

数据采集方法作业

姓名：蒋贵豪 学号：B+X9bo

2021 年 12 月 6 日

题目 1. 在一个关于 1,2-丙烷二元醇的含氮化合物的试验中，化学反应物主要是 1,2-丙烷二元胺和 2,5-二甲基哌嗪。因子是氮的浓度 (A)、最高温度 (B)、水的浓度 (C) 和初始氢气压 (D)。表中给出了设计阵和响应数据。实际安排矩阵可通过乘以一个尺度因子再加上一个中心因子而得到： $A(51, 102)$, $B(20, 250)$, $C(200, 300)$, $D(350, 850)$ ，括号中的数值分别表示尺度和中心常数。例如，对于因子 A ，用其水平乘以 51 再加上 102，于是编码水平 +1 对应于 $(+1)51 + 102 = 153$ 。响应是 2,5-二甲基哌嗪的百分比产出 (DMP)，这里想要得到高的 DMP 产出。第 1–17 号试验为最初的一阶设计，第 18–25 号试验是用来完成二阶设计的星点。

(a) 描述试验所选择的设计。

(b) 分析数据，描述所拟合的响应曲面并识别出最大化响应因子的设置。

表 1: 氮试验的设计阵和响应数据

试验号	因子				DMP
	A	B	C	D	
1	−1	−1	−1	−1	20.2625
2	1	−1	−1	−1	21.1407
3	−1	1	−1	−1	21.4192
4	1	1	−1	−1	19.9397
5	−1	−1	1	−1	28.2179

6	1	-1	1	-1	27.4594
7	-1	1	1	-1	27.5944
8	1	1	1	-1	27.156
9	-1	-1	-1	1	21.4822
10	1	-1	-1	1	21.0007
11	-1	1	-1	1	20.3318
12	1	1	-1	1	19.9855
13	-1	-1	1	1	39.3914
14	1	-1	1	1	39.4027
15	-1	1	1	1	39.3187
16	1	1	1	1	37.5407
17	0	0	0	0	29.528
18	-1.4	0	0	0	29.4931
19	1.4	0	0	0	30.3885
20	0	-1.4	0	0	30.1277
21	0	1.4	0	0	30.9075
22	0	0	-1.4	0	16.9673
23	0	0	1.4	0	33.9391
24	0	0	0	-1.4	24.1566
25	0	0	0	1.4	32.0151

解答. (a) 试验选择了序贯设计，并且用到了响应曲面法。

首先我们进行筛选试验，在多个因子中剔除不重要的因子，只保留少量因子。

然后进行一阶试验，确定当前试验条件是否接近最优试验区域。当输入因子水平远离最优区域，考虑一阶模型：

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \epsilon \quad (1)$$

进行一阶的逼近得到最优区域。如果一阶模型得到的区域不是最优区域，我们考虑使用最峭攀登法，重新给定因子的水平选择，得到一阶最优区域。

然后进行第二个一阶试验，当其接近最优试验区域时，先进行曲度的检测，如过存在曲度或交互效应，则进入二阶试验，否则，使用另一个一阶试验和最峭攀登法继续搜索。

进入二阶试验后，我们采用式2来逼近曲面，完成最终的优化目标，得到最优因子组合。

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i + \sum_{i < j}^k \hat{\beta}_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_{ii} x_i^2 \quad (2)$$

(b) 对于试验数据，我们拟合式2的模型，我们编写 **Matlab** 代码，得到的结果如表2所示：

表 2: 初始试验的最小二乘估计、标准误、 t 统计量和 p 值

效应	估计	标准误	t	p 值
截距	29.810	0.372	80.085	0.000
β_1	-0.158	0.141	-1.118	0.290
β_2	-0.200	0.141	-1.417	0.187
β_3	6.239	0.141	44.252	0.000
β_4	2.825	0.141	20.035	0.000
β_{12}	-0.231	0.157	-1.467	0.173
β_{13}	-0.096	0.157	-0.610	0.556
β_{14}	-0.050	0.157	-0.316	0.758
β_{23}	-0.041	0.157	-0.259	0.801
β_{24}	-0.196	0.157	-1.243	0.242
β_{34}	2.824	0.157	17.953	0.000
β_{11}	0.032	0.225	0.141	0.891
β_{22}	0.326	0.225	1.447	0.178
β_{33}	-2.258	0.225	-10.025	0.000
β_{44}	-0.915	0.225	-4.061	0.002

从表2中可以看出，只有水的浓度和初始氢气压是重要的，它们之间存在着显著的交互作用和曲度效应。以表2的显著效应估计响应曲面如图所示。因此，我们最终得到的拟合模型如式3所示：

$$\hat{y} = 29.810 + 6.239x_3 + 2.825x_4 - 2.258x_3^2 - 0.915x_4^2 + 2.824x_3x_4 \quad (3)$$

