# Qui hoạch bậc hai

Chương 6

- Vùng cận cực trị
- Mô hình bề mặt đáp ứng
- Qui hoạch yếu tố 3 mức độ
- Qui hoạch tâm hỗn hợp (Central Composite Design)
- Qui hoạch Box-Behnken
- Tối ưu hóa

# 6.1. Vùng cực trị

- Vùng cực trị là vùng tại đó mô hình tuyến tính không còn tương thích.
- Mô hình đa thức bậc hai thường được sử dụng để mô tả vùng cực trị. Với đa thức bậc hai thì số thí nghiệm N phải lớn hơn số hệ số hồi qui của phương trình bậc hai của k yếu tố.

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \ldots + b_kx_k + b_{12}x_1x_2 + \ldots$$
$$+ b_{k-1,k}x_{k-1}x_k + b_{11}x_1^2 + \ldots + b_{kk}x_k^2$$

số hệ số hồi qui l cho bởi

$$l = k + 1 + k + C_k^2 = 2k + 1 + \frac{k!}{2!(k-2)!} = \frac{(k+1)(k+2)}{2}$$

- Để mô tả mô hình đa thức bậc hai các yếu tố thí nghiệm phải có ít nhất 3 mức độ.
- Đối với hoạch định yếu tố 3 mức độ, khi số yếu tố lớn hơn 2 thì số thí nghiệm rất lớn rất nhiều so với số hệ số hồi qui

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| k | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
| $3^k$ | 9 | 27 | 81 | 243 | 729 |
| l | 6 | 10 | 15 | 21 | 28 |

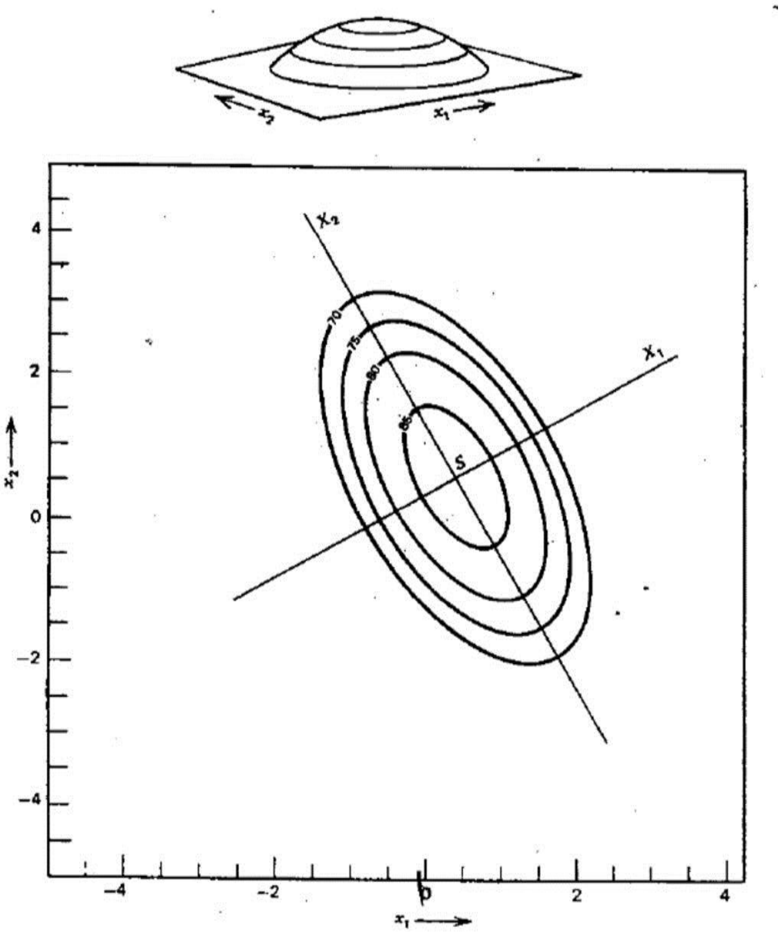
- Số thí nghiệm có thể giảm xuống khi dùng qui hoạch tâm hỗn hợp hay còn gọi là qui hoạch Box-Wilson

- Thường để khảo sát bề mặt đáp ứng tại vùng cực trị người ta thường chuyển đổi phương trình hồi qui đa thức bậc thành phương trình chính tắc có dạng:

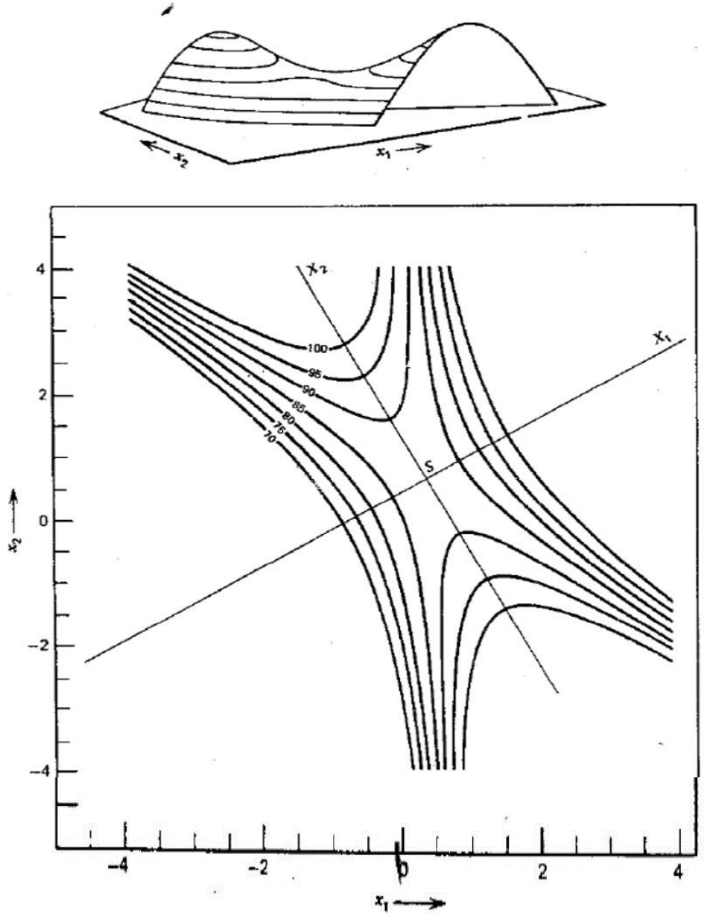
$$\mathbf{y - y_s = \lambda_{11}X_1^2 + \lambda_{22}X_2^2 + \ldots + \lambda_{kk}X_k^2}$$

- Từ phương trình chính tắc sẽ có 3 trường hợp
  - Các hệ số cùng dấu: bề mặt đáp ứng là một ellip-paraboloid với tâm là cực trị. $\lambda_{ii} < 0$ ta có cực đại; $\lambda_{ii} > 0$ ta có cực tiểu
  - Các hệ số trái dấu: bề mặt đáp ứng là một hyperbol-paraboloid có điểm yên ngựa min-max
  - Một hay nhiều hệ số gần bằng zero (không phải tất cả): tâm bề mặt nằm ngoài vùng ngoại suy. Đây là dạng nóc nhà (ridge)

