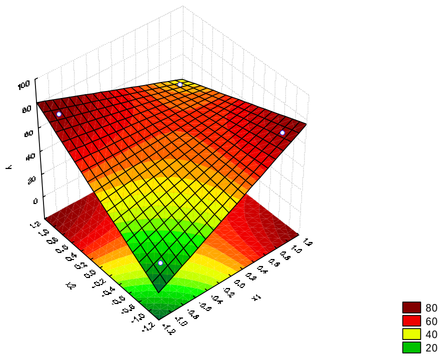
Kísérlettervezés

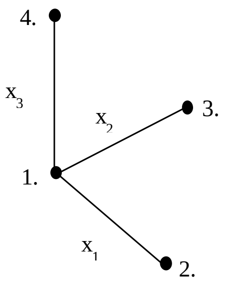


Mit akarunk megtudni?

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \ldots + \beta_p x_p$$

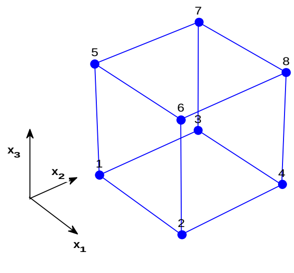
1

2^p típusú teljes faktoros kísérleti tervek



a)

a változók egyenkénti változtatása



b)

mátrix-terv

2

1. példa

Vizsgáljuk a baracklekvár-főzés technológiai paramétereinek hatását a baracklekvár minőségére

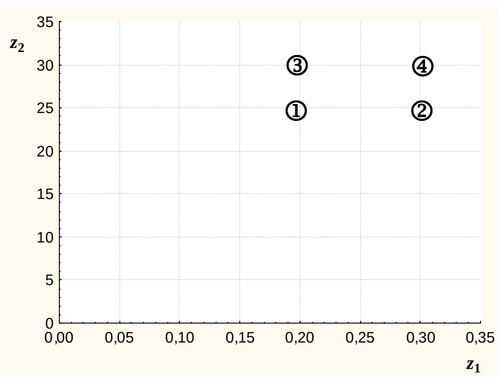
z_1 cukor mennyisége 0.2 és 0.3 kg/kg,

z_2 forralási idő 25 és 30 min

Faktorok	z_1	z_2
középpont z_j^0	0.25	27.5
variációs intervallum Δz_j	0.05	2.5
fölső szint z_j^{max} (+)	0.3	30
alsó szint z_j^{min} (–)	0.2	25

A kísérleti terv:

i	z_1	z_2	y
1	0.2	25	16
2	0.3	25	68
3	0.2	30	72
4	0.3	30	44



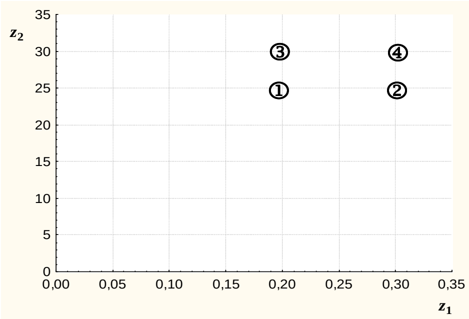
i	Természetes egységekben		A transzformált faktorok			y
	z_1	z_2	x_0	x_1	x_2	
1	0.2	25	+	-	-	16
2	0.3	25	+	+	-	68
3	0.2	30	+	-	+	72
4	0.3	30	+	+	+	44

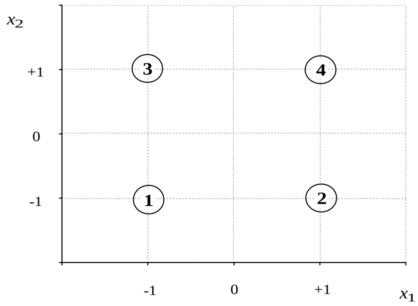
Transzformáció (kódolás):

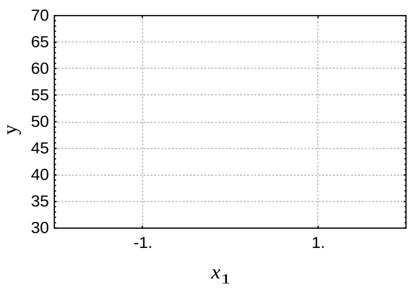
$$x_j = \frac{z_j - z_j^0}{\Delta z_j}$$

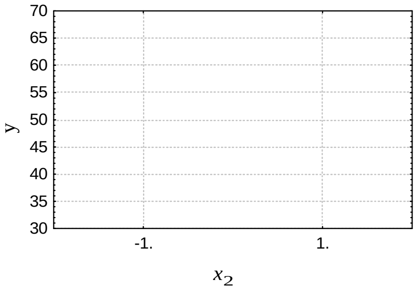
$$\sum_i x_{ji} x_{ki} = 0, \text{ ha } \quad j \neq k$$

ortogonalitás







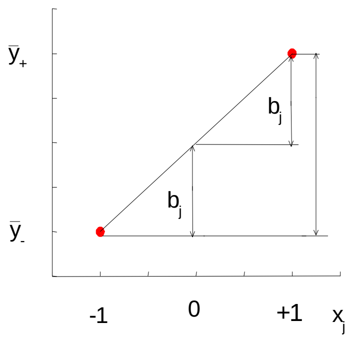


$$h_j = \left(\bar{y}_{j+}\right) - \left(\bar{y}_{j-}\right)$$

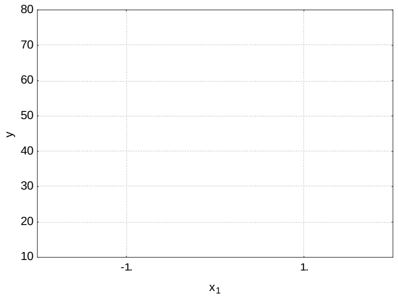
$$h_1 = \frac{68+44}{2} - \frac{16+72}{2} = 56 - 44 = 12$$

$$h_2 = \frac{72+44}{2} - \frac{16+68}{2} = 58 - 42 = 16$$

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \ldots + \beta_p x_p$$



$$b_j = \frac{\sum_i y_i x_{ji}}{\sum_i x_{ji}^2} = \frac{\sum_i y_i x_{ji}}{N}$$



i	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	y
1	+	–	–	+	16
2	+	+	–	–	68
3	+	–	+	–	72
4	+	+	+	+	44

$$h_{12} = \bar{y}_{12+} - \bar{y}_{12-} = \frac{16+44}{2} - \frac{68+72}{2} = 30 - 70 = -40$$

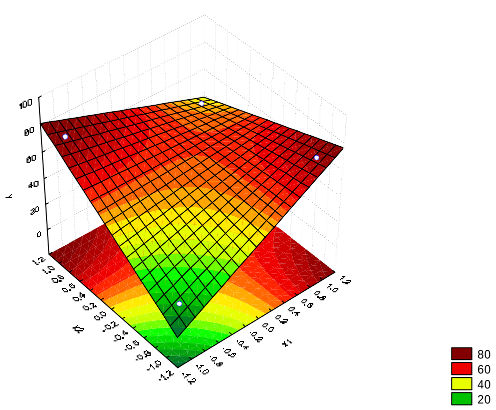
$$b_{12} = \frac{16-68-72+44}{4} = \frac{60-140}{4} = \frac{-80}{4} = -20$$ kölcsönhatás!

$$b_0 = \frac{16+68+72+44}{4} = 50$$

9

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

$$\hat{Y} = 50 + 6x_1 + 8x_2 - 20x_1x_2$$



10

A becsült paraméterek szignifikanciájának vizsgálata

Ha újra elvégeznénk az egész kísérletsorozatot, ugyanazokat az y értékeket kapnánk?

$$y = Y + \varepsilon$$

$\boxed{y \text{ ingadozik } Y \text{ körül}}$

Ha az újra elvégzett kísérletsorozatot kiértékelnénk, ugyanazokat a b becsült paraméter-értékeket kapnánk?

