IV. Faktoros kísérleti tervek

20. Kétszintes kísérleti tervek

Az optimalizáló kísérlettervezés olyan speciális optimalizálási feladatnak tekinthető, amelyben az optimalizálandó függvény nem ismert (ún. fekete doboz). Helyette viszonylag egyszerű (lineáris és másodfokú) függvények alkalmazásával a független változóknak az optimális működés tartományát jellemző értékeit keressük.

Az ismertetendő módszerek a változókat egyszerre változtatják, így egy-egy kísérlet minden változó hatásáról nyújt információt, a könnyű kiértékelést (legtöbbször az ortogonalitást) pedig a kísérleti terv matematikai tulajdonságai teszik lehetővé. A legegyszerűbb (lineáris) modell két szint (a független változók két-két értéke) beállítását igényli, mivel két pontra egyenes illeszthető.

Ipari-technológiai és laboratóriumi problémáknál, ahol a kísérletek viszonylag gyorsan végrehajthatók, a kísérlettervezés-kísérletezés folyamatának minden lépésében a következő kísérletek optimális megtervezéséhez felhasználjuk az addig rendelkezésre álló ismereteinket az objektumról vagy jelenségről. Minél több az előzetes ismeretünk (a priori információ), annál hatékonyabb a további kísérletezés, abban az értelemben, hogy a lehető legkevesebb kísérlettel érjünk célhoz.

A független változókat faktoroknak nevezik, beállított értékeiket szinteknek (faktorszinteknek). Feltételezzük, hogy e szinteket pontosan be tudjuk állítani. Gyakorlatilag ez azt jelenti, hogy beállításuk bizonytalansága elhanyagolható azon intervallum szélességéhez képest, amelyben értéküket változtatjuk. A faktorok nemcsak mennyiségiek lehetnek, hanem minőségiek is; pl. a nyersanyag gyártmánya, minősége, tisztasága, hogy melyik készüléken dolgozunk stb.

20.1. 2^p típusú teljes faktoros kísérleti tervek

A 2^p típusú tervek p faktort tartalmaznak, mindegyiket két szinten vizsgálják. Ha minden beállításnál egyetlen kísérletet végzünk, a kísérleti terv N=2^p pontot tartalmaz.

Jelölje z_j a j-edik faktort, z_j^0 a faktor alapszintjét:

$$z_j^0 = \frac{z_j^{\max} + z_j^{\min}}{2}. \tag{20.1}$$

A z_j^0 (j = l, ..., p) értékekkel jellemzett pontot a terv centrumának nevezik. A Δz_j ún. variációs intervallum definíciója:

$$\Delta z_j = \frac{z_j^{\max} - z_j^{\min}}{2}. \tag{20.2}$$

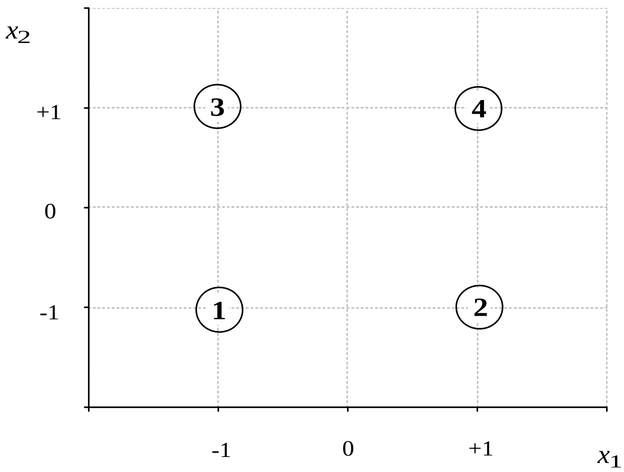
A faktorokat a következőképpen célszerű transzformálni:

$$x_j = \frac{z_j - z_j^0}{\Delta z_j},\ j=1, ..., p. \qquad (20.3)$$

Az így kapott x_j faktor értéke +1 a magasabbik szinten ($z_j = z_j^{max}$), –1 az alacsonyabbik szinten ($z_j = z_j^{min}$).

Minőségi faktorok esetén az alapszint és a variációs intervallum általában nem értelmezhető, a szintek azonban igen; pl. egyik vagy másik típusú készüléken végezzük a kísérletet, analitikai vagy technikai tisztaságú nyersanyagból dolgozunk stb.

