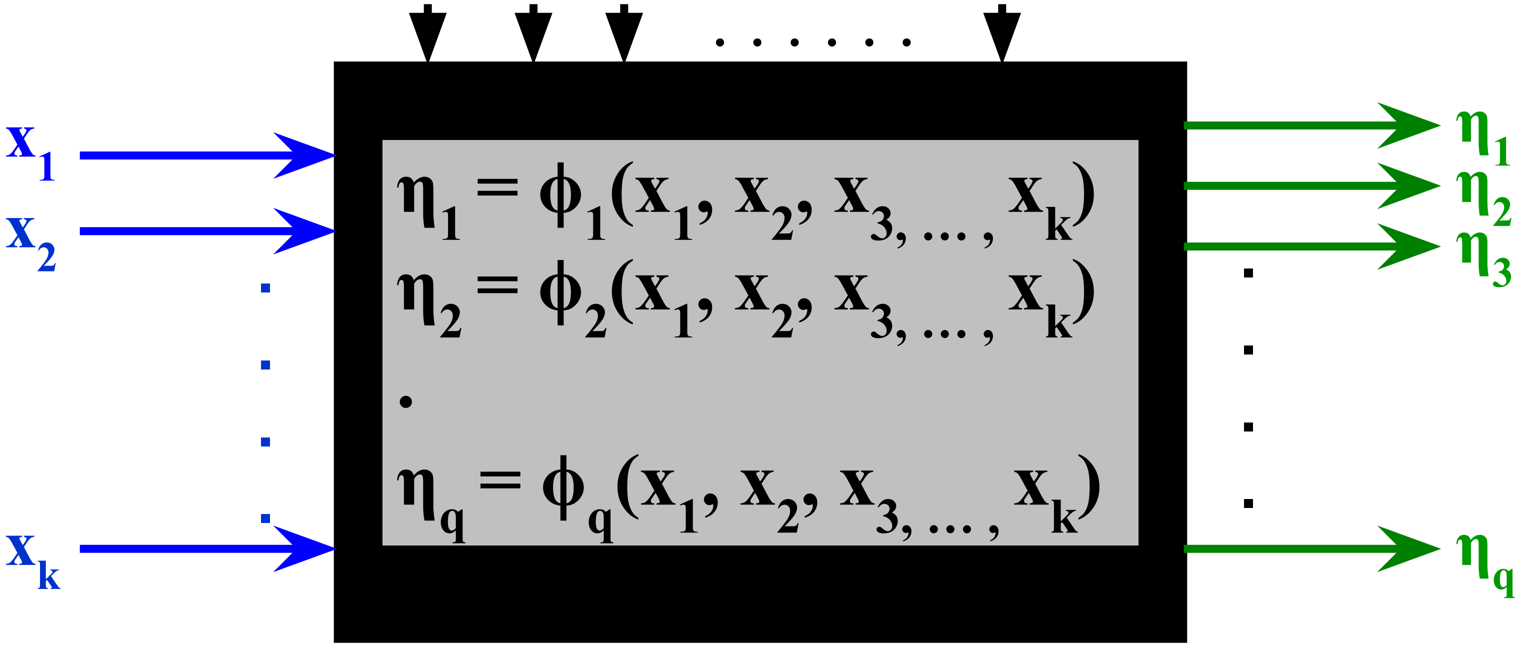
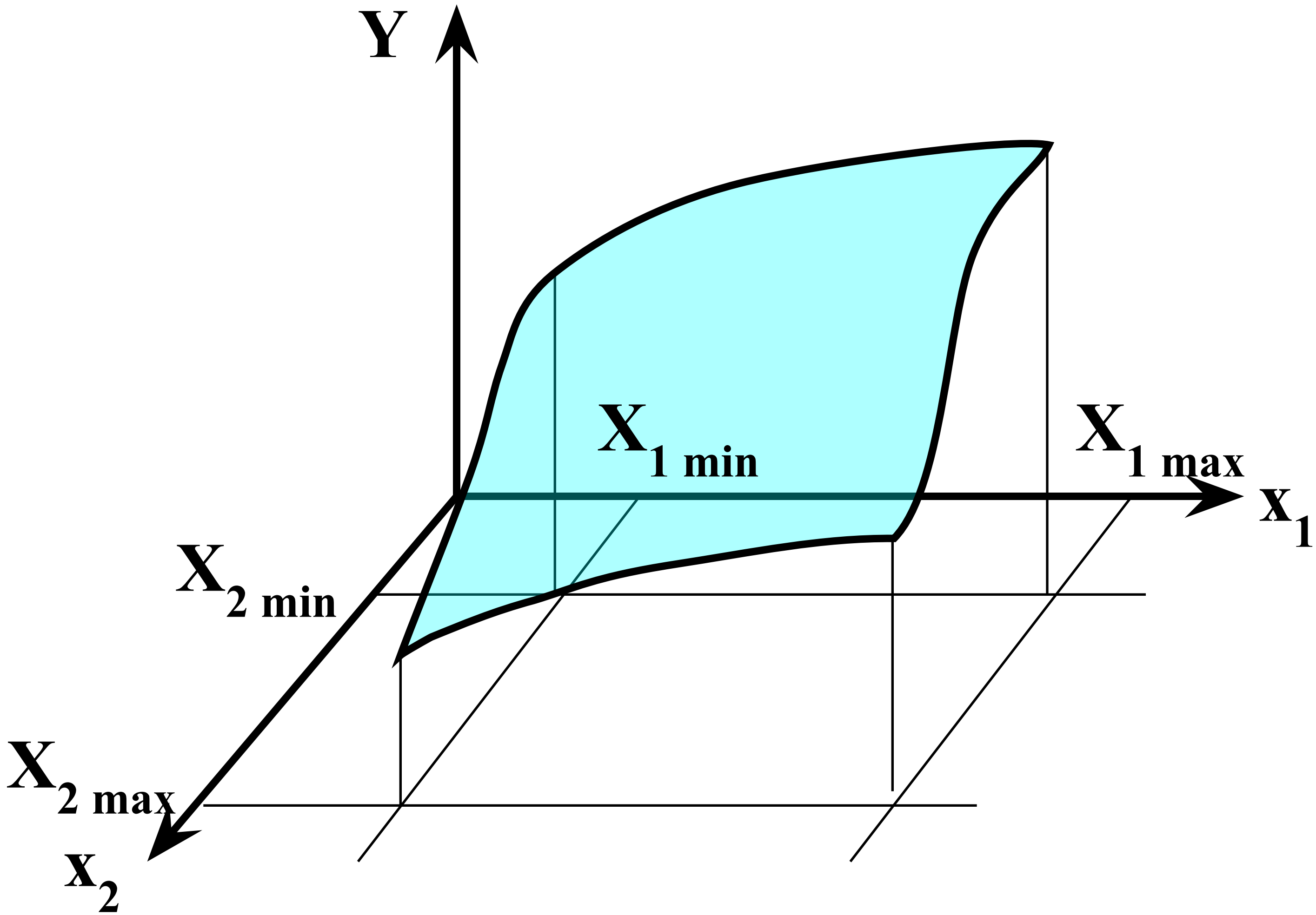
Понятие "черного ящика"

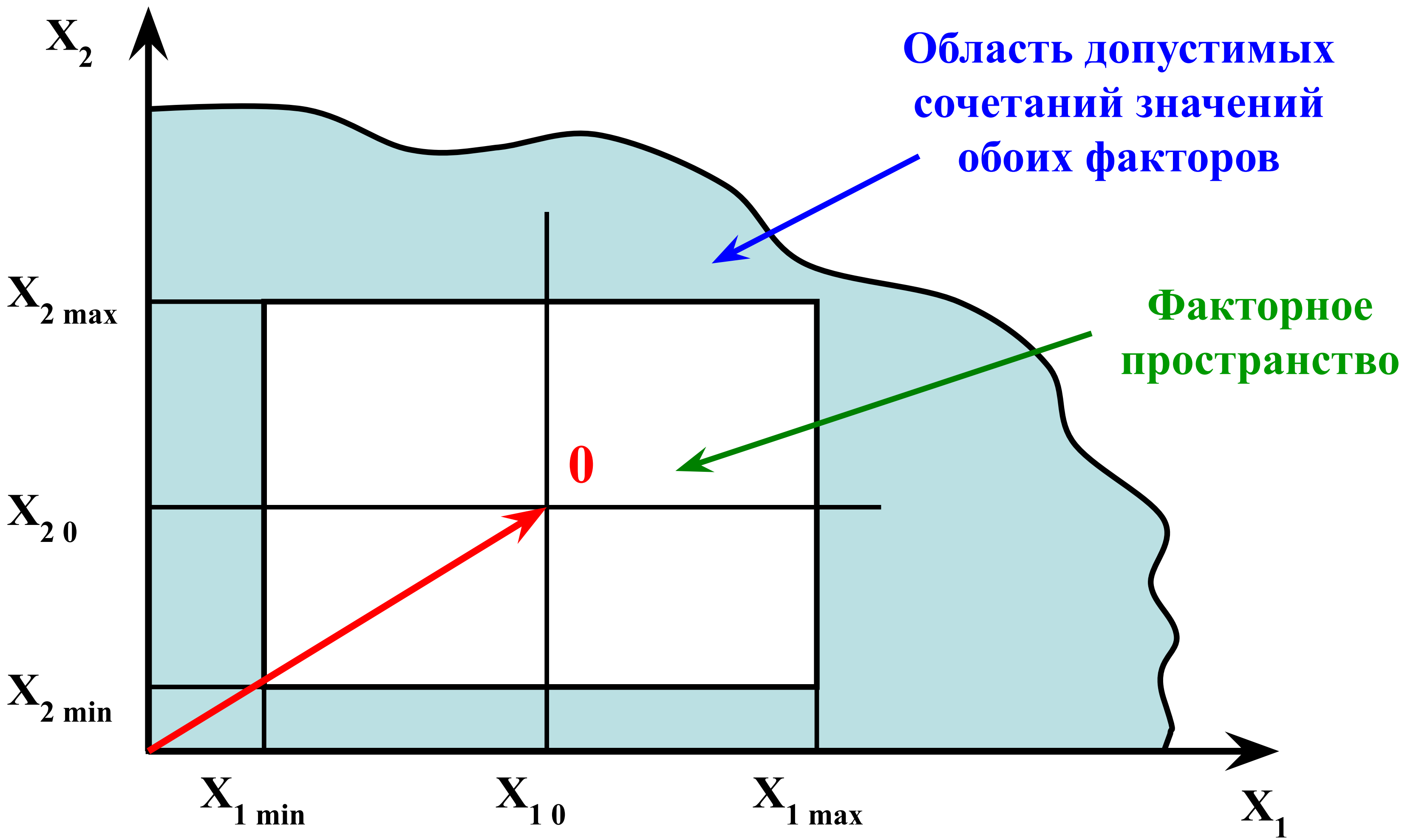


$$Y_1 = f_1(x_1, x_2, x_{3, \dots,} x_k)$$
$$Y_2 = f_2(x_1, x_2, x_{3, \dots,} x_k)$$
.
$$Y_q = f_q(x_1, x_2, x_{3, \dots,} x_k)$$

Поверхность отклика в двумерном факторном пространстве



Задание границ факторного пространства в случае двух факторов



Разложение неизвестной функции в ряд Тейлора

$$\eta = \varphi(x_1, x_2, x_3 \ldots x_k) =$$

$$= \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} x_i^2 + \ldots$$

где

$$\beta_i = \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \qquad \beta_{ij} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} \qquad \beta_{ii} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i^2}$$

Пересчет реальных значений факторов в масштабные

$$x_i = \frac{X_i - X_{i0}}{\Delta X_i} = \frac{X_i - \dfrac{X_{i\,min} + X_{i\,max}}{2}}{\dfrac{X_{i\,max} - X_{i\,min}}{2}}$$

x_i – масштабное значение i-го фактора (−1 …+1)

X_i – реальное значение i-го фактора

$X_{i\,min}$ – минимальное реальное значение i-го фактора

$X_{i\,max}$ – максимальное реальное значение i-го фактора

ΔX_i − интервал варьирования

Матрица полного факторного эксперимента

$$N = 2^k$$

№ опыта	x_1	x_2	x_3
1	−1	−1	−1
2	+1	−1	−1
3	−1	+1	−1
4	+1	+1	−1
5	−1	−1	+1
6	+1	−1	+1
7	−1	+1	+1
8	+1	+1	+1

Свойства полных факторных экспериментов

Расширенная матрица плана 2^2

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	y
1	+1	−1	−1	+1	y_1
2	+1	+1	−1	−1	y_2
3	+1	−1	+1	−1	y_3
4	+1	+1	+1	+1	y_4

Симметричность $$\sum_{u=1}^{N} x_{iu} = 0$$

Нормированность $$\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 = N$$

Ортогональность $$\sum_{u=1}^{N} x_{iu} x_{ju} = 0$$

Вычисление коэффициентов модели плана 2^2 с помощью метода наименьших квадратов (1)

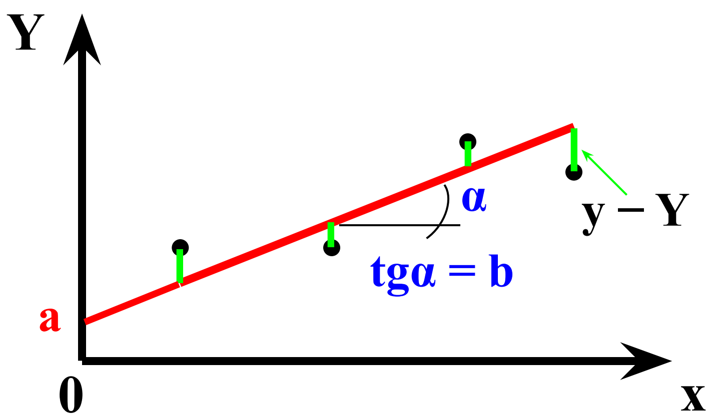
Минимизируемая функция

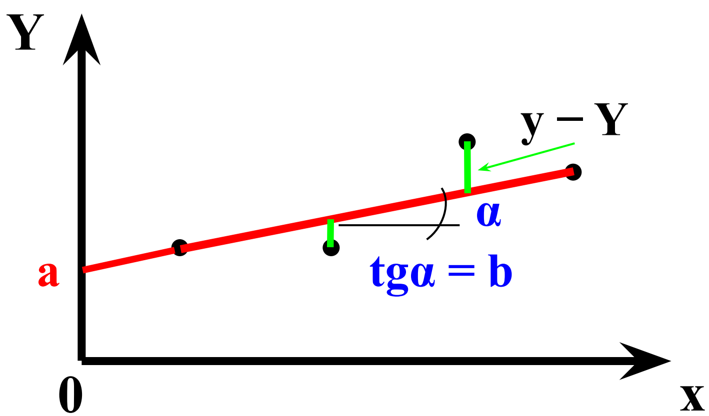
$$\Phi = \sum_{u=1}^{N} \left(y_u - Y_u \right)^2 = \min$$

y_u – экспериментальное значение функции отклика

Y_u – расчетное значение функции отклика

Использование МНК для функции $Y = a + bx$





Вычисление коэффициентов модели плана 2^2 с помощью метода наименьших квадратов (2)

$$Y_u = b_0 x_{0u} + b_1 x_{1u} + b_2 x_{2u}$$

$$\Phi = \sum_{u=1}^{N} \left(y_u - b_{0u} - b_{1u} x_{1u} - b_{2u} x_{2u} \right)^2 = \min$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial b_0} = 0 \qquad \frac{\partial \Phi}{\partial b_1} = 0 \qquad \frac{\partial \Phi}{\partial b_2} = 0$$

Вычисление коэффициентов модели плана 2^2 с помощью метода наименьших квадратов (3)

$$
\begin{cases}
b_0 \sum_{u=1}^{N} x_{0u}^2 + b_1 \sum_{u=1}^{N} x_{0u} x_{1u} + b_2 \sum_{u=1}^{N} x_{0u} x_{2u} = \sum_{u=1}^{N} x_{0u} y_u \\
b_0 \sum_{u=1}^{N} x_{0u} x_{1u} + b_1 \sum_{u=1}^{N} x_{1u}^2 + b_2 \sum_{u=1}^{N} x_{1u} x_{2u} = \sum_{u=1}^{N} x_{1u} y_u \\
b_0 \sum_{u=1}^{N} x_{0u} x_{2u} + b_1 \sum_{u=1}^{N} x_{1u} x_{2u} + b_2 \sum_{u=1}^{N} x_{2u}^2 = \sum_{u=1}^{N} x_{2u} y_u
\end{cases}
$$