我们编写 **Matlab** 程序求解式3在限制在因子最大最小水平之间的最大值，求得的最大

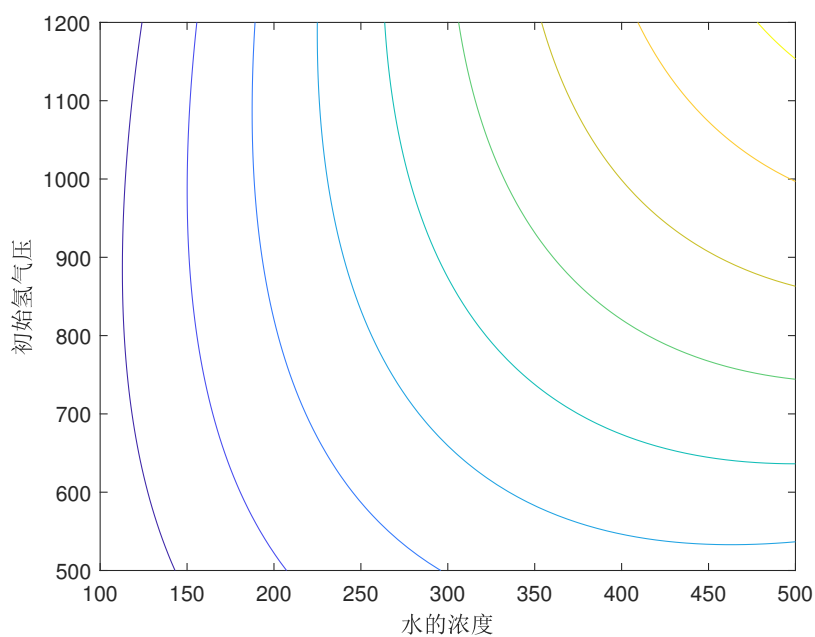


图 1: 试验的响应曲面估计

值点为: $x_3 = 500$, $x_4 = 1200$ 。这也与响应曲面中体现出的是一致的。于是我们的**最大化响应因子**设置为：**水的浓度为 500，初始氢气压为 1200。**

当然，我们也可以做后续的跟随二阶试验，因子只考虑水的浓度和初始氢气压，得到更为精确的响应曲面和最大化响应因子设置。

附录

计算最小二乘估计、标准误、 t 统计量和 p 值的函数：

```
1 function [beta,standard_error,T,p] = ...
    Leastsquare_2d_curtest(x,y);%输入y是列向量
2 N = size(x);
3 X(:,1) = ones(N(1),1);
4 X(:,2:(1+N(2))) = x;
5 for i = 1:N(2)
6     for j = 1:N(2)
7         if i < j
8             X = [X';(x(:,i).*x(:,j))']';
9         end
10    end
11 end
12 X = [X';(x.^2)']';
13 size_X = size(X);
14 for i = 1:size_X(2)
15     for j = 1:size_X(2)
16         X_Normal(i,j) = sum(X(:,i).*X(:,j));
17     end
18     Y(i) = sum(X(:,i).*y);
19 end
20 beta = X_Normal^(-1)*Y';
21 for i = 1:size_X(2)
22     standard_error(i) = sqrt(sum((y-X*beta).^2)/sum((X(:,i)-...
23         mean(X(:,i))).^2)/(size_X(2)-1));
24 end
25 standard_error(1) = ...
    sqrt(sum((y-X*beta).^2)/(size_X(2)-1)*(1/(size_X(2)-1)+...
26     (mean(X(:,i)))^2/sum((X(:,i)).^2)));
```

```

27 standard_error = standard_error';
28 T = beta./standard_error;
29 p = 2*min(tcdf(T,(size_X(2)-1)),1-tcdf(T,(size_X(2)-1)));
30 p(1) = 2*min(tcdf(T(1),(size_X(2)-1)),1-tcdf(T(1),(size_X(2)-1)));

```

代入实际数值：

```

1 x = [-1 -1 -1 -1
2 1 -1 -1 -1
3 -1 1 -1 -1
4 1 1 -1 -1
5 -1 -1 1 -1
6 1 -1 1 -1
7 -1 1 1 -1
8 1 1 1 -1
9 -1 -1 -1 1
10 1 -1 -1 1
11 -1 1 -1 1
12 1 1 -1 1
13 -1 -1 1 1
14 1 -1 1 1
15 -1 1 1 1
16 1 1 1 1
17 0 0 0 0
18 -1.4 0 0 0
19 1.4 0 0 0
20 0 -1.4 0 0
21 0 1.4 0 0
22 0 0 -1.4 0
23 0 0 1.4 0
24 0 0 0 -1.4
25 0 0 0 1.4

```

```

26 ];
27 y=[29.49306687  20.26248303 28.21787102 21.4822297  39.39141536 ...
      21.41919053 27.59438637 20.33184107 39.31871927 30.127689 ...
      29.5279922  16.96732843 33.93911192 24.1566307  32.01512035 ...
      30.907479   21.14071579 27.45942248 21.00074189 39.40273353 ...
      19.93966367 27.1559919  19.98549752 37.54072093 ...
      30.38846612]';
28 [beta,standard_error,T,p] = Leastsquare_2d_curtest(x,y)

```

绘制响应曲面:

```

1 f = @(x3,x4) 29.81+6.239*((x3-300)/200)+2.825*((x4-850)/350)+...
2 2.824*((x3-300)/200).*((x4-850)/350)-0.915*((x4-850)/350)^2-...
3 2.258*((x3-300)/200)^2;
4 fcontour(f,[100 500 500 1200])

```

求最大化响应因子:

```

1 f = @(x) -(29.81+6.239*((x(1)-300)/200)+2.825*((x(2)-850)/350)+...
2 2.824*((x(1)-300)/200).*((x(2)-850)/350)-0.915*((x(2)-850)/350)^2-...
3 2.258*((x(1)-300)/200)^2);
4 fmincon(f,[200 600],[[],[]],[[],[]],[100 500],[500 1200])

```