A kísérleti terv az a táblázat, amely kísérletenként megadja az egyes faktorok beállítandó értékeit (szintjeit).
Két faktor esetére a kísérleti terv pl.: $N = 2^2 = 4$ (l. a 20-1. ábrát).



i	x_1	x_2
1	–	–
2	+	–
3	–	+
4	+	+

20-1. ábra. 2^2 kísérleti terv beállításai

A két faktor esetében jól látszik, de általánosan is belátható, hogy a 2^p típusú teljes faktoros kísérleti tervek ortogonális tulajdonságúak, vagyis a faktorokra (független változókra) teljesül, hogy

$$\sum_i x_{ji} x_{ki} = 0, \text{ ha } j \neq k; \quad j, k = 1, ..., p.$$

A feltételezett modell (elméleti regressziós függvény):

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + ... + \beta_p x_p\ . \qquad (20.4)$$

A lineáris regresszióban és a konfidenciavizsgálatokban itt is célszerű egy szimbolikus x_0 változót bevezetni, amelynek értéke mindig +1, így a β_0 paraméter a többivel azonosan kezelhető, helyette a (20.4)-ben $\beta_0 x_0$ írható. Az így kibővített kísérleti terv:

i	x_0	x_1	x_2

1	+	-	-
2	+	+	-
3	+	-	+
4	+	+	+

Könnyen belátható, hogy az újonnan bevezetett x_0 faktorral is teljesül az ortogonalitás feltétele (l. az 5.2. alfejezetet):

$$\sum_i x_{ji} x_{ki} = 0, \text{ ha } j \neq k;\ j, k = 0, 1, \ldots, p.$$

A paraméterek becslésére, minthogy ortogonális változókról van szó, az 5.2. alfejezetben levezetett formulák használhatók:

$$b_j = \frac{\sum_i y_i x_{ji}}{\sum_i x_{ji}^2} = \frac{\sum_i y_i x_{ji}}{N}, \tag{20.5}$$

ahol N a kísérleti terv pontjainak (beállításainak) száma.

Az ortogonalitás következtében a b_j együtthatók egymástól független becslések, vagyis az egyes faktorok hatása más faktorokétól függetlenül vizsgálható annak ellenére, hogy a kísérleti tervben több faktor szintjét (a független változók értékét) változtatjuk egyszerre.

A becsült paraméterek varianciája:

$$Var\left[b_j\right] = \frac{\sigma_y^2}{\sum_i x_{ji}^2} = \frac{\sigma_y^2}{N}. \tag{20.6}$$

A becsült regressziós függvény varianciája:

$$Var\left(\hat{Y}\right) = \sum_{j=0}^{p} x_j^2 Var\left(b_j\right) = \frac{\sigma_y^2}{N} \sum_{j=0}^{p} x_j^2 \ . \tag{20.7}$$

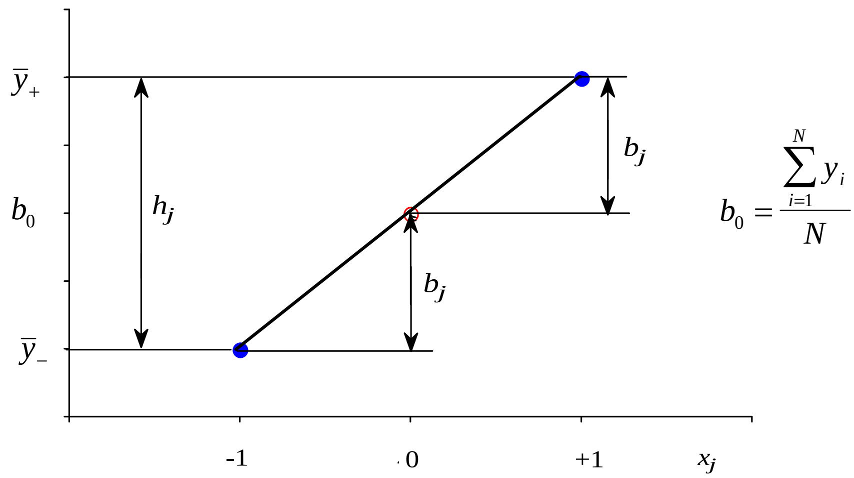
Ez egy p-dimenziós gömb egyenlete, vagyis a becsült függvény varianciája a faktortér bármely irányában csak a terv centrumától mért távolságtól függ. E tulajdonságot forgathatóságnak (rotatability) nevezik, és azért előnyös, mert a kísérleti terv elkészítésekor még nem tudjuk, hogy az optimum felé haladás szempontjából melyik irány fontos számunkra, és ezért melyik irányban kívánatos $\hat{Y}$ bizonytalanságát csökkenteni.

