Segédlet a kísérlettervezés önálló feladat megoldásához

Ennek az ismertetőnek a célja elsősorban az, hogy segítséget nyújtson a hallgatóknak a kísérlettervezési önálló feladat helyes megoldásában. A feladat megoldásához párhuzamosan kell használni a STATISTICA programot, illetve a kifejezetten ehhez a feladathoz készített Kísérletek szimulációja programot. A dokumentum része ennek a programnak a telepítési és használati útmutatója is.

Az alapszituáció

A feladatban az úgynevezett optimalizáló kísérlettervezés műveletét hajtjuk végre. A gyakorlatban erre akkor van szükség, ha van valamilyen folyamatunk, ami működik, és használjuk, és ezt szeretnénk valamilyen szempontból feljavítani. Ehhez választunk valami célfüggvényt (kitermelés, tisztaság, profit, stb.) és ennek valamilyen szélsőértékét keressük (nyilván a célfüggvény természete mondja meg, hogy minimumot vagy maximumot ésszerű keresni). Ehhez gondosan megválasztott technológiai paramétereket megfelelően változtatunk, ezeket hívjuk faktoroknak. Közben természetesen fontos, hogy a folyamatunk működőképes maradjon, tehát minden faktorra megszabunk egy tartományt, amin belül, ha a faktorokat változtatjuk, akkor nagy biztonsággal a folyamatunk működőképes marad.
Mivel most nincs ilyen folyamatunk, így ehelyett a folyamatot csak szimuláljuk számítógépes szoftver segítségével. Itt nem kell foglalkoznunk a faktorok és a célfüggvény megválasztásával, minden programban 3-7 faktor van, illetve a program kísérletenként a célfüggvény értékét adja meg. Azonban a gyakorlati probléma több „játékszabálya” érvényben marad. Tehát nem az a cél, hogy minél pontosabban megismerjük a folyamat mögött rejlő függvényt, hanem a szélsőérték-keresés. Továbbá a gyakorlatban a kísérletek pénz- és időigényesek, tehát cél az, hogy ne pocsékoljuk a kísérleteket. (Ez egy központi eleme a feladatnak, így ezt még bővebben kifejtjük.) Természetesen a gyakorlatban minden mérést terhelnek mérési hibák, illetve a legstabilabb folyamatnak is van természetes ingadozása, így a szimulációs program is ad véletlen ingadozást az eredményekben.

Formai követelmények

A feladat megoldását egy írásos dokumentáció formájában szeretnénk megkapni. (Tehát nem jó, ha valaki csak a STATISTICA táblázatokat, workbookokat küldi el.) Ennek tartalmaznia kell az elvégzett „kísérletek” eredményeit, illetve a belőlük levont tapasztalatokat. Lényeges rész a szöveges magyarázat, elemzés is, ezt ne hanyagoljuk el!
Viszont sokan abba hibába esnek, hogy leiratot szeretnének készíteni a szimulációs program, és/vagy a STATISTICA megfelelő analíziseihez. Ezekre nincs szükség, mert az utóbbihoz ott van a rendelkezésre álló könyv, az előbbihez meg ez.
Ne adjunk a fájlnak hosszú, komplikált nevet! A beküldött fájlokat hallgatónként és feladatonként külön-külön mappákban tároljuk, tehát a fájlnév legfontosabb feladata az, hogy a megoldások különböző verzióit megkülönböztethesse a javító egymástól (ez jellemzően a 30-40 karakteres fájlnevek utolsó karaktereiből szokott látszani). Ez persze nem azt jelenti, hogy ne írjuk bele a nevünket a fájl nevébe. Amikor a javaslatok alapján javított változatot készítünk, akkor célszerű megőrizni az eredeti változatot is, és a javított változatot más néven elmenteni, és elküldeni. A javítások készítésére több, különféle technikát követhetünk. Amennyiben rájövünk, hogy a feladat egy részét teljesen másképpen kellene megoldani, akkor természetesen nincs sok választásunk, akkor ezt teljesen át kell írnunk. Nem célszerű olyan elemeket meghagyni a dolgozatban, amikről tudjuk, hogy helytelenek. (Nem összekeverendő ez azzal, hogy meghagyjuk a teljes korábbi változatot egy külön fájlban.)

Azonban ha csak kis változtatásokat, kiegészítéseket végzünk, akkor több lehetőségünk is van. Az egyik, hogy a teljes dolgozatot újra elküldjük, és a megfelelő helyen kiegészítéseket teszünk. Ilyenkor tanácsos ezeket más színnel vagy háttérkitöltéssel jelölni, főleg, ha mondjuk egy 10-15 oldalas megoldásban mondjuk összesen 2-3 mondatot változtattunk. Ez utóbbi azonban ennél a feladattípusnál ritkán fordul elő.

Javaslom mindenkinek, hogy a megoldását .pdf kiterjesztésű dokumentumban küldje el. Ugyanis a Word programok sokféle változata miatt előfordul, hogy a javító számára teljesen más formában jelenik meg a megoldás. Ez jobb esetben csak esztétikai problémát okoz, rosszabb esetben a megoldásból fontos információk tűnhetnek el. (Igen, ez utóbbi is előfordult már.) A .pdf-ek viszont minden környezetben ugyanúgy jelennek meg (továbbá jellemzően kisebb méretűek is, de ez manapság már kevésbé probléma).

Hogy (és hogy ne) használjuk a STATISTICA-könyvet?

Korábban említettem már a STATISTICA kezeléséhez írt könyvet, ami sokat segíthet a feladat megoldásában, de nem megfelelő alkalmazás esetén nagyon könnyen félrevezethet minket, és komoly bosszúságokat okozhat a javítónak. A könyv kifejezetten arról szól, hogy bemutatja a szoftver egyes funkcióit különböző példákon keresztül, tehát inkább törekedik arra, hogy az összes elérhető funkciót bemutassa, mint hogy egy logikai íven keresztül bemutassa egy feladat megoldásának menetét. Ráadásul a szoftver használatához nem elengedhetetlen elemekre kis mértékben vagy egyáltalán nem tér ki.
Ez az előbbi kitétel a kísérlettervezési feladat esetén még hangsúlyosabban kezelendő. Ugyanis a könyvben nincs szó az optimalizáló kísérlettervezésről! A feladatnak csak egy része a faktoros kísérletek megtervezése, és kiértékelése, vannak olyan feladatelemek, amik nem szerepelnek a könyvben egyáltalán (gradiens-terv elkészítése, és kiértékelése), ugyanis ezek közvetlenül nincsenek benne a STATISTICAban.
Tehát a megoldás során

- NE próbáljunk szövegrészeket, táblázatokat egy az egyben a könyvből kimásolni (akkor sem, ha az adatokat átírjuk a sajátunkra),
- NE illesszünk be táblázatot/elemzést csak azért, mert a könyvben van olyan,
- NE változtassunk meg beállításokat a programban csak azért, hogy a könyvben szereplő elemzéseket el tudjuk végezni!
- NE rakjunk a megoldásba olyan táblázatot vagy ábrát, amiről nem vonunk le következtetést! (Az nem következtetés, hogy kimásoljuk a könyvből azt, hogy mit látunk az ábrán.)
- NE másoljuk a megoldásba ennek az írásnak semmilyen részét!

