Kísérlettervezés 2.

Részfaktortervek

Alapok

- A faktorok számának növekedésével rohamosan nő a szükséges kísérletek száma és a kiértékelhető hatások száma (kölcsönhatások miatt)
- A tapasztalat azt mutatja, hogy minél magasabb rendű egy kölcsönhatás (minél több faktor kölcsönhatása) annál ritkábban szignifikáns

  → sparsity szabály (Ockham borotvája): a főhatások a legfontosabbak, majd a kettős kcsh, majd a hármas kcsh, stb.

- A legtöbb paraméter nem bizonyul fontosnak, kiértékelésük nem szükséges

→ Konklúzió: csökkenthetjük az elvégzendő kísérletek számát (az ortogonalitás megtartása mellett)

→ szabadsági fok (ν) = $N - l$

Alapok

- Jelölésük: 2^{p-r}
- Példa: 3 faktor vizsgálata részfaktortervvel ($\boldsymbol{x_1}$, $\boldsymbol{x_2}$, $\boldsymbol{x_3}$)
- A teljes terv 2^3, azaz 8 mérést igényelne

#	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$
1	+	-	-	-	-	+	+
2	-	+	-	-	+	-	+
3	-	-	+	+	-	-	+
4	+	+	+	+	+	+	+
5	+	+	-	+	-	-	-
6	+	-	+	-	+	-	-
7	-	+	+	-	-	+	-
8	-	-	-	+	+	+	-

Alapok

- A részfaktor terv 2^{3-1}, azaz 4 pontot igényel

#	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$
1	+	-	-	-	-	+	+
2	-	+	-	-	+	-	+
3	-	-	+	+	-	-	+
4	+	+	+	+	+	+	+
5	+	+	-	+	-	-	-
6	+	-	+	-	+	-	-
7	-	+	+	-	-	+	-
8	-	-	-	+	+	+	-

- Következmények:

  a) $\boldsymbol{x_1x_2x_3}$, azaz a 3 faktor kölcsönhatása nem értékelhető ki

  b) $\boldsymbol{x_1}$ és $\boldsymbol{x_2x_3}$ hatásai egymástól nem választhatóak el (ugyanígy $\boldsymbol{x_2}$ és $\boldsymbol{x_1x_3}$ illetve $\boldsymbol{x_3}$ és $\boldsymbol{x_1x_2}$ sem) → **keveredés**

  c) 4 paramétert tudunk kiértékelni: b_1', b_2', b_3', b_0'

Kiértékelés

- A modell:

$$\widehat{Y} = \boldsymbol{b_0'} + \boldsymbol{b_1'}\boldsymbol{x_1} + \boldsymbol{b_2'}\boldsymbol{x_2} + \boldsymbol{b_3'}\boldsymbol{x_3}$$

- ahol $\boldsymbol{b_1'}$ tartalmazza mind az $\boldsymbol{x_1}$ potenciális hatását, mind pedig az $\boldsymbol{x_2}\boldsymbol{x_3}$ potenciális kölcsönhatást, $\boldsymbol{b_2'}$ tartalmazza… , $\boldsymbol{b_3'}$ tartalmazza…
- vagyis $\boldsymbol{\beta_1'} = \boldsymbol{\beta_1} + \boldsymbol{\beta_{23}}$, $\boldsymbol{\beta_2'} = \boldsymbol{\beta_2} + \boldsymbol{\beta_{13}}$ és $\boldsymbol{\beta_3'} = \boldsymbol{\beta_3} + \boldsymbol{\beta_{12}}$

  → H_0 **:** $\boldsymbol{\beta_1'} = \boldsymbol{0}$, tehát H_0 elutasítása esetén nem lehetünk biztosak benne, hogy $\boldsymbol{x_1}$ faktornak van hatása vagy a $\boldsymbol{x_2}\boldsymbol{x_3}$ kcsh-nak, vagy mindkettőnek (vagy akár egyiknek sem (*elsőfajú hiba*))