Вычисление коэффициентов модели плана 2^2 с помощью метода наименьших квадратов (4)

$$\begin{cases} b_0 \sum_{u=1}^{N} x_{0u}^2 = \sum_{u=1}^{N} x_{0u} y_u \\ b_1 \sum_{u=1}^{N} x_{1u}^2 = \sum_{u=1}^{N} x_{1u} y_u \\ b_2 \sum_{u=1}^{N} x_{2u}^2 = \sum_{u=1}^{N} x_{2u} y_u \end{cases}$$

$$b_0 = \frac{\sum_{u=1}^{N} x_{0u} y_u}{\sum_{u=1}^{N} x_{0u}^2}$$

$$b_1 = \frac{\sum_{u=1}^{N} x_{1u} y_u}{\sum_{u=1}^{N} x_{1u}^2}$$

$$b_2 = \frac{\sum_{u=1}^{N} x_{2u} y_u}{\sum_{u=1}^{N} x_{2u}^2}$$

Вычисление коэффициентов модели плана 2^2 с помощью метода наименьших квадратов (5)

$$b_i = \frac{\sum_{u=1}^{N} x_{iu} y_u}{\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2} = \frac{\sum_{u=1}^{N} x_{iu} y_u}{N}$$

Расчет среднего значения и дисперсии функции отклика при дублировании опытов в центре плана

$$\bar{y}_0 = \frac{\sum_{g=1}^{n_0} y_{g0}}{n_0} \qquad S_y^2 = \frac{\sum_{g=1}^{n_0} \left(y_{g0} - \bar{y}_0\right)^2}{f} = \frac{\sum_{g=1}^{n_0} \left(y_{g0} - \bar{y}_0\right)^2}{n_0 - 1}$$

$\bar{y}_0$ – среднее значение функции отклика в центре плана

y_{g0} – результат g-го дублирования в центре плана

f – число степеней свободы

n_0 – число дублирований опытов в центре плана

S^2_y – дисперсия опыта

Расчет средних значений и дисперсии опытов при неравномерном дублировании

$$\bar{y}_u = \frac{\sum_{g=1}^{n_u} y_{gu}}{n_u} \qquad S_{yu}^2 = \frac{\sum_{g=1}^{n_u} \left(y_{gu} - \bar{y}_u\right)^2}{f_u} = \frac{\sum_{g=1}^{n_u} \left(y_{gu} - \bar{y}_u\right)^2}{n_u - 1}$$

$$S_y^2 = \frac{\sum_{u=1}^{N} f_u S_{yu}^2}{\sum_{u=1}^{N} f_u} = \frac{\sum_{u=1}^{N} \sum_{g=1}^{n_u} \left(y_{gu} - \bar{y}_u\right)^2}{\sum_{u=1}^{N} n_u - 1}$$

$\bar{y}_u$ – среднее значение функции отклика в u-м опыте

$y_{g\,u}$ – результат g-го дублирования u-го опыта

f_u – число степеней свободы для u-го опыта

n_u – число дублирований u-го опыта

S^2_{yu} – дисперсия u-го опыта S^2_y – дисперсия опытов (средняя)

Расчет средних значений и дисперсии опытов при равномерном дублировании

$$\boxed{\begin{aligned} n_u &= n \\ f_u &= f \end{aligned}}$$

$$\bar{y}_u = \frac{\sum_{g=1}^{n} y_{gu}}{n} \qquad S_{yu}^2 = \frac{\sum_{g=1}^{n}\left(y_{gu} - \bar{y}_u\right)^2}{f} = \frac{\sum_{g=1}^{n}\left(y_{gu} - \bar{y}_u\right)^2}{n-1}$$

$$S_y^2 = \frac{\sum_{u=1}^{N} f_u \cdot S_{yu}^2}{\sum_{u=1}^{N} f_u} = \frac{f_u \sum_{u=1}^{N} S_{yu}^2}{N \cdot f_u} = \frac{\sum_{u=1}^{N} S_{yu}^2}{N} = \frac{\sum_{u=1}^{N}\sum_{g=1}^{n}\left(y_{gu} - \bar{y}_u\right)^2}{N \cdot (n-1)}$$

$\bar{y}_u$ – среднее значение функции отклика в u-м опыте

$y_{g\,u}$ – результат g-го дублирования u-го опыта

$f_u = f$ – число степеней свободы для любого опыта

$n_u = n$ – число дублирований любого опыта

S^2_{yu} – дисперсия u-го опыта **S^2_y – дисперсия опытов (средняя)**

Проверка ряда дисперсий на однородность по критерию Кохрена при равномерном дублировании

Ряд дисперсий однороден, если $G_{расч} \le G_{табл}$

Расчетное значение критерия Кохрена

$$G_{расч} = \frac{S^2_{y\,u\,max}}{\sum_{u=1}^{N} S^2_{y\,u}}$$

Табличное значение критерия Кохрена

$$G_{табл} = \Phi(N, f, \alpha)$$

$$f = (n-1)$$

$S^2_{y\,u\,max}$ – максимальная дисперсия опыта

$S^2_{y\,u}$ – дисперсия u-го опыта   N – число экспериментов

f – число степеней свободы   α – уровень значимости

Проверка статистической значимости коэффициентов уравнения регрессии

Коэффициент значим, если $|b_i| \geq \Delta b_i$

$$\Delta b_i = \sqrt{S_{b_i}^2} \cdot t$$

При дублировании опытов в центре плана	**При равномерном дублировании опытов**
$S_{b_i}^2 = \dfrac{S_y^2}{N}$	$S_{b_i}^2 = \dfrac{S_y^2}{N \cdot n}$

Δb_i – доверительный интервал

S^2_{bi} – дисперсия оценок коэффициентов

S^2_y – дисперсия опытов (средняя) **N – число экспериментов**

n – число дублирований опытов **t – критерий Стьюдента**

$t = \Phi(\alpha, f)$, где $f = n_0 - 1$ или **$t = \Phi(\alpha, f_1)$, где $f_1 = N(n - 1)$**

Проверка значимости уравнения регрессии (1)

Уравнение значимо, если $F_{расч} \le F_{табл}$

$$F_{расч} = \frac{S^2_{неад}}{S^2_y}$$

При дублировании опытов в центре плана

$$S^2_{неад} = \frac{\sum_{u=1}^{N}(Y_u - y_u)^2}{f_2} = \frac{\sum_{u=1}^{N}(Y_u - y_u)^2}{N - k'}$$

При равномерном дублировании опытов

$$S^2_{неад} = \frac{n \cdot \sum_{u=1}^{N}(Y_u - \bar{y}_u)^2}{f_2} = \frac{n \cdot \sum_{u=1}^{N}(Y_u - \bar{y}_u)^2}{N - k'}$$

$S^2_{неад}$ – дисперсия неадекватности

Y_u – расчетное значение функции отклика для u-го опыта

y_u, $\bar{y}_u$ – экспериментальное значение для u-го опыта

k’ – число значимых коэффициентов уравнения регрессии

Проверка значимости уравнения регрессии (2)

При дублировании опытов в центре плана

$$F_{расч} = \frac{\dfrac{\sum_{u=1}^{N}\left(Y_u - y_u\right)^2}{f_2}}{\dfrac{\sum_{g=1}^{n_0}\left(y_{g0} - \bar{y}_0\right)^2}{f}} = \frac{\dfrac{\sum_{u=1}^{N}\left(Y_u - y_u\right)^2}{N - k'}}{\dfrac{\sum_{g=1}^{n_0}\left(y_{g0} - \bar{y}_0\right)^2}{n_0 - 1}}$$

При равномерном дублировании опытов

$$F_{расч} = \frac{\dfrac{n \cdot \sum_{u=1}^{N}\left(Y_u - y_u\right)^2}{f_2}}{\dfrac{\sum_{u=1}^{N}\sum_{g=1}^{n}\left(y_{ug} - \bar{y}_u\right)^2}{f_1}} = \frac{\dfrac{n \cdot \sum_{u=1}^{N}\left(Y_u - y_u\right)^2}{N - k'}}{\dfrac{\sum_{u=1}^{N}\sum_{g=1}^{n}\left(y_{ug} - \bar{y}_u\right)^2}{N \cdot (n - 1)}}$$

Проверка значимости уравнения регрессии (3)

При дублировании опытов в центре плана $F_{табл} = \Phi(f, f_2)$

При равномерном дублировании опытов $F_{табл} = \Phi(f_1, f_2)$

f_2 – число степеней свободы в числителе

f, f_1 – число степеней свободы в знаменателе

При $N = k'$ $\Rightarrow$ $f_2 = 0$

$$F_{расч} = \frac{\dfrac{\sum_{m=1}^{r}\left(Y_m - y_m\right)^2}{r}}{S_y^2}$$

r – число дополнительных опытов

Преобразование уравнения регрессии под реальное представление факторов

Вид уравнения для масштабного представления факторов

$$Y = 18{,}3 + 3\,x_1 + 1{,}5\,x_2$$

Y – прочность порошкового материала

x_1 – температура спекания (900 ÷ 1100 ^oC)

x_2 – время изотермической выдержки (10 ÷ 30 мин)

Пересчет реальных значений факторов в масштабные

$$x_1 = \frac{X_1 - 1000}{100} \qquad x_2 = \frac{X_2 - 20}{10}$$

Вид уравнения для реального представления факторов

$$Y = -14{,}7 + 0{,}03\,X_1 + 0{,}15\,X_2$$

Матрица планирования дробного факторного эксперимента 2^{3-1} на базе плана 2^2

№ опыта	x_0	x_1	x_2	$x_1 x_2 \equiv x_3$	y
1	+1	−1	−1	+1	y_1
2	+1	+1	−1	−1	y_2
3	+1	−1	+1	−1	y_3
4	+1	+1	+1	+1	y_4

Симметричность $$\sum_{u=1}^{N} x_{iu} = 0$$

Нормированность $$\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 = N$$

Ортогональность $$\sum_{u=1}^{N} x_{iu} x_{ju} = 0$$

Смешивание эффектов в дробных факторных экспериментах

№ опыта	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_2x_3	x_1x_3
1	–1	–1	+1	+1	–1	–1
2	+1	–1	–1	–1	+1	–1
3	–1	+1	–1	–1	–1	+1
4	+1	+1	+1	+1	+1	+1

$b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23}$ $\quad b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{13}$ $\quad b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12}$

Понятия генерирующего соотношения и определяющего контраста

Генерирующее соотношение $x_3 \equiv x_1x_2$

$$x_3^2 \equiv x_1x_2x_3$$

Определяющий контраст $1 \equiv x_1x_2x_3$

$$1 \equiv x_1x_2x_3 \rightarrow \begin{cases} x_1 \equiv x_1^2x_2x_3 \longrightarrow x_1 \equiv x_2x_3 \\ x_2 \equiv x_1x_2^2x_3 \longrightarrow x_2 \equiv x_1x_3 \\ x_3 \equiv x_1x_2x_3^2 \longrightarrow x_3 \equiv x_1x_2 \end{cases}$$

Матрица ДФЭ 2^{4-1} с определяющим контрастом $1 \equiv x_1x_2x_3x_4$

№ опыта	x_1	x_2	x_3	$x_4 \equiv x_1x_2x_3$
1	–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

$$b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{234}$$
$$b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{134}$$
$$b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{124}$$
$$b_4 \rightarrow \beta_4 + \beta_{123}$$
$$b_{12} \rightarrow \beta_{12} + \beta_{34}$$
$$b_{13} \rightarrow \beta_{13} + \beta_{24}$$
$$b_{14} \rightarrow \beta_{14} + \beta_{23}$$
$$b_{23} \rightarrow \beta_{23} + \beta_{14}$$
$$b_{34} \rightarrow \beta_{34} + \beta_{12}$$

$$Y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4$$

Матрица ДФЭ 2^{4-1} с определяющим контрастом $1 \equiv x_1 x_2 x_4$

№ опыта	x_1	x_2	x_3	$x_4 \equiv x_1 x_2$
1	–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

$b_1 \to \beta_1 + \beta_{24}$

$b_2 \to \beta_2 + \beta_{14}$

$b_3 \to \beta_3 + \beta_{1234}$

$b_4 \to \beta_4 + \beta_{12}$

$b_{13} \to \beta_{13} + \beta_{234}$

$b_{23} \to \beta_{23} + \beta_{134}$

$b_{34} \to \beta_{34} + \beta_{123}$

$b_{24} \to \beta_{24} + \beta_1$

$$Y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_4 x_4 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{34} x_3 x_4$$

Планы второго порядка

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} x_i^2$$

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^{k} b_i x_i + \sum_{i=1}^{k} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{k} b_{ii} x_i^2$$

η – истинная величина функции отклика

Y – оценка величины функции отклика

β_i, β_{ij}, β_{ii} – истинные значения коэффициентов регрессии

b_i, b_{ij}, b_{ii} – оценки коэффициентов регрессии

Число членов модели

$$C_{k+2}^{k} = \frac{(k+2)!}{k!\cdot 2!} = \frac{k!(k+1)(k+2)}{k!\cdot 2} = \frac{(k+1)(k+2)}{2}$$

Число опытов

$$N \geq \frac{(k+1)(k+2)}{2}$$

Матрица композиционного плана на базе плана 2^2

№ опыта	x_1	x_2	Элемент плана
1	–1	–1	Ядро плана – ПФЭ 2^2
2	+1	–1	
3	–1	+1	
4	+1	+1	
5	–α	0	"Звездные точки"
6	+α	0	
7	0	–α	
8	0	+α	
9	0	0	Центр плана

Общее число опытов в композиционных планах с k факторами

$$N = N_1 + 2k + n_0$$

Обобщенная расширенная матрица композиционного плана

x_1	x_2	…	x_k
–1	–1	…	–1
+1	–1	…	–1
.	.	.	.
.	.	.	.
.	.	.	.
+1	+1	…	+1
–α	0	…	0
+α	0	…	0
0	–α	…	0
0	+α	…	0
.	.	.	.
.	.	.	.
.	.	.	.
0	0	…	–α
0	0	…	+α
0	0	…	0

Нечетные моменты плана

$$\sum_{u=1}^{N} x_{iu} \qquad \sum_{u=1}^{N} (x_i x_j)_u \qquad \sum_{u=1}^{N} (x_i x_j x_l)_u \qquad \sum_{u=1}^{N} (x_i^2 x_j)_u \qquad \sum_{u=1}^{N} x_{i\,u}^3$$

При всех видах дублирования

$$\sum_{u=1}^{N} x_{iu} = 0$$

$$\sum_{u=1}^{N} (x_i x_j)_u = 0$$

$$\sum_{u=1}^{N} (x_i x_j x_l)_u = 0$$

Четные моменты плана

$$\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 \qquad \sum_{u=1}^{N} (x_i^2 x_j^2)_u \qquad \sum_{u=1}^{N} x_{i\,u}^4$$

При дублировании опытов в центре плана и равномерном дублировании

$$\lambda_2 = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2$$

$$\lambda_3 = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N} (x_i^2 x_j^2)_u$$

$$\lambda_4 = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N} x_{i\,u}^4$$

При неравномерном дублировании

$$\lambda_2 = \frac{\sum_{u=1}^{N} n_u\, x_{iu}^2}{\sum_{u=1}^{N} n_u} \qquad \lambda_4 = \frac{\sum_{u=1}^{N} n_u\, x_{iu}^4}{\sum_{u=1}^{N} n_u}$$

$$\lambda_3 = \frac{\sum_{u=1}^{N} n_u\,(x_i^2 x_j^2)_u}{\sum_{u=1}^{N} n_u}$$

Вспомогательные коэффициенты для расчета коэффициентов уравнений регрессии композиционных планов

$$a = \frac{k\lambda_2^2}{\lambda_4 - \lambda_3 + k\lambda_3 - k\lambda_2^2} + 1 \qquad b = \frac{\lambda_2}{\lambda_4 - \lambda_3 + k\lambda_3 - k\lambda_2^2} + 1$$

$$c = \frac{1}{\lambda_4 - \lambda_3} \qquad d = \frac{\lambda_3 - \lambda_2^2}{(\lambda_4 - \lambda_3)(\lambda_4 - \lambda_3 + k\lambda_3 - k\lambda_2^2)}$$

Проверка правильности расчетов вспомогательных коэффициентов

$$a - bk\lambda_2 = 1 \qquad b + (dk - c)\lambda_2 = 0$$

$$b\lambda_2 + [d(k-1) - c]\lambda_3 + d\lambda_4 = 0$$

Расчет коэффициентов уравнения регрессии композиционных планов (1)

При дублировании опытов в центре плана и равномерном дублировании

$$b_0 = \frac{a}{N}\sum_{u=1}^{N} Y_u - \frac{b}{N}\sum_{i=1}^{k}\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 Y_u$$

$$b_i = \frac{1}{N\lambda_2}\sum_{u=1}^{N} x_{iu} Y_u$$

$$b_{ij} = \frac{1}{N\lambda_3}\sum_{u=1}^{N} \left(x_i x_j\right)_u Y_u$$

$$b_{ii} = \frac{c}{N}\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 Y_u - \frac{d}{N}\sum_{i=1}^{k}\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 Y_u - \frac{b}{N}\sum_{u=1}^{N} Y_u$$