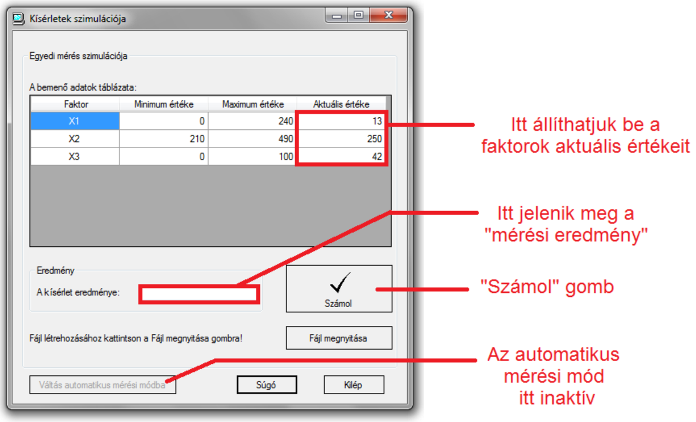
A szükséges programok telepítése

Kezdjük az egyszerűbb végén a dolgot! A STATISTICA-t lemezről kell telepíteni, kövessük a telepítési útmutatót, ezzel nem szokott gond lenni. Megjegyzendő, hogy csak Windows operációs rendszer alatt telepíthető. Linux és OS X alatt is lehet elvileg futtatni Windows virtuális gép segítségével. A könnyebbség kedvéért a másik program is csak Windows alatt működik. A szimulációs program működéséhez a .NET framework 4-es verziója szükséges. Jelenlegi állapotában a STATISTICA telepítője ezt nem telepíti, így ha nincs ez fönt a számítógépünkön, akkor le kell töltenünk, és telepítenünk kell. A NET framework az alábbi linken érhető el: http://www.microsoft.com/hu-hu/download/details.aspx?id=17851
Ha ezt telepítettük, akkor készítsünk a merevlemezen bárhol egy alkalmas mappát, és ebbe másoljuk a „DLLek.zip” fájlban található 2 db dll-t, illetve az a programot, amit a kapott feladunk ír. (Ezek neve kiserlet és valamilyen szám, pl.:kiserlet2.exe, és külön-külön zip

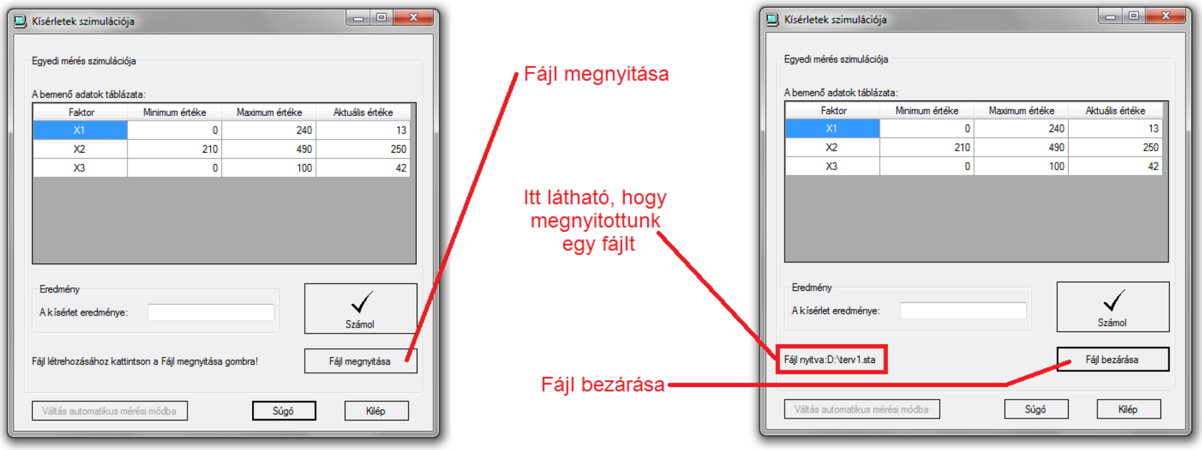
fájlban vannak a honlapon.). Fontos, hogy a dll-ek és az exe ugyanabban a mappában legyenek.
Ha ezzel megvagyunk, akkor már bele is kezdhetünk a feladat megoldásába.

A program használatáról röviden

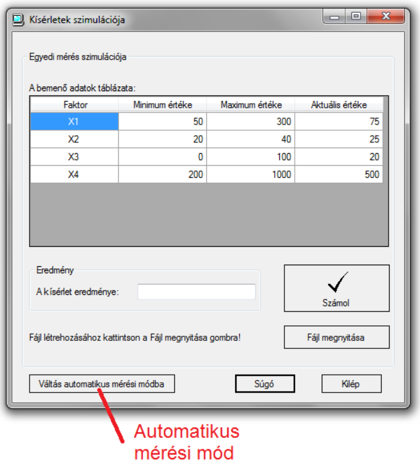
Az egész program működése eléggé magától értetődő, és még help menü is van, szóval nehezen akadhatunk el, de itt röviden összegzem a funkciókat.
A program ablakában középen látható egy táblázat a faktorokkal (x1-től egyesével számozva). A faktorokhoz tartozik egy minimum és maximum érték. Ezek a fizikai korlátok, ezek között bármekkora értékre beállíthatjuk a faktort (pontosabban van egy beállítási pontosság is, nem írhatunk be akármennyi tizedesjegyet, ez is a realitás érzékeltetése végett). A feladat szövegében is szerepel, hogy a tervet „jóval a faktorok értelmezési tartományán belül" kellene létrehozni, de itt még egyszer rá kell erősítenem: Ezek a minimum és maximum értékek nem azok, amit a tervben a faktorok alacsony, és magas értékének kell beállítani!



