Kísérlettervezés 2.

Box és Wilson módszere az optimum keresésre

Példa feladat

- 2^{7-4} terv + fold-over terv, centrumponti méréssel

Faktor	Alsó szint	Felső szint
Reakció idő (min)	70	80
Hőmérséklet (°C)	130	135
Fordulatszám (1/min)	400	500
Katalizátor konc. (%)	1	2
Felesleg (%)	20	30
Nyomás (bar)	1	2
Szennyezés konc. (%)	0	0,5

Függő változó a kitermelés (%)

2^{7-4} terv

					(x_1x_2)	(x_1x_3)	(x_2x_3)	$(x_1x_2x_3)$		
#	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	*Blokk*	y
1	+	-	-	-	+	+	+	-	1	31,04
2	+	+	-	-	-	-	+	+	1	43,65
3	+	-	+	-	-	+	-	+	1	56,42
4	+	+	+	-	+	-	-	-	1	66,39
5	+	-	-	+	+	-	-	+	1	27,78
6	+	+	-	+	-	+	-	-	1	48,63
7	+	-	+	+	-	-	+	-	1	51,13
8	+	+	+	+	+	+	+	+	1	69,7
9	+	0	0	0	0	0	0	0	1	49,07
10	+	0	0	0	0	0	0	0	1	51,34
11	+	0	0	0	0	0	0	0	1	49,72

Centrumponti mérések

2^{7-4} terv – blokk faktor

- Blokk “faktor”: Azért alkalmazzuk, hogy elkülönítsük azt a hatást ami abból ered, hogy a terv különböző részei, különböző (külső) körülmények között mentek végbe
- Jelen esetben 2 terv részletünk van: 2^{7-4} terv + fold-over terv
- A fold-over tervet pl. másik nap végezzük el, vagy a kitermelést más műszerrel mérjük stb.

  → ezen körülmények potenciális hatását tartalmazza a blokk faktor (ha nem alkalmaznánk a blokk faktort, a reziduális szórást növelné a figyelembe nem vett körülmény hatása)

  →A tervek centrumponti méréseinek eredményeit hasonlítjuk össze

  → $H_0: E\left(\bar{y}_{c(1)}\right) = E\left(\bar{y}_{c(2)}\right)$

- Ha szignifikáns a blokk faktor az azt jelenti, hogy a terv részleteinek elvégzése során a körülmények változása befolyásolta a mért értéket, ilyenkor a blokk bekerül a modellbe

2^{7-4} terv

- A kiértékelés alapján 3 főhatás szignifikáns

Factor	Effect	Std.Err.	t(2)	p
Mean/Interc.	49.34250	0.413315	119.3824	0.000070
Curvatr.	1.40167	1.582875	0.8855	0.469296
(1)idő	15.50000	0.826630	18.7508	0.002832
(2)hőmérséklet	23.13500	0.826630	27.9871	0.001274
(3)ford.szám	-0.06500	0.826630	-0.0786	0.944484
(4)kat.konc.	-1.23000	0.826630	-1.4880	0.275157
(5)felesleg	4.21000	0.826630	5.0930	0.036458
(6)nyomás	-0.92500	0.826630	-1.1190	0.379496
(7)szenny.konc.	0.09000	0.826630	0.1089	0.923240

- Keveredés van, nem tudjuk, hogy valóban a főhatások vagy esetleg két faktoros kcsh-ok a szignifikánsak → fold-over tervet készítünk

Fold-over terv

					$(-x_1x_2)$	$(-x_1x_3)$	$(-x_2x_3)$	$(-x_1x_2x_3)$		
#	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	*Blokk*	y
1	+	+	+	+	-	-	-	+	2	65,29
2	+	-	+	+	+	+	-	-	2	56,9
3	+	+	-	+	+	-	+	-	2	42,42
4	+	-	-	+	-	+	+	+	2	31,47
5	+	+	+	-	-	+	+	-	2	71,18
6	+	-	+	-	+	-	+	+	2	50,08
7	+	+	-	-	+	+	-	+	2	47,26
8	+	-	-	-	-	-	-	-	2	29,11
9	+	0	0	0	0	0	0	0	2	49,89
10	+	0	0	0	0	0	0	0	2	49,16
11	+	0	0	0	0	0	0	0	2	51,11