$\boxed{b_j \text{ valószínűségi változó, értéke akkor sem 0, ha } \beta_j\text{=0}}$

Az együttható (b_j) ingadozását jellemző s_b szórás y szórásából (s_y) számítható.

Ismételt mérések végzése $\left(s_y^2\right)$ meghatározásához

a) *k*-szor ismétlünk a terv minden pontjában,

b) a terv centrumában végzünk ismételt méréseket, k_c-szer ismétlünk.

A terv centrumában végzett ismételt mérések a hatások szignifikanciájának vizsgálatán kívül a linearitás vizsgálatát is lehetővé teszik.

Különböznek-e a *b* becsült paraméterek szignifikánsan zérustól?

$$t = \frac{b_j - \beta_j}{s_{b_j}} \qquad s_{b_j}^2 = \frac{s_y^2}{\sum_i x_{ji}^2} = \frac{s_y^2}{N}$$

Nullhipotézis: $H_0 : \beta_j = 0$

Ha a nullhipotézis helytálló, a hányados *t*-eloszlású, vagyis

$$P\left(-t_{\alpha/2} < b_j \big/ s_{b_j} \le t_{\alpha/2}\right) = 1 - \alpha$$

A nullhipotézist akkor utasítjuk el, ha $\left|b_j\right| > s_{b_j} t_{\alpha/2}$

Honnan vegyük s_y^2 -et?

A terv centrumában (ahol minden faktor szintje 0) is végeztek méréseket

i	Természetes egységekben		A transzformált faktorok		y
	z_1	z_2	x_1	x_2	
5	0.25	27.5	0	0	50
6	0.25	27.5	0	0	50
7	0.25	27.5	0	0	51

$$\bar{y}_1^0 = \frac{\sum_{m=1}^{3} y_{1m}^0}{3} = 50.33 \qquad s_{y_1 0}^2 = \frac{\sum_{m=1}^{3} \left(y_{1m}^0 - \bar{y}_1^0\right)^2}{2} = 0.333$$

$$s_{b_j}^2 = \frac{s_y^2}{\sum_i x_{ji}^2} = \frac{s_y^2}{N} = \frac{0.333}{4} = 0.0833 \qquad s_{b_j} = 0.289$$

$$P\left(-t_{\alpha/2} < b_j \big/ s_{b_j} < t_{\alpha/2}\right) = 1 - \alpha$$ ha b_j=0

szignifikáns, ha $\left|b_j\right| > s_{b_j} t_{\alpha/2}$

$t_{0.05/2} = 4.3$ $\qquad s_{b_j} t_{\alpha/2} = 0.289 \cdot 4.3 = 1.243$

A lineáris modell adekvát voltának vizsgálata (görbeség-ellenőrzés)

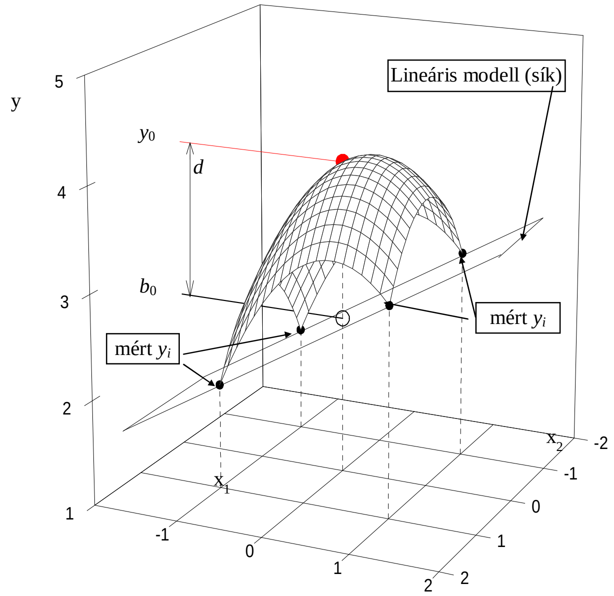
$E\left(\bar{y}^0\right) = Y^0$ (centrum-pont)

H_0: $E\left(b_0\right) = E\left(\bar{y}^0\right) = Y^0$

H_1: $E\left(b_0\right) \neq E\left(\bar{y}^0\right) = Y^0$

$$t_0 = \frac{d}{s_d} \qquad d = \bar{y}^0 - b_0 \qquad s_d^2 = s_y^2\left(\frac{1}{k_c} + \frac{1}{N}\right)$$

$$\nu = N - l + k_c - 1$$



$$d = 50.33 - 50 = 0.33$$

$$s_d^2 = 0.333\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{3}\right) = 0.1943 \qquad s_d = 0.441$$

$$t_0 = \frac{0.33}{0.441} = 0.748$$

$$\nu = N - l + k_c - 1 = 4 - 4 + 3 - 1 = 2$$

$$t_0 < t_{0.05/2}(2) = 4.3$$

Elfogadjuk a nullhipotézist
(nem kell másodfokú tag a modellbe).

A becsült függvény:

$$\hat{Y} = 50 + 6x_1 + 8x_2 - 20x_1x_2$$

$$\hat{Y} = 50 + 6\left(\frac{C - 0.25}{0.05}\right) + 8\left(\frac{t - 27.5}{2.5}\right) - 20\left(\frac{C - 0.25}{0.05}\right)\left(\frac{t - 27.5}{2.5}\right) =$$

$$= 50 - \frac{2.5 \cdot 6 \cdot 0.25 + 0.05 \cdot 8 \cdot 27.5 + 20 \cdot 0.25 \cdot 27.5}{0.125} + \frac{2.5 \cdot 6 + 20 \cdot 27.5}{0.125} C +$$

$$+ \frac{0.05 \cdot 8 + 20 \cdot 0.25}{0.125} t - \frac{20 C \cdot t}{0.125} = -1168 + 4520\, C + 43.2\, t - 160\, C \cdot t$$

A variancia (σ^2) becslési lehetőségei $\left(s_y^2\right)$

k-szor ismétlünk a terv minden pontjában

A kísérletek száma: $N = k \cdot 2^p$

Ellenőrizhető a σ^2 konstans feltétel

Nem vizsgálható, hogy a lineáris modell adekvát-e

k_c-szer ismétlünk a terv centrumában

A kísérletek száma: $N = 2^p + kc << k \cdot 2^p$

Nem ellenőrizhető a σ^2 konstans feltétel

Vizsgálható, hogy a lineáris modell adekvát-e.

k-szor a terv minden pontjában, k_c-szer a terv centrumában

A kísérletek száma: $N = k \cdot 2^p + k_c$

Ellenőrizhető a σ^2 konstans feltétel

Vizsgálható, hogy a lineáris modell adekvát-e

Szigorúbb statisztikai próbák, a szabadsági fok nagyobb

Mi történik, ha csak a kísérleti terv egy pontját ismételjük?

i	x_0	x_1	x_2	x_1x_2
1	+	–	–	+
2	+	+	–	–
3	+	–	+	–
4	+	+	+	+
5	+	+	+	+

$$\sum_i x_{ji} x_{ki} = 0, \text{ ha } \quad j \neq k$$

ortogonalitás?