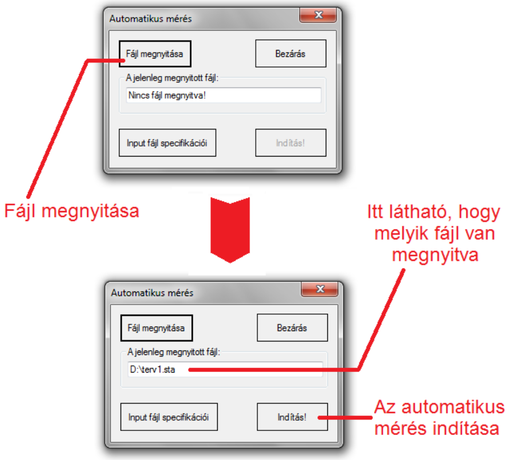
A faktor értékét a 4. oszlopban lehet beállítani. Ha csak odakattintunk, és elkezdünk írni, akkor felülírjuk a mezőben található számot. Ha entert nyomunk, vagy félrekattintunk, rögzítjük az értéket (adott esetben ilyenkor a program kiírja, hogy rossz értéket írtunk be, és visszaírja az előző értéket). Ha a mezőre duplán kattintunk, akkor szövegkurzort kapunk, és így módosíthatjuk a beírt számot. Rögzíteni természetesen ugyanúgy enter nyomásával, vagy félrekattintással lehet.
Ha beállítottuk az összes faktort arra a szintre, amit szeretnénk, akkor a „Számol" gombra kell kattintanunk. Ekkor a középső mezőben megjelenik a „mérési eredmény", amit ki kell másolnunk, mert ha újra a „Számol" gombra kattintunk, akkor az előző eredmény elvész.
Mivel ez végtelenül körülményes így, ezért a programban lehetőség van arra, hogy a mérési eredményeinket automatikusan tároljuk egy STATISTICA spreadsheet-ben. Ehhez kattintsunk a „Fájl megnyitása" gombra! Ilyenkor egy megnyitási ablak jelenik meg. Itt megadhatunk olyan fájlt is, ami még nem létezik, ezzel létrehozva azt. Ha viszont olyan fájlt választunk, ami már létezik, akkor a program megkérdezi tőlünk, hogy törölje-e ki annak a tartalmát, vagy folytassa-e azt. Nyilván nem célszerű olyan fájlt választanunk, amiben más célra tartunk adatokat, viszont ha például a megoldás korábbi lépéseiből származó eredmények vannak ott, akkor logikus lehet folytatni (Igen, a megoldás során ezt a programot több lépésben kell használni.).



Ha megnyitottunk fájlt, akkor a program ezt jelzi az ablakban, és a Számol gomb nyomkodása során megjelenő értékek ebben a fájlban kerülnek elmentésre. Ezután a „Fájl bezárása" gombra kattintva (ez igazából ugyanaz a gomb, amikor megnyitunk/bezárunk egy fájlt, egymásba alakulnak) mentjük el a fájl változtatásait.
Itt lenne egy-két megjegyzendő dolog: Nem lehet fájlt megnyitni a programban addig, amíg az meg van nyitva a STATISTICA-ban. Erre hibaüzenet is felhívja a figyelmünket. Amennyiben viszont a fájlt nem zárjuk be a kiserlet programban, akkor megpróbálhatjuk megnyitni a STATISTICA-ban. Viszont mivel a változtatások csak a bezárás után rögzülnek a fájlban, egy üres fájlt fogunk látni. Ekkor fontos, hogy előbb (!) a STATISTICA-ban zárjuk be a fájlt és csak ezután (!) kattintsunk a „Fájl bezárása" gombra! Ellenkező esetben a program összeomolhat, ráadásul azzal a kellemetlen mellékhatással, hogy az eredmények is elvesznek.
Egyes feladatokban elérhető az automatikus mérési mód. Ezt onnan vesszük észre, hogy az egyébként feltűnően nagy gomb a főablakban nem szürke. Ha szürke, akkor nem elérhető ez a mód, ezért nem kell reklamálni, és nem kell próbálkozni, hátha aktivizálódni fog, mert nem fog.



Az automatikus mérés lehetővé teszi, hogy egy teljes kísérletsorozatot beolvasson a program, és mindegyik kiírt kísérletet elvégezze, és az eredményeket rögzítse. A kísérleteket természetesen .sta STATISTICA spreadsheet-ben kell megadni a számára. Ezt úgy kell megalkotnunk, hogy az első oszlopban kell szerepelnie az X1 értékeknek, a másodikban az X2-knek, és így tovább, egy kísérlethez egy sor tarozik. A program ebbe a fájlba fogja beleírni a mérési eredményeket. Új oszlopot hoz létre az X-ek után (ennek EREDMENY lesz a neve), és ebbe kerülnek a mérési eredmények. A fájlt automatikusan bezárja, menti. Ha esetleg szerepelne olyan sor a fájlban, amivel nem tudott mit kezdeni (nem szám van ott, vagy a megadott szám kívül esik a megadott minimum-maximum intervallumon), akkor abban a sorban nem kapunk értéket, illetve egy hibaüzenet is figyelmeztet minket.



Hogy is kell ezt a feladatot akkor megoldani?

A megoldás a következő lépések ismételgetéséből áll. Először megtervezzük a kísérletet a STATISTICA segítségével. Ezután „elvégezzük a kísérleteket” a kiserlet program segítségével. Az eredményeket a STATISTICA segítségével értékeljük ki. A tapasztalatok alapján újabb kísérletet kell terveznünk, amiket el kell végezni, kiértékelni, és így tovább, mindaddig, amíg el nem érjük a keresett szélsőértéket.
A megoldásban komoly szerepet kap a kreativitásunk, nincs konkrétan 1 jó megoldás. A lényeg leginkább az, hogy jól tudjuk megindokolni azt, hogy miért olyan lépést tettünk, amilyent. (És persze, hogy ne kövessünk el elvi hibát közben.)
És akkor jöjjön most az, amit nem lehet eléggé hangsúlyozni: Ha nagyon sok kísérletet végzünk, akkor találgatással is célt érhetünk el. Mivel a program egy gombját nyomogatni nem komoly munka (automatikus mérési módban még azt sem kell), így könnyen abba a hibába eshetünk, hogy sok „kísérletet végzünk”. A gyakorlat célja annak a szituációnak az előállítása, mint ha a laborban, félüzemben vagy üzemben kísérleteznénk, fáradságos munkával. Tehát a megoldás során mindig elsődlegesen azt a szempontot tartsuk a szemünk előtt, hogy a lehető legkevesebb kísérletet végezzük el. Ami nem azt jelenti, hogy ne végezzünk el olyan kísérleteket, amire szükségünk van, hanem azt, hogy próbáljunk a legjobb tudásunk szerint eljárni, és a kísérletekben lévő információt a lehető leghatékonyabban használjuk fel.
Ehhez tartozik az a rendkívüli módon nem követendő eljárás, hogy elvégzünk nagyon sok kísérletet (találgatunk, mivel csak nyomkodni kell), majd ezekből vonunk le valami következtetést, de úgy hogy közben azt nem írjuk le, hogy hány kísérletet végeztünk el. Mindezt társítjuk valami ködösítő szöveggel (például: keresek egy olyan tartományt, ahol adekvát a lineáris modell). Szóval ilyet semmiképpen sem szabad tenni.
Ennek a jelenségnek a kivédésére (hogy magunkat se verjük át) a legjobb megoldás az, ha ténylegesen tételesen leírjuk az összes elvégzett „kísérlet” eredményét. Így talán könnyebben szembesülünk azzal, ha rengeteg (felesleges) kísérletet végeztünk.
Igencsak magától értetődő, de a megoldásban nem elfogadható olyan indoklás, hogy „Azért végeztem el ilyen sok kísérletet, mert csak egy gombot kellett nyomkodni.”. (Igen, ilyen indoklással indokolatlanul sokszor élnek a hallgatók.)

Oké, oké értem már, hogy nem szabad sok kísérletet végezni, de mégis milyen eszközök vannak a kezemben?