A kísérleti tervek értékelésekor szokás a faktorok hatását grafikusan szemléltetni és számszerűen is megadni. A j-edik faktor hatása (h_j) az alábbi képlettel írható le:

$$h_j = \left(\bar{y}_{j+}\right) - \left(\bar{y}_{j-}\right) \tag{20.8}$$

ahol $\bar{y}$ általánosságban a függő változó (célfüggvény) számtani középértéke; a j+ és j– alsó index a fölső, illetve az alsó szinthez tartozó középértéket jelez.

Könnyen belátható, hogy a b_j együttható értéke a megfelelő hatás fele. Ezt szemlélteti a transzformált x_j változó függvényében a 20-2. ábra.



20-2. ábra. A faktor hatásának és együtthatójának kapcsolata

20-1. példa

2^2 kísérleti terv végrehajtásakor két célfüggvényt (y_1 és y_2) vizsgáltak és az alábbi eredményeket kapták:

20-1. táblázat

i	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	y_1	y_2
1	+	–	–	+	23	26
2	+	+	–	–	19	12
3	+	–	+	–	31	30
4	+	+	+	+	27	32

a) Először értékeljük ki a tervet az y_1 változóra!

A (20.4) lineáris modell paramétereinek becslése:

$$b_0 = \frac{23+19+31+27}{4} = 25; \qquad b_1 = \frac{-23+19-31+27}{4} = \frac{46-54}{4} = -2;$$

$$b_2 = \frac{-23-19+31+27}{4} = \frac{58-42}{4} = 4.$$

A becsült sík egyenlete: $\hat{Y} = 25 - 2x_1 + 4x_2$.

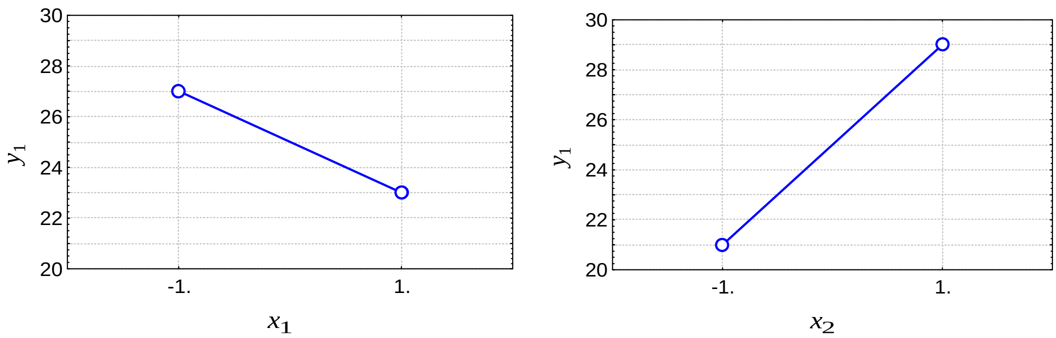
Az 1. faktor hatása a fölső szinten és az alsó szinten mért y_1 értékek átlagainak különbsége:

1. faktor: $h_1 = \frac{19+27}{2} - \frac{23+31}{2} = \frac{46}{2} - \frac{54}{2} = 23 - 27 = -4$,

2. faktor: $h_2 = \frac{31+27}{2} - \frac{23+19}{2} = \frac{58}{2} - \frac{42}{2} = 29 - 21 = 8$.

Tehát a 20-2. ábrának megfelelően a hatás az együttható kétszerese.

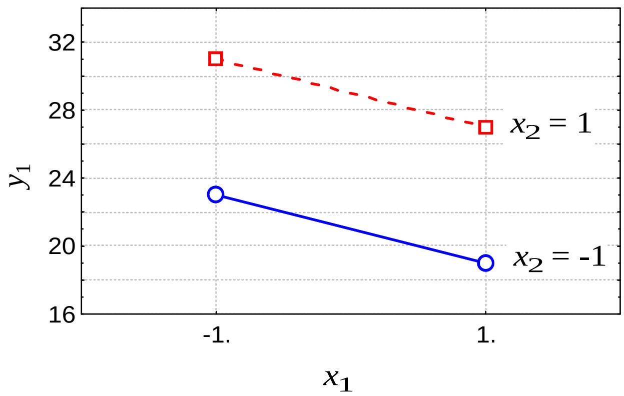
Most szemléltessük grafikusan a faktorok hatását.