A 2^p terv alapján becsült modell-paraméterek száma (l) legfeljebb 2^p

<u>Modell-redukció:</u> a nem szignifikáns tagokat (b_j-ket) kihagyjuk a modellből, így

$$l < 2^p$$

Ha a terv minden pontját k-szor hajtjuk végre, a terv sorainak száma

$$N = k2^p$$

A tervpontokban mért y értékek szóródása az illesztett modell körül:

$$\left(s_y^2\right)_{regr} = \frac{\sum_{i=1}^{N}\left(y_i - \hat{Y}_i\right)^2}{N-l} \qquad \nu = N - l$$

2. példa

Vizsgáljuk egy kémiai reaktorban a kitermelést (%) négy faktor függvényében, ha a

z_1 hőmérséklet 40 és 60 °C,

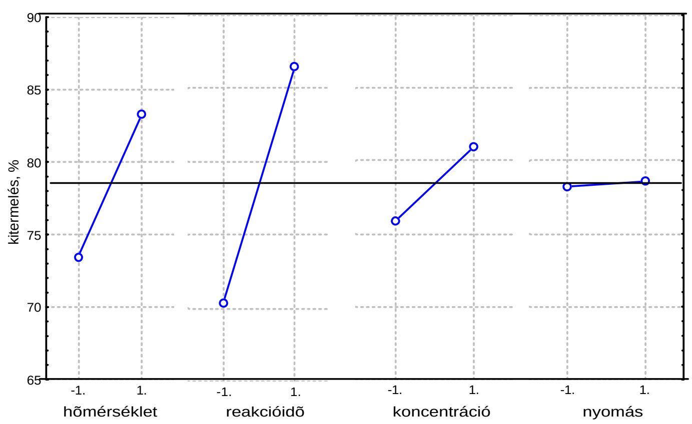
z_2 reakcióidő 10 és 20 min,

z_3 kiindulási komponens koncentrációja 45 és 65 %,

z_4 nyomás 2 és 6 bar

Faktorok	z_1	z_2	z_3	z_4
középpont z_j^0	50	15	55	4
variációs intervallum Δz_j	10	5	10	2
fölső szint z_j^{max} (+)	60	20	65	6
alsó szint z_j^{min} (–)	40	10	45	2

	Természetes egységekben				A transzformált faktorok					y
i	z_1	z_2	z_3	z_4	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	%
1	40	10	45	2	+	–	–	–	–	60.4
2	60	10	45	2	+	+	–	–	–	75.9
3	40	20	45	2	+	–	+	–	–	79.8
4	60	20	45	2	+	+	+	–	–	86.0
5	40	10	65	2	+	–	–	+	–	64.9
6	60	10	65	2	+	+	–	+	–	80.9
7	40	20	65	2	+	–	+	+	–	86.4
8	60	20	65	2	+	+	+	+	–	91.6
9	40	10	45	6	+	–	–	–	+	59.6
10	60	10	45	6	+	+	–	–	+	77.0
11	40	20	45	6	+	–	+	–	+	83.1
12	60	20	45	6	+	+	+	–	+	85.0
13	40	10	65	6	+	–	–	+	+	65.0
14	60	10	65	6	+	+	–	+	+	79.3
15	40	20	65	6	+	–	+	+	+	88.7
16	60	20	65	6	+	+	+	+	+	91.1

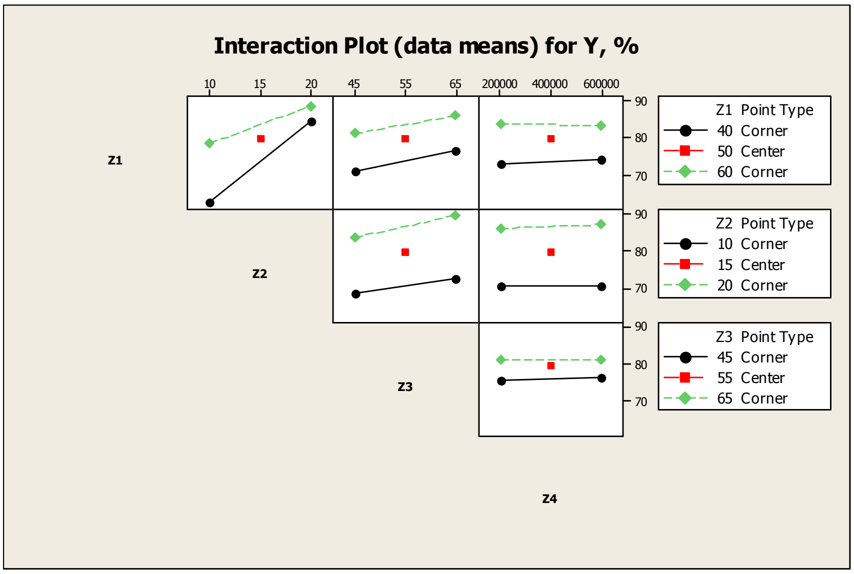


$$\hat{Y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_4 x_4 +$$

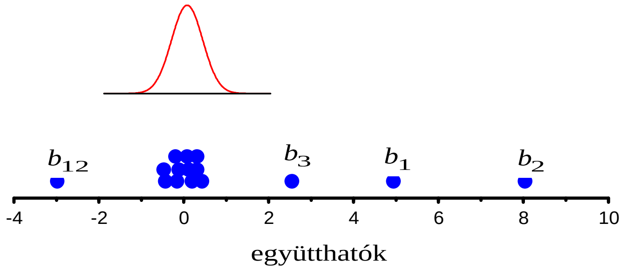
$$+ b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{14} x_1 x_4 + b_{23} x_2 x_3 + b_{24} x_2 x_4 + b_{34} x_3 x_4 +$$

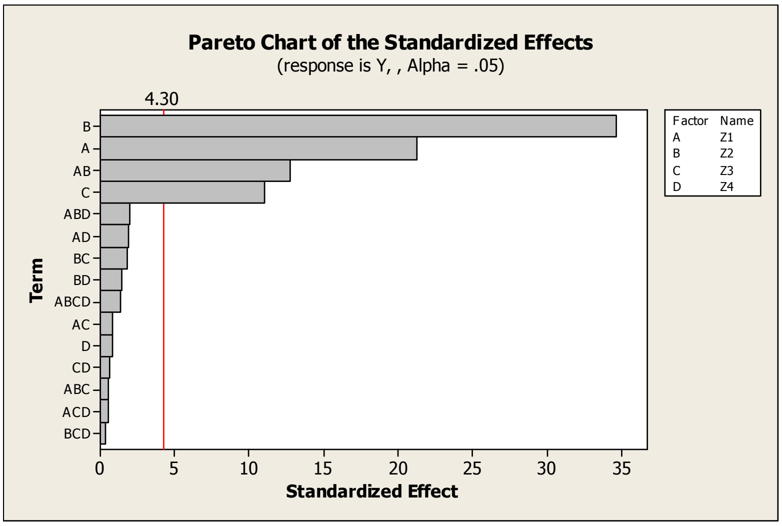
$$+ b_{123} x_1 x_2 x_3 + b_{124} x_1 x_2 x_4 + b_{134} x_1 x_3 x_4 + b_{234} x_2 x_3 x_4 + b_{1234} x_1 x_2 x_3 x_4$$