Расчет коэффициентов уравнения регрессии композиционных планов (2)

При неравномерном дублировании опытов

$$b_0 = \frac{a}{\sum\limits_{u=1}^{N} n_u} \sum_{u=1}^{N} n_u \overline{Y}_u - \frac{b}{\sum\limits_{u=1}^{N} n_u} \sum_{i=1}^{k} \sum_{u=1}^{N} n_u x_{iu}^2 \overline{Y}_u$$

$$b_i = \frac{1}{\lambda_2 \sum\limits_{u=1}^{N} n_u} \sum_{u=1}^{N} n_u x_{iu} \overline{Y}_u \qquad b_{ij} = \frac{1}{\lambda_3 \sum\limits_{u=1}^{N} n_u} \sum_{u=1}^{N} n_u \left(x_i x_j\right)_u \overline{Y}_u$$

$$b_{ii} = \frac{c}{\sum\limits_{u=1}^{N} n_u} \sum_{u=1}^{N} n_u x_{iu}^2 \overline{Y}_u - \frac{d}{\sum\limits_{u=1}^{N} n_u} \sum_{i=1}^{k} \sum_{u=1}^{N} n_u x_{iu}^2 \overline{Y}_u - \frac{b}{\sum\limits_{u=1}^{N} n_u} \sum_{u=1}^{N} n_u \overline{Y}_u$$

Дисперсия оценки коэффициентов регрессии

При дублировании опытов в центре плана

$$S_{b_0}^2 = \frac{a}{N} S_Y^2$$

$$S_{b_i}^2 = \frac{1}{N\lambda_2} S_Y^2$$

$$S_{b_{ij}}^2 = \frac{1}{N\lambda_3} S_Y^2$$

$$S_{b_{ii}}^2 = \frac{c-d}{N} S_Y^2$$

При неравномерном дублировании

$$S_{b_0}^2 = \frac{a}{\sum_{u=1}^{N} n_u} S_Y^2$$

$$S_{b_i}^2 = \frac{1}{\lambda_2 \sum_{u=1}^{N} n_u} S_Y^2$$

$$S_{b_{ij}}^2 = \frac{1}{\lambda_3 \sum_{u=1}^{N} n_u} S_Y^2$$

$$S_{b_{ii}}^2 = \frac{c-d}{\sum_{u=1}^{N} n_u} S_Y^2$$

При равномерном дублировании

$$S_{b_0}^2 = \frac{a}{Nn} S_Y^2$$

$$S_{b_i}^2 = \frac{1}{Nn\lambda_2} S_Y^2$$

$$S_{b_{ij}}^2 = \frac{1}{Nn\lambda_3} S_Y^2$$

$$S_{b_{ii}}^2 = \frac{c-d}{Nn} S_Y^2$$

Условие D-оптимальности для непрерывных симметричных планов

При k = 1

$$\lambda_2 = \frac{k+3}{(k+1)(k+2)}\left[1+(k-1)\frac{\lambda_3}{\lambda_2}\right]$$

При k > 1

$$\lambda_3 = \frac{2k+1+\sqrt{4k^4+12k+17}}{4(k+2)}\lambda_2$$

$$\lambda_2 = \lambda_4$$

Расширенная матрица плана B_2

№ опыта	x_0	x_1	x_2	$x_1 \cdot x_2$	x_1^2	x_2^2
1	**+1**	**–1**	**–1**	**+1**	**+1**	**+1**
2	**+1**	**+1**	**–1**	**–1**	**+1**	**+1**
3	**+1**	**–1**	**+1**	**–1**	**+1**	**+1**
4	**+1**	**+1**	**+1**	**+1**	**+1**	**+1**
5	**+1**	**–1**	**0**	**0**	**+1**	**0**
6	**+1**	**+1**	**0**	**0**	**+1**	**0**
7	**+1**	**0**	**–1**	**0**	**0**	**+1**
8	**+1**	**0**	**+1**	**0**	**0**	**+1**

$$N = N_1 + 2k$$

Расширенная матрица плана B_3

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	$x_1 \cdot x_2$	$x_2 \cdot x_3$	$x_1 \cdot x_3$	x_1^2	x_2^2	x_3^2
1	+1	–1	–1	–1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
2	+1	+1	–1	–1	–1	+1	–1	+1	+1	+1
3	+1	–1	+1	–1	–1	–1	+1	+1	+1	+1
4	+1	+1	+1	–1	+1	–1	–1	+1	+1	+1
5	+1	–1	–1	+1	+1	–1	–1	+1	+1	+1
6	+1	+1	–1	+1	–1	–1	+1	+1	+1	+1
7	+1	–1	+1	+1	–1	+1	–1	+1	+1	+1
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
9	+1	–1	0	0	0	0	0	+1	0	0
10	+1	+1	0	0	0	0	0	+1	0	0
11	+1	0	–1	0	0	0	0	0	+1	0
12	+1	0	+1	0	0	0	0	0	+1	0
13	+1	0	0	–1	0	0	0	0	0	+1
14	+1	0	0	+1	0	0	0	0	0	+1

Расчет коэффициентов уравнения регрессии композиционного плана B_k

При дублировании опытов в центре плана

$$b_0 = c_1 \sum_{u=1}^{N} Y_u - c_2 \sum_{i=1}^{k} \sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 Y_u$$

$$b_i = c_3 \sum_{u=1}^{N} x_{iu} Y_u \qquad b_{ij} = c_4 \sum_{u=1}^{N} (x_i x_j)_u Y_u$$

$$b_{ii} = c_5 \sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 Y_u + c_6 \sum_{i=1}^{k} \sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 Y_u - c_2 \sum_{u=1}^{N} Y_u$$

При дублировании опытов в центре плана величина Y_u меняется на величину $\overline{Y_u}$

Расчет дисперсий и среднеквадратических ошибок оценок коэффициентов

При дублировании опытов в центре плана

$$S_{b_0}^2 = c_1 S_Y^2 \qquad S_{b_i}^2 = c_3 S_Y^2 \qquad S_{b_{ij}}^2 = c_4 S_Y^2 \qquad S_{b_{ii}}^2 = (c_5 + c_6) S_Y^2$$

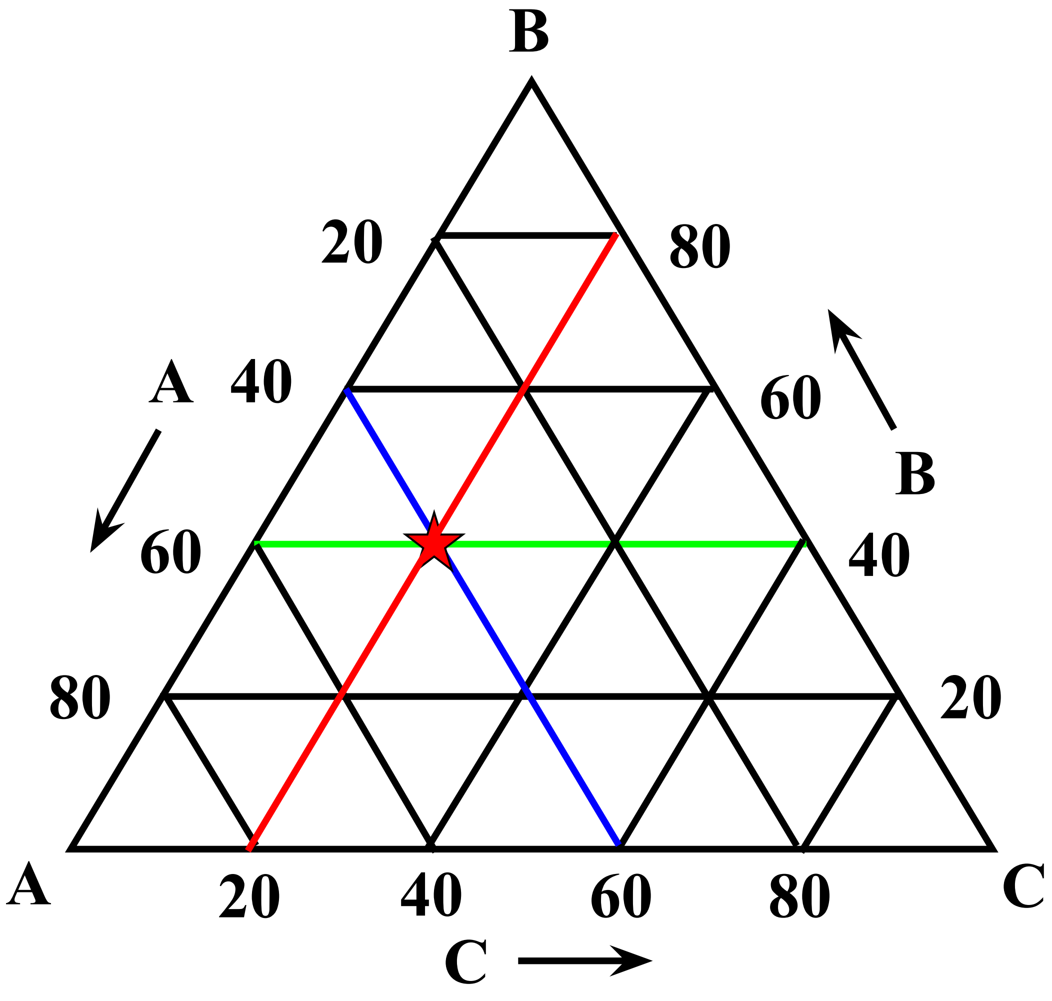
$$S_{b_0} = c_7 S_Y \qquad S_{b_i} = c_8 S_Y \qquad S_{b_{ij}} = c_9 S_Y \qquad S_{b_{ii}} = c_{10} S_Y$$

При равномерном дублировании опытов

$$S_{b_0}^2 = \frac{c_1 S_Y^2}{n} \qquad S_{b_i}^2 = \frac{c_3 S_Y^2}{n} \qquad S_{b_{ij}}^2 = \frac{c_4 S_Y^2}{n} \qquad S_{b_{ii}}^2 = \frac{(c_5 + c_6) S_Y^2}{n}$$

$$S_{b_0} = \frac{c_7 S_Y}{\sqrt{n}} \qquad S_{b_i} = \frac{c_8 S_Y}{\sqrt{n}} \qquad S_{b_{ij}} = \frac{c_9 S_Y}{\sqrt{n}} \qquad S_{b_{ii}} = \frac{c_{10} S_Y}{\sqrt{n}}$$

Определение состава материала в двумерном правильном симплексе



A = 40 %

B = 40 %

C = 20 %

Преобразование полиномиального регрессионного уравнения в каноническую форму Шеффе (1)

Исходное уравнение

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^{k} b_i x_i + \sum_{i=1}^{k} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{k} b_{ii} x_i^2$$

Правило нормировки

$$\sum_{i=1}^{q} x_i = 1$$

$$\mathbf{b_0 = b_0 \cdot x_1 + b_0 \cdot x_2 + b_0 \cdot x_3}$$

$$\mathbf{x_1{}^2 = x_1 - x_1x_2 - x_1x_3 = x_1(1 - x_2 - x_3)}$$

$$\mathbf{x_2{}^2 = x_2 - x_1x_2 - x_2x_3 = x_2(1 - x_1 - x_3)}$$

$$\mathbf{x_3{}^2 = x_3 - x_1x_3 - x_2x_3 = x_3(1 - x_1 - x_2)}$$

Преобразование полиномиального регрессионного уравнения в каноническую форму Шеффе (2)

$$\mathbf{Y = (b_0 + b_1 + b_{11})x_1 + (b_0 + b_2 + b_{22})x_2 + (b_0 + b_3 + b_{33})x_3}$$
$$\mathbf{+ (b_{12} - b_{11} - b_{22})x_1x_2 + (b_{13} - b_{11} - b_{33})x_1x_3 +}$$
$$\mathbf{+ (b_{23} - b_{22} - b_{33})x_2x_3}$$

$$\boldsymbol{\beta}_\mathbf{i} \mathbf{= b_0 + b_i + b_{ii}}$$
$$\boldsymbol{\beta}_\mathbf{ij} \mathbf{= b_{ij} - b_{ii} - b_{ij}}$$

Каноническая форма Шеффе

$$\mathbf{Y} = \boldsymbol{\beta}_1\mathbf{x}_1 + \boldsymbol{\beta}_2\mathbf{x}_2 + \boldsymbol{\beta}_3\mathbf{x}_3 + \boldsymbol{\beta}_{12}\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2 + \boldsymbol{\beta}_{13}\mathbf{x}_1\mathbf{x}_3 + \boldsymbol{\beta}_{23}\mathbf{x}_2\mathbf{x}_3$$

Приведение полинома первого порядка к канонической форме в q-мерном случае

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^{q} b_i x_i$$

$$b_0 = \sum_{i=1}^{q} b_0 x_i$$

$$Y = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i$$

Приведение полинома второго порядка к канонической форме в q-мерном случае

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^{k} b_i x_i + \sum_{i=1}^{k} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{k} b_{ii} x_i^2$$

$$\boxed{b_0 = \sum_{i=1}^{q} b_0 x_i}$$

$$x_i^2 = x_i - \sum_{i=1}^{q} x_i x_j$$

$$Y = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{q} \beta_{ij} x_i x_j$$

Приведение полинома третьего порядка к канонической форме в q-мерном случае

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^{q} b_i x_i + \sum_{i=1}^{q} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{q} b_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^{q} b_{iii} x_i^3 +$$

$$+ \sum_{i=1}^{q} b_{ijk} x_i x_j x_k + \sum_{i=1}^{q} b_{iij} x_i^2 x_j + \sum_{i=1}^{q} b_{ijj} x_i x_j^2$$

$$\boxed{b_0 = \sum_{i=1}^{q} b_0 x_i \qquad x_i^2 = x_i - \sum_{i=1}^{q} x_i x_j}$$

$$x_i^3 = x_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{q} \left[3x_i x_j + x_i x_j (x_i - x_j) - \sum_{i=1}^{q} x_i x_j x_k \right]$$

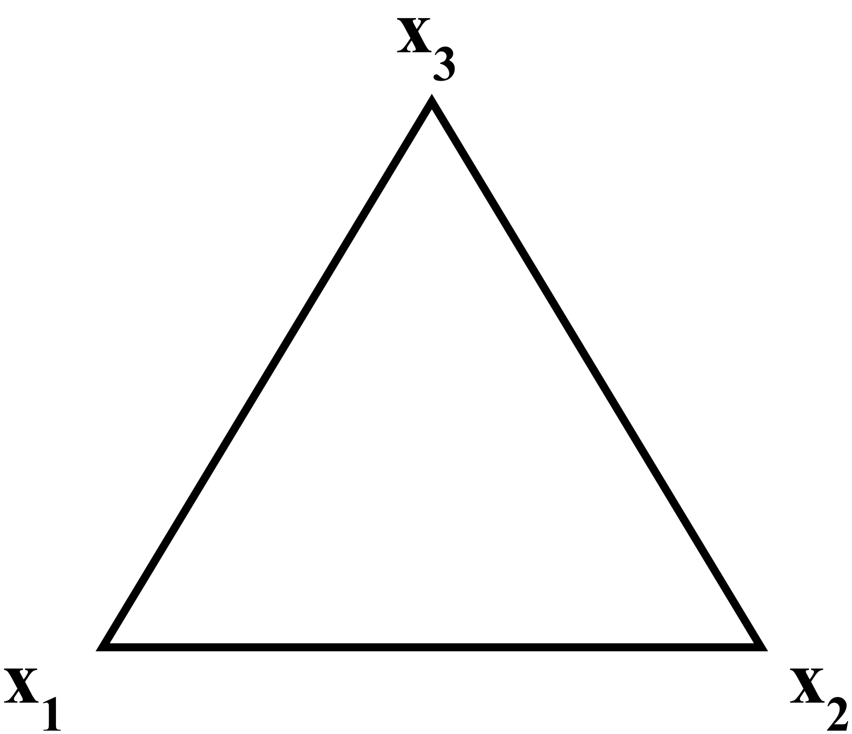
$$x_i^2 x_j = \frac{1}{2} \left[x_i x_j + x_i x_j (x_i - x_j) - \sum_{i=1}^{q} x_i x_j x_k \right]$$

$$Y = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{q} \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{i=1}^{q} b_{ijk} x_i x_j x_k$$