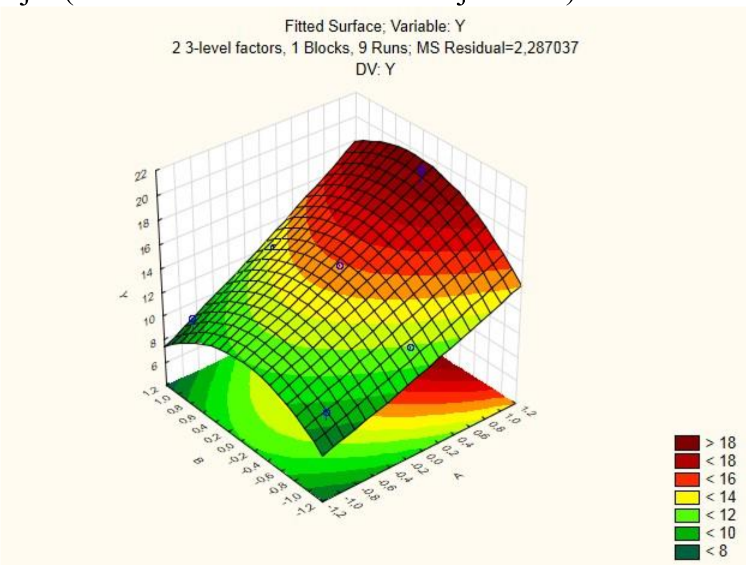
Első lépésben 2 szintes tervvel érdemes kezdeni. Ez a faktorok számától függően teljes faktoros terv vagy részfaktorterv lehet. Amennyiben az eredmény varianciáját is vizsgálni szeretnénk, akkor ismétléseket kell végezni. Centrumponti méréssel ellenőrizhetjük a lineáris modell adekvátságát. A cél az, hogy meghatározzuk a hatásos faktorokat (itt nagyon nem véletlenül nem írtam szignifikáns faktorokat), hogy a nem hatásos faktorokat elhagyhassuk a modellből.
Amennyiben a lineáris modell nem adekvát, másodfokú modelleket kell használnunk. Ez lehet 3 szintes teljes, vagy kompozíciós terv. Másodfokú tervnél meg kell jegyezni azt, hogy a másodfokú tag hatását/együtthatóját nem a „józan paraszti ész” szabályai szerint kell értelmezni. Ugyanis úgy jelöljük ezt, hogy pl: $b_{11} \cdot x_1^2$, így bárki jogosan gondolná azt, hogy a STATISTICA-ból kapott *b* értékkel kell megszorozni az *x* értékét. DE nem így van. Ugyanis a másodfokú hatást úgy kell számolni, hogy a szélső értékek átlagát kivonjuk a középső értékből, és a *b* ennek a fele. Ez onnan válik nyilvánvalóvá, hogy rossz az előjel. (Meg persze ha valaki elolvassa a STATISTICA helpjét, de leginkább nem szokták ezt észrevenni.)

Effect Estimates; Var.:Y; R-sqr=,9287; Adj:,80985 (3**(2-0) full factorial design, 1 block , 9 runs (Spreadsheet1) in Workbook1)
2 3-level factors, 1 Blocks, 9 Runs; MS Residual=2,287037
DV: Y

Factor	Effect	Std.Err.	t(3)	p	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt	Coeff.	Std.Err. Coeff.	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt
Mean/Interc.	13,44444	0,504098	26,67028	0,000116	11,84018	15,04871	13,44444	0,504098	11,84018	15,04871
(1)A (L)	7,00000	1,234784	5,66901	0,010872	3,07037	10,92963	3,50000	0,617392	1,53518	5,46482
A (Q)	-0,16667	1,069354	-0,15586	0,886042	-3,56983	3,23650	-0,08333	0,534677	-1,78491	1,61825
(2)B (L)	1,33333	1,234784	1,07981	0,359299	-2,59630	5,26297	0,66667	0,617392	-1,29815	2,63148
B (Q)	2,33333	1,069354	2,18200	0,117129	-1,06983	5,73650	$\boxed{1,16667}$	0,534677	-0,53491	2,86825
1L by 2L	1,50000	1,512295	0,99187	0,394378	-3,31280	6,31280	0,75000	0,756148	-1,65640	3,15640

B faktor négyzetes hatásának együtthatója pozitív

Ugyanis, ha a parabola lefelé nyitott, akkor az x^2 együtthatójának negatívnak kell lennie. De ilyenkor ez pont pozitív lesz, ugyanis a nagyobb középső értékből vonjuk ki a két kisebb szélső érték átlagát. Erre azért nem árt odafigyelni. Az egészben a legérdekesebb, hogy ezzel a problémával relatíve kevesen kerülnek szembe, ugyanis valami egészen más lépést tesznek, ami más miatt nem jó. (Bővebben a Jellemző hibák fejezetben)



A fenti ábrán nyilvánvalóan látszik, hogy a függvénynek a B faktor szerint maximuma van, azaz a négyzetes tag együtthatójának negatívnak kell lennie. (A fenti táblázat természetesen ugyanerről a modellről szól.)

Itt a helyes eljárás az, ha már döntöttünk az illesztendő modellről (a tagok szignifikanciájának vizsgálata után), a nem transzformált modell együtthatóit kérjük a programtól (egyéb helyzetekben meg ettől intenék óva mindenkit), ugyanis az már jó. Csak arról ne feledkezzünk meg, hogy itt nem ortogonálisak a kapott együtthatók, ennek minden következményével (nem alkalmas a tagok szignifikanciájának vizsgálatára, ha elhagyunk belőle sorokat, a megmaradó együtthatók megváltoznak). Használjuk a Model fület a STATISTICA programban, hogy a megfelelő redukált modell paramétereit kapjuk meg!

Regr. Coefficients; Var.:Y; R-sqr=,9287; Adj:,80985 (3**(2-0) full factorial design, 1 block , 9 runs (Spreadsheet1) in Workbook1.stw)
2 3-level factors, 1 Blocks, 9 Runs; MS Residual=2,287037
DV: Y

Factor	Regressn Coeff.	Std.Err.	t(3)	p	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt
Mean/Interc.	14,88889	1,127198	13,20876	0,000938	11,30164	18,47614
(1)A (L)	3,50000	0,617392	5,66901	0,010872	1,53518	5,46482
A (Q)	0,16667	1,069354	0,15586	0,886042	-3,23650	3,56983
(2)B (L)	0,66667	0,617392	1,07981	0,359299	-1,29815	2,63148
B (Q)	-2,33333	1,069354	-2,18200	0,117129	-5,73650	1,06983
1L by 2L	0,75000	0,756148	0,99187	0,394378	-1,65640	3,15640

