前处理 x 的邻域内做一些试验, 利用最小二乘法得到一阶拟合模型

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^p \hat{\beta}_i x_i.$$

- 对拟合模型中的 \hat{y} 关于 x_i 求导,

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x_i} = \hat{\beta}_i, \quad i = 1, 2, \dots, p.$$

- 最速上升的方向为向量 $(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_p)$ 的方向, 或者方向

$$\lambda(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_p), \quad \lambda > 0.$$

沿着该方向序贯地移动, 一般可以达到最优处理附近.

- 在当前处理 x 的邻域内做一些试验, 利用最小二乘法得到一阶拟合模型

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^p \hat{\beta}_i x_i.$$

- 对拟合模型中的 \hat{y} 关于 x_i 求导,

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x_i} = \hat{\beta}_i, \quad i = 1, 2, \dots, p.$$

- 最速上升的方向为向量 $(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_p)$ 的方向, 或者方向

$$\lambda(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_p), \quad \lambda > 0.$$

沿着该方向序贯地移动, 一般可以达到最优处理附近.

- 在当前处理 x 的邻域内做一些试验, 利用最小二乘法得到一阶拟合模型

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^p \hat{\beta}_i x_i.$$

- 对拟合模型中的 \hat{y} 关于 x_i 求导,

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x_i} = \hat{\beta}_i, \quad i = 1, 2, \dots, p.$$

- 最速上升的方向为向量 $(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_p)$ 的方向, 或者方向

$$\lambda(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_p), \quad \lambda > 0.$$

沿着该方向序贯地移动, 一般可以达到最优处理附近.

例

某工程师需获得某一化学过程的最佳处理. 影响该过程转化率 y 的试验因子有两个: 反应时间 ξ_1 和反应温度 ξ_2 . 当前处理为 $\xi_1 = 35\text{min}$, $\xi_2 = 155^\circ\text{C}$, 转化率大约为 $y = 40\%$. 根据经验, 最佳处理在当前处理附近的可能性不大.

- 该工程师决定首先利用一阶模型的最速上升法, 探索区域 $\xi_1 \in [30\text{min}, 40\text{min}]$, $\xi_2 \in [150^\circ\text{C}, 160^\circ\text{C}]$ 内的最速上升方向.
- 为简化计算, 采用编码变换将 ξ_1 和 ξ_2 转换为

$$x_1 = \frac{\xi_1 - 35}{5}, \quad x_2 = \frac{\xi_2 - 155}{5}.$$

则 $x_1 \in [-1, 1]$, $x_2 \in [-1, 1]$.

例

ξ_1	ξ_2	x_1	x_2	y
30	150	-1	-1	39.3
30	160	-1	1	40.0
40	150	1	-1	40.9
40	160	1	1	41.5
35	155	0	0	40.3
35	155	0	0	40.5
35	155	0	0	40.7
35	155	0	0	40.2
35	155	0	0	40.6

前 4 次试验为 2^2 因子试验的全面实施, 后 5 次为中心点试验, 这是一个添加中心点的正交回归设计.

例

利用正交回归设计的理论, $\hat{\beta}_0 = \bar{y} = 40.44$,

$$\hat{\beta}_1 = (\mathbf{x}_1^T \mathbf{x}_1)^{-1} \mathbf{x}_1^T \mathbf{y} = \frac{1}{4} (-39.3 - 40.0 + 40.9 + 41.5) = 0.77,$$

$$\hat{\beta}_2 = (\mathbf{x}_2^T \mathbf{x}_2)^{-1} \mathbf{x}_2^T \mathbf{y} = 0.325,$$

故一阶拟合模型:

$$\hat{y} = 40.44 + 0.775x_1 + 0.325x_2.$$

最速上升方向为 $(0.775, 0.325)$, 工程师决定以反应时间每步增加 5min 的间隔探索最优处理. 转化到编码变量, 即每步移动 $\Delta = (1, 0.042)$.