Симплекс-решетчатые планы

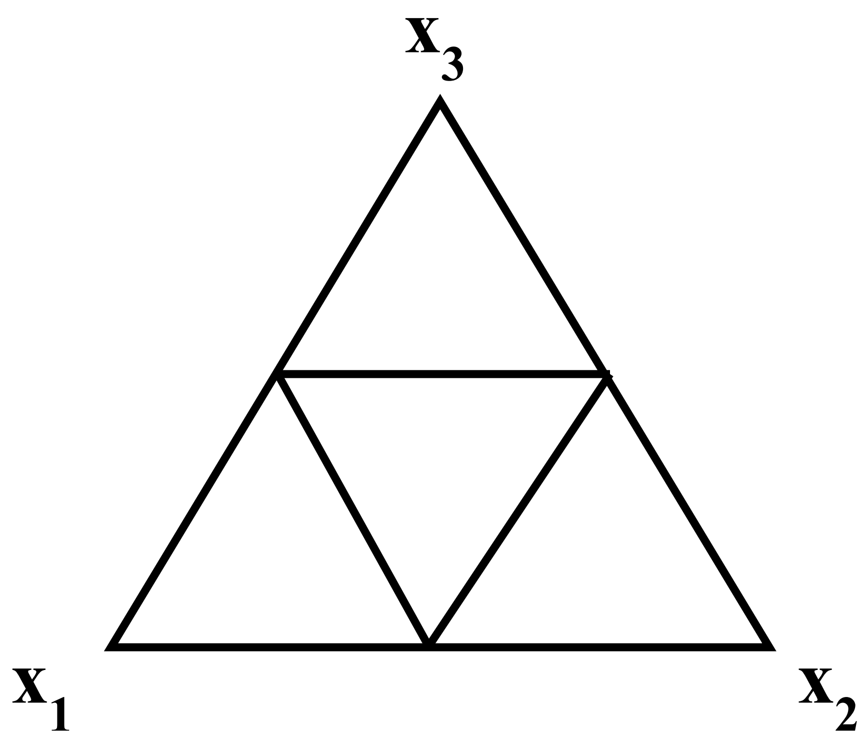
Для модели степени n используют n + 1 равноотстоящих уровней: 0; 1/n; 2/n; 3/n; … n/n

Первый порядок



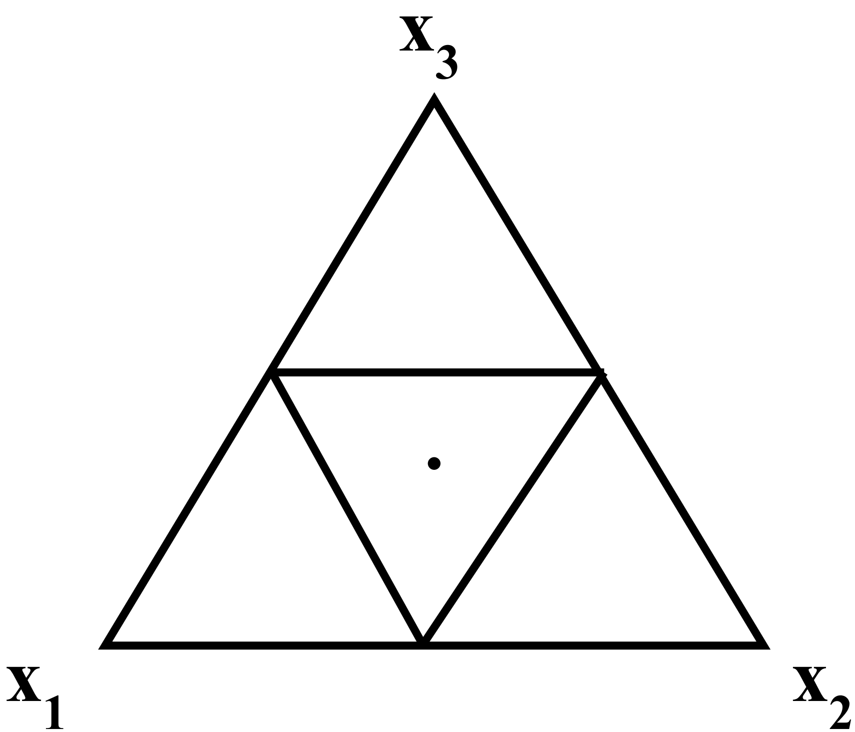
$$Y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$$

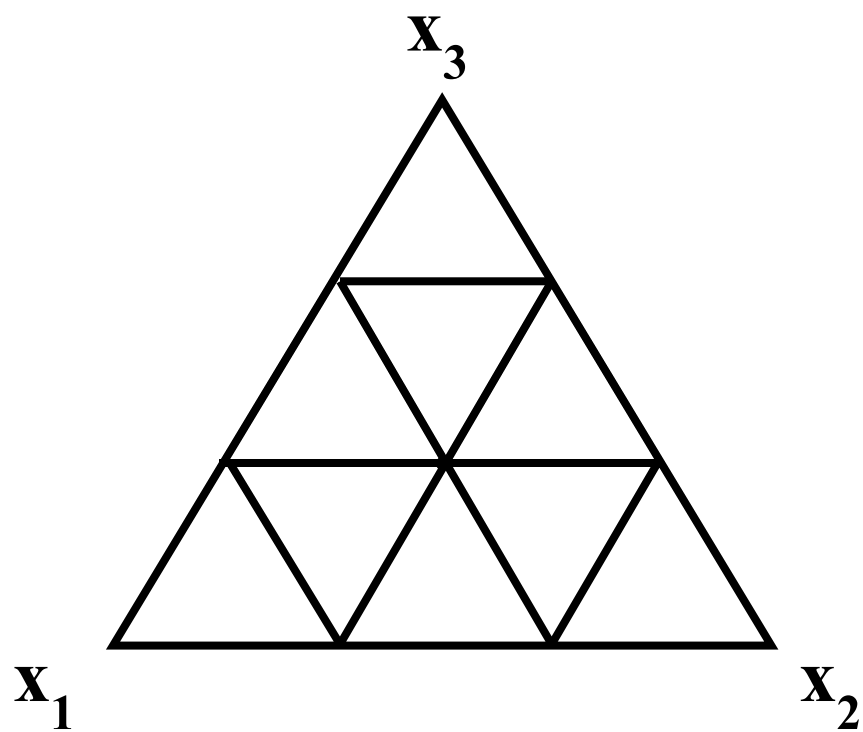
Второй порядок



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

Симплекс-решетчатые планы неполного и полного третьего порядка

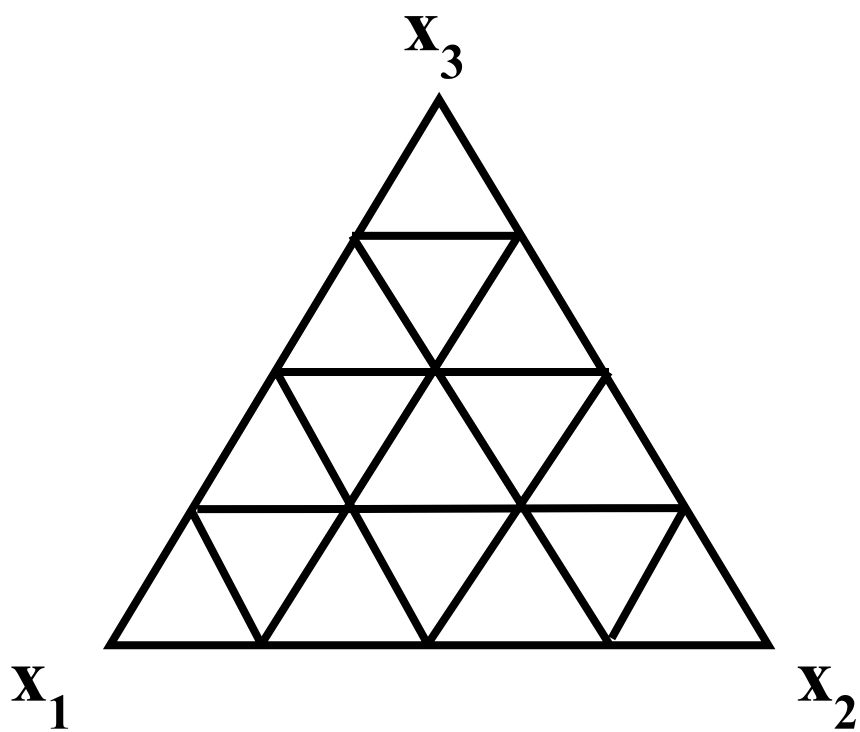




$$Y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{123} x_1 x_2 x_3$$

$$Y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{123} x_1 x_2 x_3 + \gamma_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) + \gamma_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3) + \gamma_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3)$$

Симплекс-решетчатый план четвертого порядка



$$Y=\sum_{i=1}^{q}\beta_i x_i+\sum_{i=1}^{q}\beta_{ij}x_i x_j+\sum_{i=1}^{q}\gamma_{ij}x_i x_j\left(x_i-x_j\right)+\sum_{i=1}^{q}\delta_{ij}x_i x_j\left(x_i-x_j\right)^2+$$

$$+\sum_{i=1}^{q}\beta_{iijk}x_i^2 x_j x_k+\sum_{i=1}^{q}\beta_{ijjk}x_i x_j^2 x_k+\sum_{i=1}^{q}\beta_{iijk}x_i x_j x_k^2$$

Матрица симплекс-решетчатого плана полного третьего порядка для q = 3

№ опыта	Содержание компонентов в экспериментальных точках			Обозначение точки	Обозначение значения функции отклика
	x_1	x_2	x_3		
1	1	0	0	x_1	Y_1
2	0	1	0	x_2	Y_2
3	0	0	1	x_3	Y_3
4	1/3	2/3	0	x_{122}	Y_{122}
5	1/3	0	2/3	x_{133}	Y_{133}
6	0	1/3	2/3	x_{233}	Y_{233}
7	2/3	1/3	0	x_{112}	Y_{122}
8	2/3	0	1/3	x_{113}	Y_{113}
9	0	2/3	1/3	x_{223}	Y_{223}
10	1/3	1/3	1/3	x_{123}	Y_{123}

Расчет коэффициентов уравнения регрессии методом подстановки (1)

На примере уравнения для симплекс-решетчатого плана второго порядка

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

Для точки с координатами $x_1 = 1;\ x_2 = 0;\ x_3 = 0$

$$Y_1 = \beta_1 \cdot 1 + \beta_2 \cdot 0 + \beta_3 \cdot 0 + \beta_{12} \cdot 1 \cdot 0 + \beta_{23} \cdot 0 \cdot 0 + \beta_{13} \cdot 1 \cdot 0 = \beta_1$$

Аналогично

$\beta_2 = Y_2$

$\beta_3 = Y_3$

$$\boxed{\beta_i = Y_i}$$

Расчет коэффициентов уравнения регрессии методом подстановки (2)

Для точки с координатами $x_1 = 1/2;\ x_2 = 1/2;\ x_3 = 0$

$$Y_{12} = \beta_1 \cdot 1/2 + \beta_2 \cdot 1/2 + \beta_3 \cdot 0 + \beta_{12} \cdot 1/2 \cdot 1/2 + \beta_{23} \cdot 1/2 \cdot 0 +$$

$$+ \beta_{13} \cdot 1/2 \cdot 0 = \beta_1 \cdot 1/2 + \beta_2 \cdot 1/2 + \beta_{12} \cdot 1/4$$

С учетом $\beta_i = Y_i$

$$\beta_{12} = 4Y_{12} - 2Y_1 - 2Y_2$$

Аналогично

$$\beta_{23} = 4Y_{23} - 2Y_2 - 2Y_3$$

$$\beta_{13} = 4Y_{13} - 2Y_1 - 2Y_3$$

$$\boxed{\beta ij = 4Yij - 2Yi - 2Yj}$$

Расчет коэффициентов уравнения регрессии для плана неполного третьего порядка

$$\beta_i = Y_i$$

$$\beta_{ij} = 4Y_{ij} - 2Y_i - 2Y_j$$

$$\beta_{123} = 27Y_{123} - 12(Y_{12} + Y_{23} + Y_{13}) + \\ + 3(Y_1 + Y_2 + Y_3)$$

Расчет коэффициентов уравнения регрессии для плана полного третьего порядка

$$\beta_i = Y_i$$

$$\beta_{ij} = 9/4\,(Y_{iij} + Y_{ijj} - Y_i - Y_j)$$

$$\beta_{123} = 27Y_{123} - 27/4\,(Y_{112} + Y_{122} + Y_{223} + Y_{233} + Y_{113} + Y_{133}) + 9/2\,(Y_1 + Y_2 + Y_3)$$

$$\gamma_{ij} = 9/4\,(3Y_{iij} - 3Y_{ijj} - Y_i + Y_j)$$

Проверка адекватности уравнения регрессии по критерию Сьюдента (1)

$t_{расч} \le t_{табл}$ для всех контрольных точек

$$t_{расч} = \frac{\left|Y_r - Y_{rp}\right|}{S_{(Y_r - Y_{rp})}} \qquad S_{(Y_r - Y_{rp})} = \sqrt{S_Y^2 + S_{Y_r}^2}$$

Y_r – экспериментальное (среднее) значение в контрольной точке r

Y_{rp} – расчетное значение в контрольной точке r

$S_y{}^2$ – средняя дисперсия опытов в основных точках плана

$S_{yr}{}^2$ – средняя дисперсия опытов в контрольных точках плана

Проверка адекватности уравнения регрессии по критерию Сьюдента (2)

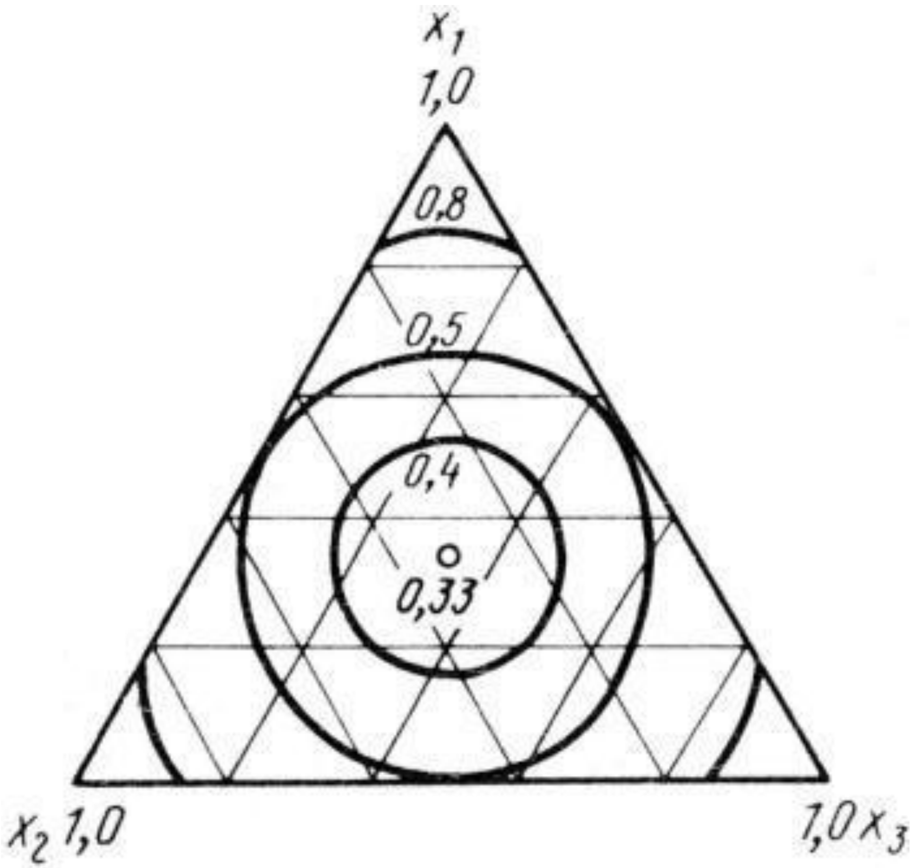
$$t_{расч} = \frac{\left|Y_r - Y_{rp}\right|}{\sqrt{S_Y^2 + S_{Y_r}^2}} \qquad t_{расч} = \frac{\left|Y_r - Y_{rp}\right| \cdot \sqrt{n_r}}{S_Y \sqrt{1+\xi}} \;*$$