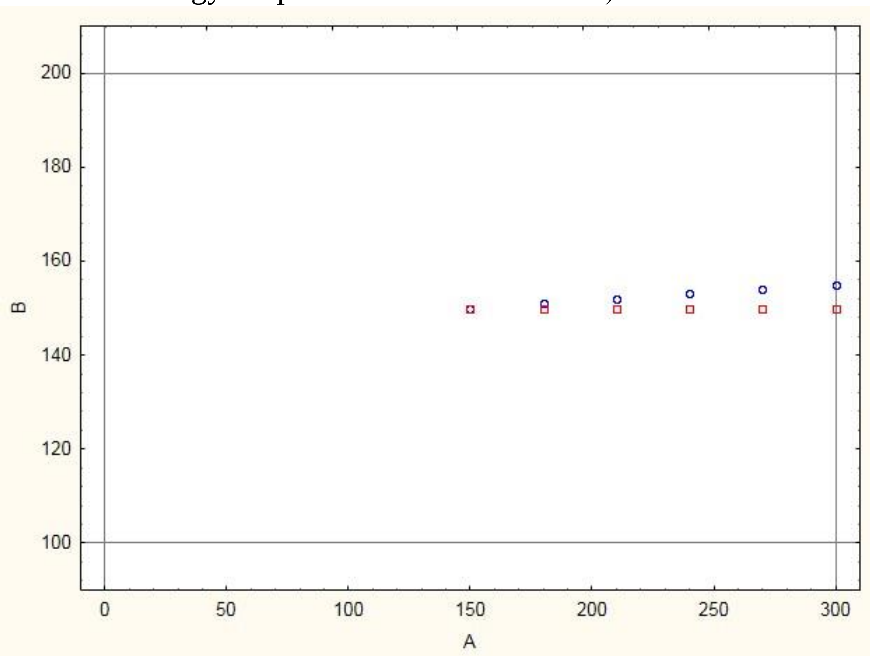
B faktor négyzetes hatásának együtthatója (helyesen) negatív

A másodfokú modellnek az az előnye van a lineárissal szemben, hogy lehet szélsőértéke. Így ezt nem árt megnézni. De mindenképpen vegyük figyelembe, hogy az illesztett modell megbízhatósága az illesztési tartományon kívül nem túl jó, továbbá könnyen lehet, hogy a modell szélsőértékének helye kívül esik a megadott fizikai korlátokon.
A másik eszköz, ami a kezünkben van, a gradiens-terv, más néven gradiens menti lépkedés. Itt néhányan nagyon meg fognak lepődni, de ez nincs benne a STATISTICA-ban. Ez persze nem akaszt meg minket, használjunk Excelt, vagy papírt és tollat. Itt ugye jól jön, hogy az egyes cellákba különböző képleteket tudunk írni (amit a STATISTICA-ban nem lehet, mert ott az egész oszlopnak adhatunk csak meg képletet), ezért jobb Excellel dolgozni.
Itt el lehet rontani dolgokat. A lépésköz megválasztásánál az „arany középút” elve az irányadó. Ha túl kicsit választunk, akkor nagyon sok kísérlet kell („De hiszen csak nyomkodni kell!”). Ha túl nagyot választunk, akkor meg lényegében nem tudunk lépkedni, mert túl hamar, túl kevés lépésből (ad abszurdum már a legelső lépés után) elérjük a fizikai korlátokat. Ilyenkor elképzelhető, hogy épp a számunkra érdekes részt lépjük át, ahol a keresett szélsőérték lenne. És gyakori hiba az is, ha valaki elrontja a gradiens irányát, így javaslom, hogy a gradiens számítását jól gondoljuk át, és figyelmesen végezzük. Segítségként használhatjuk az előadás anyagát, amiben részletesen le van írva, hogy hogyan kell ezt helyesen megoldani.
És ezzel lényegében az eszköztárunk végére értünk. Hozzátenném, hogy szokás szerint egy-egy megfelelően kiválasztott grafikus ábrázolás csodákra képes, ezek használatát mindenképp ajánlom.

Hogy is volt ez a szignifikáns hatásokkal?

Itt gyorsan gondoljuk át, hogy mit is jelent az, hogy szignifikáns! Ehhez kell egy statisztikai próba, aminek a próbastatisztikájában a hatást hasonlítjuk a szóráshoz, és ez alapján szignifikánsnak vagy nem szignifikánsnak találjuk az adott hatást. Ugye a nullhipotézist itt úgy tudjuk egyszerűen (nem matematikai igényességgel) megfogalmazni, hogy „Elhisszük-e a hatásról, hogy 0?”.
Itt több probléma is fellép. Először is, ha a faktor nem szignifikáns, akkor az azt jelenti, hogy „nem tudjuk elutasítani, hogy nincs hatása”. Ilyenkor elkövethetünk másodfajú hibát. Ennek a valószínűsége a nevező szabadsági fokától függ, ami itt eléggé kicsi szokott lenni (célszerűen a kevés ismétlés miatt a centrumponti ismétlésekből számoljuk a szórást, és 1-2 szabadsági fokunk lesz). Azaz igazából a próba eredménye alapján nem sokat tudunk mondani, mert amit nem találunk szignifikánsnak, az is könnyen lehet hatásos.

De ha ez nem lenne elég, akkor is akadhatnak gondjaink, ha a faktort szignifikánsnak találjuk. Nézzünk egy ilyen példát! Tételezzük fel, hogy találunk két szignifikáns hatást, melyek nagysága például 2 és 60! Jusson eszünkbe az, hogy nem az a feladatunk, hogy a válaszfüggvény paramétereit minél pontosabban meghatározzuk, hanem a szélsőértéket keressük. Ilyenkor a 60 mellett a 2 egyszerűen „nem számít". Ugyanis ilyenkor a gradiens iránya csak nagyon kis mértékben fog eltérni attól, mint ha csak a 60-as hatású faktort változtatnánk. Viszont cserébe a gradiens irányának számításában ilyenkor is ugyanazok a hibalehetőségek benne vannak, mint általában, tehát lényegében mindenféle pozitív hozadék nélkül plusz hibalehetőségeket vittünk az elemzésünkbe. Mindezt a következőkben ábrával is illusztrálom. Az alábbi ábrán ábrázolom a gradiens menti lépéseket úgy, hogy figyelembe vesszük a kisebb hatást (kék pontok), és úgy is ha nem (piros pontok). (Az ábrán nem 60-nal és 2-vel, hanem 30-cal és 1-gyel lépünk a két faktor mentén.)



