Kísérlettervezés 2.

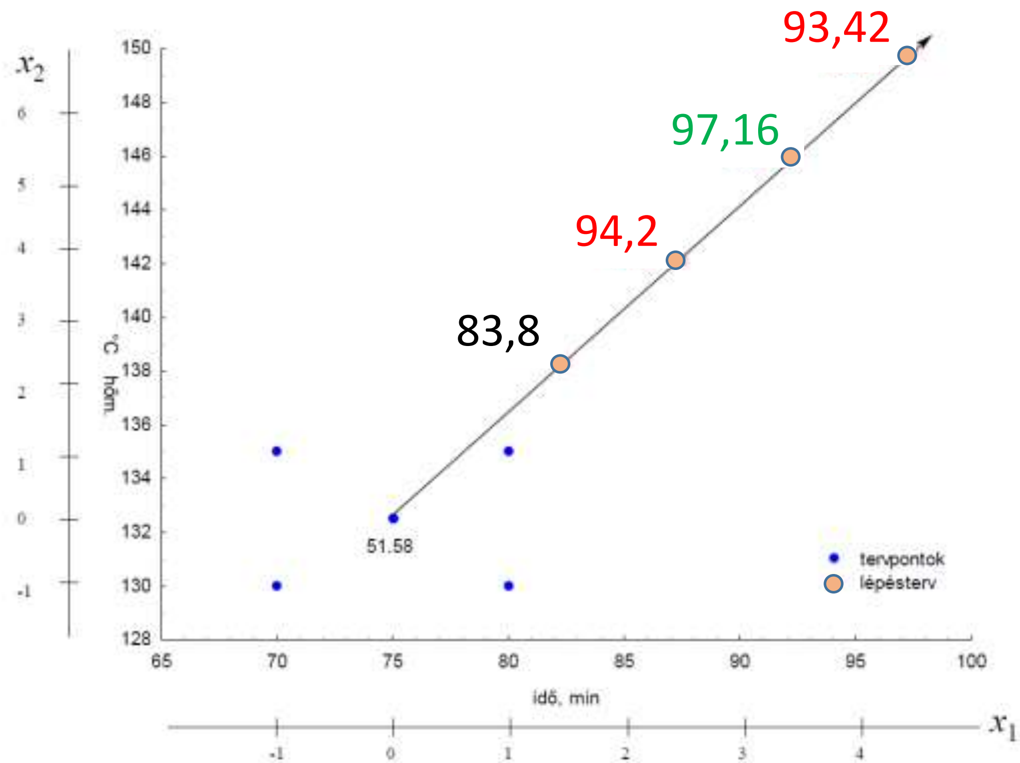
Másodfokú tervek

Box-Wilson emlékeztető

- A terv területéről kilépve és távolodva, a faktorok hatásai (így a modell is) változhatnak
- A tervből becsült modellel számított gradiens irány, nem feltétlen a valódi optimum irányba vezérel minket, csak egy fiktív optimumba
- A fiktív optimumból továbbléphetünk, ha annak közelében is feltérképezzük a faktorok hatásait

Box-Wilson-os példa feladat folytatása

- Méréseket végeztünk az első tervből becsült fiktív optimum irányába, találtunk egy fiktív optimumot
- A talált maximum érték körül újra kell vizsgálni a faktorok hatását, hogy az optimumot még jobban meg tudjuk közelíteni



Új terv a talált maximum körül

- 2^2 terv (+3 centrum ponti mérés), 2 faktort vizsgálunk 2 szinten

Faktor	Alsó szint	Felső szint
Reakció idő (min)	**80**	**100**
Hőmérséklet (°C)	**140**	**150**

#	x_1	x_2	x_1x_2	y
1	-	-	+	**82,2**
2	+	-	-	**92,69**
3	-	+	-	**92,24**
4	+	+	+	**89,98**
5	**0**	**0**	**0**	**93,89**
6	**0**	**0**	**0**	**95,56**
7	**0**	**0**	**0**	**94,84**

Centrumponti mérés

- Célja:

1.) Szabadságifokot növeljük a plusz mérésekkel (centrumponti méréssel nem rontjuk el az ortogonalitást), így statisztikailag kiértékelhető minden hatás

2.) Blokk faktor vizsgálata: első terv részlet centrumponti méréseinek várható értéke megegyezik-e a második terv részlet centrumponti méréseinek várható értékével

3.) A modell adekvátságának vizsgálata: megfelelő-e a lineáris modell a faktorok és a függő változó közötti kapcsolat leírására

Centrumponti mérés

- A modell adekvátságának vizsgálata során azt kérdezzük, hogy a modellből becsült érték várható értéke a centrumpontban, megegyezik-e a centrumponti mérések várható értékével

  → $H_0: E(\hat{y}_c) = E(\bar{y}_c)$

- A modellből becsült centrumponti érték ($\hat{y}_c$) valójában megegyezik b_0-lal

  → $H_0: E(b_0) = E(\bar{y}_c)$

Kiértékelés

Factor	Coeff.	Std.Err. Coeff.	t(2)	p
Mean/Interc.	89,27750	0,418818	213,1655	0,000022
Curvatr.	5,48583	0,639755	8,5749	0,013329
(1)idő	2,05750	0,418818	4,9126	0,039026
(2)hőmérséklet	1,83250	0,418818	4,3754	0,048469
1 by 2	-3,18750	0,418818	-7,6107	0,016830

Görbeség vizsgálat: Curvature (Curvatr.)

→ $H_0: E(b_0) = E(\bar{y}_c)$ → t-próba: $\frac{b_0 - \bar{y}_c}{s_{\hat{y}_c - \bar{y}_c}} = \frac{5{,}486}{0{,}640} = 8{,}57$

→ Szignifikánsan eltér a becsült és a mért érték, **nem megfelelő a lineáris modell**

Lineáris és másodfokú modell

- Lineáris modell 2 faktorral (emlékeztető):

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2$$

- Másodfokú modell 2 faktorral:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 +$$
$$+\beta_{112} x_1^2 x_2 + \beta_{122} x_1 x_2^2 + \beta_{1122} x_1^2 x_2^2$$

→ négyzetes hatások, illetve azok kölcsönhatása lineáris és négyzetes tagokkal is megjelenik a modellben

Másodfokú kísérleti tervek I.

- A kétszintes terveket (2^p) ki kell egészíteni további mérési pontokkal, hogy a másodfokú modell paraméterei becsülhetőek legyenek
- Az egyik típusú kiegészített terv a háromszintes terv (3^p) mellyel a másodfokú modell minden paramétere kiértékelhető

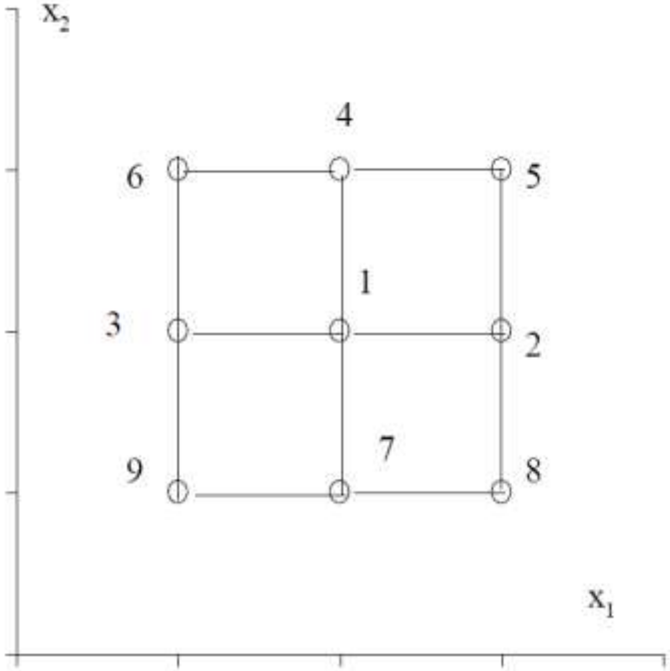
  → mennyiségi faktorok esetén az eddigi kiértékelési módszer alkalmazható, minőségi fakorok esetén viszont már nem (mivel a középső szint nem értelmezhető úgy, mint a 2 szélső szint felezőpontja)