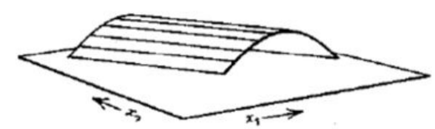
- Các hệ số chính tắc cùng dấu

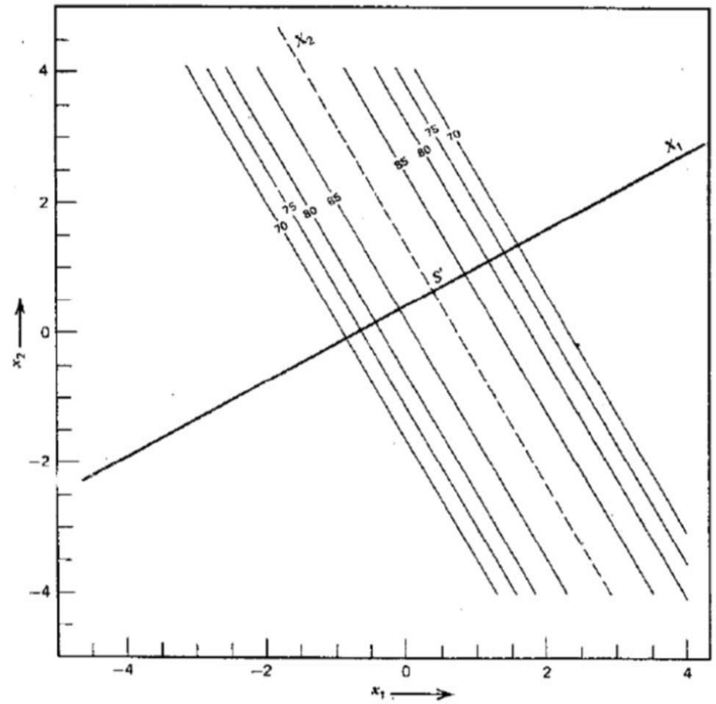


- Các hệ số chính tắc trái dấu

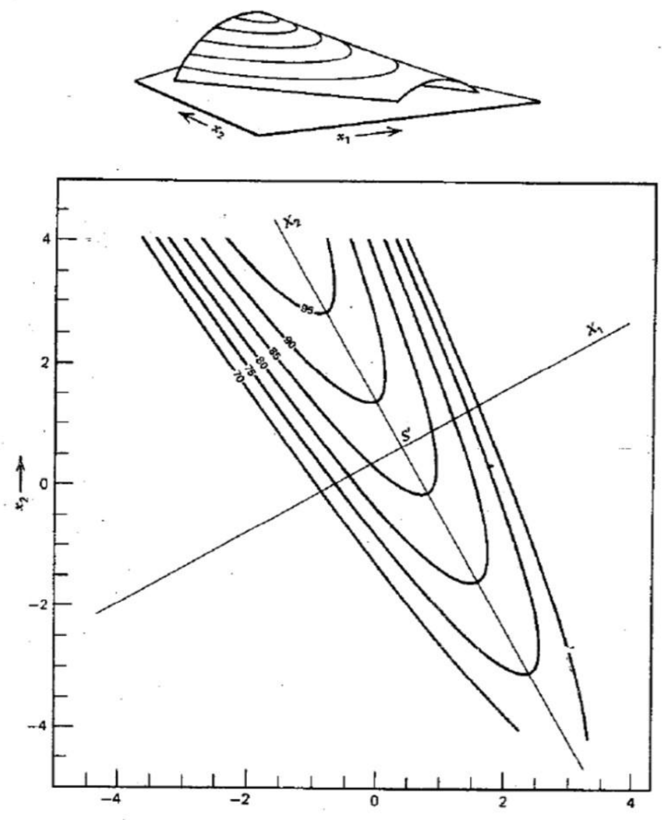


- Có một hay nhiều hệ số chính tắc gần bằng zero:
  - Dạng nóc nhà nằm ngang:
    điều kiện tối ưu nằm trên đường thẳng (1 hệ số gần bằng zero) hay mặt phẳng (2 hệ số bằng zero). Điều này cho phép có nhiều chọn lựa điều kiện tối ưu





- Dạng nóc nhà nghiêng xuống (lên): giá trị của đáp ứng giảm dần (tăng dần) khi di chuyển xa điểm gần cực trị và nằm ngoài vùng khảo sát. Do đó nên tiến hành thêm các thí nghiệm nằm ngoài vùng khảo sát



Để chuyển đổi từ phương trình đa thức sang dạng chính tắc cần tiến hành 2 bước:

- Chuyển trục tọa độ đến điểm cực trị

  Tọa độ điểm cực trị $X_{si}$ là nghiệm của hệ phương trình

$$\frac{\partial f}{\partial X_i} = 0$$

- Quay góc tọa độ để loại bỏ các thừa số liên quan đến tương tác. Trong trường hợp 2 biến, góc quay α cho bởi

$$\tan 2\alpha = \frac{b_{12}}{b_{11} - b_{22}}$$

- Phương trình chính tắc có dạng:

$$\mathbf{Y - Y_s = B_{11}X_1^2 + B_{22}X_2^2}$$

với:

$$B_{11} = b_{11}\cos^2\alpha + b_{22}\sin^2\alpha + b_{12}\sin\alpha.\cos\alpha$$

$$B_{22} = b_{11}\sin^2\alpha + b_{22}\cos^2\alpha - b_{12}\sin\alpha.\cos\alpha$$

Các hệ số $B_{11}$ và $B_{22}$ có thể giải dựa trên bất biến của phương trình. Đó là các hàm của các hệ số có giá trị không đổi ở bất cứ hệ trục nào

$$I_1 = b_{11} + b_{22} = \text{const} \qquad I_2 = \begin{vmatrix} b_{11} & \frac{1}{2}b_{12} \\ \frac{1}{2}b_{12} & b_{22} \end{vmatrix} = \text{const}$$

Trường hợp tổng quát các hệ số của phương trình chính tắc là nghiệm của phương trình

$$P_k(B) = \begin{vmatrix} b_{11} - B & \frac{1}{2}b_{12} & .. & .. & \frac{1}{2}b_{1k} \\ \frac{1}{2}b_{21} & b_{22} - B & .. & .. & \frac{1}{2}b_{2k} \\ .. & .. & .. & .. & .. \\ .. & .. & .. & .. & .. \\ \frac{1}{2}b_{k1} & \frac{1}{2}b_{k2} & .. & .. & b_{kk} - B \end{vmatrix} = 0$$

với $b_{ij} = b_{ji}$

Các tọa độ chính tắc quan hệ với tọa độ của theo phương trình

$X_i = m_{i1}(x_1 - x_{1s}) + m_{i2}(x_2 - x_{2s}) + \ldots + m_{ik}(x_k - x_{ks})$

với $m_{ij}$ là nghiệm đồng thời của k phương trình, với $B_i$ phương trình có dạng:

$(b_{11} - B_i)m_{i1} + ½*b_{12}m_{i2} + \ldots + ½*b_{1k}m_{ik} = 0$

……………………………………………………

$½*b_{k1}m_{i1} + ½*b_{k2}m_{i2} + \ldots + (b_{kk} - B_i)m_{ik} = 0$

Vì các phương trình tỉ lệ với $m_{ij}$, nên để đảm bảo tính trực giao của hệ phương trình thì:

$$m_{i1}^2 + m_{i2}^2 + \ldots + m_{ik}^2 = 1$$

Thí dụ:

Chuyển phương trình bậc hai về dạng chính tắc:

$Y = 10 – 15x1 – 10x2 + 4x1x2 + 6x1^2 + 2x2^2$

$B_{11} = 6.8284$

$B_{22} = 1.1716$

Mặt có cực trị với tâm của mặt là cực tiểu

$Y + 4.0625 = 6.8284X_1^2 + 1.1716X_2^2$

# 6.2. Mô hình bề mặt đáp ứng

- Mô hình toán dạng đa thức
- Bao gồm các thừa số biểu diễn độ cong và các tương tác
- Các hệ số được xác định bằng phương pháp phân tích hồi qui.
- Các hệ số không có ý nghĩa bị loại bỏ

- Mô hình bề mặt đáp ứng của 2 yếu tố $X_1$ và $X_2$ và đáp ứng Y như sau:

| | |
|---|---|
| $Y = b_0$ | : Hằng số |
| $+ b_1X_1 + b_2X_2$ | : Yếu tố chính |
| $+ b_3X_1^2 + b_4X_2^2$ | : Độ cong |
| $+ b_5X_1X_2$ | : Tương tác |
| $+ \varepsilon$ | : Sai số |

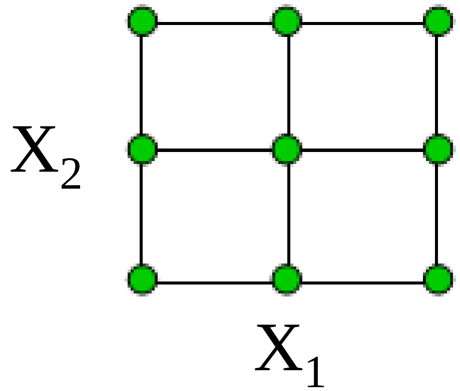
- Mô hình bề mặt đáp ứng của 3 yếu tố $X_1$; $X_2$ và $X_3$ và đáp ứng Y như sau:

| | |
|---|---|
| $Y = \quad b_0$ | : Hằng số |
| $+ b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3$ | : Yếu tố chính |
| $+ b_4X_1^2 + b_5X_2^2 + b_6X_3^2$ | : Độ cong |
| $+ b_7X_1X_2 + b_8X_1X_3 + b_9X_2X_3$ | : Tương tác |
| $+ \varepsilon$ | : Sai số |

# 6.3. Qui hoạch yếu tố 3 mức độ

## Qui hoạch 2 yếu tố 3 mức độ

- Dạng hình học

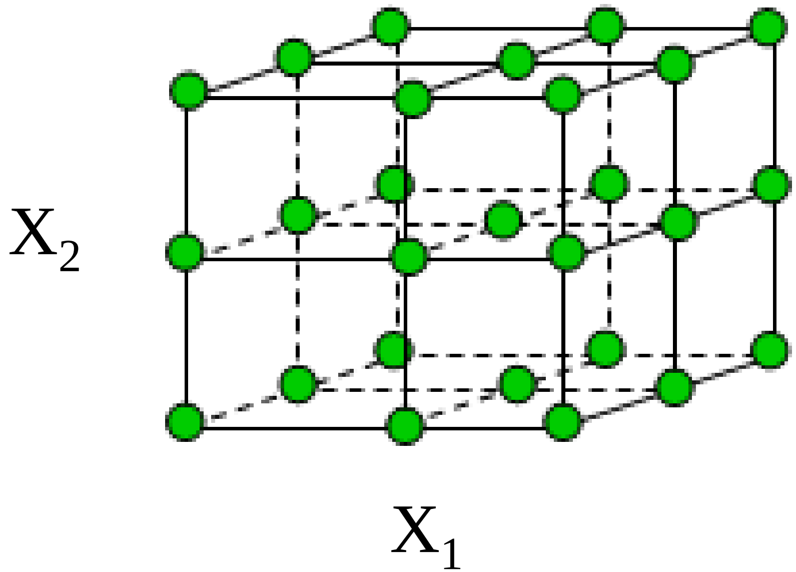



- Dạng toán học

$$Y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_1^2 + b_4X_2^2 + b_5X_1X_2 + b_6X_1^2X_2 + b_7X_1X_2^2 + b_8X_1^2X_2^2 + \varepsilon$$