*** - по данным Шеффе и Микешиной**

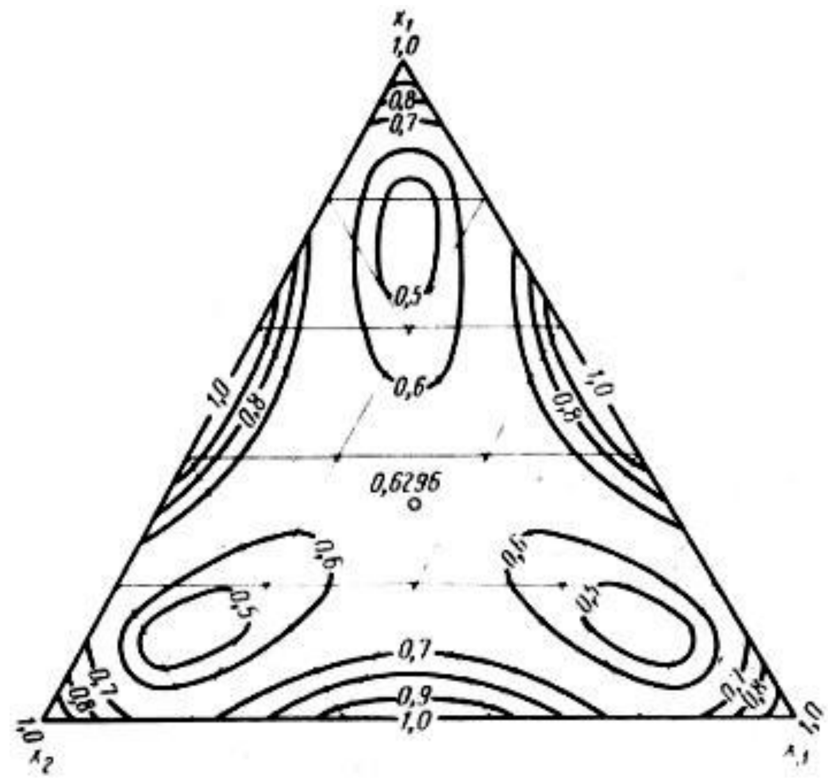
n_r – число дублирований опыта в контрольной точке r

ξ – величина, зависящая от положения контрольной точки на симплексе

Линии равных значений величины ξ для двумерных симплексов (1)

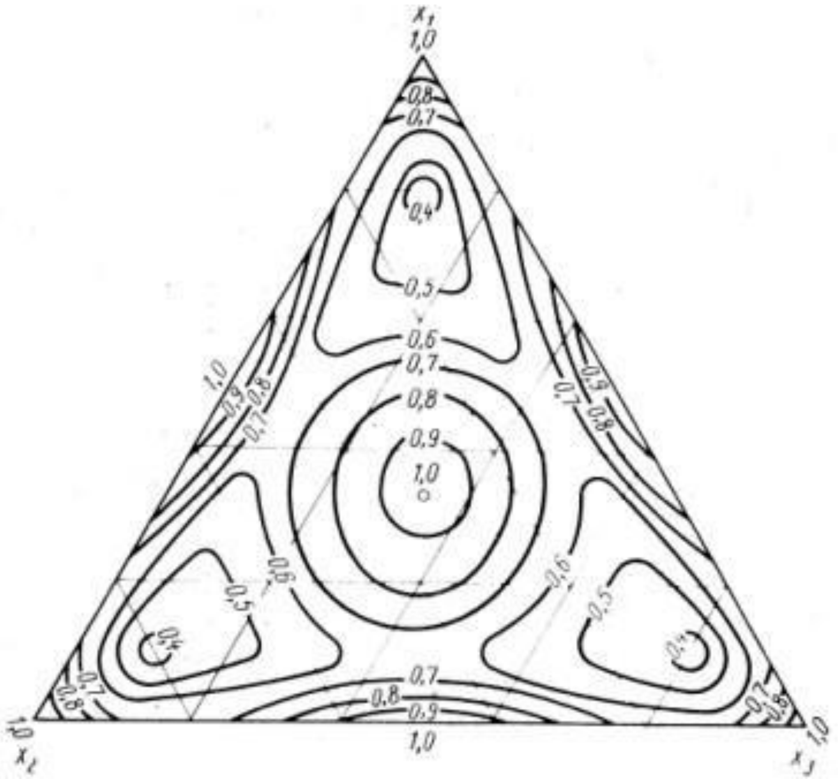


Первый порядок

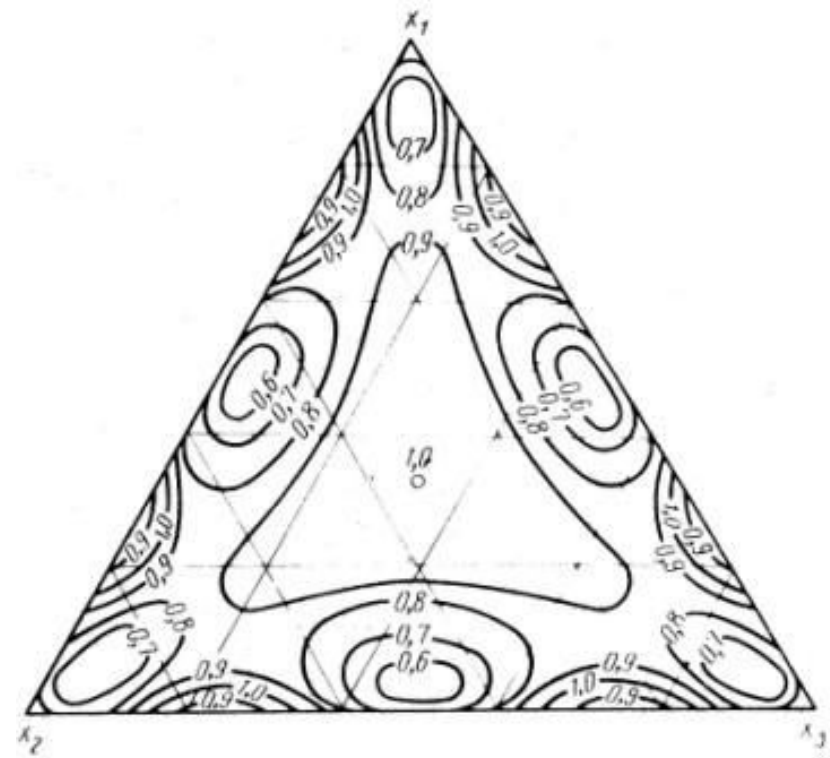


Второй порядок

Линии равных значений величины ξ для двумерных симплексов (2)

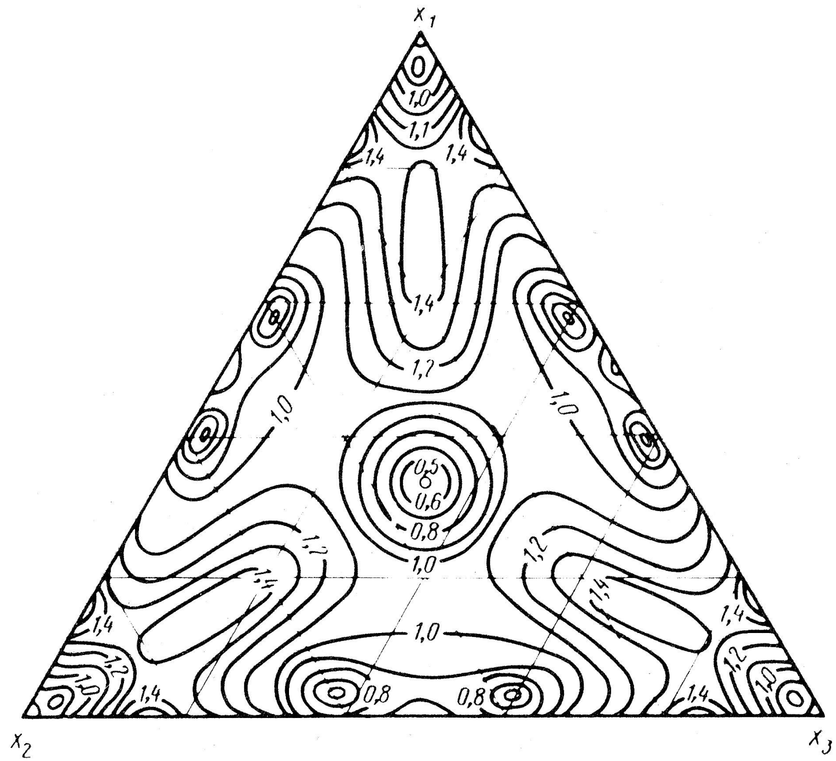


Неполный третий порядок



Третий порядок

Линии равных значений величины ξ для двумерных симплексов (3)



Четвертый порядок

Расчет значений ξ (1)

Модель первого порядка

$$\xi = \sum_{i=1}^{q} x_i^2$$

Модель второго порядка

$$\xi = \sum_{i=1}^{q} \left[x_i(2x_i - 1)\right]^2 + \sum_{i=1}^{q} \left(4x_i x_j\right)^2$$

Модель неполного третьего порядка

$$\xi = \sum_{i=1}^{q} \left[0{,}5x_i\left(6x_i^2 - 2x_i + 1 - 3\sum_{j=1}^{q} x_j^2\right)\right]^2 +$$

$$+ \sum_{i=1}^{q} \left[4x_i x_j (3x_i + 3x_j - 2)\right]^2 + \sum_{i=1}^{q} \left(27x_i x_j x_k\right)^2$$

Расчет значений ξ (2)

Модель третьего порядка

$$\xi = \sum_{i=1}^{q}\left[0,5x_i(3x_i-1)(3x_i-2)\right]^2 + \sum_{i=1}^{q}\left[4,5x_i x_j(3x_i-1)\right]^2 +$$

$$+\sum_{i=1}^{q}\left[4,5x_i x_j(3x_j-1)\right]^2 + \sum_{i=1}^{q}\left(27x_i x_j x_k\right)^2$$

Оценка дисперсии значений, предсказанных моделью (1)

На примере уравнения для плана второго порядка

$$Y_{\text{расч}} = Y_1x_1 + Y_2x_2 + Y_3x_3 + (4Y_{12} - 2Y_1 - 2Y_2)x_1x_2 + \\ + (4Y_{23} - 2Y_2 - 2Y_3)x_2x_3 + (4Y_{13} - 2Y_1 - 2Y_3)x_1x_3$$

$$\Downarrow$$

$$Y_{\text{расч}} = Y_1(x_1 - 2x_1x_2 - 2x_1x_3) + Y_2(x_2 - 2x_1x_2 - 2x_2x_3) + \\ + Y_3(x_3 - 2x_1x_3 - 2x_2x_3) + 4Y_{12}x_1x_2 + 4Y_{23}x_2x_3 + 4Y_{13}x_1x_3$$

$$\Downarrow$$

$$Y_{\text{расч}} = x_1(2x_1 - 1)Y_1 + x_2(2x_2 - 1)Y_2 + x_3(2x_3 - 1)Y_3 + \\ + 4x_1x_2Y_{12} + 4x_2x_3Y_{23} + 4x_1x_3Y_{13}$$

Оценка дисперсии значений, предсказанных моделью (2)

$$Y_{расч} = \sum_{i=1}^{q} b_i Y_i + \sum_{i=1}^{q} b_{ij} Y_{ij}$$

$$b_i = x_i(2x_i - 1) \quad b_{ij} = 4x_i x_j$$

Если величины x_i определяются без ошибок

$$S_{Yp}^2 = \sum_{i=1}^{q} b_i^2 S_{Y_i}^2 + \sum_{i=1}^{q} b_{ij}^2 S_{Y_{ij}}^2$$

$$S_{Y_i}^2 = \frac{S_Y^2}{n_i}$$

$$S_{Y_{ij}}^2 = \frac{S_Y^2}{n_{ij}}$$

$$S_{Yp}^2 = S_Y^2 \left(\sum_{i=1}^{q} \frac{b_i^2}{n_i} + \sum_{i=1}^{q} \frac{b_{ij}^2}{n_{ij}} \right)$$

Оценка дисперсии значений, предсказанных моделью (3)

При равномерном дублировании $n_i = n_{ij} = n$

$$S_{Yp}^2 = S_Y^2 \frac{\xi}{n}$$

$$\Delta = t \cdot \sqrt{S_{Yp}^2}$$

$$\Delta = t \cdot S_Y \sqrt{\frac{\xi}{n}} = t \cdot \frac{S_Y}{\sqrt{n}} \sqrt{\xi}$$

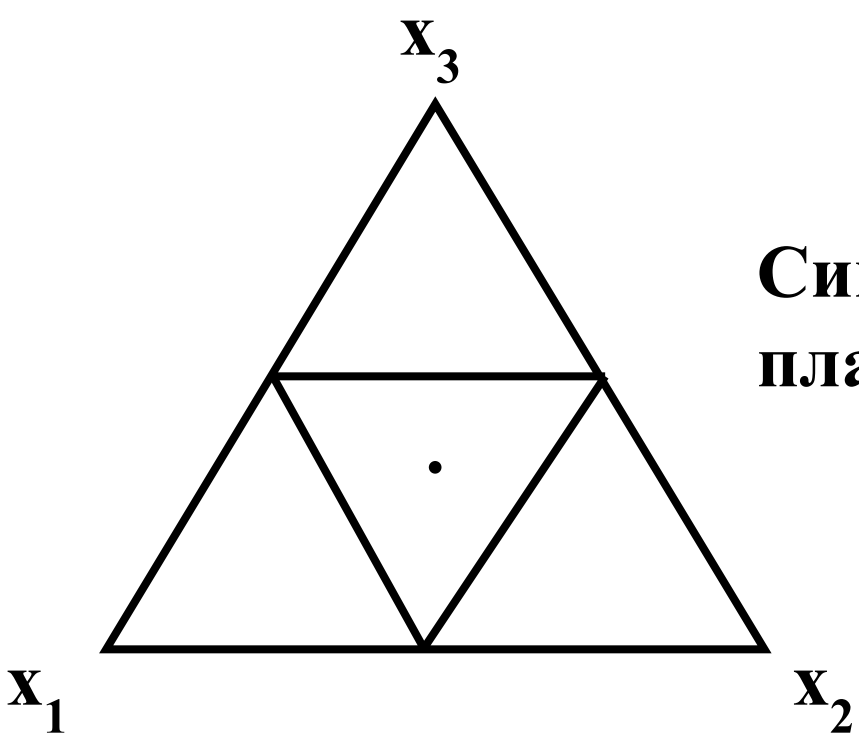
Δ –доверительный интервал значений функции отклика, предсказываемых моделью

Симплекс-центроидные планы

Координаты точек: (1; 0;… 0); (1/2; 1/2; 0;… 0);…

…(1/q; 1/q; … 1/q)

$$Y = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{q} b_{ijk} x_i x_j x_k + \ldots + \beta_{12\ldots q} x_1 x_2 \ldots x_q$$



Симплекс-центроидный план для q = 3

D-оптимальные планы

Координаты точек модели третьего порядка для q факторов: (1; 0;… 0); (0,7236; 0,2764; 0;… 0); (1/3; 1/3; 1/3; 0;… 0)

Координаты точек модели четвертого порядка для q факторов: (1; 0;… 0); (1/2; 1/2; 0;… 0); (0,8273; 0,1727; 0;… 0); (0,5670; 0,2165; 0,2165; 0;… 0); (1/4; 1/4; 1/4; 1/4; 0;… 0)

Матрица D-оптимального плана третьего порядка для q = 3

№ опыта	Содержание компонентов в экспериментальных точках			Обозначение точки	Обозначение значения функции отклика
	x_1	x_2	x_3		
1	1	0	0	x_1	Y_1
2	0	1	0	x_2	Y_2
3	0	0	1	x_3	Y_3
4	0,2764	0,7236	0	x_{122}	Y_{122}
5	0,2764	0	0,7236	x_{133}	Y_{133}
6	0	0,2764	0,7236	x_{233}	Y_{233}
7	0,7236	0,2764	0	x_{112}	Y_{122}
8	0,7236	0	0,2764	x_{113}	Y_{113}
9	0	0,7236	0,2764	x_{223}	Y_{223}
10	1/3	1/3	1/3	x_{123}	Y_{123}