Kiértékelés

- DE:
  1) sparsity
  2) szakmai megfontolás alapján történő elhanyagolás
  3) előkísérleteknél cél lehet a faktorok számának csökkentése, vagyis az a fontos nekünk hogy mely faktornál fogadjuk el a H_0-t, tehát mely faktort zárhatjuk esetleg ki a további vizsgálatokból
- terv helyességének ellenőrzése: ellenőrző kísérlet

Részfaktorterv létrehozása

#	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$
1	+	-	-	-	-	+	+
2	-	+	-	-	+	-	+
3	-	-	+	+	-	-	+
4	+	+	+	+	+	+	+
5	+	+	-	+	-	-	-
6	+	-	+	-	+	-	-
7	-	+	+	-	-	+	-
8	-	-	-	+	+	+	-

- olyan, mint egy 2^2 terv, ahol a kcsh ($\boldsymbol{x_1x_2}$) helyére vezettük be az új faktort ($\boldsymbol{x_3}$)

  → DE, itt az $\boldsymbol{x_3}$ értékeket ténylegesen be kell állítani a kísérletek során

- ezen a módon készíthetünk bonyolultabb részfaktorterveket is

Részfaktorterv létrehozása

- pl. 2^{5-2}: 2^3-es alap tervet felhasználva, 5 faktort vizsgálunk
- 2 új faktort kell bevezetnünk az alaptervbe valamely kcsh-ok helyére
- sparsity szabály → érdemes az új faktorokat a legmagasabb rendű kcsh-ok helyére bevezetni

→ 3 faktoros modellben ez a $\boldsymbol{x_1 x_2 x_3}$ és valamely két faktoros kcsh (pl. $\boldsymbol{x_1 x_2}$)

→ ha szakmai megfontolás alapján ezek a kcsh-ok fontosak lehetnek, alacsonyabb rendű kcsh. helyére is vezethetjük az új faktorokat

Keveredési rendszer

- A beállításokat tartalmazó oszlop megegyezik a bevezetett faktorra és aminek helyére bevezettük
- 2^{3-1} tervnél tehát: $\boldsymbol{x_3} = \boldsymbol{x_1 x_2}$ $\boldsymbol{x_i = \pm 1}$ / $*\boldsymbol{x_3}$

  $1 = \boldsymbol{x_1 x_2 x_3}$

  → ez az úgynevezett meghatározó kontraszt

A meghatározó kontraszt segítségével tudjuk megadni, mely hatások keverednek:

$1 = \boldsymbol{x_1 x_2 x_3}$ $/*\boldsymbol{x_i}$

$$\boldsymbol{x_1 = x_2 x_3} \qquad \boldsymbol{x_2 = x_1 x_3} \qquad \boldsymbol{x_3 = x_1 x_2}$$

- Tehát $\boldsymbol{x_1}$ keveredik $\boldsymbol{x_2 x_3}$ kcsh-sal, $\boldsymbol{x_2}$ az $\boldsymbol{x_1 x_3}$ kcsh-sal és $\boldsymbol{x_3}$ a $\boldsymbol{x_1 x_2}$ kcsh-sal

Keveredési rendszer

- 2^{4-1} tervnél (1. opció): $\boldsymbol{x_4} = \boldsymbol{x_1 x_2 x_3}$
- Meghatározó kontraszt: $1 = \boldsymbol{x_1 x_2 x_3 x_4}$
- Keveredések:

$$\boldsymbol{x_1 = x_2 x_3 x_4 \quad x_2 = x_1 x_3 x_4 \quad x_3 = x_1 x_2 x_4 \quad x_4 = x_1 x_2 x_3}$$

$$\boldsymbol{x_1 x_2 = x_3 x_4 \quad x_1 x_3 = x_2 x_4 \quad x_1 x_4 = x_2 x_3}$$

- Ebben a tervben a főhatások nem keverednek kettes kcsh-okkal csak hármas kcsh-okkal

  $\rightarrow$ előnyösebb, mint a 2^{3-1} terv (sparsity: a három faktoros kcsh kevésbé fontos és ritkábban létezik, mint a két faktoros kcsh)