Qui hoạch 3 yếu tố 3 mức độ

- Dạng hình học

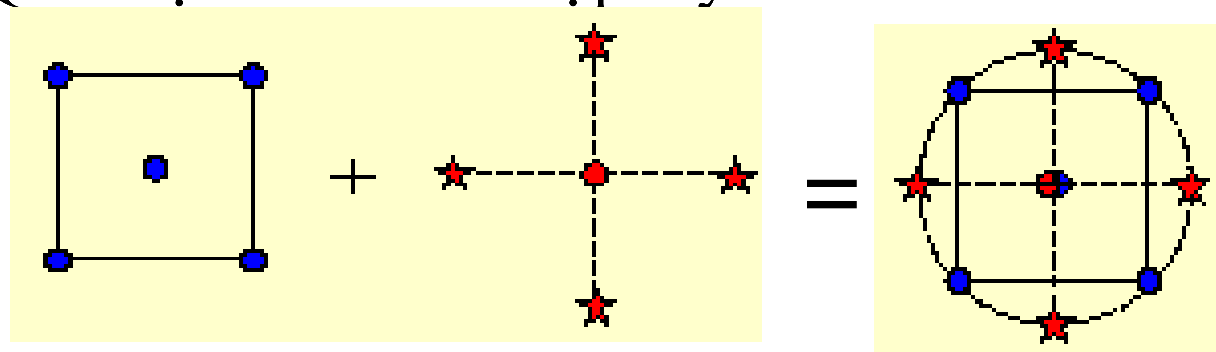


- Dạng toán học

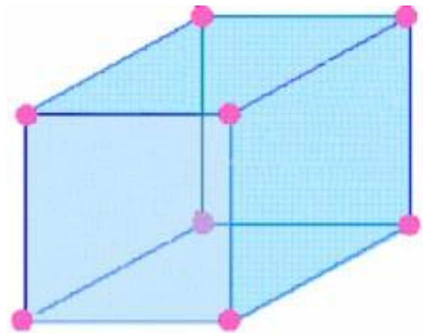
$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_1 X_2 + \beta_5 X_1 X_3 + \beta_6 X_2 X_3$$
$$+ \beta_7 X_1^2 + \beta_8 X_2^2 + \beta_9 X_3^2 + \beta_{10} X_1^2 X_2 + \beta_{11} X_1^2 X_3$$
$$+ \beta_{12} X_1 X_2^2 + \beta_{13} X_2^2 X_3 + \beta_{14} X_1 X_3^2 + \beta_{15} X_2 X_3^2$$
$$+ \beta_{16} X_1^2 X_2^2 + \beta_{17} X_1^2 X_3^2 + \beta_{18} X_2^2 X_3^2 + \beta_{19} X_1 X_2 X_3$$
$$+ \beta_{20} X_1^2 X_2 X_3 + \beta_{21} X_1 X_2^2 X_3 + \beta_{22} X_1 X_2 X_3^2 + \beta_{23} X_1^2 X_2^2 X_3$$
$$+ \beta_{24} X_1^2 X_2 X_3^2 + \beta_{25} X_1 X_2^2 X_3^2 + \beta_{26} X_1^2 X_2^2 X_3^2 + \varepsilon$$

# 6.4. Qui hoạch tâm hỗn hợp

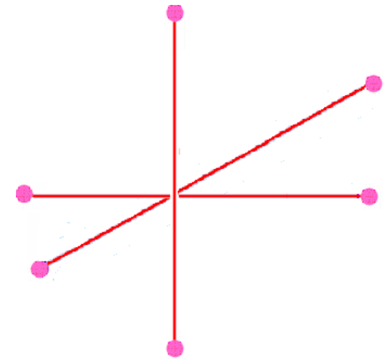
- Qui hoạch tâm hỗn hợp (CCD) còn gọi là qui hoạch Box-Wilson
- Qui hoạch tâm hỗn hợp 2 yếu tố



QH yếu tố + Điểm sao = CCD

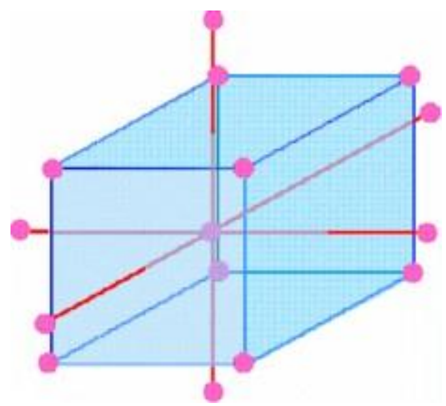


+



Yếu tố + Điểm sao

=



CCD

- Trong qui hoạch tâm hỗn hợp mỗi yếu tố có 5 mức độ

  1: điểm cực trên (điểm sao)

  2: điểm trên

  3: điểm tâm

  4: điểm dưới

  5: điểm cực dưới (điểm sao)
- Các qui hoạch yếu tố toàn phần hay từng phần được tiến hành thí nghiệm và phân tích trước
- Tùy theo sự tương thích các thí nghiệm tại điểm sao sẽ tiến hành tiếp theo

- Qui hoạch tâm hỗn hợp có thể là qui hoạch trực giao, tâm quay hay trực giao-tâm quay tùy theo việc chọn giá trị các điểm sao α.
- Trong qui hoạch trực giao các hệ số hồi qui độc lập
- Trong qui hoạch tâm quay các hệ số hồi qui bậc hai có quan hệ phần nào. Để giảm mối quan hệ này ta có thể thực hiện nhiều thí nghiệm ở tâm hơn. Khi số thí nghiệm ở tâm đủ lớn thì qui hoạch trở thành trực giao-tâm quay