20-3. ábra. A faktorok hatása az y_1 változóra a 20-1. példában

A hatás (20.8) definíciójában az adott faktor fölső és alsó szintjén vett számtani átlag kiszámításakor a többi faktor szintjeinek kombinációja szerint nem teszünk további megkülönböztetést, mert a terv szerkezete (ortogonalitás) biztosítja, hogy a hatásokat egymástól függetlenül értékelhessük ki.

Egyes esetekben a faktorok hatása additív. Ez azt jelenti, hogy a vizsgált faktor hatása azonos a többi faktor minden szintkombinációjában. Végezzünk erre grafikus ellenőrzést. Készítsünk olyan ábrát, amelyen az 1. faktor hatását a 2. faktor alsó és fölső szintjén külön-külön ábrázoljuk!



20-4. ábra. A faktorok kölcsönhatása a 20-1. példában, a célfüggvény: y_1

A 20-4. ábrán az x_2 alsó és fölső szintjéhez tartozó egyenesek párhuzamosak, azaz az x_1 faktor hatása (a fölső és alsó szinthez tartozó y_1 érték különbsége) azonos az x_2 faktor mindkét szintjén, tehát nincs a faktorok között kölcsönhatás (interakció).

b) Végezzük el az értékelést az y_2 változóra is!

A lineáris modell paramétereinek becslése:

$$b_0 = \frac{23+19+31+27}{4} = 25; \qquad b_1 = -3; \qquad b_2 = 6.$$

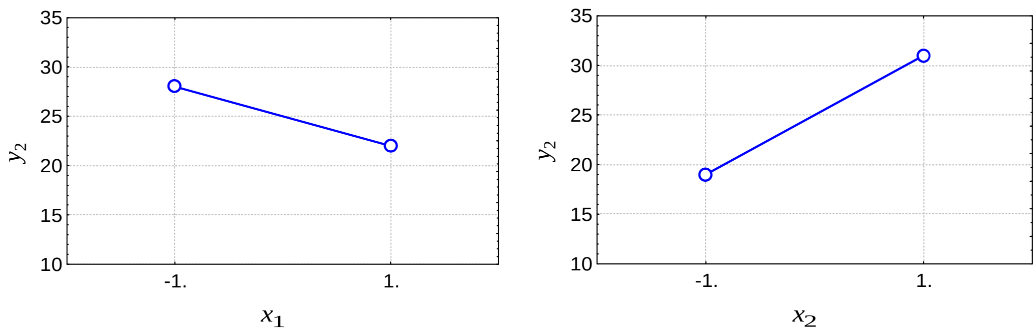
A becsült sík egyenlete: $\hat{Y} = 25 - 3x_1 + 6x_2$.

A faktorok hatása:

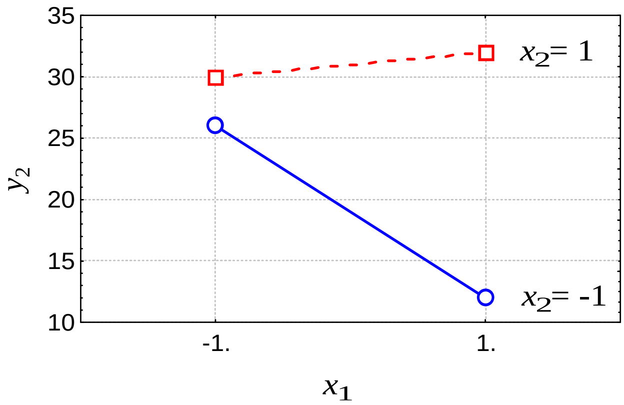
1. faktor: $h_1 = 22 - 28 = -6$,

2. faktor: $h_2 = 31 - 19 = 12$.

Szemléltessük grafikusan a faktorok hatását és ellenőrizzük a faktorok közötti kölcsönhatást is!



20-5. ábra. A faktorok hatása az y_2 változóra a 20-1. példában



20-6. ábra. A faktorok kölcsönhatása a 20-1. példában, a célfüggvény: y_2

A 20-4. ábrával ellentétben, a 20-6. ábrán az x_2 alsó és fölső szintjéhez tartozó egyenesek nem párhuzamosak, azaz az x_1 faktor hatása függ az x_2 faktor beállításától, tehát a hatások nem additívak, vagyis a faktorok között van kölcsönhatás (interakció).