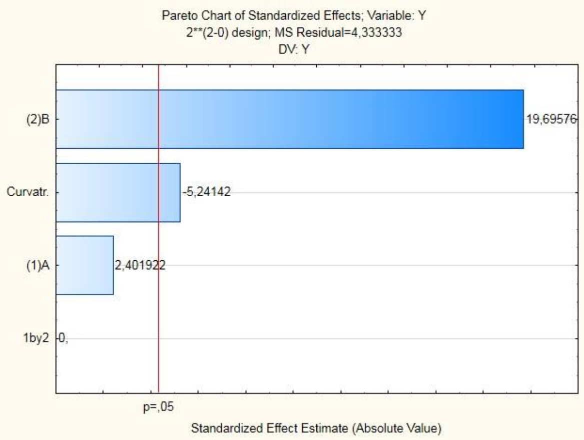
Ráadásul ez az ábra még torzít is amiatt, hogy a B faktor értelmezési tartománya csak 100 egység széles, míg az A faktoré 300 széles. Amennyiben a B faktornak is ugyanilyen széles lenne az értelmezési tartománya, akkor még kevésbé látszana a különbség az irányok között.
Ez után mindkét esetben ugyanúgy folytatjuk a megoldásunkat, meg kell néznünk a B faktor hatását, hiszen elhanyagolható annak a valószínűsége, hogy a kicsi lépésekkel gyorsabban érjük el a fizikai határt, mint a nagyobbakkal. (Azaz mintha az előző ábrán hamarabb értük volna el a B faktorral a fizikai határt – 200-at –, mint az A faktorral.)
Ugyanezt az eszmefuttatást a görbeségellenőrzésnél is végig lehet vinni. A görbeség hatásának nagyságából arra következtethetünk, hogy mekkora a centrumpont eltérése a lineáris modell által becsült értéktől. Ha egy faktor (lineáris – hiszen kétszintes tervből csak ezt számíthatjuk) hatása nagyságrendekkel nagyobb, mint a görbeség hatása, akkor lehet, hogy a hatást a másodfokú modell pontosabban írja le, de ebben is biztosan a lineáris tag lesz a domináns. Azaz a modell szélsőértéke biztosan nem a tervtartományon belül lesz megtalálható, azaz nem megbízható, így tehát mind az egyszerűbb, mind a plusz kísérleteket igénylő másodfokú modellből hasonló (azonos) következtetést vonhatunk le – hogy a faktor lineáris hatásának mentén kell lépni, függően attól, hogy a minimumot, vagy maximumot keressük. Mi tehát ebből a tanulság? Plusz kísérleteket végeztünk („De hiszen csak nyomkodni kell!"), és az ebből származó információkat nem tudtuk semennyiben sem hasznosítani, azaz feleslegesen dolgoztunk.

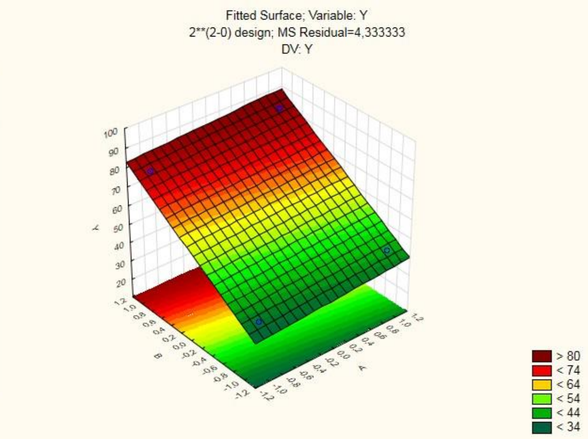
Mi ebből az egészből a következtetés? Az, hogy a statisztikai próbák eredményeinek vizsgálata helyett célszerű a hatások egymáshoz mért relatív nagyságát nézni. Amúgy a Pareto-ábra pontosan ezt mutatja. Ezen pedig meg lehet állapítani a biztosan hatásos – lehet, hogy hatásos – biztosan nem hatásos faktorokat.
Következzen itt egy rövid példa az előző görbeséges esetre! (A maximumot keressük, a számokat csak úgy beírtam.)
Ezeket a hatásokat kapjuk a kétszintes tervre:

Effect Estimates; Var.:Y; R-sqr=,99527; Adj:,98582 (Design: 2**(2-0) design (3**(2-0) full factorial design, 1 block , 9 runs (Spreadsheet1) in Workbook1.stw) in Workbook1
2**(2-0) design; MS Residual=4,333333
DV: Y

Factor	Effect	Std.Err.	t(2)	p	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt	Coeff.	Std.Err. Coeff.	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt
Mean/Interc.	61,000	1,04083	58,6069	0,00029	56,521	65,4783	61,0000	1,04083	56,521	65,4783
Curvatr.	-16,666	3,17979	-5,2414	0,03452	-30,348	-2,9851	-8,3333	1,58989	-15,174	-1,4925
(1)A	5,000	2,08166	2,4019	0,13827	-3,9567	13,9566	2,5000	1,04083	-1,978	6,9783
(2)B	41,000	2,08166	19,6957	0,00256	32,043	49,9566	20,5000	1,04083	16,021	24,9783
1 by 2	0,000	2,08166	0,0000	1,00000	-8,9567	8,9566	0,0000	1,04083	-4,478	4,4783

Nézzük a Pareto-ábrát, illetve illesztett felületet!



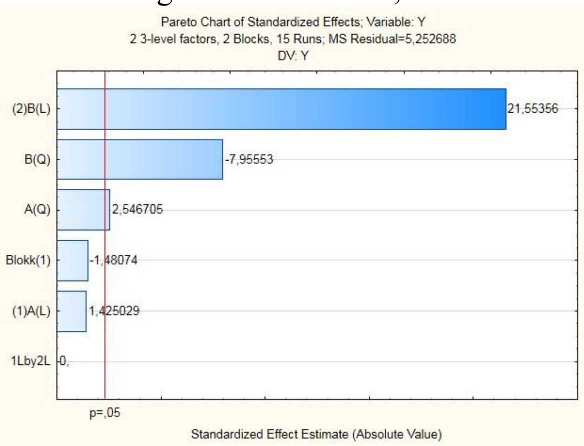


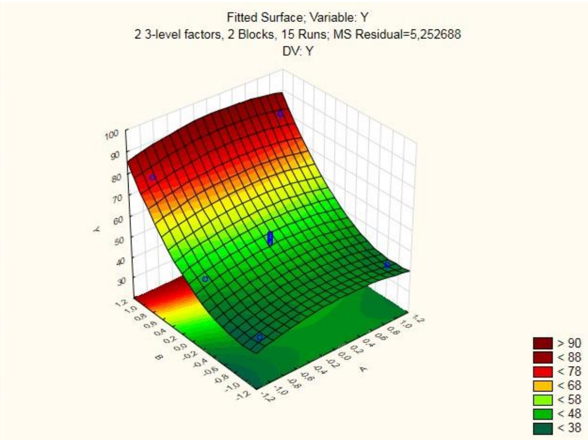
A B faktor lineáris hatása sokkal nagyobb, mint a görbeség hatása, ez alapján a B faktor növelése növeli az Y-t. A görbeség viszont szignifikáns, így elkészítjük a másodfokú tervet is (kiegészítjük a lineáris modellt!).
Az ekkor kapott hatások:

Effect Estimates; Var.:Y; R-sqr=,98549; Adj:,9746 (3**(2-0) full factorial design, 1 block , 9 runs (3**(2-0) full factorial design, 1 block , 9 runs (Spreadsheet1) in Workbook1.stw) in Workboo
2 3-level factors, 2 Blocks, 15 Runs; MS Residual=5,252688
DV: Y