Keveredési rendszer

- 2^{4-1} tervnél (2. opció): $\boldsymbol{x_4} = \boldsymbol{x_1 x_2}$
- Meghatározó kontraszt: $1 = \boldsymbol{x_1 x_2 x_4}$
- Keveredések:

$$\boldsymbol{x_1 = x_2 x_4 \qquad x_2 = x_1 x_4 \qquad x_4 = x_1 x_2 \qquad x_3 = x_1 x_2 x_3 x_4}$$

$$\boldsymbol{x_1 x_3 = x_2 x_4 x_3 \qquad x_2 x_3 = x_1 x_4 x_3 \qquad x_4 x_3 = x_1 x_2 x_3}$$

- Ebben a tervben a főhatások már kettes kcsh-okkal is keverednek → kevésbé előnyös a 2. opció az 1. opcióhoz képest

Felbontás

- Azt adja meg, hogy mely hatások keverednek
- Resolution III. : főhatás (I) legrosszabb esetben kettős kcsh-sal (II) keveredik → I+II=III   pl: 2^{3-1}, 2^{4-1} terv (2. opció):
- Res IV. : főhatás (I) legrosszabb esetben hármas kcsh-sal (III) keveredik, a kettes kcsh-ok (II) legrosszabb esetben kettes kcsh-okkal (II) keverednek → I+III=IV és II+II=IV pl: 2^{4-1} terv (1. opció):
- Általánosan, minél nagyobb egy terv felbontása, annál jobb

Példa feladat: Szűrési folyamat

- 2^{7-4} terv (előkísérlet)
- Vizsgált 7 faktor:

Faktor	Alsó szint	Felső szint
víz forrása	városi víztároló	kút
alapanyag	helyi	egyéb
hőmérséklet	alacsony	magas
recirkuláltatás	van	nincs
NaOH adagolás	gyors	lassú
szűrő anyag	új	használt
várkozási idő	alacsony	magas

- Függő változó a szűrési idő

Kísérleti terv és eredmények

				(x_1x_2)	(x_1x_3)	(x_2x_3)	$(x_1x_2x_3)$	
#	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	y
1	-	-	-	+	+	+	-	68,4
2	+	-	-	-	-	+	+	77,7
3	-	+	-	-	+	-	+	66,4
4	+	+	-	+	-	-	-	81,0
5	-	-	+	+	-	-	+	78,6
6	+	-	+	-	+	-	-	41,2
7	-	+	+	-	-	+	-	68,7
8	+	+	+	+	+	+	+	38,7

$x_4 = x_1x_2$ $\quad$ $x_5 = x_1x_3$ $\quad$ $x_6 = x_2x_3$ $\quad$ $x_7 = x_1x_2x_3$

Becsült paraméterek és keveredések

+… = három vagy annál több faktoros kcsh

$b_1'^1 = -10{,}9$ → 1+24+35+67+… ($b_1 + b_{24} + b_{35} + b_{67}$ +…)

$b_2' = -2{,}8$ → 2+14+36+57+…

$b_3'^1 = -16{,}6$ → 3+15+26+47+…

$b_4' = 3{,}2$ → 4+12+37+56+…

$b_5'^1 = -22{,}8$ → 5+13+27+46+…

$b_6'^1 = -3{,}4$ → 6+17+23+45+…

$b_7'^1 = 0{,}5$ → 7+16+25+34+…

Továbbhaladás a részfaktorterv eredménye alapján

1. opció:

- előkísérletek eredményei alapján 3 faktor potenciálisan szignifikáns
- a továbbiakban elég ezt a 3 faktort vizsgálni, csinálhatunk olyan tervet amiben csak ezeket a faktorokat vizsgáljuk mélyebben

2. opció:

- keveredés részleges feloldása = fold-over terv
- feloldjuk a főhatások és a két faktoros kcsh-sok keveredéseit, ezáltal kiderül, hogy valóban a 3 főhatás ami szignifikáns vagy a keveredésben résztvett tagok közül más

Fold-over terv

- A tervet újra elvégezzük, DE egyes oszlopok beállításait ellenkező előjelűnek vesszük
- Ezzel, az adott oszlophoz tartozó hatás keveredését részben feloldjuk