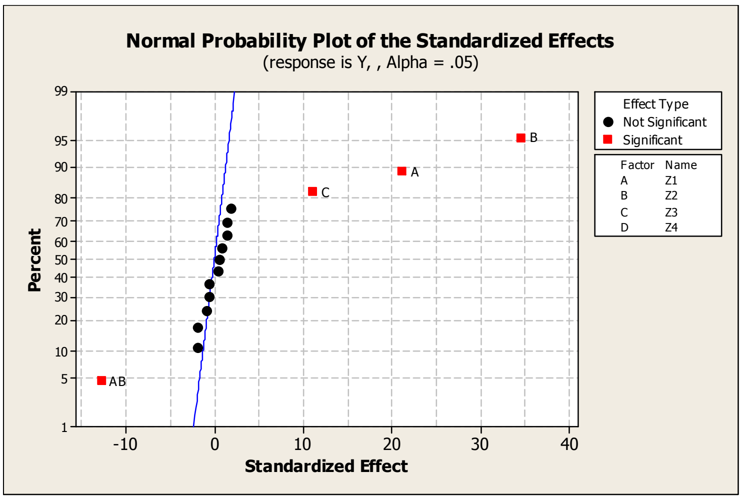
i	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_1x_2	x_1x_3	x_1x_4	x_2x_3	x_2x_4	x_3x_4	$x_1x_2x_3$	$x_1x_2x_4$	$x_1x_3x_4$	$x_2x_3x_4$	$x_1x_2x_3x_4$	y
1	+	–	–	–	–	+	+	+	+	+	+	–	–	–	–	+	60.4
2	+	+	–	–	–	–	–	–	+	+	+	+	+	+	–	–	75.9
3	+	–	+	–	–	–	+	+	–	–	+	+	+	–	+	–	79.8
4	+	+	+	–	–	+	–	–	–	–	+	–	–	+	+	+	86.0
5	+	–	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	+	–	64.9
6	+	+	–	+	–	–	+	–	–	+	–	–	+	–	+	+	80.9
7	+	–	+	+	–	–	–	–	+	–	–	–	+	+	–	+	86.4
8	+	+	+	+	–	+	+	+	+	–	–	+	–	–	–	–	91.6
9	+	–	–	–	+	+	+	–	+	–	–	–	+	+	+	–	59.6
10	+	+	–	–	+	–	–	+	+	–	–	+	–	–	+	+	77.0
11	+	–	+	–	+	–	+	–	–	+	–	+	–	+	–	+	83.1
12	+	+	+	–	+	+	–	+	–	+	–	–	+	–	–	–	85.0
13	+	–	–	+	+	+	–	–	–	–	+	+	+	–	–	+	65.0
14	+	+	–	+	+	–	+	+	–	–	+	–	–	+	–	–	79.3
15	+	–	+	+	+	–	–	–	+	+	+	–	–	–	+	–	88.7
16	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	91.1



$b_0 = 78.42$; $b_1 = 4.93$; $b_2 = 8.04$; $b_3 = 2.57$; $b_4 = 0.18$; $b_{12} = -2.97$;
$b_{13} = -0.19$; $b_{14} = -0.43$; $b_{23} = 0.42$; $b_{24} = -0.33$; $b_{34} = -0.14$;
$b_{123} = 0.13$; $b_{124} = -0.46$; $b_{134} = -0.13$; $b_{234} = 0.08$; $b_{1234} = 0.32$







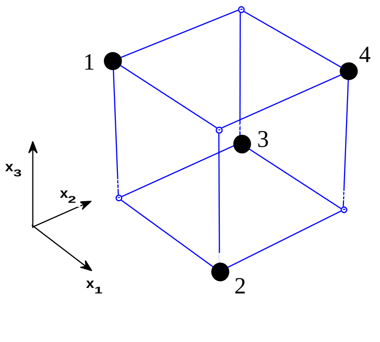
$$\hat{Y} = 78.42 + 4.93x_1 + 8.04x_2 + 2.53x_3 - 2.97x_1x_2$$

2^{p-r} típusú részfaktortervek

x_3

2^2				
i	x_0	x_1	x_2	x_1x_2
1	+	–	–	+
2	+	+	–	–
3	+	–	+	–
4	+	+	+	+

2^{3-1}				
i	x_0	x_1	x_2	x_3
1	+	–	–	+
2	+	+	–	–
3	+	–	+	–
4	+	+	+	+



i	x_0	x_1	x_2	x_3
1	+	–	–	+
2	+	+	–	–
3	+	–	+	–
4	+	+	+	+

Az illeszthető modell

$$\hat{Y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3$$

$b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12}$ mivel $x_3 = x_1 x_2$

Mindkét oldalt szorozva x_3-mal $1 = x_1 x_2 x_3$

$x_1 = x_1^2 x_2 x_3 = x_2 x_3$ $b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23}$

$x_2 = x_1 x_3$ $b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{13}$

(keveredési rendszer)

2^{4-1} $x_4 = x_1 x_2 x_3$ $1 = x_1 x_2 x_3 x_4$

A keveredési rendszer:

$x_1 = x_2 x_3 x_4$

$x_1 x_2 = x_3 x_4$

$x_2 = x_1 x_3 x_4$

$x_1 x_3 = x_2 x_4$

$x_3 = x_1 x_2 x_4$

$x_1 x_4 = x_2 x_3$

$x_4 = x_1 x_2 x_3$

A főhatások háromfaktoros interakciókkal keverednek,
a kétfaktoros interakciók pedig egymással.

2^{4-1}

$$\hat{Y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_4 x_4$$

$x_1 x_2 = x_3 x_4$ stb.

2^{5-1} $x_5 = x_1 x_2 x_3 x_4$ $1 = x_1 x_2 x_3 x_4 x_5$

$x_1 = x_2 x_3 x_4 x_5$ $x_1 x_2 = x_3 x_4 x_5$

2^{5-2}

pl. $x_4 = x_1 x_2$ $x_5 = x_1 x_2 x_3$

$$\hat{Y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_4 x_4 + b_5 x_5$$

kísérletek száma? paraméterek száma?

2^{5-3}

kísérletek száma? paraméterek száma?

2^{6-3} 2^{7-3} 2^{7-4}

3. példa

G. E. P. Box, W. G. Hunter, J. S. Hunter: Statistics for Experimenters, J. Wiley, 1978; p. 424-429

	variable	-	+
1	water supply	town reservoir	well
2	raw material	on site	other
3	temperature	low	high
4	recycle	yes	no
5	caustic soda	fast	slow
6	filter cloth	new	old
7	holdup time	low	high

Az első terv:

				12	**13**	**23**	**123**	filtration time (min)
test	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**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

Az első terv eredményeinek feldolgozása:

$$
\begin{aligned}
l_1 &= -10.9 \rightarrow 1+24+35+67\\
l_2 &= -2.8 \rightarrow 2+14+36+57\\
l_3 &= -16.6 \rightarrow 3+15+26+47\\
l_4 &= 3.2 \rightarrow 4+12+37+56\\
l_5 &= -22.8 \rightarrow 5+13+27+46\\
l_6 &= -3.4 \rightarrow 6+17+23+45\\
l_7 &= 0.5 \rightarrow 7+16+25+34
\end{aligned}
$$

Filtr1.mtw

Második (fold-over) terv:

test	**1**	**2**	**3**	**-12** **4**	**-13** **5**	**-23** **6**	**123** **7**	filtration time (min) y
1	+	+	+	-	-	-	+	66.7
2	-	+	+	+	+	-	-	65.0
3	+	-	+	+	-	+	-	86.4
4	-	-	+	-	+	+	+	61.9
5	+	+	-	-	+	+	-	47.8
6	-	+	-	+	-	+	+	59.0
7	+	-	-	+	+	-	+	42.6
8	-	-	-	-	-	-	-	67.6

A 16 kísérlet eredményeinek feldolgozása:

$$
\begin{aligned}
l_1 &= -6.7 \rightarrow 1\\
l_2 &= -3.9 \rightarrow 2\\
l_3 &= -0.4 \rightarrow 3\\
l_4 &= 2.8 \rightarrow 4\\
l_5 &= -19.2 \rightarrow 5\\
l_6 &= 0.1 \rightarrow 6\\
l_7 &= -4.4 \rightarrow 7\\
l_{12} &= 0.5 \rightarrow 12+37+56\\
l_{13} &= -3.6 \rightarrow 13+27+46\\
l_{14} &= 1.1 \rightarrow 14+36+57\\
l_{15} &= -16.2 \rightarrow 15+26+47\\
l_{16} &= 4.9 \rightarrow 16+25+34\\
l_{17} &= -3.4 \rightarrow 17+23+45\\
l_{24} &= -4.2 \rightarrow 24+35+67
\end{aligned}
$$

43

Meddig lehet a kísérletek számát csökkenteni?