Factor	Effect	Std.Err.	t(8)	p	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt	Coeff.	Std.Err. Coeff.	-95,% Cnf.Limt	+95,% Cnf.Limt
Mean/Interc.	57,188	0,71214	80,3043	0,00000	55,546	58,8303	57,1881	0,71214	55,5459	58,8303
Blokk(1)	-1,903	1,28532	-1,4807	0,17695	-4,867	1,0607	-0,9516	0,64266	-2,4335	0,5303
(1)A (L)	2,666	1,87130	1,4250	0,19197	-1,648	6,9819	1,3333	0,93565	-0,8242	3,4909
A (Q)	3,516	1,38065	2,5467	0,03435	0,332	6,6999	1,7580	0,69032	0,1661	3,3499
(2)B (L)	40,333	1,87130	21,5535	0,00000	36,018	44,6485	20,1666	0,93565	18,0090	22,3242
B (Q)	-10,983	1,38065	-7,9555	0,00004	-14,167	-7,8000	-5,4919	0,69032	-7,0838	-3,9000
1L by 2L	0,000	2,29187	0,0000	1,00000	-5,2851	5,2850	0,0000	1,14593	-2,6425	2,6425

Itt nézzük megint a Pareto-ábrát, és az illesztett felületet!



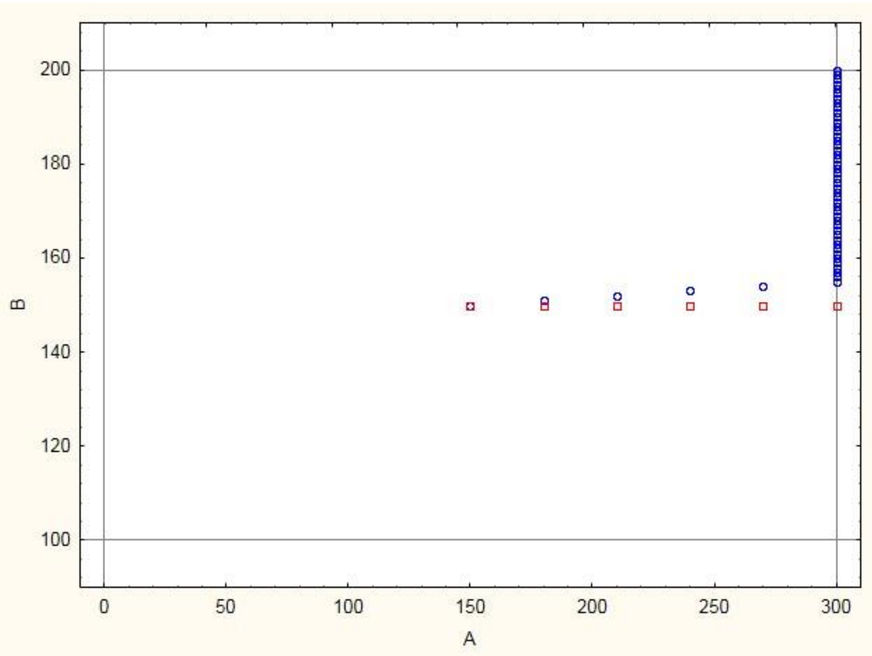


Mit láthatunk itt? Lényegében a B faktor másodfokú hatása továbbra is kicsi a lineáris mellett, az illesztett felület alapján továbbra is a B faktor növelése célszerű, azaz semennyiben sem változott az, ahogy a megoldást folytatnánk, azaz a másodfokú modell illesztéséhez elvégzett kísérletek feleslegesek voltak. Megjegyzendő, hogy a lineáris modellben a görbeség hatása negatív volt, ami azt jelenti, hogy a valós összefüggés középen „lefelé húzódik”, amitől a függvény még meredekebben növekszik, mint ha csak a lineáris tagot vesszük figyelembe.

Jellemző hibák

1. jellemző hiba: Megmarad a gradiens lépésköze

Ez a probléma akkor lép fel, amikor gradiens mentén való lépkedés során elérjük az egyik faktor értelmezési tartományának határát. Amennyiben a lépésközök aránya nagy, akkor a nagyobbik lépésközt nem választhatjuk túl nagynak, mert akkor nem tudunk sokat lépkedni. Ekkor viszont az történhet, hogy a kisebbik nagyon kicsi lesz. Egyesek ekkor a lépkedést tovább folytatják a kicsi lépésközzel (a másik faktort nem léptetik, hisz azzal már elérték az értelmezési tartomány határát). Ezt a lépkedést pedig addig folytatják, amíg el nem érik az értelmezési tartomány határát ezzel is. Mi itt a baj? Sok (nagyon sok) kísérletet végzünk, ráadásul feleslegesen. („Csak nyomkodni kell!”) Ugyanis gondoljuk meg, hogy mi a szerepe a lépésközök helyes megválasztásának! Azt szeretnénk, hogy a legnagyobb növekedés vagy csökkenés irányába lépkedjünk, és ezt az irányt biztosítja a lépésközök aránya. Viszont ha már csak egyetlen faktort léptetünk, akkor az irány adott, tehát akkora lépésközt választunk, amekkorát csak akarunk.



A korábban kifejtett oknál, illetve ennél fogva következik, hogy nem feltétlenül célszerű egy olyan faktort bevenni a gradiens-tervbe, aminek a várható elmozdulása elhanyagolható a másik(ok)hoz képest, hiszen komoly előnyünk nem származhat belőle, viszont több hibalehetőséget is bevonunk a megoldásba.

2. jellemző hiba: A STATISTICA kiszámolja a szélsőérték helyét

Másodfokú terv illesztése esetén megjelenik egy gomb a szoftverben, amivel ki lehet íratni az illesztett modell szélsőértékének a helyét. Ez egy nagyon hasznos funkció, de sajnos könnyen csapdába csalja az óvatlan hallgatókat. Először is, nem könnyű értelmezni azt, amit látunk. A kapott táblázatnak 3 oszlopa van, egy observed-minimum, critical values és observed-maximum oszlop. Nos, itt annyi lehetőség van a tévedésre, hogy leginkább azon kell csodálkozni, hogy néha jól értelmezi valaki ezt. Elsőként matematikából tudhatjuk, hogy egy másodfokú modellnek legfeljebb 1 szélsőértéke lehet. Ebből kikövetkeztethetjük, hogy a minimum és maximum oszlop NEM a modell minimum és maximum helyét mutatja meg. (Ugyanis ezek közül csak maximum 1 létezhet.) Ezek az oszlopok az mondják meg, hogy a tervben mi volt az adott faktor legalacsonyabb, és legmagasabb értéke. Erre könnyen találhatjuk azt mondani, hogy erre mi szükség, hisz tudjuk mi ezt magunktól is. Nos, mindjárt kiderül, de el kell ismerni, hogy azért ez így eléggé félrevezető. Ahogy azt már sejteni lehet, a szélsőérték helyét a critical values oszlop mutatja meg. Ám itt jön a csavar, ugyanis a táblázat fejlécét is meg kell nézni (nem lennék meglepve, ha lennének néhányan, akik úgy gondolták eddig, hogy oda csak felesleges sallangokat ír a szoftver). Ugyanis a fejlécben van leírva, hogy a szélsőérték miféle szélsőérték: Ez lehet minimum, maximum, vagy saddlepoint, ami magyarul nyeregpont, ami igazából nem is szélsőérték. Tehát ha ez nem illik ahhoz, amit keresünk, akkor ez az információ érdektelen a számunkra.