例

Steps	x_1	x_2	ξ_1	ξ_2	y
Origin + Δ	1.00	0.42	40	157	41.0
Origin + 2Δ	2.00	0.84	45	159	42.9
Origin + 3Δ	3.00	1.26	50	161	47.1
Origin + 4Δ	4.00	1.68	55	163	49.7
Origin + 5Δ	5.00	2.10	60	165	53.8
Origin + 6Δ	6.00	2.52	65	167	59.9
Origin + 7Δ	7.00	2.94	70	169	65.0
Origin + 8Δ	8.00	3.36	75	171	70.4
Origin + 9Δ	9.00	3.78	80	173	77.6
Origin + 10Δ	10.00	4.20	85	175	80.3
Origin + 11Δ	11.00	4.62	90	177	76.2
Origin + 12Δ	12.00	5.04	95	159	75.1

可在第十步的处理 (85, 175) 处再次探索最速上升方向.

3.4 响应曲面法

3.4.1 响应曲面分析

- (1) 响应曲面法的概念
- (2) 最速上升法
- (3) 二阶响应曲面分析

3.4.2 中心复合设计

3.4.3 Box-Behnken 设计简介

- 采用最速上升法到达极值点附近后, 采用二阶模型可在小邻域中准确地寻找到极值点.
- 记二阶拟合模型为

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^p \hat{\beta}_i x_i + \sum_{1 \leq i \leq j \leq p} \hat{\beta}_{ij} x_i x_j = \hat{\beta}_0 + \mathbf{x}^T \mathbf{b} + \mathbf{x}^T \mathbf{B} \mathbf{x},$$

$\mathbf{b}^T = [\hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_p]^T$, \mathbf{B} 为 $p \times p$ 阶对称矩阵

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \frac{1}{2}\hat{\beta}_{12} & \cdots & \frac{1}{2}\hat{\beta}_{1p} \\ \frac{1}{2}\hat{\beta}_{12} & \hat{\beta}_{22} & \cdots & \frac{1}{2}\hat{\beta}_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2}\hat{\beta}_{1p} & \frac{1}{2}\hat{\beta}_{2p} & \cdots & \hat{\beta}_{pp} \end{bmatrix}.$$

- 采用最速上升法到达极值点附近后, 采用二阶模型可在小邻域中准确地寻找到极值点.
- 记二阶拟合模型为

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^p \hat{\beta}_i x_i + \sum_{1 \leq i \leq j \leq p} \hat{\beta}_{ij} x_i x_j = \hat{\beta}_0 + \mathbf{x}^T \mathbf{b} + \mathbf{x}^T \mathbf{B} \mathbf{x},$$

$\mathbf{b}^T = [\hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_p]^T$, \mathbf{B} 为 $p \times p$ 阶对称矩阵

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \frac{1}{2}\hat{\beta}_{12} & \cdots & \frac{1}{2}\hat{\beta}_{1p} \\ \frac{1}{2}\hat{\beta}_{12} & \hat{\beta}_{22} & \cdots & \frac{1}{2}\hat{\beta}_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2}\hat{\beta}_{1p} & \frac{1}{2}\hat{\beta}_{2p} & \cdots & \hat{\beta}_{pp} \end{bmatrix}.$$

- 对二阶拟合模型中的 \hat{y} 关于 x 求导, 并令其为 0

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x} = b + 2Bx = 0,$$

得到二阶模型的稳定点¹: $x_s = -B^{-1}b/2$.

- 把稳定点代入二阶拟合模型:

$$\hat{y}_s = \hat{\beta}_0 - \frac{1}{4}b^T B^{-1}b.$$

- 稳定点可能是极大值点, 可能是极小值点, 也可能是鞍点(saddle point).

¹假设矩阵 B 可逆.

- 对二阶拟合模型中的 \hat{y} 关于 x 求导, 并令其为 0

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x} = b + 2Bx = 0,$$

得到二阶模型的稳定点¹: $x_s = -B^{-1}b/2$.