2^{7-4} terv + fold-over terv együtt

- A fold-over terv segítségével a főhatásokat megszabadítjuk a két faktoros khcs-okkal történő keveredéstől
- Végső soron csak a főhatásokat találjuk szignifikánsnak
- A blokk faktor nem szignifikáns, nincs kimutatható hatása a körülmények különbözőségének a mérésre

Factor	Effect	Std.Err.	t(5)	p
Mean/Interc.	49.27812	0.242269	203.4027	0.000000
Blokk(1)	-0.09091	0.413215	-0.2200	0.834568
Curvatr.	1.54042	0.927819	1.6603	0.157756
(1)idő	15.07375	0.484538	31.1096	0.000001
(2)hőmérséklet	23.21625	0.484538	47.9142	0.000000
(3)ford.szám	-0.22625	0.484538	-0.4669	0.660183
(4)kat.konc.	-0.66375	0.484538	-1.3699	0.229043
(5)felesleg	4.59375	0.484538	9.4807	0.000221
(6)nyomás	-0.88875	0.484538	-1.8342	0.126081
(7)szenny.konc.	-0.64375	0.484538	-1.3286	0.241390
1 by 2	-0.56625	0.484538	-1.1686	0.295231
1 by 3	-0.38375	0.484538	-0.7920	0.464265
1 by 4	-0.08125	0.484538	-0.1677	0.873402
1 by 5	0.16125	0.484538	0.3328	0.752792
1 by 6	0.73375	0.484538	1.5143	0.190367
1 by 7	-0.03625	0.484538	-0.0748	0.943264
2 by 4	0.42625	0.484538	0.8797	0.419285

Az illesztett modell

$\hat{Y} = 49{,}28 + 7{,}54x_1 + 11{,}61x_2 + 2{,}30x_5$

A felesleget (x_5) gazdasági megfontolás alapján nem akarták tovább növelni, így azt +1 értéken rögzítették

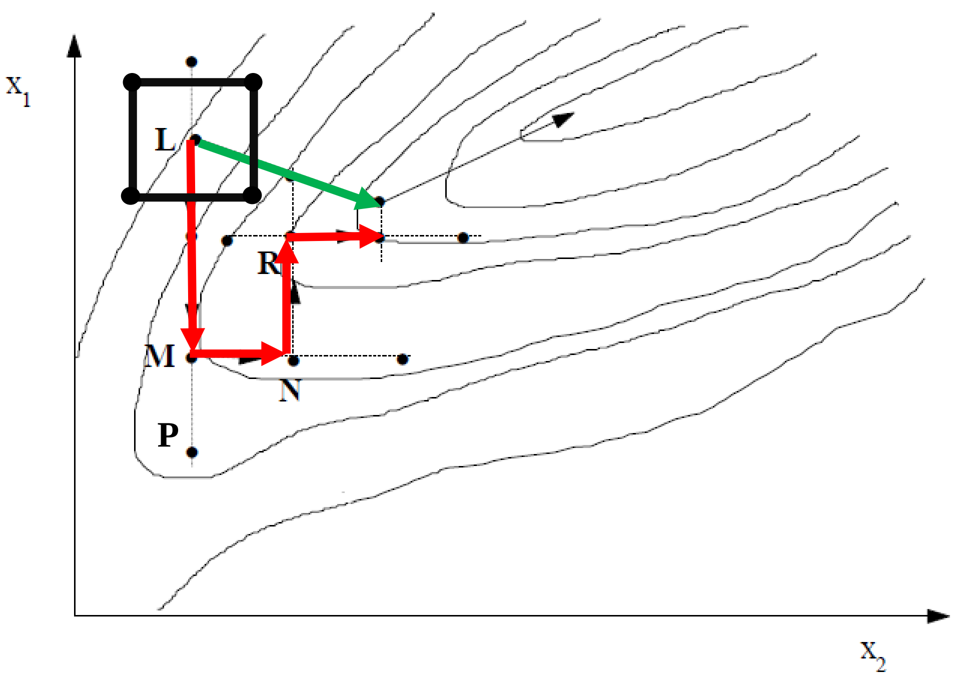
Ez alapján az új modell:

$\hat{Y} = 51{,}58 + 7{,}54x_1 + 11{,}61x_2$ $(49{,}28 + 2{,}30 * (+1) = 51{,}58)$