	Critical values; Variable: Y (3**(2-0) full factorial design, 1 block , 9 runs (Spreadsheet1) in Workbook1) Solution: saddlepoint Predicted value at solution: ,6025501		
Factor	Observed Minimum	Critical Values	Observed Maximum
A	-1,00000	-7,94754	1,000000
B	-1,00000	-1,13443	1,000000

Itt mutatja, hogy nem is szélsőértéket, hanem nyeregpontot talált.

A piros számok itt azt mutatják, hogy a talált hely kilóg a tervtartományból.

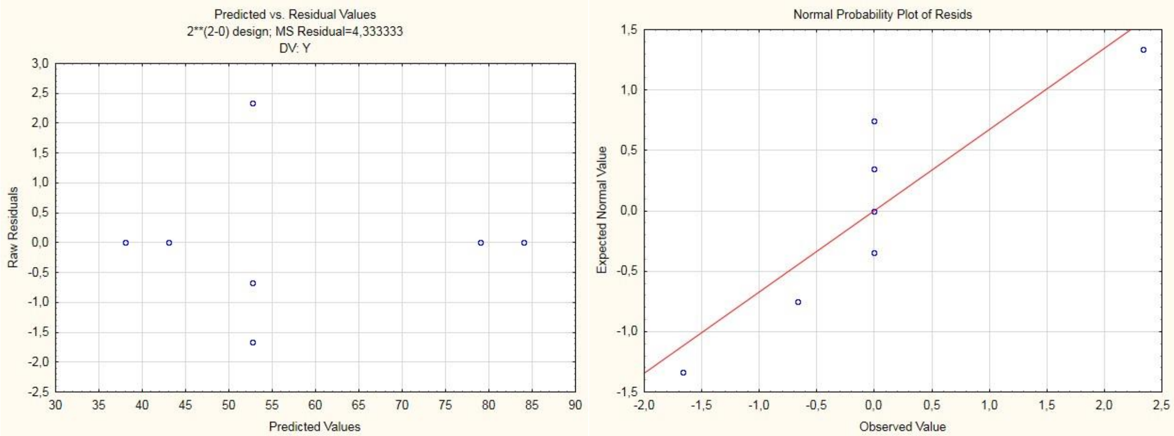
NEM szélsőérték-helyek!

Viszont ha passzol, még akkor sem lehetünk teljesen nyugodtak. Ugyanis tudott, hogy a modell megbízhatósága igen kicsi azokon a helyeken, amik kívül esnek az eredeti kísérletek tartományán, amire a modellt illesztettük. Ez az oka annak, hogy a táblázatban megjelenik a faktorok minimális és maximális szintje. Amennyiben a talált szélsőértékhely kívül esik a minimum-maximum intervallumon, akkor a program ezt piros színnel fogja jelölni, ami arra figyelmeztet minket, hogy nem mehetünk biztosra ezzel a szélsőértékkel.
Viszont mindez nem veszi figyelembe a faktorok értelmezési tartományát, hisz ezt nem is adjuk meg a Statistica szoftver számára. Természetesen, ha a szélsőérték helye kívül van a faktorok értelmezési tartományán, akkor ez nem lesz megfelelő a számunkra, de itt is könnyen hibát véthetünk. Ha például két faktorunk van, és ezek közül az egyik esetben az értelmezési tartományon belülre, míg a másiknál kívülre esik a szélsőérték helye, ilyenkor könnyen felmerülhet bennünk az a lehetőség, hogy az elsőt a meghatározott helyre, míg a másikat a tartomány határára állítsuk be. Igaz, hogy ez a megoldás sokszor megfelelő, de ha a kölcsönhatások jelentősek, akkor könnyen messzire kerülhetünk a megfelelő helytől, tehát ilyenkor minden esetben újabb faktoros tervvel kell ellenőriznünk, hogy a szélsőérték ténylegesen a talált helyen van-e.

3. jellemző hiba: A 0 reziduum mindig azt mutatja, amit látni szeretnénk

Alapvetően jellemző hiba az, hogy miután készítünk egy ábrát, nem vonunk le róla semmilyen következtetést. Ennél eggyel jobb az a helyzet, ha tudjuk, hogy milyen következtetés lenne célszerű a számunkra, és ezt úgy „vonjuk le" az ábrából, hogy igazából rá sem tekintettünk az ábrára. Ennek nevesített esete a 0 reziduum-ábra.
Mivel az elsődleges cél, hogy minél kevesebb kísérletet hajtsunk végre, így a kísérletek során csak a centrumpontban végzünk ismétléseket. A kiértékelés során viszont a teljes modellt illesztjük az adatokra. Ez viszont azzal jár, hogy pontosan annyi modellparamétert illesztünk, ahány adatpont van, így nem marad szabadsági fokunk. Ez gyakorlatilag azt jelenti, hogy a modell tökéletesen illeszkedik a centrumpontot leszámítva. A reziduumok oldaláról nézve a dolgot ez azt jelenti, hogy lesz 3 pont (a centrumponti mérések), ahol van reziduum, míg a terv összes többi pontja esetében 0 lesz a reziduum. Ez a jelenség váratlan rajzolatot eredményez mind a becsült érték/reziduum (predicted vs. residuals), mind a Gauss-hálós (normal probability plot) ábrázoláson.

Megjegyezném, hogy a STATISTICA jelenlegi (12.5-ös) verziójában, ha a „Normal probability plot of residuals” gombra kattintunk, nem ilyen ábra adódik, viszont ha a reziduumokat kiíratjuk, és azokra rajzolunk normal probability plot-ot, akkor már ilyen ábrát (a 2.-at) kapunk. Ez nyilván nem megfelelő működés a program részéről (ugyanazt kellene adnia mindkét esetben), így valószínű, hogy a későbbi verziókban majd kijavítják.



Ilyenkor többek jellemzően azt a következtetést vonják le, hogy a normalitás megfelelő, illetve a variancia konstans, mivel ez áll a megoldás érdekében. Mások viszont a szokatlan rajzolat miatt inkább úgy döntenek, hogy itt nem megfelelő a normalitás, illetve hogy nem konstans a variancia, viszont ennek következményeivel gyakran nem törődnek.
A sajnálatos dolog azonban az, hogy egyik eljárás sem megfelelő. Erről az ábráról az egyetlen helyes következtetés az, hogy a terv szerkezete miatt nincsenek reziduumok, így reziduális elemzés nem készíthető. Azonban célszerűbb az, hogy ha valaki nem is készít el egy olyan ábrát, amiről már elöljáróban tudja, hogy nem tartalmazhat érdemi információt.

Kunovszki Péter