- 把稳定点代入二阶拟合模型:

$$\hat{y}_s = \hat{\beta}_0 - \frac{1}{4}b^T B^{-1}b.$$

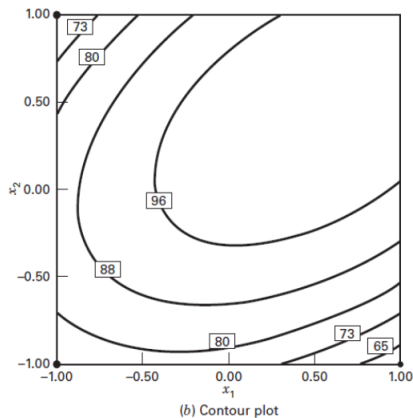
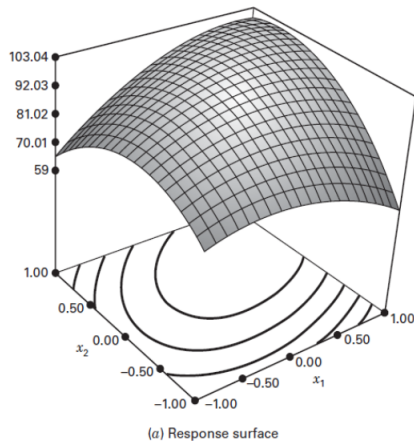
- 稳定点可能是极大值点, 可能是极小值点, 也可能是鞍点(saddle point).

¹假设矩阵 B 可逆.

- 如何判断稳定点 x_s 的类型?
- 当 $p = 2$ 或 3 时, 可通过等高线图判断;

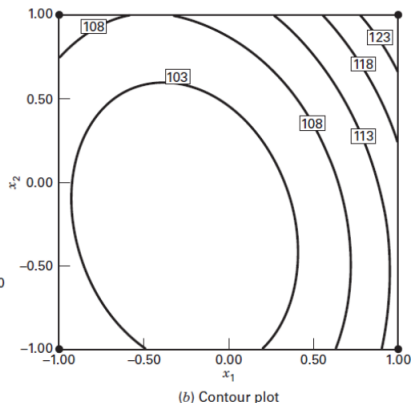
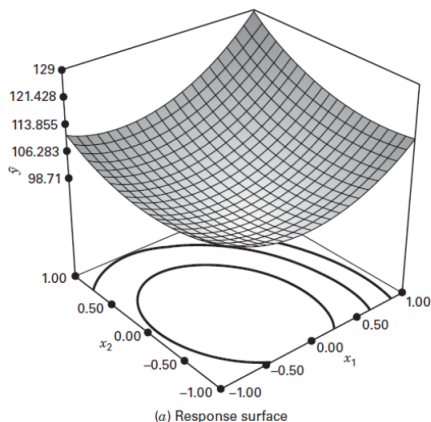
- 如何判断稳定点 x_s 的类型?
- 当 $p = 2$ 或 3 时, 可通过等高线图判断;

- 如何判断稳定点 x_s 的类型?
- 当 $p = 2$ 或 3 时, 可通过等高线图判断;



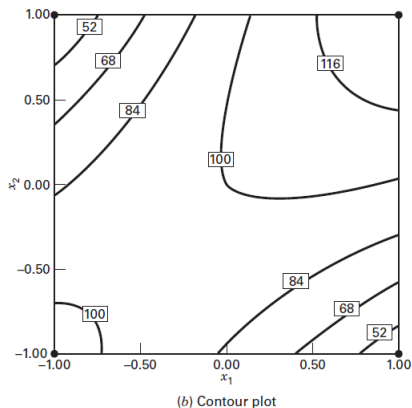
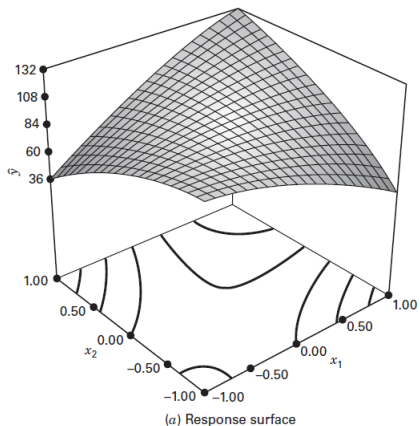
极大值点及其等高线图

- 如何判断稳定点 x_s 的类型?
- 当 $p = 2$ 或 3 时, 可通过等高线图判断;



极小值点及其等高线图

- 如何判断稳定点 x_s 的类型?
- 当 $p = 2$ 或 3 时, 可通过等高线图判断;