Ezután célunk az optimum megtalálása (legnagyobb elérhető kitermelés), melyet az x_1 és x_2 faktorok terében keresünk tovább **Box és Wilson módszerével**

Box és Wilson módszere az optimum közelítésére

Függő változó maximumát keressük



Faktorok egyenkénti változtatásával:

0. Kiindulás az **L pontból** (a kiindulási kísérleti terv centrumpontja)
1. Mérések x_1 csökkentésével (modell alapján a hatása negatív)
2. **P ponton** a mért érték kisebb, mint az **M ponton** volt, visszalépünk az **M pontra**
3. Mérések x_2 növelésével (modell alapján a hatása pozitív) **M pontból** indulva
4. És így tovább…

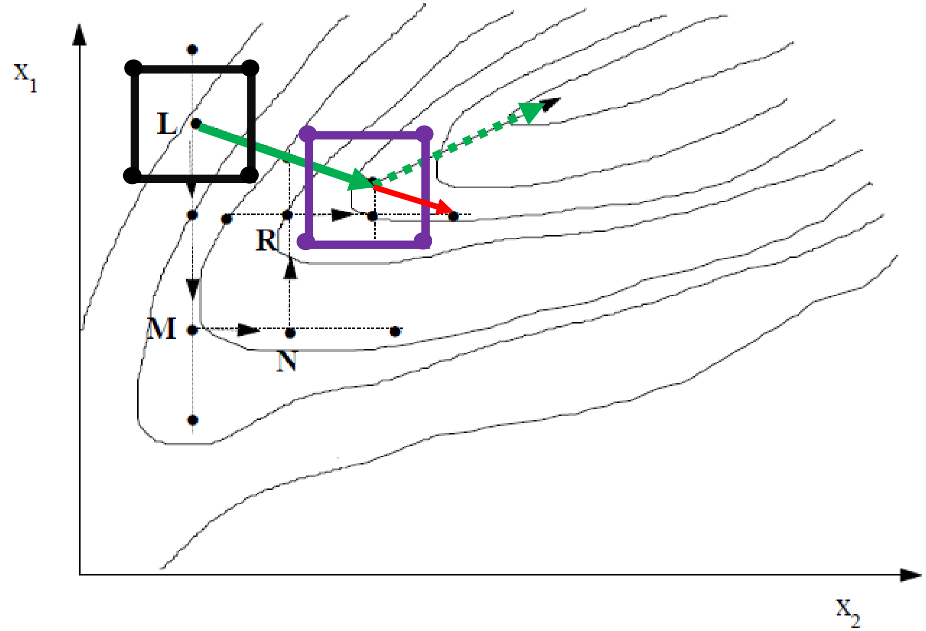
Box és Wilson módszere

Gradiens mentén haladunk a **becsült modell szerinti** legrövidebb úton az optimum felé

Becsült modell érvényessége

- A modell szigorúan véve, csak a faktortér vizsgált részén belül érvényes, tehát a kísérleti terv pontjai által határolt régióban
- A tervből kilépve és attól távolodva, egyre valószínűbb, hogy a modell már nem érvényes
- Például, ha a mért változó felülről korlátos (pl. kitermelés(%)), az optimum közelében platóba hajlik a függvény, megváltozik az összefüggés a faktorok és a függő változó között

- Tehát a tervből becsült modell, nem feltétlenül a valódi optimum irányába vezérel minket, hanem a tervből becsült modell extrapolációjával kapott fiktív optimum irányába, DE a két irány általában közel azonos!
  - →Amint a fiktív gradiens irányában (zöld nyíl) történő mérés már nem az optimum irányába változtatja a függő változót (piros nyíl), új tervet hozunk létre a talált pont körül és új gradiens irányt számítunk (szaggatott zöld) az új modellel



Box és Wilson módszere

- Az optimum felé mutató vektort (gradiens-függvény) a modellben szereplő tagok parciális deriváltjainak felhasználásával kapjuk:

$$\underline{grad\hat{Y}} = \frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_1}\underline{\delta x_1} + \frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_2}\underline{\delta x_2} + \frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_1}\underline{\delta x_3} + \ \dots + \frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_p}\underline{\delta x_p}$$

ahol $\underline{\delta x_i}$ az i-edik koordinátatengely irányába mutató egységvektor