  → minőségi faktor esetén ANOVA vizsgálat lehetséges

3^2 kísérleti terv

2 faktort vizsgálunk 3 szinten

#	x_1	x_2	…
1	**0**	**0**	**…**
2	+	**0**	**…**
3	-	**0**	**…**
4	**0**	+	**…**
5	+	+	**…**
6	-	+	**…**
7	**0**	-	**…**
8	+	-	**…**
9	-	-	**…**



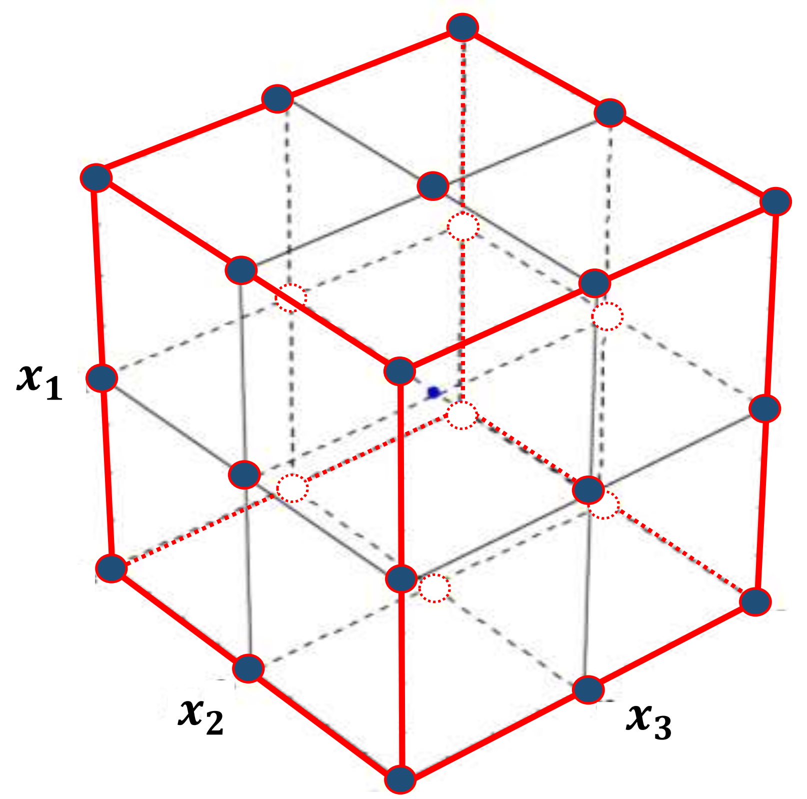
Kiértékelhető modell:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{112} x_1^2 x_2 + \beta_{122} x_1 x_2^2 + \beta_{1122} x_1^2 x_2^2$$

3^3 kísérleti terv

3 faktor 3 szinten vizsgálva

A kiértékelhető modellben szerepelnek a lineáris modell tagjai (L,LL,LLL), továbbá a főhatások négyzetes tagjai (Q), a négyzetes tagok lineáris kombinációjával kialakítható kettes és hármas kölcsönhatások (QQ, QQQ), illetve a főhatások lineáris és négyzetes tagjaival kialakítható kettes és hármas kölcsönhatások (QL, QLL, QQL) (sparsity)



Probléma a 3^p tervekkel

- A faktorok számának növekedésével rohamosan nő a tervhez szükséges kísérletek száma

Faktorok száma	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**
Kísérletek száma	**9**	**27**	**81**	**243**	**729**
Kiértékelhető paraméterek száma	**6**	**10**	**15**	**21**	**28**

- A kiértékelhető paraméterek száma alig növekszik (megjegyzés: csak a főhatások lineáris tagját, azok maximum kétfaktoros kcsh-át, illetve a főhatások négyzetes tagjait vesszük figyelembe)
- Konklúzió: nem hatékony a terv típus ha “sok” a faktor

Másodfokú kísérleti tervek II.