Példa folytatása: fold-over terv

- Minden oszlop beállítását felcseréljük

				$(-x_1x_2)$	$(-x_1x_3)$	$(-x_2x_3)$	$(-x_1x_2x_3)$
#	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
1	+	+	+	-	-	-	+
2	-	+	+	+	+	-	-
3	+	-	+	+	-	+	-
4	-	-	+	-	+	+	+
5	+	+	-	-	+	+	-
6	-	+	-	+	-	+	+
7	+	-	-	+	+	-	+
8	-	-	-	-	-	-	-

$x_4 = -x_1x_2$ $\quad$ $x_5 = -x_1x_3$ $\quad$ $x_6 = -x_2x_3$ $\quad$ $x_7 = -x_1x_2x_3$

Keveredések a fold-over tervben

+… = három vagy annál több faktoros kcsh

$b_1'^2$: 1-24-35-67+… ($b_1 - b_{24} - b_{35} - b_{67} + \ldots$)

$b_2'^2$: 2-14-36-57+…

$b_3'^2$: 3-15-26-47+…

$b_4'^2$: 4-12-37-56+…

$b_5'^2$: 5-13-27-46+…

$b_6'^2$: 6-17-23-45+…

$b_7'^2$: 7-16-25-34+…

Eredeti:

b'_1:	1+24+35+67+…
b'_2:	2+14+36+57+…
b'_3:	3+15+26+47+…
b'_4:	4+12+37+56+…
b'_5:	5+13+27+46+…
b'_6:	6+17+23+45+…
b'_7:	7+16+25+34+…

Fold-over terv:

$b_1'^2$:	1-24-35-67+…
$b_2'^2$:	2-14-36-57+…
$b_3'^2$:	3-15-26-47+…
$b_4'^2$:	4-12-37-56+…
$b_5'^2$:	5-13-27-46+…
$b_6'^2$:	6-17-23-45+…
$b_7'^2$:	7-16-25-34+…

A két terv összegzésével (méréseinek összevonásával) a keveredés a főhatások és a két faktoros kcsh-ok között megszűnik

Eredeti + fold-over terv főhatásai

+… = három vagy annál több faktoros kcsh

$b'_1 = -6{,}7$ → 1+…

$b'_2 = -3{,}9$ → 2+…

$b'_3 = -0{,}4$ → 3+…

$b'_4 = 2{,}8$ → 4+…

$b'_5 = -19{,}2$ → 5+…

$b'_6 = 0{,}1$ → 6+…

$b'_7 = -4{,}4$ → 7+…

Eredeti terv alapján:

$b'^1_1 = -10{,}9$

$b'^1_3 = -16{,}6$

$b'^1_5 = -22{,}8$

Eredeti + fold-over terv kcsh-ai

Két faktoros kcsh-ok egymással és magasabb rendű kcsh-okkal továbbra is keverednek

$b'_{12} = 0{,}5$ → 12+37+56+…

$b'_{13} = -3{,}6$ → 13+27+46+…

$b'_{14} = 1{,}1$ → 14+36+57+…

$b'_{15} = -16{,}2$ → 15+26+47+…

$b'_{16} = 4{,}9$ → 16+25+34+…

$b'_{17} = -3{,}4$ → 17+23+45+…

$b'_{24} = -4{,}2$ → 24+35+67+…

Éppen ezt a tagot választottuk el a 3-as faktor főhatásától
Melyik a szignifikáns kcsh? (sparsity és heredity szabály)

Szűrési példa eredménye

- Szignifikáns hatása van az 1. faktornak (víz forrása) és a 5. faktornak (NaOH adagolás sebessége) illetve a kcsh-uknak
- A főhatások és a kcsh paramétere negatív előjelű, tehát a faktorok beállítását +1-nek választva érhetjük el a terv területén belül a legalacsonyabb szűrési időt

Összefoglaló:

- 7 faktoros teljes terv túl sok mérést jelentene (2^7)
- Csökkentjük a mérések számát részfaktort terv (2^{7-4} terv) segítségével, de ezzel kevesebb hatás értékelhető ki és keveredés történik
- Ha szükségesnek ítéljük meg, fold-over tervvel megszüntethetünk keveredéseket és feloldhatjuk a főhatások “legfontosabb” keveredéseit (magasabb rendű kcsh-okkal továbbra is keverednek)