Qui hoạch tâm hỗn hợp

$N_f$: số thí nghiệm của qui hoạch yếu tố

$N_0$: số thí nghiệm ở tâm

2k: số điểm sao $(0, \ldots, \pm\alpha, \ldots, 0)$

- Điều kiện trực giao

$$N_0 = \frac{4\alpha^2\left(\alpha^2 + N_f\right)}{N_f} - 2k$$

- Điều kiện quay

$$N_f = \alpha^4$$

- Các giá trị của α (trực giao hóa)

| $k$ | $F$ | $\alpha$ | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | $n_0 = 1$ | $n_0 = 2$ | $n_0 = 3$ | $n_0 = 4$ | $n_0 = 5$ | $n_0 = 6$ |
| 2 | 4 | 1.000 | 1.078 | 1.147 | 1.210 | 1.267 | 1.320 |
| 3 | 8 | 1.215 | 1.287 | 1.353 | 1.414 | 1.471 | 1.525 |
| 4 | 16 | 1.414 | 1.483 | 1.547 | 1.607 | 1.664 | 1.719 |
| 5 | 32 | 1.596 | 1.662 | 1.724 | 1.784 | 1.841 | 1.896 |
| 5(1/2 rep) | 16 | 1.547 | 1.607 | 1.664 | 1.719 | 1.771 | 1.820 |
| 6 | 64 | 1.761 | 1.824 | 1.885 | 1.943 | 2.000 | 2.055 |
| 6(1/2 rep) | 32 | 1.724 | 1.784 | 1.841 | 1.896 | 1.949 | 2.000 |

- Các giá trị của α (trực giao – tâm quay)

| | Orthogonal | | Rotatable | | Ortho. & Rotat | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Factors | Center Points | α | Center Points | α | Center Points | α |
| 2 | 4 | 1.21 | 5 | 1.41 | 8 | 1.41 |
| | 5 | 1.27 | | | | |
| 3 | 4 | 1.41 | 6 | 1.68 | 9 | 1.68 |
| | 5 | 1.47 | | | | |
| 4 | 4 | 1.61 | 7 | 2.00 | 12 | 2.00 |
| | 5 | 1.66 | | | | |
| 5 | 4 | 1.78 | 10 | 2.38 | 17 | 2.38 |
| | 5 | 1.84 | | | | |
| 5 (half | 4 | 1.72 | 6 | 2.00 | 10 | 2.00 |
| replicate) | 5 | 1.77 | | | | |
| 6 (half | 4 | 1.90 | 9 | 2.38 | 15 | 2.38 |
| replicate) | 5 | 1.95 | | | | |

# Cách xác định phương trình hồi qui bậc hai trực giao

- Xét qui hoạch hỗn hợp với $k = 2$; $n_0 = 1$. Số thí nghiệm là $N = 2^2 + 2*2 + 1 = 9$. Bảng hoạch định như sau:

| TN | $X_0$ | $X_1$ | $X_2$ | $X_{12}$ | $X_1^2$ | $X_2^2$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 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 | $-\alpha$ | 0 | 0 | $\alpha^2$ | 0 |
| 6 | +1 | $+\alpha$ | 0 | 0 | $\alpha^2$ | 0 |
| 7 | +1 | 0 | $-\alpha$ | 0 | 0 | $\alpha^2$ |
| 8 | +1 | 0 | $+\alpha$ | 0 | 0 | $\alpha^2$ |
| 9 | +1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

- Ma trận qui hoạch không trực giao. Để chuyển thành ma trận trực giao phải đổi biến số các thừa số bình phương

$$Z_j = X_j^2 - \frac{\sum_{i=1}^{N} X_{ji}^2}{N} = X_j^2 - \overline{X}_j^2$$

Khi đó

$$\sum_{i=1}^{N} X_{0i} Z_{ji} = \sum_{i=1}^{N} X_{ji}^2 - N\overline{X}_j^2 = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N} Z_{ji} Z_{ui} = 0$$

- Ma trận qui hoạch trở thành ($\alpha = 1$)

| TN | $X_0$ | $X_1$ | $X_2$ | $X_{12}$ | $Z_1$ | $Z_2$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | +1 | -1 | -1 | +1 | +1/3 | +1/3 |
| 2 | +1 | +1 | -1 | -1 | +1/3 | +1/3 |
| 3 | +1 | -1 | +1 | -1 | +1/3 | +1/3 |
| 4 | +1 | +1 | +1 | +1 | +1/3 | +1/3 |
| 5 | +1 | $-\alpha$ | 0 | 0 | +1/3 | -2/3 |
| 6 | +1 | $+\alpha$ | 0 | 0 | +1/3 | -2/3 |
| 7 | +1 | 0 | $-\alpha$ | 0 | -2/3 | +1/3 |
| 8 | +1 | 0 | $+\alpha$ | 0 | -2/3 | +1/3 |
| 9 | +1 | 0 | 0 | 0 | -2/3 | -2/3 |