- A 2^p tervet úgy is kiegészíthetjük annak érdekében, hogy másodfokú modellt illesszünk, hogy kompozíciós tervet kapunk
- A **kompozíciós tervek** segítségével csökkenthetjük a mérések számát a 3^p tervhez képest, miközben továbbra is ki tudjuk értékelni a lényeges paramétereket
- A terv alapja egy 2^p terv (p>4 esetén 2^{p-r} részfaktorterv)

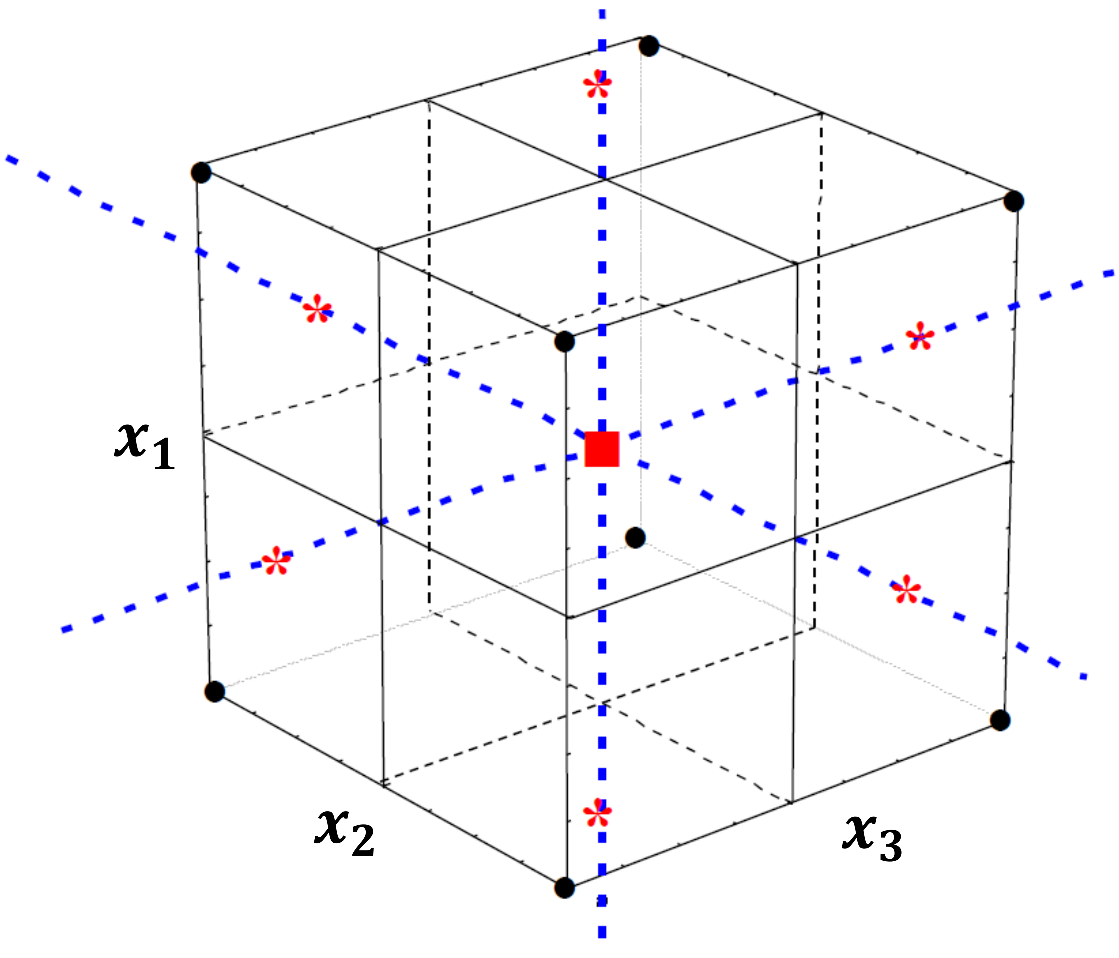
→ + k_c centrumponti kísérletet végzünk el