鞍点及其等高线图

- 如何判断稳定点 x_s 的类型?
- 当 $p = 2$ 或 3 时, 可通过等高线图判断;
- 典型分析法: 把二阶拟合模型的中心点变换到平稳点, 并适当旋转坐标轴, 化成标准的二次型.
 - 设 $p \times p$ 阶正交矩阵 P 化 B 为对角阵:

$$P^T B P = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p).$$

- 令 $z = (z_1, \dots, z_p)^T = P^T(x - x_s)$, 二阶拟合模型变为典型型

$$\hat{y} = \hat{y}_s + \sum_{i=1}^p \lambda_i z_i^2.$$

- 如何判断稳定点 x_s 的类型?
- 当 $p = 2$ 或 3 时, 可通过等高线图判断;
- 典型分析法: 把二阶拟合模型的中心点变换到平稳点, 并适当旋转坐标轴, 化成标准的二次型.
 - 设 $p \times p$ 阶正交矩阵 P 化 B 为对角阵:

$$P^T B P = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p).$$

- 令 $z = (z_1, \dots, z_p)^T = P^T(x - x_s)$, 二阶拟合模型变为典范型

$$\hat{y} = \hat{y}_s + \sum_{i=1}^p \lambda_i z_i^2.$$

- 如何判断稳定点 \mathbf{x}_s 的类型?
- 当 $p = 2$ 或 3 时, 可通过等高线图判断;
- 典型分析法: 把二阶拟合模型的中心点变换到平稳点, 并适当旋转坐标轴, 化成标准的二次型.
 - 设 $p \times p$ 阶正交矩阵 P 化 B 为对角阵:

$$P^T B P = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p).$$

- 令 $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_p)^T = P^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}_s)$, 二阶拟合模型变为典范型

$$\hat{y} = \hat{y}_s + \sum_{i=1}^p \lambda_i z_i^2.$$

诸 λ_i 的符号决定了稳定点 x_s 的类型:

- 如果诸 λ_i 同号, x_s 邻域内的等高线呈椭球形
 - 当特征值都大于零时, x_s 为极小值点;
 - 当特征值都小于 0 时, x_s 为极大值点;
 - 如果有某个 $\lambda_i \approx 0$, 则响应曲面的形状类似 “平缓山脊” .
- 如果诸 λ_i 有正有负, x_s 邻域内的等高线图呈双曲线型, x_s 为鞍点.

诸 λ_i 的符号决定了稳定点 x_s 的类型:

- 如果诸 λ_i 同号, x_s 邻域内的等高线呈椭球形
 - 当特征值都大于零时, x_s 为极小值点;
 - 当特征值都小于 0 时, x_s 为极大值点;
 - 如果有某个 $\lambda_i \approx 0$, 则响应曲面的形状类似 “平缓山脊” .
- 如果诸 λ_i 有正有负, x_s 邻域内的等高线图呈双曲线型, x_s 为鞍点.

例

续前例, 在处理 (85, 175) 附近进行几次试验, 试验方案和试验数据如下^a.

ξ_1	ξ_2	x_1	x_2	y
80	170	-1	-1	76.5
80	180	-1	1	77.0
90	170	1	-1	78.0
90	180	1	1	79.5
85	175	0	0	79.9
85	175	0	0	80.0
85	175	0	0	80.3
85	175	0	0	79.7
85	175	0	0	79.8
92.07	175	1.414	0	78.4
77.93	175	-1.414	0	75.6
85	182.07	0	1.414	78.5
85	167.93	0	-1.414	77.0

^a表中的试验方案为中心复合设计.

例

拟合二阶模型为

$$\begin{aligned}\hat{y} &= 79.94 + 0.995x_1 + 0.515x_2 - 1.376x_1^2 - 1.001x_2^2 + 0.250x_1x_2 \\ &= 79.94 + \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.995 \\ 0.515 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1.376 & 0.125 \\ 0.125 & -1.001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}.\end{aligned}$$

即

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0.995 \\ 0.515 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} -1.376 & 0.125 \\ 0.125 & -1.001 \end{bmatrix}.$$

根据稳定点的计算公式:

$$\mathbf{x}_s = -\frac{1}{2}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{b} = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -0.7345 & -0.0917 \\ -0.0917 & -1.0096 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.995 \\ 0.515 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.389 \\ 0.306 \end{bmatrix}$$