Legalább a főhatásokat becsülnünk kell, p faktorra minimálisan p+1 pontból

pl. 7 faktorra legalább 8 beállítás (2^{7-4}).

Ha a faktorok száma 8 és 15 között van, a minimális beállítások száma 16

44

A kísérletek menete

Randomizálás

Például a kísérleteket nem lehet egyszerre (azonos pillanatban) elvégezni, és nem zárható ki, hogy az idő előrehaladásával a külső körülményekben, az anyagban változások lesznek.
Ha a tervgenerálás algoritmusa a végrehajtás sorrendje, akkor a terv első feléhez, a faktor egyik szintje, második feléhez pedig a másik szintje tartozik. Ekkor a szóban forgó faktor főhatásába belekeveredik az időbeli különbség (az idő hatása).

A kísérletek sorrendjét véletlenszerűsíthetjük, ez a randomizálás.

Az is előfordul, hogy a kísérletekhez felhasználandó nyersanyag egy tételéből nincs annyi, hogy az egész kísérletsorozatra futná, vagy nem végezhetjük az egész sorozatot egy napon ill. egy készüléken. Ha ilyenkor randomizálunk, a tétel (nap, vagy készülék) nem keveredik a faktor hatásába, de a randomizálás miatt a szórás megnő, és elfedheti a lényeges faktorok hatását.

Jobb, ha a kísérletsorozatot ilyen esetekben blokkokra osztjuk: egy blokkban azonos körülményeket biztosítunk (azonos nyersanyagtétel, azonos nap, vagy készülék).

Blokkokra osztás

BLOKK

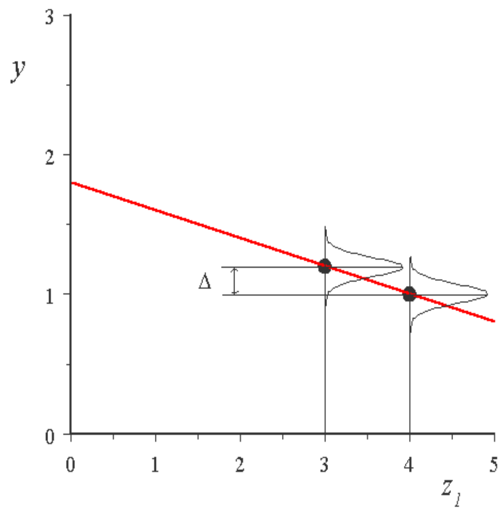
i	x_0	x_1	x_2	x_3	$x_1x_2x_3$
1	+	+	+	+	+
2	+	–	+	+	–
3	+	+	–	+	–
4	+	–	–	+	+
5	+	+	+	–	–
6	+	–	+	–	+
7	+	+	–	–	+
8	+	–	–	–	–

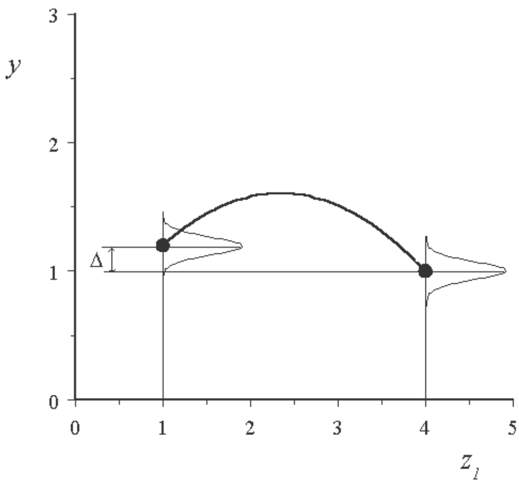
A variációs intervallum megválasztása

A faktorok értelmezési tartományán belül

- ehhez az intervallumhoz képest kell a faktor beállítási bizonytalanságának elhanyagolhatónak lennie
- ha túl kicsire választjuk, a faktor hatástalannak mutatkozik
- ha túl nagyra, a görbe felület leírására a sík nem adekvát

Ha nagy a szórás, nem észleljük a hatást!





4. példa: 2^{7-4} részfaktorterv+fold-over, centrumponttal

A kísérletek célja egy speciális anyag optimális előállítási körülményeinek meghatározása volt. A célfüggvény a kihozatal %, melynek maximális értékét kell elérni.

Faktorok :

z_1 reakció idő, min;
z_2 hőmérséklet, °C;
z_3 fordulatszám, 1/min;
z_4 katalizátor koncentráció, %;
z_5 felesleg, %;
z_6 nyomás, bar;
z_7 szennyezés koncentráció, %.

.

Jellemzők	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5	z_6	z_7
Alapszint, z_j^0	75	132,5	450	1,5	25	1,5	0,25
Variációs intervallum, Δz_j	5	2,5	50	0,5	5	0,5	0,25
-1	70	130	400	1,0	20	1	0,00
+1	80	135	500	2,0	30	2	0,50

Az 1. blokk: 2^{7-4} részfaktorterv, 3 ismétlés a centrumpontban:

$$x_4 = x_1x_2; \qquad x_5 = x_1x_3; \qquad x_6 = x_2x_3; \qquad x_7 = x_1x_2x_3$$

i	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	y, %	*blokk*
1	+	-	+	-	+	-	+	-	31,04	1
2	+	+	+	-	-	+	-	-	43,65	1
3	+	-	-	-	-	+	+	+	56,42	1
4	+	+	-	-	+	-	-	+	66,39	1
5	+	-	+	+	-	-	-	+	27,78	1
6	+	+	+	+	+	+	+	+	48,63	1
7	+	-	-	+	+	+	-	-	51,13	1
8	+	+	-	+	-	-	+	-	69,70	1
9	+	0	0	0	0	0	0	0	49,07	1
10	+	0	0	0	0	0	0	0	51,34	1
11	+	0	0	0	0	0	0	0	49,72	1

A 2. blokk: fold-over (3 centrumponttal)

i	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	y, %	*blokk*
12	+	+	+	+	-	-	-	+	65,29	2
13	+	-	+	+	+	+	-	-	56,90	2
14	+	+	-	+	+	-	+	-	42,42	2
15	+	-	-	+	-	+	+	+	31,47	2
16	+	+	+	-	-	+	+	-	71,18	2
17	+	-	+	-	+	-	+	+	50,08	2
18	+	+	-	-	+	+	-	+	47,26	2
19	+	-	-	-	-	-	-	-	29,11	2
20	+	0	0	0	0	0	0	0	49,89	2
21	+	0	0	0	0	0	0	0	49,16	2
22	+	0	0	0	0	0	0	0	51,11	2

Fractional Factorial Fit: y, % versus time; Temp; ...