→ + 2p csillagpontot végzünk el a centrumtól α távolságra

Kísérletek száma a kompozicíós tervben:

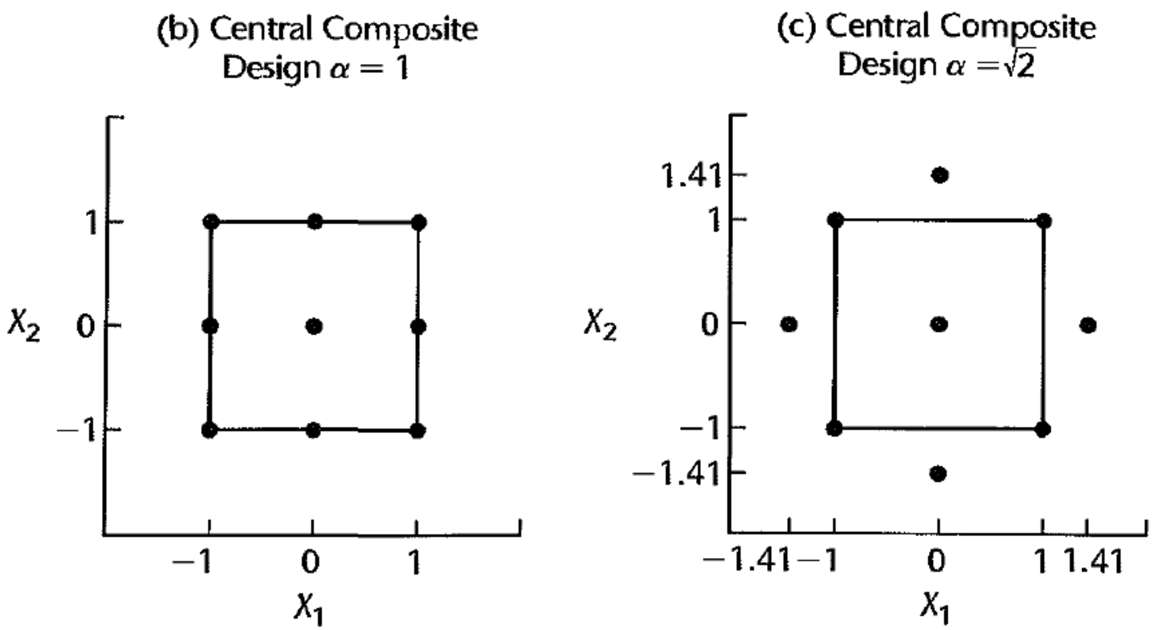
$$N = 2^p + k_c + 2p$$

3 faktoros kompozíciós terv



● 2^3 kétszintes terv
■ centrumpont
* csillagpontok
α távolságra

2 faktoros kompozíciós terv

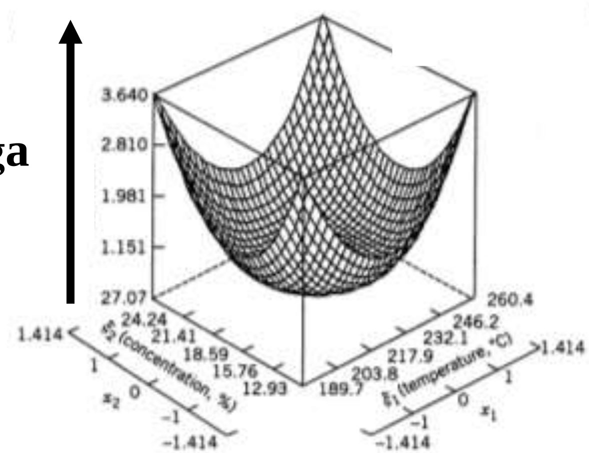


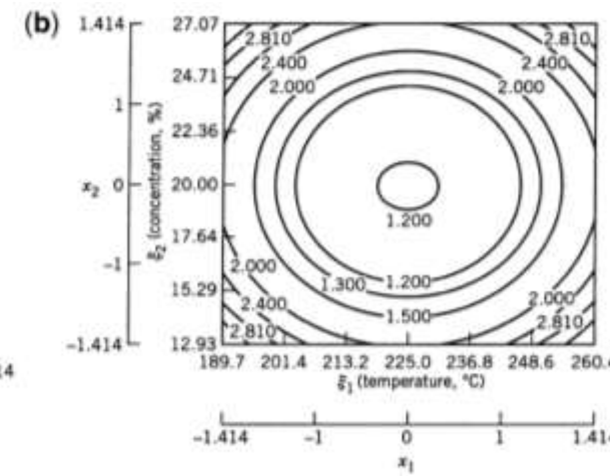
- α értékének megfelelő megválasztása speciális tulajdonságokkal ruházza fel a tervet
- Ha $\alpha = 1$, ez a már ismert 3^2 terv, aminek a speciális tulajdonsága az **ortogonalitás**

α értékének megválasztása

- α értékét matematikailag úgy határozzuk meg **első sorban**, hogy forgatható tervet kapjunk
- **Forgatathatóság:** ha egy terv forgatható, az azt jelenti, hogy a becsült függvény bizonytalansága megegyezik minden olyan pontban, ami egyenlő távolságra van a centrumtól; 2 faktor esetén:

$\hat{Y}$ bizonytalansága





Forgatható tervek

Faktorok száma	2	3	4	5
Alapterv	2^2	2^3	2^4	2^{5-1}
Centrumponti mérések száma	1	1	1	1
α	1.4142	1.6818	2.0000	2.0000

- A 2 faktoros kompozíciós terv, $\alpha = 1.4142$ ($k_c = 1$) esetén **forgatható** de **nem ortogonális**
- A 3^2 terv terv (ami egy 2 faktoros kompoziciós, $\alpha = 1$ tervnek felelne meg) ugyan **ortogonális**, de **nem forgatható**

Forgatható tervek

- DE: a centrumponti mérések számának növelésével ortogonálissá tehetjük a forgatható (de $k_c = 1$ esetén nem ortgonális) tervet