例

采用典型分析法判断稳定点 x_s 的类型, 首先求矩阵 B 的特征值. 通过求解特征方程

$$\begin{aligned} |B - \lambda I| &= \begin{vmatrix} -1.376 - \lambda & 0.1250 \\ 0.1250 & -1.001 - \lambda \end{vmatrix} \\ &= \lambda^2 - 2.3788\lambda + 1.3639 = 0 \end{aligned}$$

得到两个特征根为 $\lambda_1 = -0.9634$, $\lambda_2 = -1.4141$. 由此可判断稳定点 x_s 为极大值点. 故最佳处理对应的编码变量为 $x_1 = 0.389$, $x_2 = 0.306$. 利用方程

$$0.389 = \frac{\xi_1 - 85}{5}, \quad 0.306 = \frac{\xi_2 - 175}{5}$$

得到最佳处理为反应时间 $\xi_1 = 86.95 \approx 87\text{min}$, 反应温度为 $\xi_2 = 173.53 \approx 176.5^\circ\text{C}$.

3.4 响应曲面法

3.4.1 响应曲面分析

3.4.2 中心复合设计

- (1) 中心复合设计的组成
- (2) 确定中心复合设计中的参数
- (3) 利用 R 构造中心复合设计

3.4.3 Box-Behnken 设计简介

- 提高响应曲面法的效率, 需精心选择序贯试验中每一步的设计.
- 一阶模型只需估计线性效应, 采用 2^p 设计或 2^{p-k} 设计 (正交回归设计) 即可, 试验次数不会太多.
- 二阶模型需估计非线性效应, 每个因子需 3 个及以上水平, 试验次数可能会很多.
- 中心复合设计是一种常用的二阶模型设计.

- 提高响应曲面法的效率, 需精心选择序贯试验中每一步的设计.
- 一阶模型只需估计线性效应, 采用 2^p 设计或 2^{p-k} 设计 (正交回归设计) 即可, 试验次数不会太多.
- 二阶模型需估计非线性效应, 每个因子需 3 个及以上水平, 试验次数可能会很多.
- 中心复合设计是一种常用的二阶模型设计.

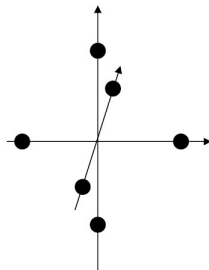
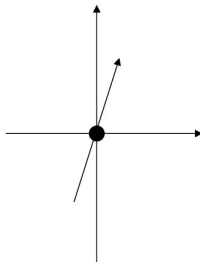
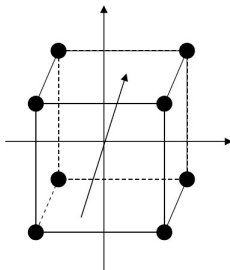
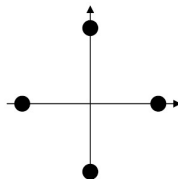
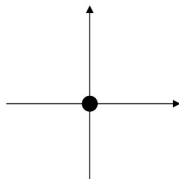
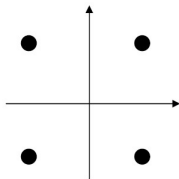
- 提高响应曲面法的效率, 需精心选择序贯试验中每一步的设计.
- 一阶模型只需估计线性效应, 采用 2^p 设计或 2^{p-k} 设计 (正交回归设计) 即可, 试验次数不会太多.
- 二阶模型需估计非线性效应, 每个因子需 3 个及以上水平, 试验次数可能会很多.
- 中心复合设计是一种常用的二阶模型设计.

- 提高响应曲面法的效率, 需精心选择序贯试验中每一步的设计.
- 一阶模型只需估计线性效应, 采用 2^p 设计或 2^{p-k} 设计 (正交回归设计) 即可, 试验次数不会太多.
- 二阶模型需估计非线性效应, 每个因子需 3 个及以上水平, 试验次数可能会很多.
- 中心复合设计是一种常用的二阶模型设计.