Расчет коэффициентов уравнения регрессии для D-оптимального плана третьего порядка

$$\beta_i = Y_i$$

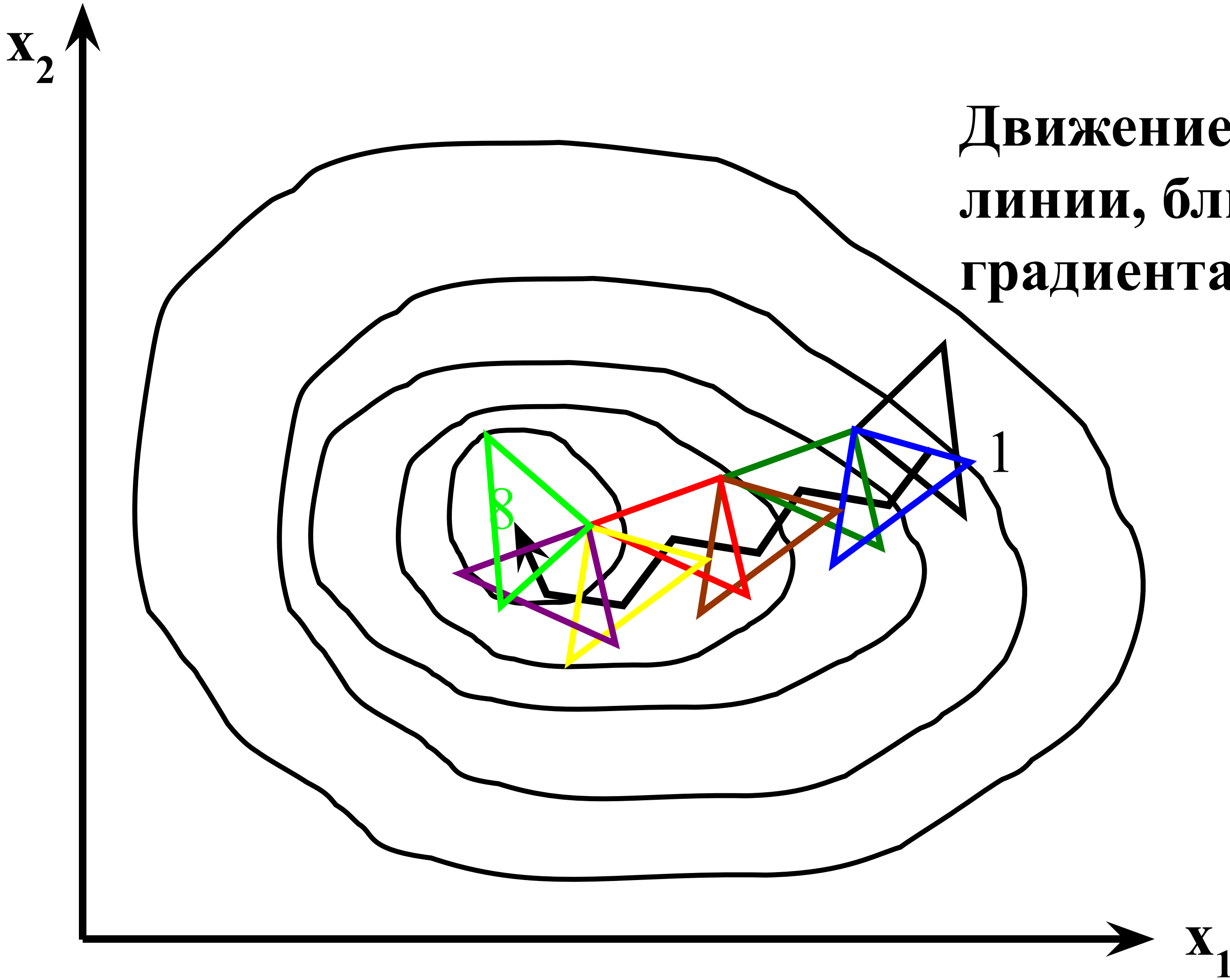
$$\beta_{ij} = 2{,}5\,(Y_{iij} + Y_{ijj} - Y_i - Y_j)$$

$$\beta_{123} = 27Y_{123} - 7{,}5\,(Y_{112} + Y_{122} + Y_{223} + + Y_{233} + Y_{113} + Y_{133}) + 6\,(Y_1 + Y_2 + Y_3)$$

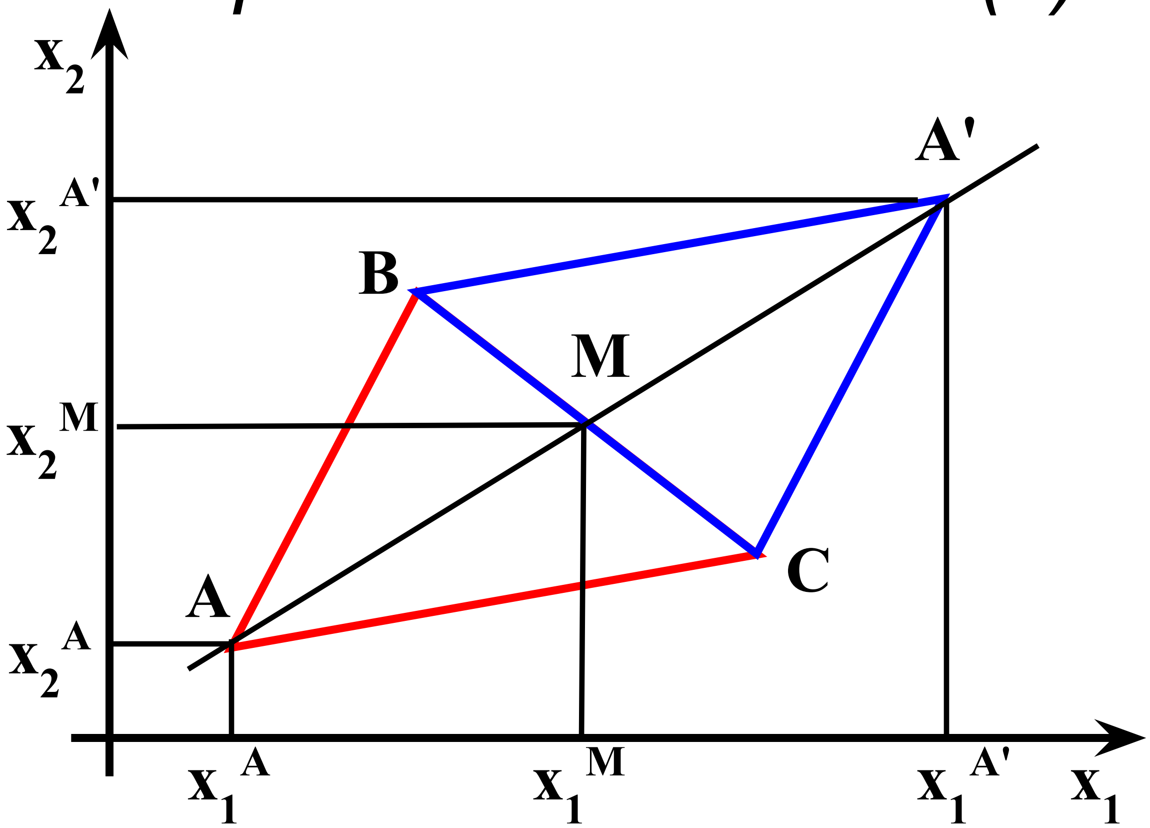
$$\gamma_{ij} = 2{,}5\,(Y_i - Y_j) + 2{,}5 \cdot 5^{0,5}\,(Y_{iij} - Y_{ijj})$$

Поиск экстремума методом последовательного симплекс-планирования

Движение симплексов по линии, близкой к линии градиента



Расчет координат зеркально отраженной вершины симплекса (1)



$$x_i^{A'} = x_i^M + \left(x_i^M - x_i^A\right) = 2x_i^M - x_i^A = 2\left(\frac{x_i^B + x_i^C}{2}\right) - x_i^A =$$

$$= x_i^B + x_i^C - x_i^A$$

Расчет координат зеркально отраженной вершины симплекса (2)

$$x_i^{*} = \frac{2}{q}\left(x_i^{1} + x_i^{2} + \ldots + x_i^{f-1} + x_i^{f+1} + \ldots + x_i^{q+1}\right) - x_i^{f}$$

i – номер фактора

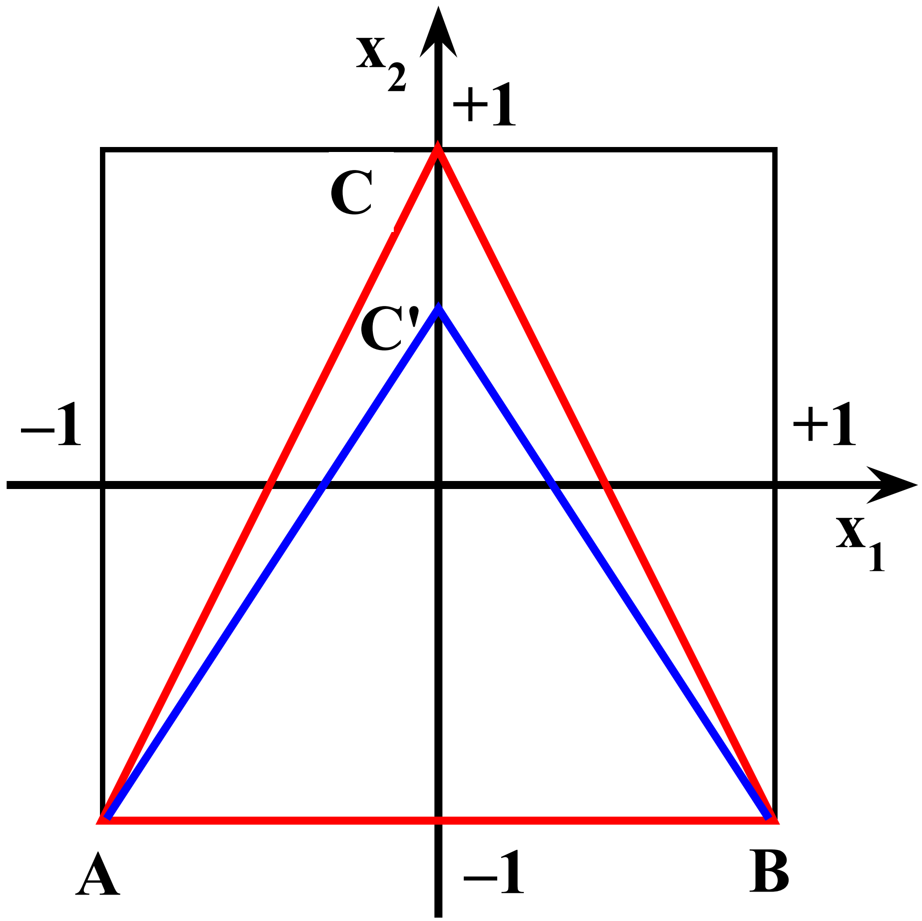
q –число факторов

*** – индекс новой (зеркальной) вершины**

f – индекс вершины с наихудшим значением отклика

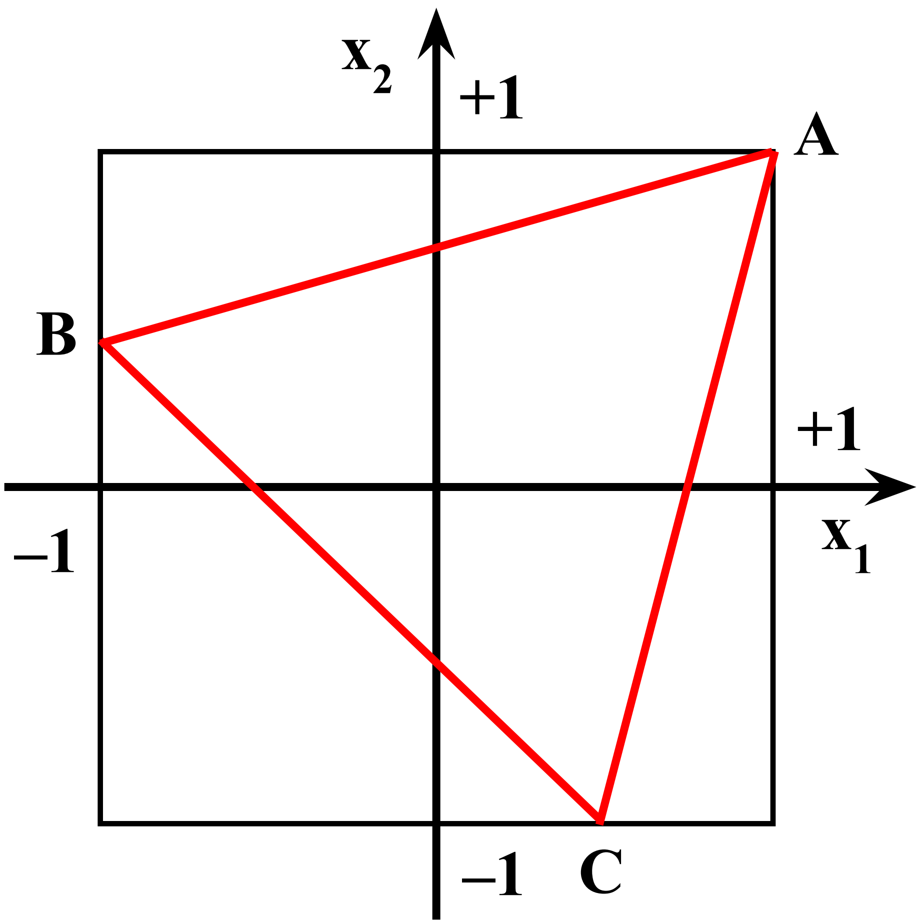
1; 2; (f – 1); (f + 1) – индексы остальных вершин симплекса

Построение исходного симплекса совмещением его стороны со стороной квадрата факторного пространства



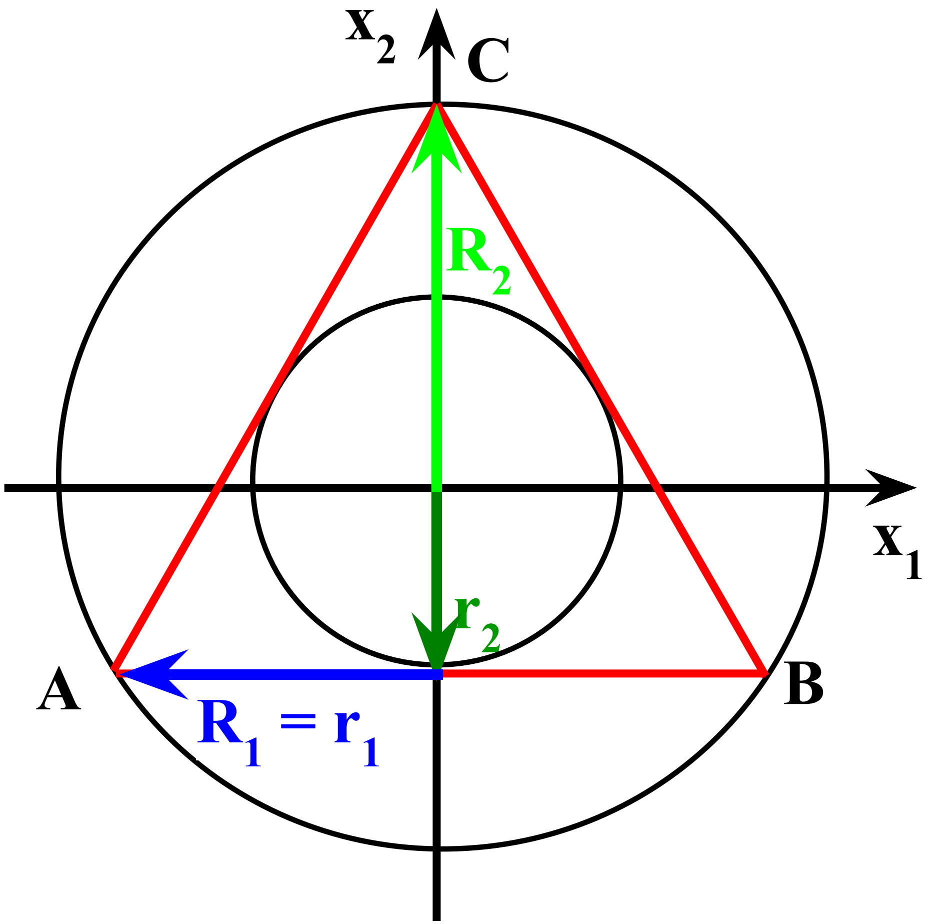
Точка	x_1	x_2
A	−1	−1
B	+1	−1
C	0	+1
C’	0	+0,73

Построение исходного симплекса совмещением его вершины с вершиной квадрата факторного пространства



Точка	x_1	x_2
A	+1	+1
B	−1	+0,46
C	+0,46	−1

Построение исходного симплекса совмещением его центра тяжести с центром координат



Точка	x_1	x_2
A	$-r_1$	$-r_2$
B	R_1	$-r_2$
C	0	R_2

$R_1 = r_1 = 0{,}5$

Координаты вершин q-мерного симплекса при совмещении его центра тяжести с центром координат (1)

Вершина симплекса	Координаты вершин					
	x_1	x_2	x_3	...	x_{q-1}	x_q
C_1	$-r_1$	$-r_2$	$-r_3$	...	$-r_{q-1}$	$-r_q$
C_2	R_1	$-r_2$	$-r_3$	...	$-r_{q-1}$	$-r_q$
C_3	0	R_2	$-r_3$	...	$-r_{q-1}$	$-r_q$
C_4	0	0	R_3	...	$-r_{q-1}$	$-r_q$
. . .	. . .	. . .	. . .	. . .	. . .	. . .
C_q	0	0	0	...	R_{q-1}	$-r_q$
C_{q+1}	0	0	0	...	0	R_q

Координаты вершин q-мерного симплекса при совмещении его центра тяжести с центром координат (2)