- Ha a modell:

$$\hat{Y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \ \dots + b_p x_p$$

A gradiens-függvény:

$$\underline{grad\hat{Y}} = b_1\underline{\delta x_1} + b_2\underline{\delta x_2} + b_3\underline{\delta x_3} + \ \dots + b_p\underline{\delta x_p}$$

Box és Wilson módszere

A gradiens-függvény:

$$\underline{grad\hat{Y}} = b_1\underline{\delta x_1} + b_2\underline{\delta x_2} + b_3\underline{\delta x_3} + \ \dots + b_p\underline{\delta x_p}$$

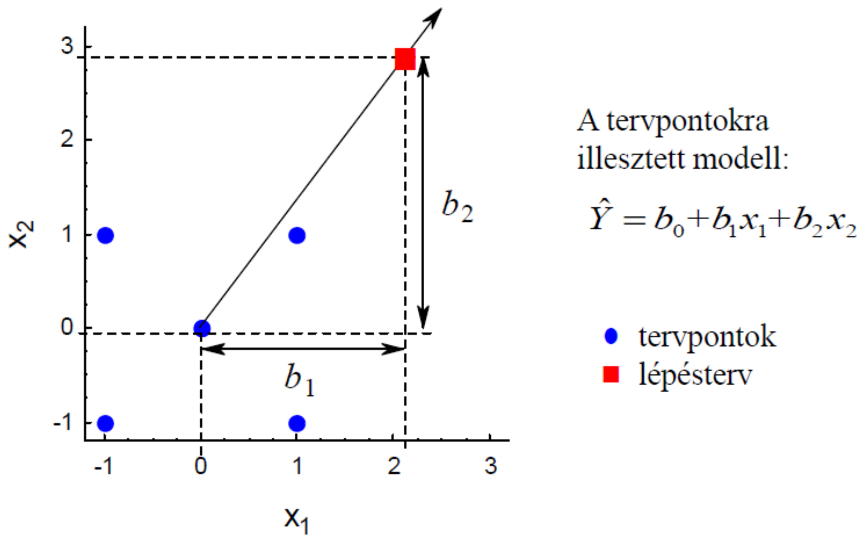
Ez gyakorlatilag azt jelenti, hogy a gradiens vektor irányát a paraméterek egymáshoz viszonyított értéke szabja meg

Gradiens irányba úgy haladunk, ha az x_1 mentén b_1 egységet lépünk miközben az x_2 mentén b_2 egységet lépünk stb.

Példa folytatása, optimum keresés

Az illesztett modell:
$\hat{Y} = 51{,}58 + 7{,}54x_1 + 11{,}61x_2$

A gradiens-függvény:
$\underline{grad\hat{Y}} = 7{,}54\underline{\delta x_1} + 11{,}61\underline{\delta x_2}$

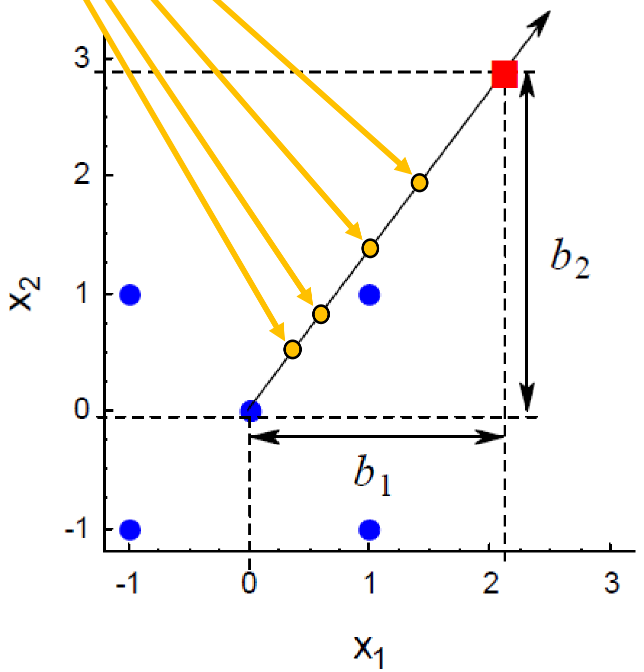


Vagyis a gradiens irányában úgy haladunk, ha egy kiindulási pontból az x_1 értékét 7,54-dal, míg x_2 értékét 11,61-dal növeljük (lépésterv az ábrán)

→ DE az irány a lényeg, nem a konkrét pont!