Estimated Effects and Coefficients for y, (coded units)

Term	Effect	Coef	SE Coef	T	P
Constant		49,2781	0,2423	203,40	0,000
Block		0,0455	0,2066	0,22	0,835
time	15,0738	7,5369	0,2423	31,11	0,000
Temp	23,2163	11,6081	0,2423	47,91	0,000
ford.szá	-0,2262	-0,1131	0,2423	-0,47	0,660
kat.konc	-0,6638	-0,3319	0,2423	-1,37	0,229
felesleg	4,5937	2,2969	0,2423	9,48	0,000
Nyomás	-0,8887	-0,4444	0,2423	-1,83	0,126
sz.konc	-0,6437	-0,3219	0,2423	-1,33	0,241
time*Temp	-0,5662	-0,2831	0,2423	-1,17	0,295
time*ford.szá	-0,3838	-0,1919	0,2423	-0,79	0,464
time*kat.konc	-0,0813	-0,0406	0,2423	-0,17	0,873
time*felesleg	0,1612	0,0806	0,2423	0,33	0,753
time*Nyomás	0,7337	0,3669	0,2423	1,51	0,190
time*sz.konc	-0,0362	-0,0181	0,2423	-0,07	0,943
Temp*kat.konc	0,4263	0,2131	0,2423	0,88	0,419
Ct Pt		0,7702	0,4639	1,66	0,158

A blokk nem szignifikáns

szignifikáns

A centrumbeli mérések átlagának eltérése a „Constant” -tól nem szignifikáns, tehát a lineáris modell adekvát.

A felesleget (x_5 ill. z_5) nem lehet tovább növelni, így azt a fölső szintjén rögzítették ($x_5 = +1$).

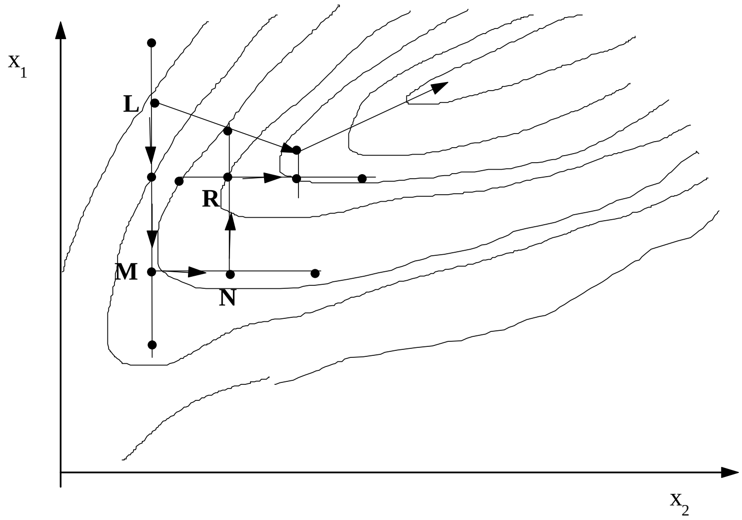
Az illesztett lineáris függvény:

$$\hat{Y} = 49{,}28 + 7{,}54x_1 + 11{,}61x_2 + 2{,}30x_5 = 51{,}58 + 7{,}54x_1 + 11{,}61x_2$$

$$49{,}28 + 2{,}30(+1) = 51{,}58$$

A célfüggvény maximumát (optimum) az x_1 és x_2 független változók terében keressük tovább.

Box és Wilson módszere az optimum megközelítésére



$$\underline{grad\ f} = \frac{\partial f}{\partial x_1}\underline{\delta x_1} + \frac{\partial f}{\partial x_2}\underline{\delta x_2} + \ldots + \frac{\partial f}{\partial x_p}\underline{\delta x_p}$$

ahol $\underline{\delta x_j}$ a *j*-edik koordinátatengely irányába mutató egységvektor.

$$\hat{Y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + \cdots + b_p x_p$$

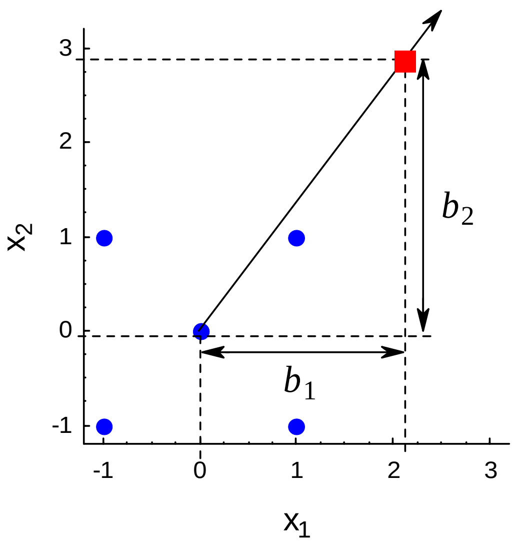
$$\frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_1} = b_1, \frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_2} = b_2, \ldots, \frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_p} = b_p.$$

A gradiens-függvény:

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

A gradiens irányában úgy haladhatunk, ha az x_1 tengely mentén b_1, az x_2 tengely mentén b_2 nagyságú stb. lépést teszünk. Az x_j koordinátában az egységnyi lépés a z_j eredeti fizikai skálán Δz_j .

A gradiens:



A tervpontokra illesztett modell:

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

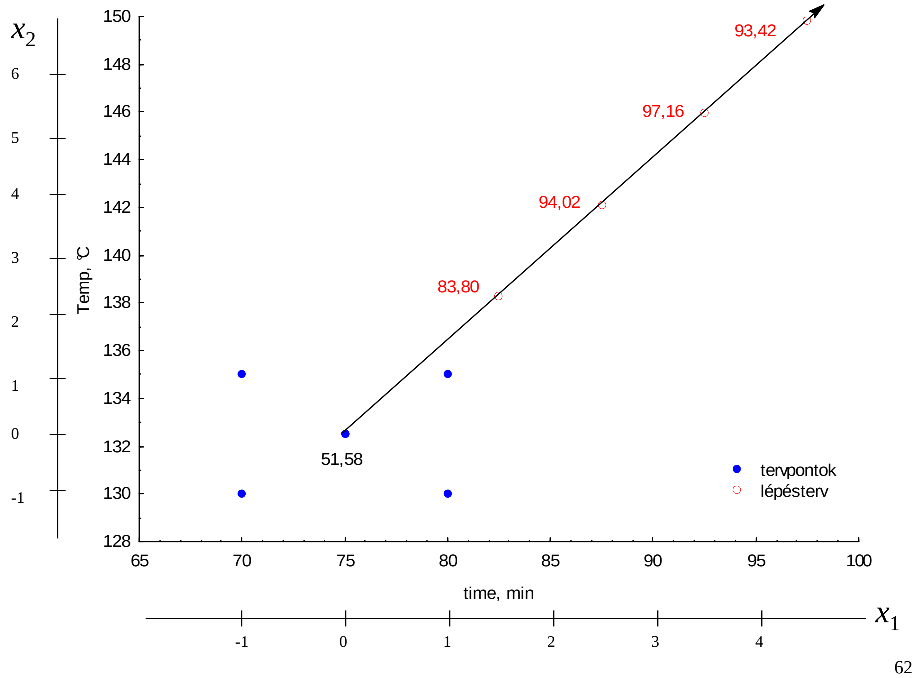
- tervpontok
- lépésterv

5. példa: a 4. példa folytatása; lépésterv a gradiens mentén

A tervpontokra illesztett egyenlet: $\hat{Y} = 51{,}58 + 7{,}54x_1 + 11{,}61x_2$

j	1	3
z_j^0	75 min	132,5 °C
Δz_j	5 min	2,5 °C
b_j	7,54	11,61
$b_j \Delta z_j$	37,70 min	29,03 °C
lépés	2,5 min	1,92 °C

$$\frac{b_2}{b_1} = \frac{11{,}61}{7{,}54} = 1{,}540$$



sorszám	x_1	x_2	time, min	Temp, °C	y, %
tervcentrum	0	0	75,0	132,5	$\hat{Y} = 51{,}58$
	0,5	0,77	77,5	134,4	
	1,0	1,54	80,0	136,4	
23	1,5	2,31	82,5	138,3	83,80
	2,0	3,08	85,0	140,2	
24	2,5	3,85	87,5	142,1	94,02
	3,0	4,62	90,0	144,1	
26	3,5	5,39	92,5	146,0	97,16
	4,0	6,16	95,0	147,9	
27	4,5	6,93	97,5	149,8	93,42