При длине ребра i-мерного (1 ≤ i < q) симплекса, равной 1

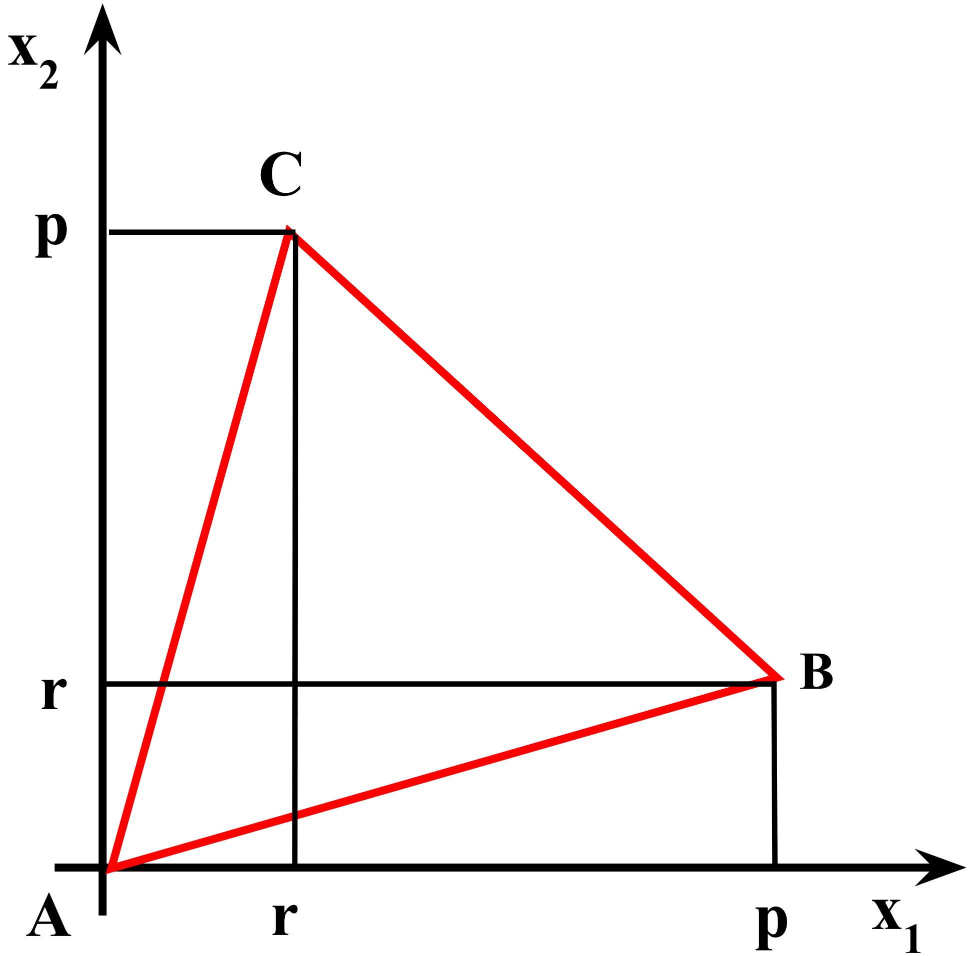
$$r_i = \frac{1}{\sqrt{2i(i+1)}} \qquad R_i = \sqrt{\frac{i}{2(i+1)}}$$

Для двумерного симплекса

$$r_2 = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot 2(2+1)}} = 0{,}289$$

$$R_2 = \sqrt{\frac{2}{2(2+1)}} = 0{,}578$$

Построение исходного симплекса совмещением его вершины с центром координат



Точка	x_1	x_2
A	0	0
B	p	r
C	r	p

Координаты вершин q-мерного симплекса при совмещении его вершины с центром координат (1)

Вершина симплекса	Координаты вершин					
	x_1	x_2	x_3	...	x_{q-1}	x_q
C_1	0	0	0	...	0	0
C_2	p	r	r	...	r	r
C_3	r	p	r	...	r	r
C_4	r	r	p	...	r	r
. . .	. . .	. . .	. . .	. . .	. . .	. . .
C_q	r	r	r	...	p	r
C_{q+1}	r	r	r	...	r	p

Координаты вершин q-мерного симплекса при совмещении его вершины с центром координат (2)

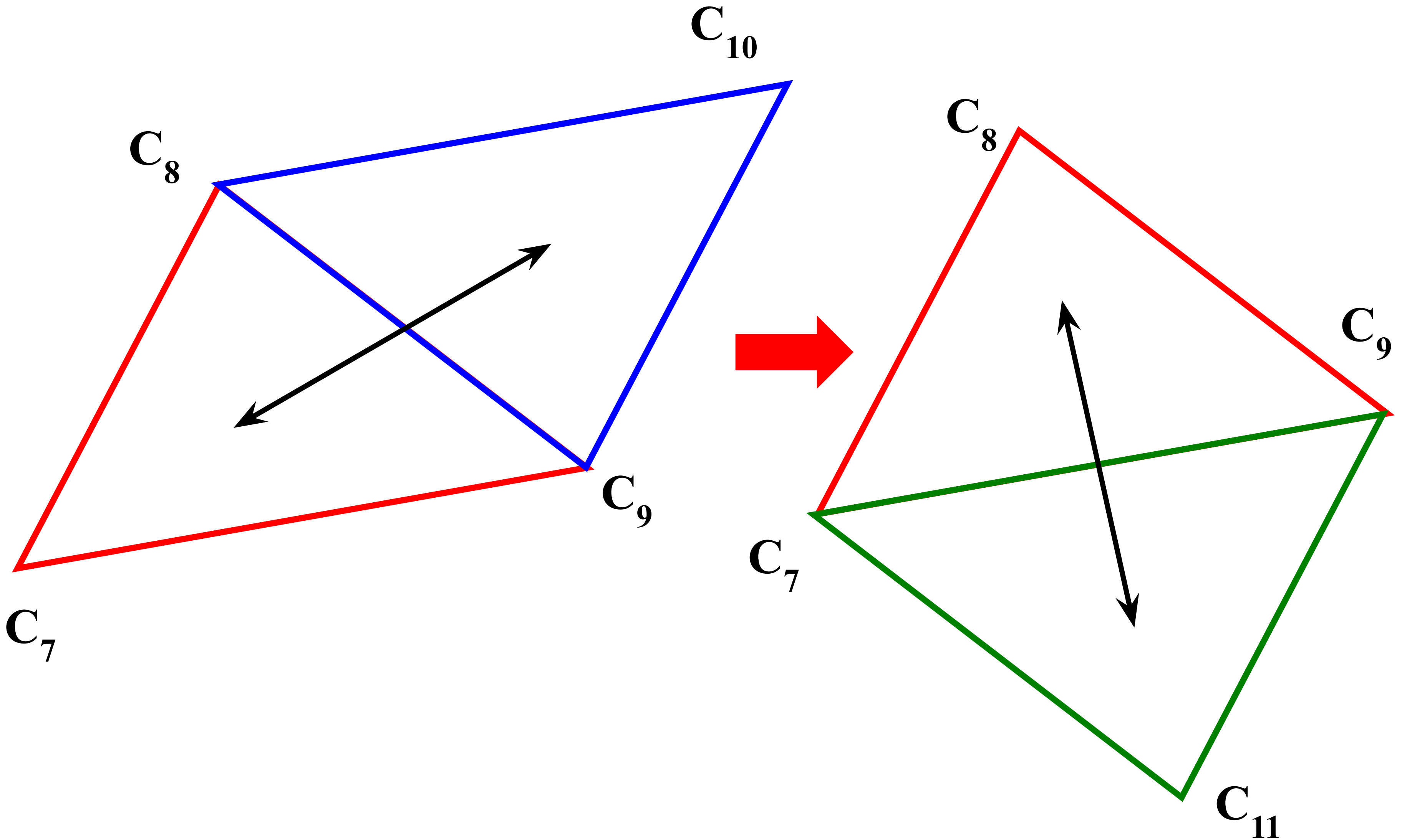
$$p = \frac{1}{q\sqrt{2}}\left(q - 1 + \sqrt{q+1}\right) \qquad r = \frac{1}{q\sqrt{2}}\left(\sqrt{q+1} - 1\right)$$

При q = 2

$$p = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(2 - 1 + \sqrt{2+1}\right) = 0{,}966$$

$$r = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\sqrt{2+1} - 1\right) = 0{,}259$$

Качание симплекса относительно одной грани



Метод деформированного симплекса

$$x_i^* = \frac{2}{q}\left(x_i^1 + x_i^2 + \ldots + x_i^{f-1} + x_i^{f+1} + \ldots + x_i^{q+1}\right) - x_i^f$$

$$x_i^* = 2\bar{x}_i - x_i^f$$

где:

$$\bar{x}_i = \frac{\left(x_i^1 + x_i^2 + \ldots + x_i^{f-1} + x_i^{f+1} + \ldots + x_i^{q+1}\right)}{q}$$

$$x_i^* = x_i^f + 2\left(\bar{x}_i - x_i^f\right) = x_i^f + (1+\delta)\left(\bar{x}_i - x_i^f\right)$$

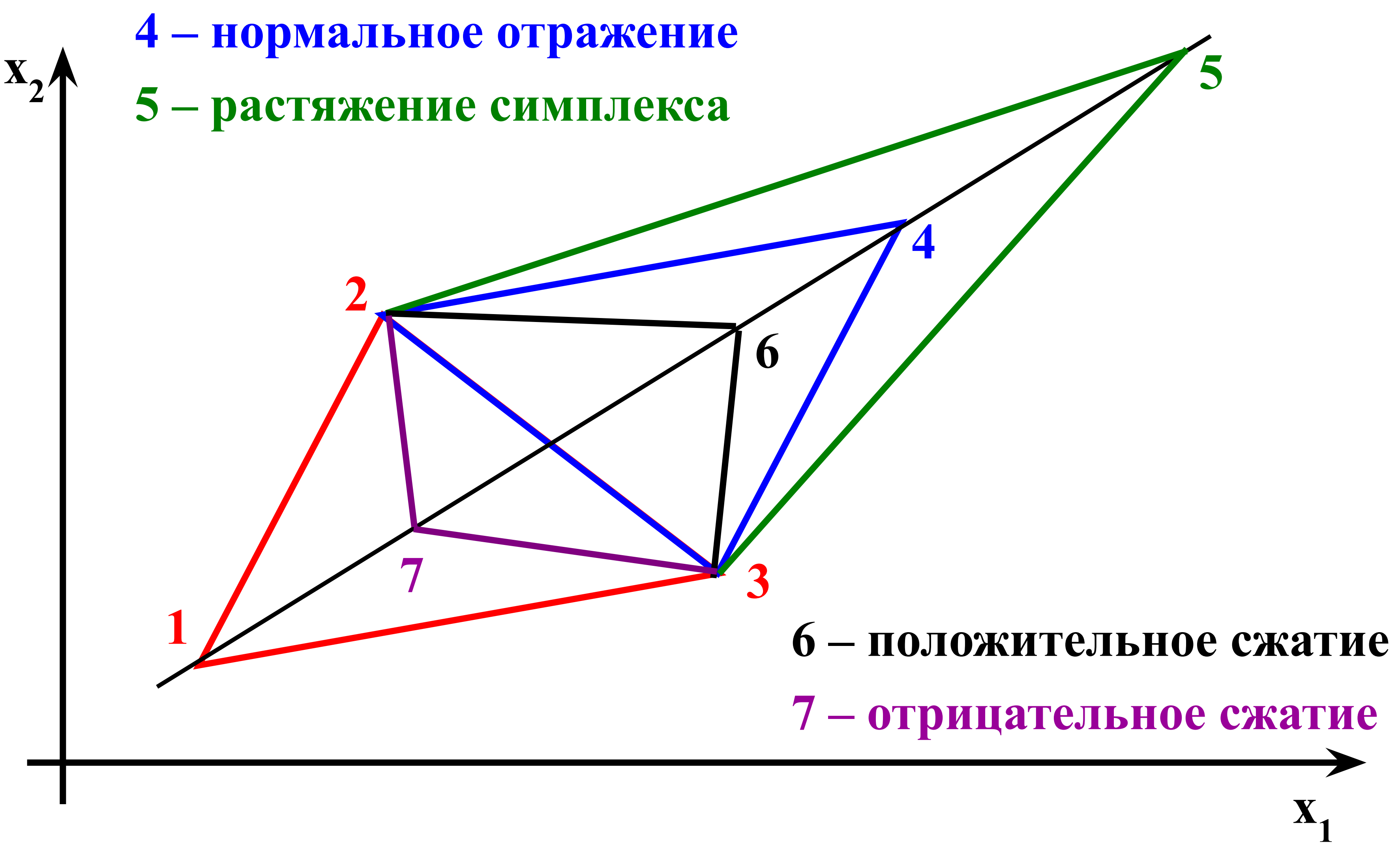
δ – коэффициент деформации симплекса

δ = α – нормальное отражение

δ = β – сжатие симплекса

δ = γ – растяжение симплекса

Виды деформации двумерного симплекса



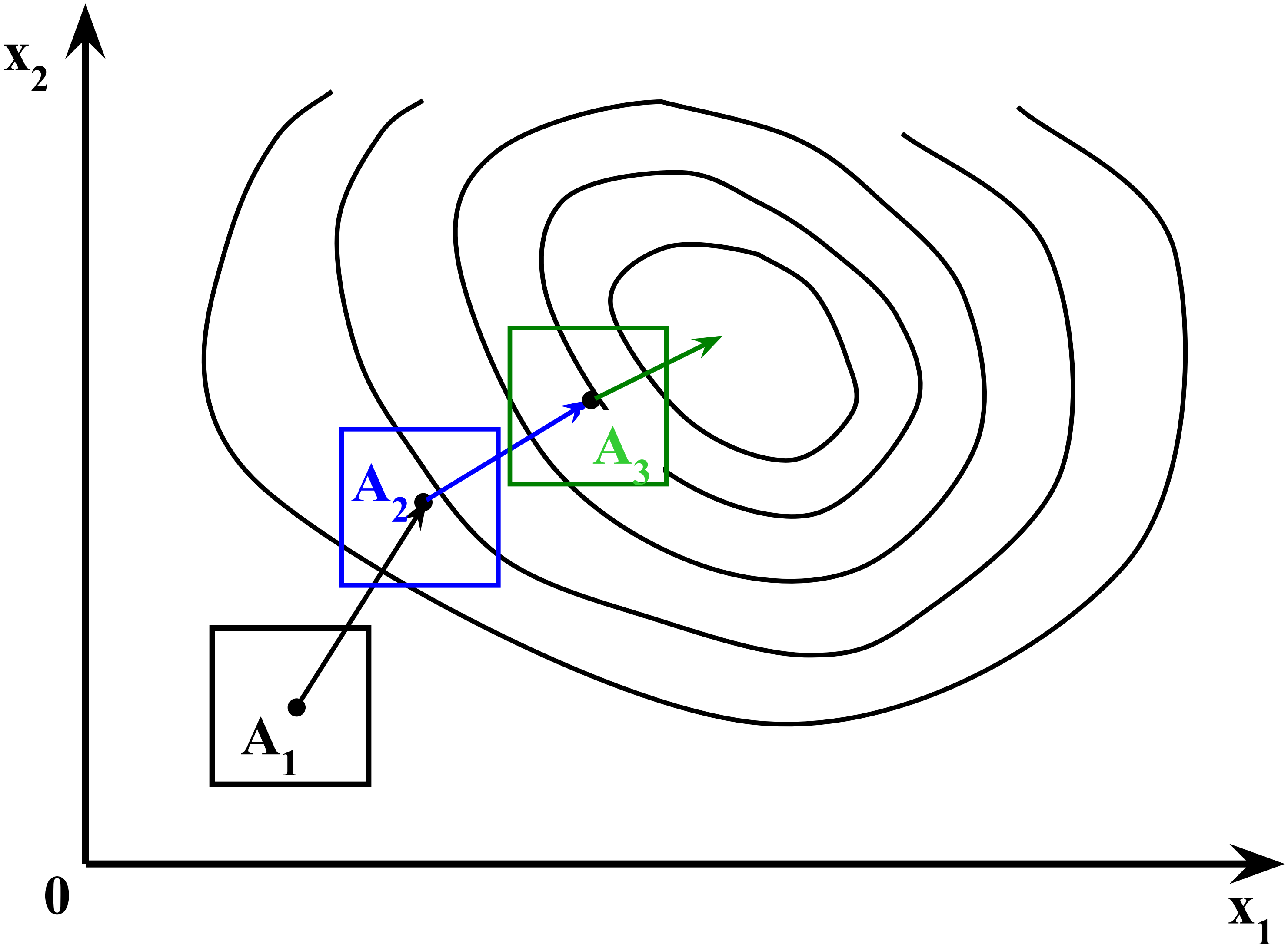
Рекомендуемые значения коэффициента деформации симплекса при поиске минимума