Az elméleti modellt finomítanunk kell, figyelembe kell vennünk, hogy a hatások nem additívak. Mivel a faktorokat csupán két szinten vizsgáljuk, ezért továbbra is lineáris modellt kell használnunk. Lineáris modellt illesztve, a modellben az interakciót az $x_1 x_2$ taggal vehetjük figyelembe:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 \,. \qquad (20.9)$$

Az $x_1 x_2$ tag a modellben újabb független változóként kezelendő, de ez természetesen a valóságban nem jelenti a vizsgált faktorok számának a megnövekedését, hiszen az x_1 és x_2 faktorok szintjeinek megválasztásával meghatározott lesz $x_1 x_2$ értéke is. $x_1 x_2$ együtthatója azt fejezi ki, hogy az x_1 faktor hatása milyen mértékben függ a másik faktor szintjétől. Az együttható értéke pozitív, ha x_1 növelése nagyobb mértékben növeli y értékét az x_2= +1 beállításnál, mint x_2= –1-nél.

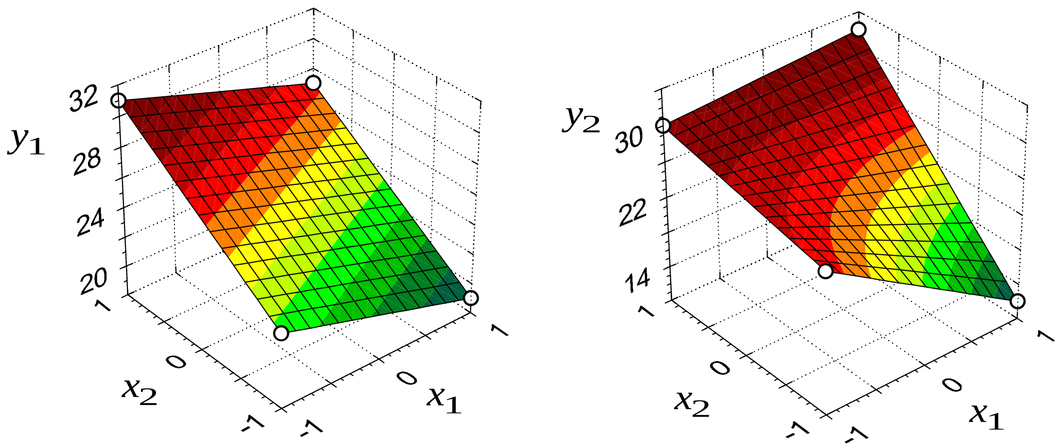
Könnyen belátható, hogy az újonnan bevezetett $x_1 x_2$ változóra is teljesül az ortogonalitás feltétele, tehát a kölcsönhatás becslése független a főhatások becslésétől. Általánosan megfogalmazva tehát:

$$\sum_i x_{\ell i}\left(x_{ji} x_{ki}\right) = 0 \text{, ha } j \neq k; \; j, \; k = 1, ..., p; \; \ell = 0, ..., p.$$

A példában a kölcsönhatás együtthatója:

$$b_{12} = \frac{26 - 12 - 30 + 32}{4} = \frac{58 - 42}{4} = \frac{16}{4} = 4 \,.$$

Az y_1 ill. y_2 célfüggvények és a vizsgált faktorok közötti függvénykapcsolatot (válaszfelületet) háromdimenziós koordináta-rendszerben is bemutatjuk (20-7. ábra).



a) $\hat{Y}_1 = 25 - 2x_1 + 4x_2$ *b*) $\hat{Y}_2 = 25 - 3x_1 + 6x_2 + 4x_1x_2$

20-7. ábra. A becsült modellek 3 dimenziós ábrázolása az 20-1. példában

A 20-7*a*) ábrán jól látható, hogy ha a faktorok között nem lép fel kölcsönhatás, az illesztett modell két faktor esetén egy sík egyenlete. Ha a faktorok között kölcsönhatás van, a felület csavarodott (20-7*b*) ábra). Ezt is még lineáris modellnek nevezik abban az értelemben, hogy négyzetes tagok nincsenek benne.

Mennyiségi faktorok esetén a becsült modellt interpolációra illetve extrapolációra egyaránt használhatjuk, azaz x_j ($j = 1, \ldots, p$) elvben tetszőleges értéket felvehet.

Minőségi faktorok esetén mindegyik x_j csak a –1 és a +1 szinten értelmezhető, tehát más értéket nem vehet fel. Ebből következik, hogy minőségi faktorra az illesztett modellel csak a tervben szereplő szintekhez (+ ill. –) végezhető számítás.