6. példa: az 5. példa folytatása; 2^2 terv az optimum közelében

sorszám	time, min	Temp., °C	x_1	x_2	y, %
1	80	140	-	-	82,20
2	100	140	+	-	92,69
3	80	150	-	+	92,24
4	100	150	+	+	89,98
5	90	145	0	0	93,89
6	90	145	0	0	95,56
7	90	145	0	0	94,84

```
Fractional Factorial Fit: y, % versus time; Temp

Estimated Effects and Coefficients for y, (coded units)

Term          Effect      Coef     SE Coef       T      P
Constant                89,278      0,4188  213,17  0,000
time           4,115     2,058      0,4188    4,91  0,039
Temp           3,665     1,832      0,4188    4,38  0,048
time*Temp     -6,375    -3,187      0,4188   -7,61  0,017
Ct Pt                    5,486      0,6398    8,57  0,013
```

Szignifikáns a centrumbeli mérések átlagának eltérése a „Constant” -tól, tehát a lineáris modell nem megfelelő.

Másodfokú modell illesztésére alkalmas terv szükséges!

Másodfokú kísérleti tervek

A centrum-ponti kísérletekből csak azt látjuk, hogy valamelyik faktorra nem jó a lineáris függvény.

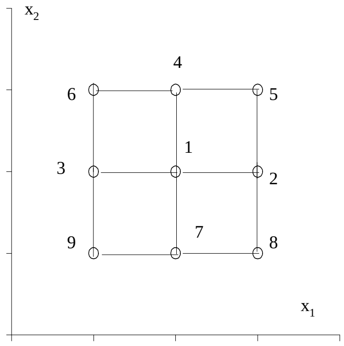
A másodfokú modell paraméterei nem becsülhetők a 2^p és 2^{p-r} tervek eredményeiből.

A 2^p kétszintes tervek kiegészíthetők háromszintesekké: 3^p.

Minőségi faktorok kettőnél több szinten csak varianciaanalízissel vizsgálhatók, mert szintjeik nem értelmezhetők intervallum-skálán.

3^2 terv:

i	x_1	x_2
1	0	0
2	+	0
3	–	0
4	0	+
5	+	+
6	–	+
7	0	–
8	+	–
9	–	–

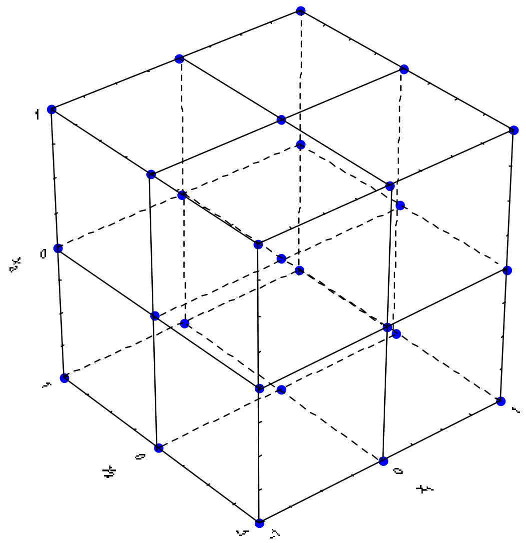


Két faktorra a 3^2 kísérleti terv

$$x'_{ji} = x_{ji}^2 - \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_{ji}^2 = x_{ji}^2 - \overline{x_j^2}$$

i	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x'_1	x'_2	$x'_1x'_2$
1	+	+	+	+	1/3	1/3	1/9
2	+	-	+	-	1/3	1/3	1/9
3	+	+	-	-	1/3	1/3	1/9
4	+	-	-	+	1/3	1/3	1/9
5	+	+	0	0	1/3	-2/3	-2/9
6	+	-	0	0	1/3	-2/3	-2/9
7	+	0	+	0	-2/3	1/3	-2/9
8	+	0	-	0	-2/3	1/3	-2/9
9	+	0	0	0	-2/3	-2/3	4/9

3^3 másodfokú terv:



A 3^p tervben az elvégzendő kísérletek száma a faktorok *p* számával rohamosan, a becsülhető együtthatók *l* száma pedig kevésbé nő:

p	2	3	4	5	6
3^p	9	27	81	243	729
l	6	10	15	21	28

Kompozíciós tervek

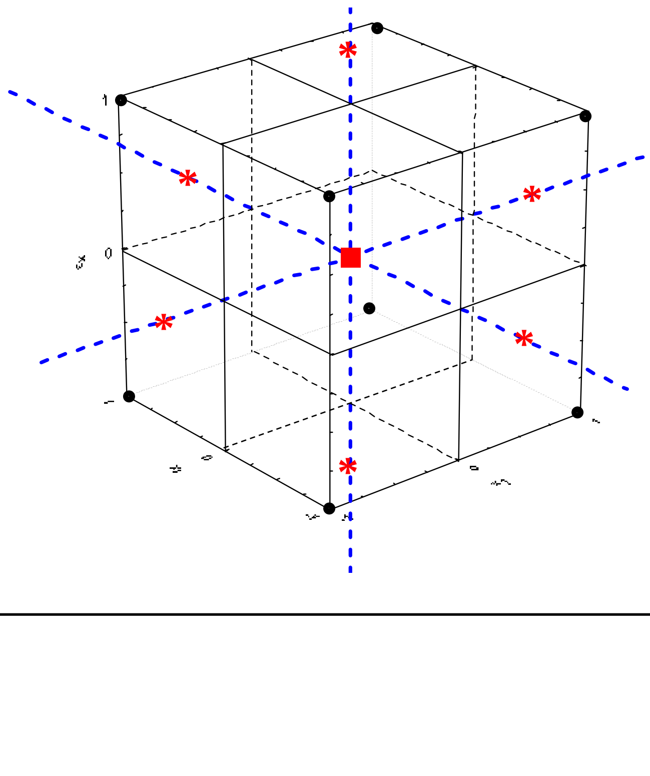
magja egy $2p$ típusú teljes faktoros kísérleti terv
($p \geq 5$ esetén részfaktorterv),
$2p$ csillagpont a centrumtól α távolságra
és k_c centrumbeli kísérlet.

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

Az α értékének megválasztása szerint a terv lehet ortogonális vagy forgatható. Ortogonális terv és $k_c=1$ esetére:

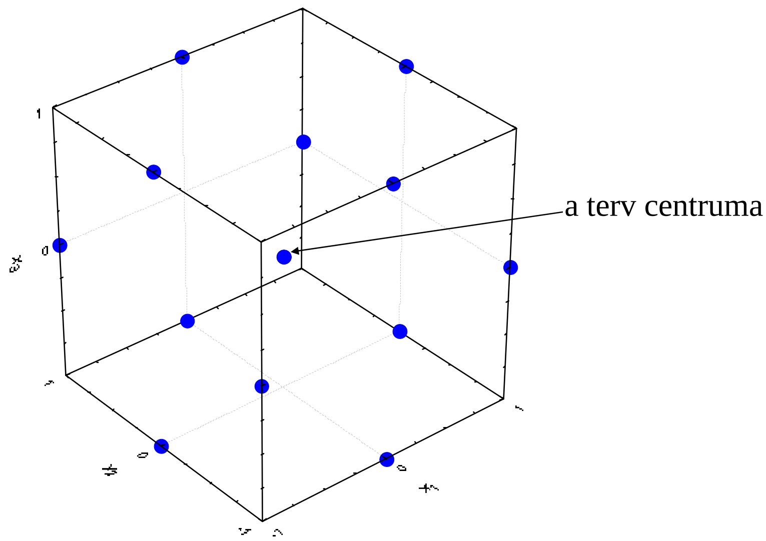
A faktor szám, p	2	3	4	5
A terv magja	2^2	2^3	2^4	2^{5-1}
α	1.0	1.215	1.414	1.547