- Các hệ số hồi qui xác định độc lập

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^{N} X_{ji} Yi}{\sum X_{ji}^2} \qquad \forall j = \overline{1,k}$$

$$b_{ju} = \frac{\sum_{i=1}^{N} X_{ji} X_{ui} Yi}{\sum \left( X_{ji} X_{ui} \right)^2} \qquad \forall j,u = \overline{1,k} \quad j \neq u$$

$$b_0^{'} = \frac{\sum_{i=1}^{N} Yi}{N}$$

$$b_{jj} = \frac{\sum_{i=1}^{N} Z_{ji} Yi}{\sum Z_{ji}^2} \qquad \forall j = \overline{1,k}$$

- Biến lượng của hệ số

$$S_{bj}^2 = \frac{S_e^2}{\sum_{i=1}^{N} X_{ji}^2}$$

Phương trình hồi qui có dạng

$$Y = b_0^{'} + b_1 X_1 + b_2 X_2 + \ldots + b_k X_k + \ldots. +$$

$$+ b_{(k-1)k} X_{k-1} X_k + b_{11}(X_1^2 - \overline{X}_1^2) + \ldots + b_{kk}(X_k^2 - \overline{X}_k^2)$$

chuyển về cách viết thông thường cần tính $b_0$

$$b_0 = b_0^{'} - b_{11}\overline{X}_1^2 - \ldots - b_{kk}\overline{X}_k^2$$

Biến lượng

$$S_{b_0}^2 = S_{b_0^{'}}^2 + \sum_{j=1}^{k} S_{b_{jj}}^2 (\overline{X}_j^2)^2$$

- Phương trình hồi qui có dạng

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^{k} biX_i + \sum_{u,i=1}^{k} b_{ju} X_u Xj + \sum_{j=1}^{k} bjjX_j^2$$

- Kiểm nghiệm ý nghĩa của các hệ số và tính tương thích của phương trình tiến hành như ở hoạch định tuyến tính

## Cách xác định phương trình hồi qui bậc hai tâm quay

- Ma trận trực giao không có tính tâm quay nên sai số khi xác định đáp ứng trên bề mặt đáp ứng có thể thấp hơn so với trong tính toán nhận được từ phương trình hồi qui.
- Hệ số của phương trinh hồi qui được giải theo phương pháp ma trận

  $B = (X^TX)^{-1}X^TY$

  XT: là ma trận chuyển của ma trận X

  $(X^TX)^{-1}$: là ma trận đảo của ma trận $X^TX$
- Ma trận qui hoạch tâm quay là ma trận không trực giao nên việc xác định các hệ số có phụ thuộc nhau.

Tiêu chuẩn trực giao chưa phải là tiêu chuẩn đủ mạnh để tối ưu hóa các phương án có tâm bậc hai.

Box – Hunter đã đề nghị xem phương án quay bậc hai là phương án tối ưu.

$$b_0 = a_1 \sum_{1}^{N} y_u - a_2 \sum_{1}^{k} \sum_{1}^{N} X_{iu}^2 \times y_u$$

$$b_i = a_3 \sum_{1}^{N} X_{iu} \times y_u$$

$$b_{ij} = a_4 \sum_{1}^{n_j} X_{iu} X_{ju} y_u$$

$$b_{ii} = a_5 \sum_{1}^{N} X_{iu}^2 \times y_u + a_6 \sum_{1}^{k} \sum_{1}^{N} X_{iu}^2 \times y_u - a_7 \sum_{1}^{N} y_u$$

| Number of factors k | Number of trials N | Coefficients | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | $a_1$ | $a_2$ | $a_3$ | $a_4$ | $a_5$ | $a_6$ | $a_7$ |
| 2 | 13 | 0.2000 | 0.1000 | 0.1250 | 0.2500 | 0.1250 | 0.0187 | 0.1000 |
| 3 | 20 | 0.1663 | 0.0568 | 0.0732 | 0.1250 | 0.0625 | 0.0069 | 0.0568 |
| 4 | 31 | 0.1428 | 0.0357 | 0.0417 | 0.0625 | 0.0312 | 0.0037 | 0.0357 |
| 5* | 32 | 0.1591 | 0.0341 | 0.0417 | 0.0625 | 0.0312 | 0.0028 | 0.0341 |
| 5 | 52 | 0.0988 | 0.0191 | 0.0231 | 0.0312 | 0.0156 | 0.0015 | 0.0191 |
| 6* | 53 | 0.1108 | 0.0187 | 0.0231 | 0.0312 | 0.0156 | 0.0012 | 0.0187 |
| 6 | 91 | 0.0625 | 0.0098 | 0.0125 | 0.0156 | 0.0078 | 0.0005 | 0.0098 |
| 7* | 92 | 0.0730 | 0.0098 | 0.0125 | 0.0156 | 0.0078 | 0.0005 | 0.0098 |
| 7 | 163 | 0.0398 | 0.0052 | 0.0066 | 0.0078 | 0.0039 | 0.0002 | 0.0052 |