- 每个因子的两个水平用编码 ± 1 表示;
- 中心复合设计在 2^{p-k} 设计的基础上加一些点, 使每个因子都有 3 个水平:
 - (a) 超立方体的顶点: 当 $p \leq 4$ 时取 2^p 完全因子设计, 当 $p \geq 5$ 时取 2^{p-k} 部分因子设计;
 - (b) 坐标轴点: p 维坐标轴上两两对称的 $2p$ 个点
($\pm\alpha, 0, \dots, 0$), ($0, \pm\alpha, 0, \dots, 0$), \dots , ($0, \dots, 0, \alpha$);
 - (c) 中心点: ($0, 0, \dots, 0$) 的 n_0 次重复.

参数 k 、 α 和 n_0 待定.

二维和三维空间中的中心复合设计



Factorial

Center Points

Axial Points

3.4 响应曲面法

3.4.1 响应曲面分析

3.4.2 中心复合设计

- (1) 中心复合设计的组成
- (2) 确定中心复合设计中的参数
- (3) 利用 R 构造中心复合设计

3.4.3 Box-Behnken 设计简介

- 2^{p-k} 设计中 k 的确定, (Box et al., 1978) 建议:
 - 当 $p = 5, 6, 7$ 时, 取 $k = 1$; 当 $p = 8, 9$ 时, 取 $k = 2$; 当 $p = 10$ 时, 取 $k = 3$.
- 坐标轴点中 α 的确定:
 - 点 x 处的预测方差为 $\text{Var}(\hat{y}(x)) = \sigma^2 x^T (X^T X)^{-1} x$.
 - 一个设计称为可旋转的, 若所有到原点距离相等的点 x 都有相同的预测方差.
 - (Box and Hunter, 1957) 证明了取 $\alpha = 2^{(p-k)/4}$, 中心复合设计是可旋转的.
- 中心点重复次数 n_0 的确定:
 - 当 α 逼近 \sqrt{p} 时, 取 $n_0 \in [3, 5]$; 当 α 逼近 1 时, 取 $n_0 \in [1, 2]$; 当 $\alpha \in (1, \sqrt{p})$ 时, 取 $n_0 \in [2, 4]$.

- 2^{p-k} 设计中 k 的确定, (Box et al., 1978) 建议:
 - 当 $p = 5, 6, 7$ 时, 取 $k = 1$; 当 $p = 8, 9$ 时, 取 $k = 2$; 当 $p = 10$ 时, 取 $k = 3$.
- 坐标轴点中 α 的确定:
 - 点 \mathbf{x} 处的预测方差为 $\text{Var}(\hat{y}(\mathbf{x})) = \sigma^2 \mathbf{x}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}$.
 - 一个设计称为**可旋转的**, 若所有到原点距离相等的点 \mathbf{x} 都有相同的预测方差.
 - (Box and Hunter, 1957) 证明了取 $\alpha = 2^{(p-k)/4}$, 中心复合设计是可旋转的.
- 中心点重复次数 n_0 的确定:
 - 当 α 逼近 \sqrt{p} 时, 取 $n_0 \in [3, 5]$; 当 α 逼近 1 时, 取 $n_0 \in [1, 2]$; 当 $\alpha \in (1, \sqrt{p})$ 时, 取 $n_0 \in [2, 4]$.

- 2^{p-k} 设计中 k 的确定, (Box et al., 1978) 建议:
 - 当 $p = 5, 6, 7$ 时, 取 $k = 1$; 当 $p = 8, 9$ 时, 取 $k = 2$; 当 $p = 10$ 时, 取 $k = 3$.
- 坐标轴点中 α 的确定:
 - 点 \boldsymbol{x} 处的预测方差为 $\text{Var}(\hat{y}(\boldsymbol{x})) = \sigma^2 \boldsymbol{x}^T (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{x}$.
 - 一个设计称为**可旋转的**, 若所有到原点距离相等的点 \boldsymbol{x} 都有相同的预测方差.
 - (Box and Hunter, 1957) 证明了取 $\alpha = 2^{(p-k)/4}$, 中心复合设计是可旋转的.
- 中心点重复次数 n_0 的确定:
 - 当 α 逼近 \sqrt{p} 时, 取 $n_0 \in [3, 5]$; 当 α 逼近 1 时, 取 $n_0 \in [1, 2]$; 当 $\alpha \in (1, \sqrt{p})$ 时, 取 $n_0 \in [2, 4]$.