Példa folytatása, optimum keresés

Bármely olyan pont a vektor irányába esik, ahol az x_1-beli lépés és x_2-beli lépés aránya megegyezik a 7,54:11,61 aránnyal



A tervpontokra illesztett modell:

$$\hat{Y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2$$

- tervpontok
- lépésterv

Példa folytatása, optimum keresés

- Mivel az illesztett modell egyre kevésbé érvényes az eredeti tervtől távolodva, nem ugorhatunk egy jó nagyot a gradiens irányába
- Megfelelően kis lépésekkel haladunk, az egyes lépésekben méréseket végzünk és ellenőrizzük, hogy a mért érték még mindig az optimális felé változik-e
- Ha az újabb pontban *y* változása már elhanyagolható az előző ponthoz képest, vagy értéke távolabb került az optimum értéktől, vagy a faktorokat nem tudjuk vagy akarjuk tovább változtatni, megállunk a lépkedéssel

Példa folytatása, optimum keresés

- Transzformáció: $x_i = \frac{z_i - z_i^0}{\Delta z_i}$
- Lépés x_i-ben:

$$L(x_i) = x_{i(j+1)} - x_{i(j)} = \frac{z_{i(\mathrm{j}+1)} - z_i^0}{\Delta z_i} - \frac{z_{i(\mathrm{j})} - z_i^0}{\Delta z_i} = \frac{z_{i(\mathrm{j}+1)} - z_{i(\mathrm{j})}}{\Delta z_i} = \frac{L(z_i)}{\Delta z_i}$$

- Tehát a z_i-beli lépés:

$$L(z_i) = L(x_i) * \Delta z_i$$

Példa folytatása, optimum keresés

- $\underline{grad\hat{Y}} = 7{,}54\underline{\delta x_1} + 11{,}61\underline{\delta x_2}$

Faktor	Alsó szint	Felső szint
Reakció idő (min)	**70**	**80**
Hőmérséklet (°C)	**130**	**135**

- $L(z_1) = 7{,}54 * \Delta z_1 = 7{,}54 * 5 = 37{,}7$
- $L(z_2) = 11{,}61 * \Delta z_2 = 11{,}61 * 2{,}5 = 29{,}025$

→ NEM a konkrét érték a fontos, minden olyan lépés jó, ahol $L(z_1)$ és $L(z_2)$ aránya 37,7:29,025

Példa folytatása, optimum keresés

- A terv bármely részéről indulhatunk, a példa során a centrumból indulunk
- A 37,7 és 29,025 túl nagy lépésközök, ezek helyett a 2,5 és 1,92 lépésközöket választjuk
  - → teljesül, hogy 37,7:29,025 = 2,5:1,92
  - → szakmai megfontolás illetve ésszerűség alapján döntünk az alkalmazott lépésközről
    - → ésszerűség: ne legyen se túl nagy, se túl kicsi…

- Tehát z_1 lépését **2,5**-nek vesszük, z_2 lépését pedig **1,92**-nak
- Centrumpontból indulunk, maximumot keresünk
- A terven belüli kísérleteket nem végezzük el, hiszen itt ismerjük a modellt! (0. és 1. pont)
- Nem feltétlenül kell minden lépésnél mérni

#	x_1	x_2	z_1 (min)	z_2 (°C)	y (%)	ŷ (%)
0.	**0**	**0**	**75**	**132,5**	**(50,4)**	**51,58**
1.	**0,5**	**0,77**	**77,5**	**134,4**		
2.	**1,0**	**1,54**	**80,0**	**136,4**		
3.	**1,5**	**2,31**	**82,5**	**138,3**	**83,30**	**89,71**
4.	**2,0**	**3,08**	**85,0**	**140,2**		
5.	**2,5**	**3,85**	**87,5**	**142,1**	**94,02**	**102,4**
6.	**3,0**	**4,62**	**90,0**	**144,1**		
7.	**3,5**	**5,39**	**92,5**	**146,0**	**97,16**	**140,5**
8.	**4,0**	**6,16**	**95,0**	**147,9**		
9.	**4,5**	**6,93**	**97,5**	**149,8**	**93,42**	**165,97**

y értékeket mérjük egyes lépéseknél

ŷ értékek azok amiket a modell extrapolációjával kapunk

A lépések során talált maximum, “fiktív optimum”