* With half-replica

1. Biến lượng các thí nghiệm ở tâm ($s_{th}^2$)

2. $s^2(b_0) = a_1 \times s_{th}^2$

3. $s^2(b_j) = a_3 \times s_{th}^2$

4. $s^2(b_{lj}) = a_4 \times s_{th}^2$

5. $s^2(b_{jj}) = (a_5 + a_6) \times s_{th}^2$

6. So sánh $t_{stat}$ với $t_{tab}$

## Kiểm tra sự tương thích theo chuẩn F:

$F_{stat} = s^2_{tt} / s^2_{th}$

$s^2_{tt} = (S_{dư} – S_{th}) / f$ với $f = N – l - (n_0 - 1)$

$S_{dư} = \sum (y_i – y^\wedge_i)^2$ với $i = 1 \rightarrow N$

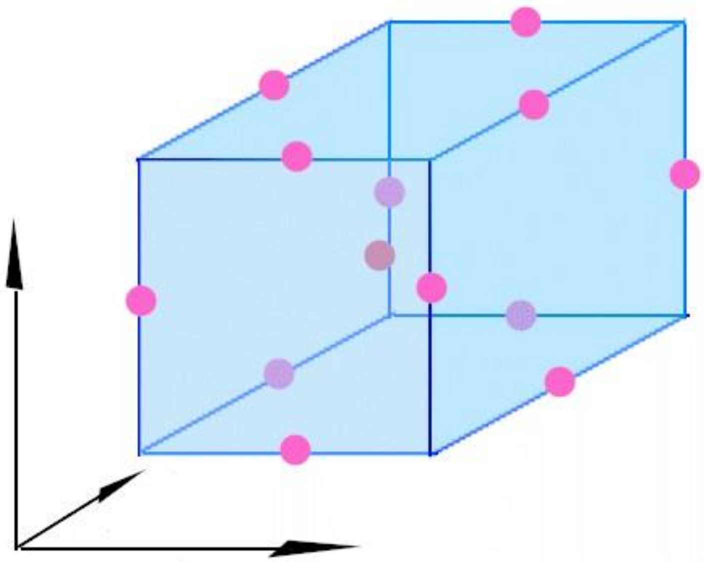
$S_{th} = \sum [y^0_u – Tb(y^0)]^2$

$F_{tab} (0.05, N – l - (n_0 - 1), n_0 - 1)$

So sánh $F_{stat}$ và $F_{tab}$

# 6.5. Qui hoạch Box-Behnken

- Xem qui  hoạch 3 yếu tố



- Qui hoạch Box-Behnken cho 3 yếu tố gồm 12 điểm thí nghiệm nằm giữa cạnh khối lập phương trên khối cầu có tâm là tâm qui hoạch, cùng các thínghiệm tại tâm

- Qui hoạch Box-Behnken là một phần của qui hoạch 3 yếu tố ở 3 mức độ bao gồm luôn tâm qui hoạch
- Qui  hoạch cho phép ước tính hiệu ứng của yếu tố chính và các đại lượng bậc hai
- Qui hoạch Box-Behnken không thể tiến hành kế tục như qui hoạch Box-Wilson
- Qui hoạch Box-Behnken có ý nghĩa ứng dụng khi một vài vùng thí nghiệm không khả thi, như các cực trị của vùng thí nghiệm

- So sánh qui hoạch Box-Behnken và Box-Wilson

| Number of Factors | $3^k$ Factorial 3 Center points | CCD with 4 Center points | Box-Behnken with 4 Center points |
|---|---|---|---|
| 2 | 12 | 12 | -- |
| 3 | 30 | 18 | 16 |
| 4 | 84 | 28 | 28 |
| 5* | 84 | 30 | 44 |
| 6* | 246 | 48 | 52 |
| 7* | 732 | 82 | 60 |

* Các qui hoạch 5,6,7 yếu tố: đối với qui hoạch yếu tố $3^k$ thì dùng qui hoạch 1/3. Đối với CCD thì dùng qui hoạch bán phần của $2^k$.

# 6.6. Các bước tối ưu hóa

1. Sử dụng mô hình bậc một tại vùng khảo sát
2. Đánh giá sự tương thích
3. Nếu mô hình tương thích thì tiến hành leo dốc đứng
4. Tiến hành các bước leo dốc đến khi đạt cựa đại cục bộ
5. Lập lại các bước 1 – 4
6. Nếu kiểm định cho thấy mô hình bậc một không tương thích, thêm các điểm sao đánh giá độ cong của mô hình
7. Sử dụng mô hình bề mặt đáp ứng để xác định điểm tối ưu (dùng giản đồ hay đạo hàm bằng không). Chú ý điểm yên ngựa
8. Khi đã xác dịnh điểm cực đại thì phải đảm bảo rằng khi lệch ra khỏi đểm cực đại thì giá trị đáp ứng giảm.