Соотношение результатов при поиске минимума	Вид деформации симплекса	Рекомендуемые коэффициенты	
		Символ	Значения
$Y_{нл} < Y^* < Y_{нх+1}$	Нормальное отражение	α	1
$Y^* > Y_{нх+1}$ и $Y^* \geq Y_{нх}$	Отрицательное сжатие	$-\beta$	–0,5; –0,25
$Y_{нх+1} < Y^* < Y_{нх}$	Сжатие	β	0,5; 0,25
$Y^* < Y_{нл}$	Растяжение	γ	2; 2,5

$Y_{нх}$ – наихудший отклик Y^* - отклик нормального отражения

$Y_{нх+1}$ – отклик, следующий за наихудшим

Поиск экстремума методом градиента

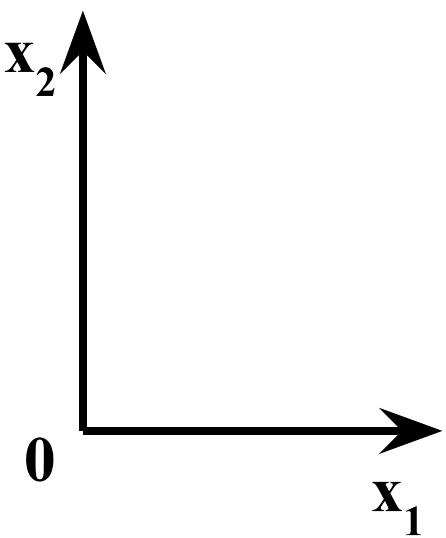


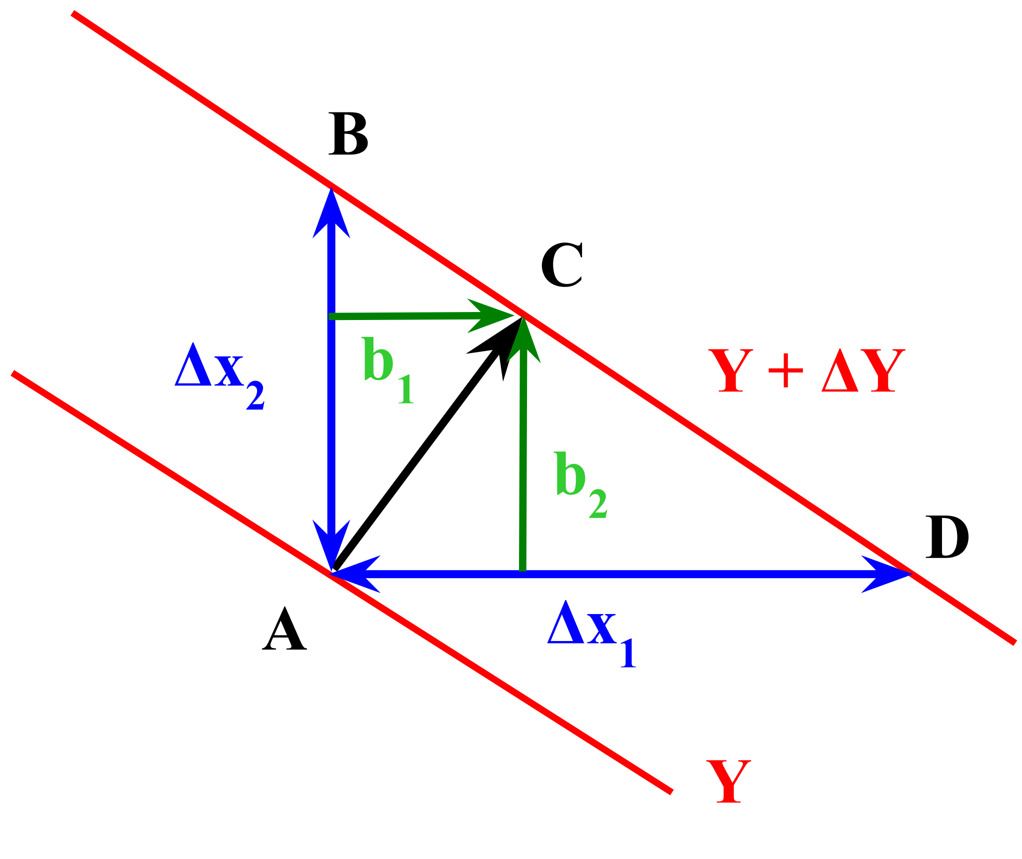
$$Y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 \longrightarrow Y = b_0' + b_1' \cdot x_1 + b_2' \cdot x_2$$

Использование компонентов градиента при переходе на следующий уровень функции отклика

$$Y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$$

$$b_1 < b_2$$





Метод крутого восхождения

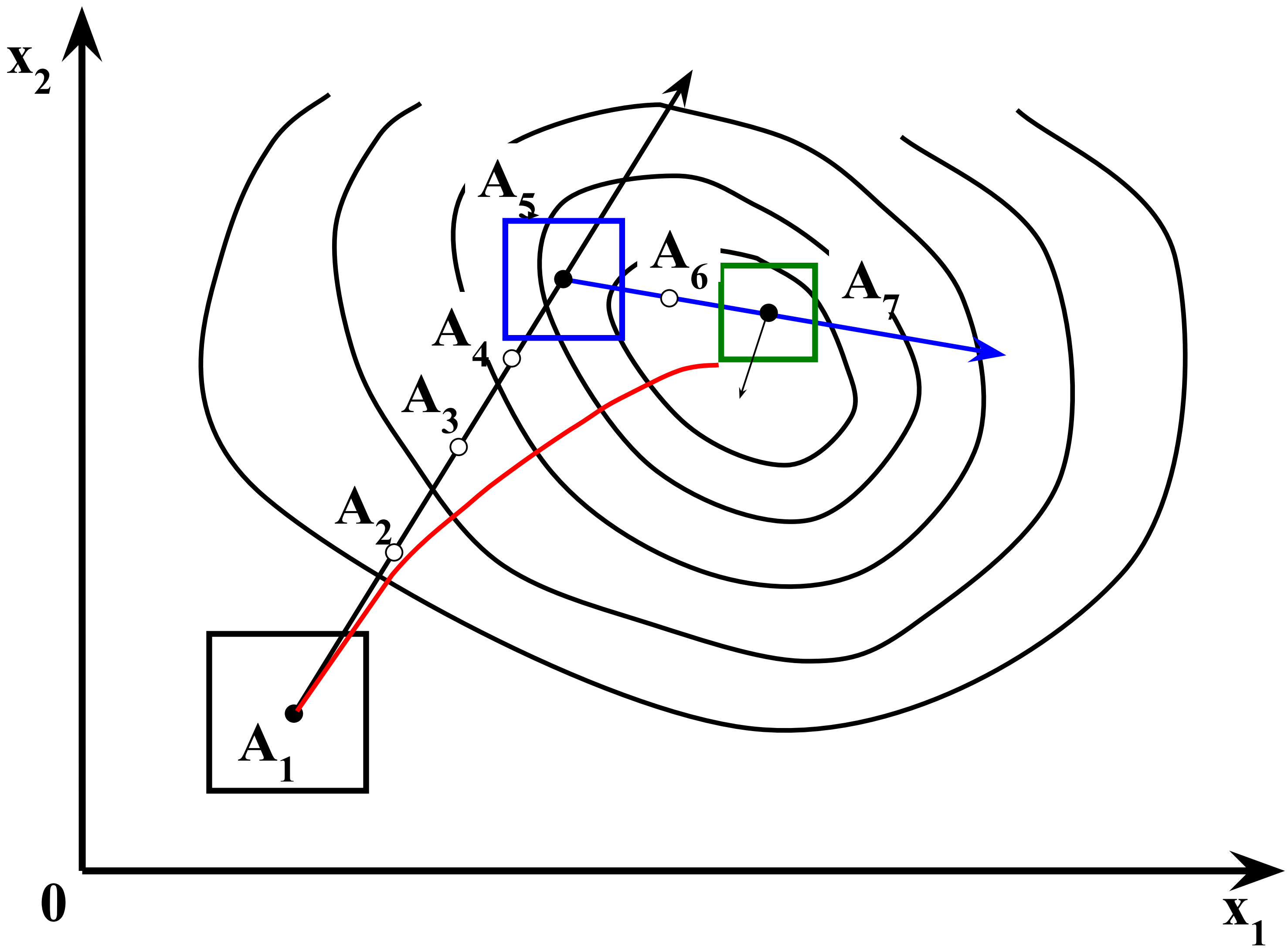
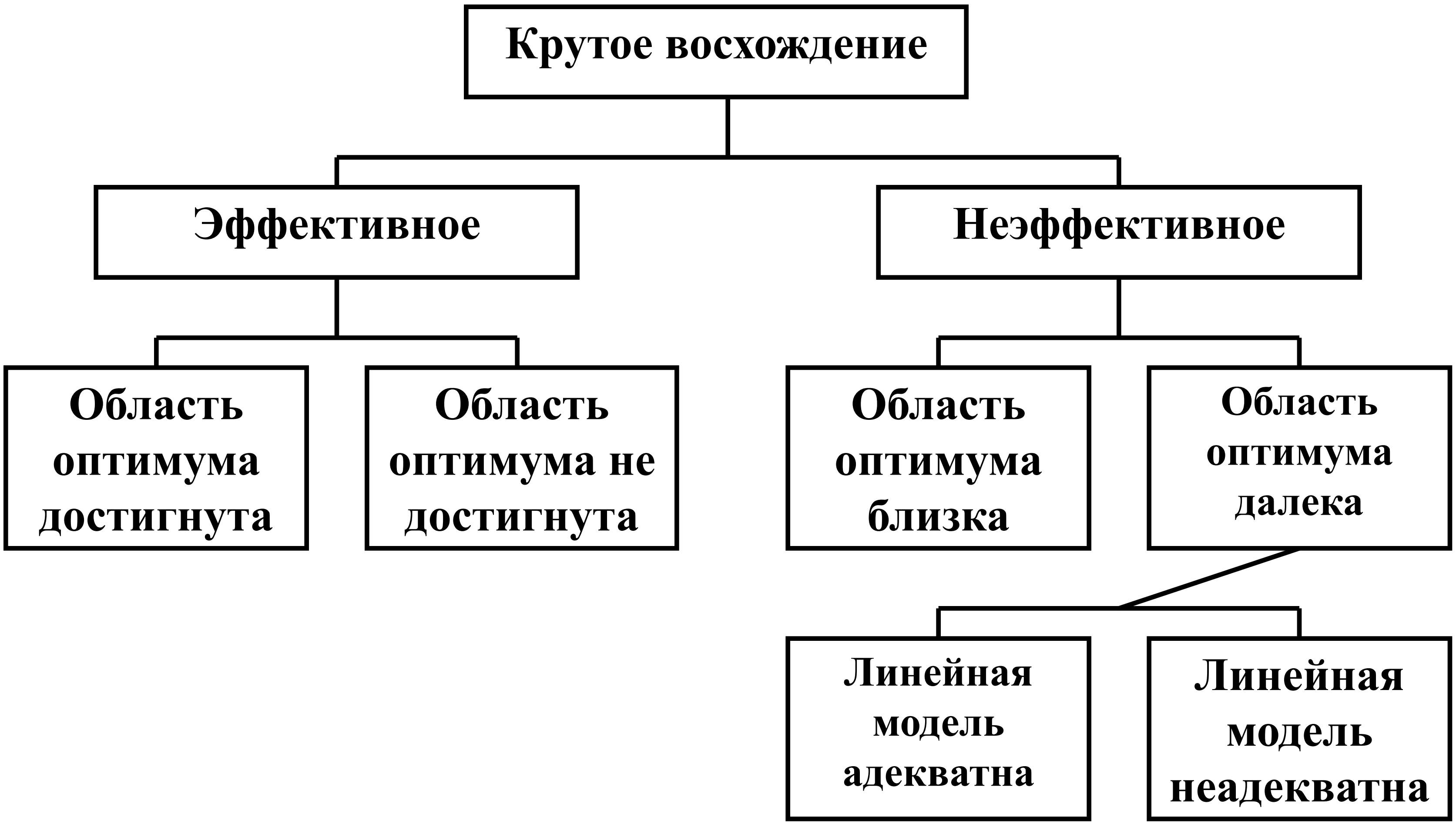


Схема принятия решений при реализации метода "крутого восхождения



Обобщенный параметр оптимизации

$$Y_i = \prod_{u=1}^{m} y_{ui} \qquad Y_i = \sqrt[m]{\prod_{u=1}^{m} y_{ui}}$$

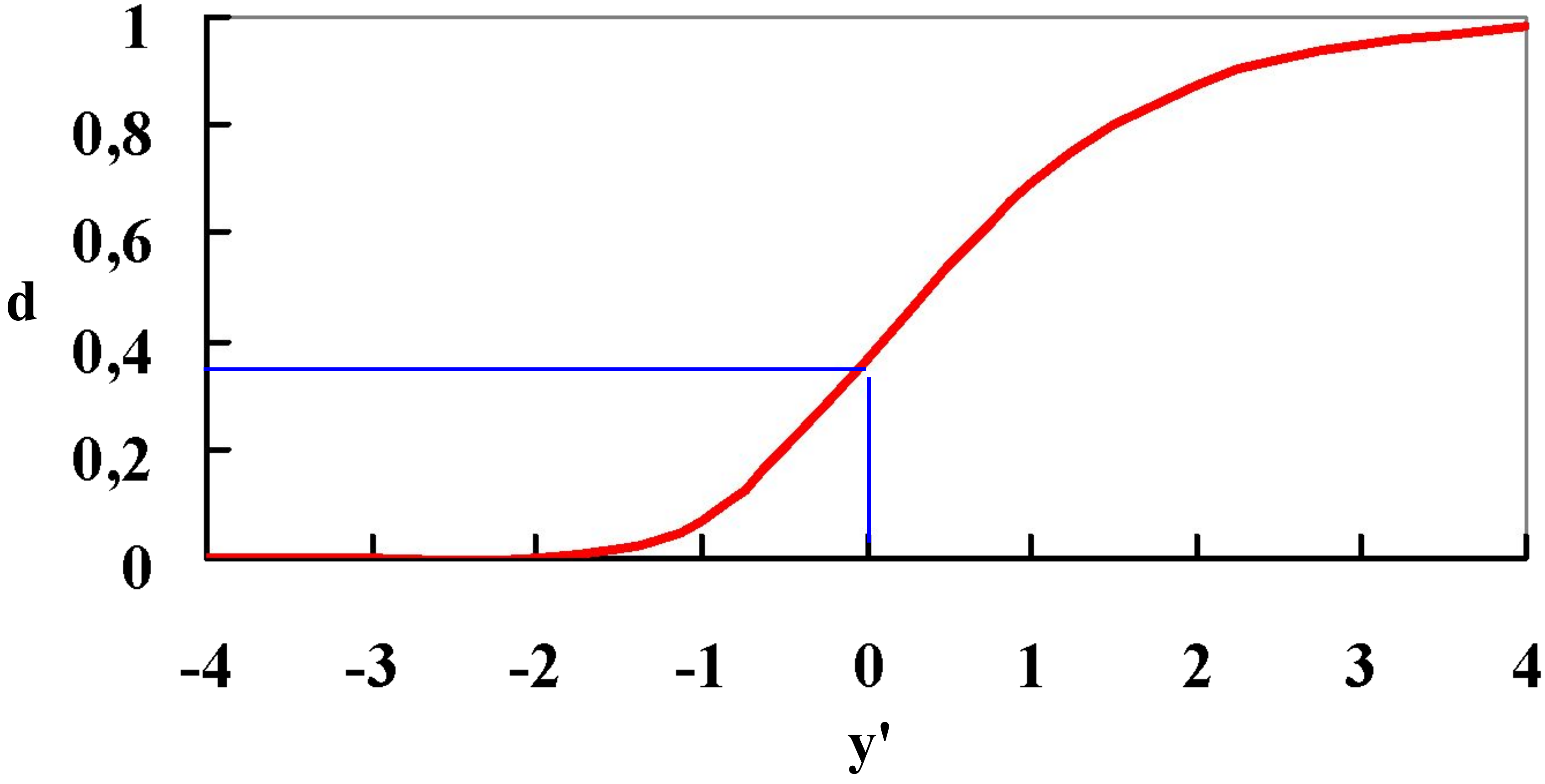
Y_i – обобщенный параметр оптимизации для i-го опыта

y_{ui} – значение частного отклика y_u в i-м опыте

$i = 1, 2, \ldots, N$; $u = 1, 2, \ldots, m$

Шкала желательности для случая односторонних ограничений

$$d = \exp(-\exp(-y'))$$



Шкала желательности для случая двусторонних ограничений

$$d = \exp\left(-\left(\left|-y'\right|^{n}\right)\right)$$