变量个数	p	2	3	4	5	6	7	8
参数个数	$\frac{(p+1)(p+2)}{2}$	6	10	15	21	28	36	45
k	k	0	0	0	1	1	1	2
非中心点数	$2^{p-k} + 2p$	8	14	24	26	44	78	80
α	$2^{(p-k)/4}$	1.414	1.682	2	2	2.387	2.828	2.828
n_0	n_0	3 - 5	2 - 4	3 - 5	2 - 4	2 - 4	2 - 4	3 - 5

- 中心复合设计所需的试验次数随着因子个数 p 呈指数增长, 当 p 较大时所需试验次数较多.
- 当 $p = 9$ 时, 试验次数 $n = 2^{9-2} + 2 \times 9 + 2 = 148$, 远大于参数的个数 $m = (9 + 1)(9 + 2)/2 = 55$.
- 当 p 较大时, 需要试验次数更少的二阶模型设计!

变量个数	p	2	3	4	5	6	7	8
参数个数	$\frac{(p+1)(p+2)}{2}$	6	10	15	21	28	36	45
k	k	0	0	0	1	1	1	2
非中心点数	$2^{p-k} + 2p$	8	14	24	26	44	78	80
α	$2^{(p-k)/4}$	1.414	1.682	2	2	2.387	2.828	2.828
n_0	n_0	3 - 5	2 - 4	3 - 5	2 - 4	2 - 4	2 - 4	3 - 5

- 中心复合设计所需的试验次数随着因子个数 p 呈指数增长, 当 p 较大时所需试验次数较多.
- 当 $p = 9$ 时, 试验次数 $n = 2^{9-2} + 2 \times 9 + 2 = 148$, 远大于参数的个数 $m = (9 + 1)(9 + 2)/2 = 55$.
- 当 p 较大时, 需要试验次数更少的二阶模型设计!

3.4 响应曲面法

3.4.1 响应曲面分析

3.4.2 中心复合设计

- (1) 中心复合设计的组成
- (2) 确定中心复合设计中的参数
- (3) 利用 R 构造中心复合设计

3.4.3 Box-Behnken 设计简介

- R 添加包 `rsm` 中的函数 `ccd()` 可用于生成精度均匀的^{精度均匀}的中心复合设计, 即在半径为 1 的超球体试验区域内的预测方差一致或大体一致.
- 以下代码块产生 3 因子的可旋转中心复合设计.

```
1 library(rsm)
2 rotd <- ccd(3, n0 = c(4, 2), alpha = "rotatable", randomize = FALSE)
```

- 参数 n_0 的第一个元素表示中心点的重复次数, 第二个元素表示区组数目.

> rotd

run.order std.order x1.as.is x2.as.is x3.as.is
Block

1	1	1	-1.000000	-1.000000	-1.000000	1
2	2	2	1.000000	-1.000000	-1.000000	1
3	3	3	-1.000000	1.000000	-1.000000	1
4	4	4	1.000000	1.000000	-1.000000	1
5	5	5	-1.000000	-1.000000	1.000000	1
6	6	6	1.000000	-1.000000	1.000000	1
7	7	7	-1.000000	1.000000	1.000000	1
8	8	8	1.000000	1.000000	1.000000	1
9	9	9	0.000000	0.000000	0.000000	1
10	10	10	0.000000	0.000000	0.000000	1
11	11	11	0.000000	0.000000	0.000000	1
12	12	12	0.000000	0.000000	0.000000	1
13	1	1	-1.681793	0.000000	0.000000	2
14	2	2	1.681793	0.000000	0.000000	2
15	3	3	0.000000	-1.681793	0.000000	2
16	4	4	0.000000	1.681793	0.000000	2
17	5	5	0.000000	0.000000	-1.681793	2
18	6	6	0.000000	0.000000	1.681793	2
19	7	7	0.000000	0.000000	0.000000	2
20	8	8	0.000000	0.000000	0.000000	2

- rot d 的后三列给出设计矩阵.
- 前 8 次试验是 2^3 的全面实施, 9-11 次为中心点的 3 次重复试验, 这 11 次试验的数据可用来拟合线性模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3.$$

- 如果上述模型拟合效果不好, 则追加第 2 个区组中的 8 次试验以拟合二阶模型.
- 可见中心复合设计也有序贯的特性.