Kompozíciós terv három faktorra



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

Box-Behnken terv 3 faktorra



7. példa: a 2^2 terv módosítása kompozíciós tervvé

	blokk	time	Temp.	y
1	1	80	140	82,20
2	1	100	140	92,69
3	1	80	150	92,24
4	1	100	150	89,98
5	1	90	145	93,89
6	1	90	145	95,56
7	**2**	**75,858**	**145**	**88,62**
8	**2**	**104,142**	**145**	**92,18**
9	**2**	**90**	**137,929**	**85,80**
10	**2**	**90**	**152,071**	**91,12**
11	**2**	**90**	**145**	**94,87**
12	**2**	**90**	**145**	**95,36**

2^2 terv (1–6. sor)

Csillagpontok és centrumpont (7–12. sor)

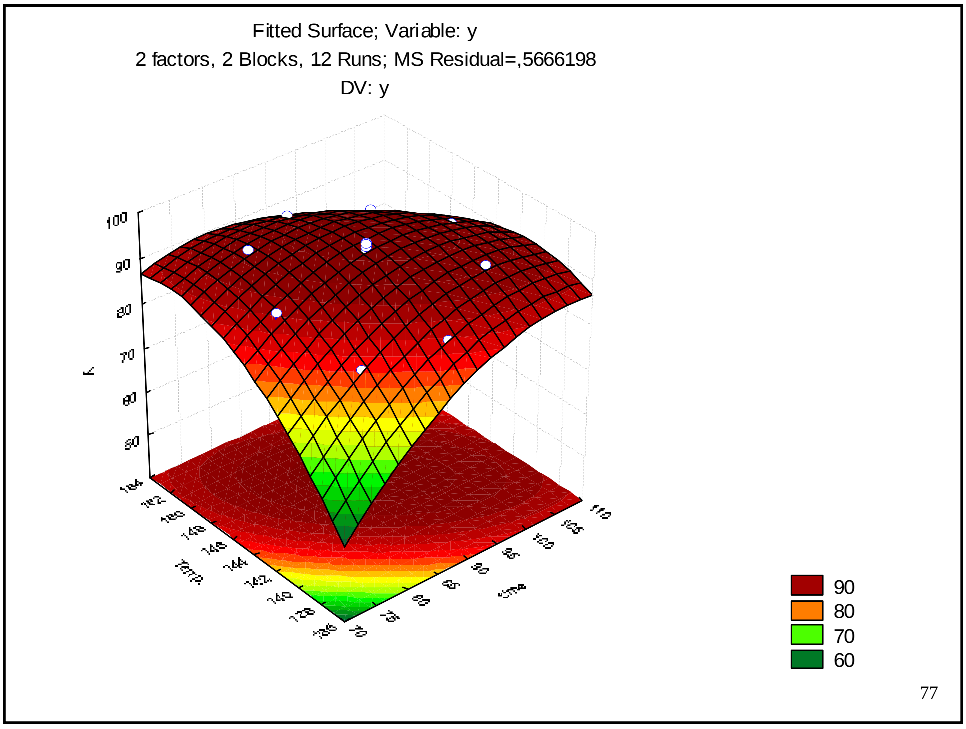
Effect Estimates; Var.:y; R-sqr=,98422; Adj:,96529 (kompozit)
2 factors, 2 Blocks, 12 Runs; MS Residual=,5666198 DV: y

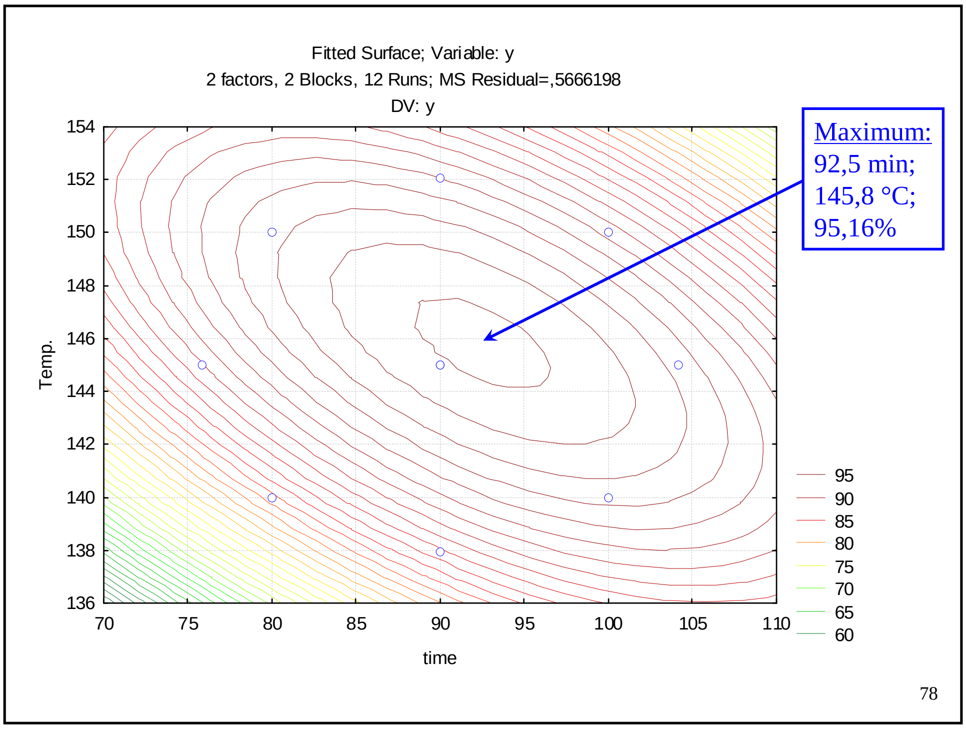
	Effect	**Std.Err.**	**t(5)**	**p**
Mean/Interc.	94,92000	0,376371	252,1981	0,000000
blokk(1)	0,23160	0,434596	0,5329	0,616928
(1)time (L)	3,31617	0,532271	6,2302	0,001559
time (Q)	-4,59628	0,595102	-7,7235	0,000581
(2)Temp.(L)	3,71342	0,532271	6,9766	0,000931
Temp.(Q)	-6,53632	0,595102	-10,9835	0,000109
1L by 2L	-6,37500	0,752742	-8,4690	0,000377

A blokk nem szignifikáns

Regr. Coefficients; Var.:y; R-sqr=,98422; Adj:,96529 (kompozit)
2 factors, 2 Blocks, 12 Runs; MS Residual=,5666198 DV: y

	Regressn	**Std.Err.**	**t(5)**	**p**
Mean/Interc.	-3740,46	274,2227	-13,6402	0,000038
blokk(1)	0,12	0,2173	0,5329	0,616928
(1)time (L)	13,55	1,2161	11,1391	0,000102
time (Q)	-0,02	0,0030	-7,7235	0,000581
(2)Temp.(L)	44,02	3,5179	12,5132	0,000058
Temp.(Q)	-0,13	0,0119	-10,9835	0,000109
1L by 2L	-0,06	0,0075	-8,4690	0,000377


Fitted Surface; Variable: y
2 factors, 2 Blocks, 12 Runs; MS Residual=,5666198
DV: y
Temp.
time
90
80
70
60


Fitted Surface; Variable: y
2 factors, 2 Blocks, 12 Runs; MS Residual=,5666198
DV: y
Maximum:
92,5 min;
145,8 °C;
95,16%
Temp.
time
95
90
85
80
75
70
65
60