Faktorok száma	**2**	**3**	**4**
Alapterv	2^2	2^3	2^4
Centrumponti mérések száma	8	9	12
α	1.4142	1.6818	2.0000

- VISZONT ez nagyon sok plusz mérés, nem biztos, hogy megéri az ortogonalitást

Ortogonális kompozíciós tervek (nem forgathatóak)

- A teljesség kedvéért a következő táblázat az ortogonális kompozíciós terveket tartalmazza, amelyek nem forgathatóak

Faktorok száma	**2**	**3**	**4**	**5**
Alapterv	2^2	2^3	2^4	2^{5-1}
Centrumponti mérések száma	1	1	1	1
α	1	1.215	1.414	1.547

Miért baj, ha nem forgatható?

- A kompoziciós tervek optimum keresési folyamatok eszközei
- Célunk, hogy az optimum irányát (vagy helyét) megtaláljuk
- Ha egy terv nem forgatható, a becsült függvény bizonytalansága a centrumtól vett irányok függvénye is, ami azért probléma, mert éppen a becsült modellből keressük a statisztikailag legvalószínűbb irányt az optimum felé
- Ha a modellből becsült várható érték és a becslés bizonytalansága már eleve irány függő, az optimum becsült iránya (és helye) torzulhat

Összefoglaló

- Másodfokú modellek nem illeszthetőek 2^p tervvel készült kísérletsorozat eredményeivel
- Erre a 3^p tervek már alkalmasak, azonban ezek nagyon sok plusz mérést igényelnek a faktorok számának növekedésével
- A mérések számának csökkentésére kompozíciós terveket alkalmazhatunk
- A kompozíciós tervet első sorban forgathatónak választjuk (α megfelelő megválasztásával), de megfelelő számú centrumponti mérés hozzáadásával ortogonálissá is tehetőek