3.4 响应曲面法

3.4.1 响应曲面分析

3.4.2 中心复合设计

3.4.3 Box-Behnken 设计简介

- 中心复合设计中每个因子都取了 5 个水平, 导致试验次数较多.
- Box-Behnken 设计是一种每个因子均只需取 3 水平的二阶设计, 由两类试验点组成:
 - n_0 个中心点;
 - 任意两个因子的 2^2 设计, 其余因子固定在中间水平, 共 $2^2 \times p \times (p-1)/2 = 2p(p-1)$ 个试验点.
- Box-Behnken 设计的试验点随着因子数 p 呈二次多项式增长, 当 p 较大时, 其所需的试验次数将远小于中心复合设计的试验次数.

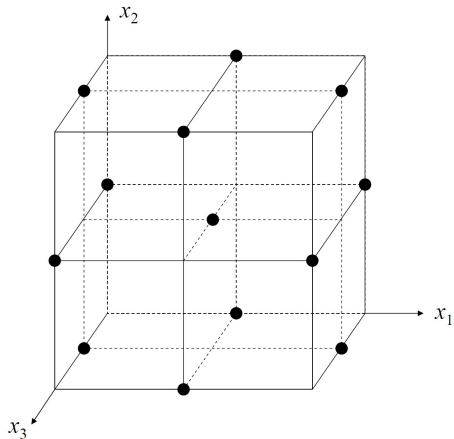
- 中心复合设计中每个因子都取了 5 个水平, 导致试验次数较多.
- Box-Behnken 设计是一种每个因子均只需取 3 水平的二阶设计, 由两类试验点组成:
 - n_0 个中心点;
 - 任意两个因子的 2^2 设计, 其余因子固定在中间水平, 共 $2^2 \times p \times (p-1)/2 = 2p(p-1)$ 个试验点.
- Box-Behnken 设计的试验点随着因子数 p 呈二次多项式增长, 当 p 较大时, 其所需的试验次数将远小于中心复合设计的试验次数.

- 中心复合设计中每个因子都取了 5 个水平, 导致试验次数较多.
- Box-Behnken 设计是一种每个因子均只需取 3 水平的二阶设计, 由两类试验点组成:
 - n_0 个中心点;
 - 任意两个因子的 2^2 设计, 其余因子固定在中间水平, 共 $2^2 \times p \times (p-1)/2 = 2p(p-1)$ 个试验点.
- Box-Behnken 设计的试验点随着因子数 p 呈二次多项式增长, 当 p 较大时, 其所需的试验次数将远小于中心复合设计的试验次数.

- 两因子试验不存在 Box-Behnken 设计.
- 三因子 Box-Behnken 设计只需 15 次试验, 而中心复合设计要求 20 次试验.

序号	x_1	x_2	x_3	序号	x_1	x_2	x_3
1	-1	-1	0	9	0	-1	-1
2	1	-1	0	10	0	1	-1
3	-1	1	0	11	0	-1	1
4	1	1	0	12	0	1	1
5	-1	0	-1	13	0	0	0
6	1	0	-1	14	0	0	0
7	-1	0	1	15	0	0	0
8	1	0	1				

- 试验次数少意味着获取的信息少: Box-Behnken 设计不具有旋转性, 得到的数据无法检验二阶模型的合理性.
- Box-Behnken 设计在超立方体的顶点上没有安排试验点, 因此无法通过 2^k 部分因子设计得到.
- 如果明确知道线性模型不足以表示响应关系, 且试验次数又受到限制时, 可采用 Box-Behnken 设计.



总结

- ① 响应曲面法用一阶和二阶多项式近似表示响应曲面, 本质上是一种序贯方法;
- ② 响应曲面分析:
 - 利用一阶模型确定最速上升方向;
 - 二阶响应曲面分析的典型方法;
- ③ 响应曲面设计
 - 一阶响应曲面设计: 可采用正交回归设计;
 - 二阶响应曲面设计: 中心复合设计、Box-Behnken 设计等;
 - 中心复合设计的组成: 2^{p-k} 点、中心点和坐标轴点.