Mennyiségi faktorok vizsgálata esetén célszerű a terv centrumában is végezni méréseket. Ez két szempontból is előnyös:

a) egyrészt ismétlés nélkül végrehajtott terv esetén a centrumban végzett mérések lehetőséget adnak a σ_y^2 variancia becslésére,

b) másrészt a centrumpontbeli kísérleti információ az illesztett lineáris modell ellenőrzésére is szolgál (adekvát-e a modell).

a) Ha van s_y^2 becslésünk σ_y^2 -re, statisztikai próbával vizsgálhatjuk, hogy a *b* becsült paraméterek szignifikánsan különböznek-e zérustól. Ehhez felhasználhatjuk, hogy

$$t = \frac{b_j - \beta_j}{s_{b_j}}, \quad \text{ahol} \quad s_{b_j}^2 = \frac{s_y^2}{\sum_i x_{ji}^2} = \frac{s_y^2}{N}.$$

Az ismertetett példában ismételt méréseket végeztek a terv centrumában (ahol minden faktor szintje 0), amelyeknek eredményei az y_1 célfüggvényre:

$$y_{11}^0 = 25, \qquad y_{12}^0 = 25, \qquad y_{13}^0 = 26, \qquad \bar{y}_1^0 = \frac{\sum_{m=1}^{3} y_{1m}^0}{3} = 25.33.$$

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

$$s_{b_j}^2 = \frac{0.333}{4} = 0.0833, \quad s_{b_j} = 0.289.$$

Most már elvégezhetjük a próbát, amelynek nullhipotézise:

$$H_0: \ \beta_j = 0.$$

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

$$P(-t_{\alpha/2} < b_j / s_{b_j} < t_{\alpha/2}) = 1 - \alpha.$$

Ebből látszik, hogy a nullhipotézist akkor utasítjuk el, ha

$$|b_j| > s_{b_j} t_{\alpha/2}$$

$\alpha = 0.05$ szignifikanciaszinthez, $\nu = 2$ szabadsági fok esetén a III. táblázatból $t_{0.05/2} = 4.3$; $s_{b_j} t_{\alpha/2} = 0.289 \cdot 4.3 = 1.243$; vagyis azon együtthatókat tekinthetjük szignifikánsnak (a zérustól szignifikánsan különbözőnek), amelyek abszolút értéke 1.243-nál nagyobb. A példában x_1 és x_2 együtthatója (b_1 és b_2) egyaránt szignifikáns.

Megjegyezzük, hogy lehetne ismételt méréseket végezni a terv bizonyos pontjában vagy bármely más pontban is, minthogy σ_y^2 konstans. Még ha az ismétléseket a terv valamely pontjában végezzük is, az ekkor mért adatok nem vonhatók össze az eredeti terv megvalósítása során kapottakkal, vagyis nem átlagolhatjuk őket együtt. Ugyanis ha a terv különböző pontjaiban az ismétlések száma különböző, a pontok súlya $\left(\sigma_y^2 / p_i\right)$ különböző.

b) Ellenőrizzük, hogy az y_1 függő változó illesztett lineáris modell adekvát-e (nincs-e szükség másodfokú tagra)! A centrumban végzett mérések eredményei az Y_1 felületen lévő valódi függvényérték (Y_1^0) körül ingadoznak, a számtani közép várható értéke:

$$E\left(\bar{y}_1^0\right) = Y_1^0$$

A 2^2 terv négy pontjában kapott mérési adatokra illesztett lineáris modellből számított centrumbeli érték megegyezik b_0 értékével ($\hat{Y}_1^0 = b_0$). A becsült tengelymetszet (b_0) várható értéke azonban csak akkor egyezik meg a centrumbeli y_1 mérések várható értékével, ha a valóságban az Y_1 felület lineáris. A lineáris modell érvényessége esetén tehát (nullhipotézis):

$$H_0:\ E\left(b_0\right)=E\left(\bar{y}_1^0\right)=Y_1^0 . \tag{20.10a}$$

Az ellenhipotézis az, hogy nem lineáris a modell, azaz

$$H_1:\ E\left(b_0\right)\neq E\left(\bar{y}_1^0\right). \tag{20.10b}$$

Ha feltételezzük, hogy a valóságban a 20-1. példában szereplő Y_1 felület nem lineáris, a 20-8. ábrán vázolt helyzet fordulhat elő (a modell nem adekvát, H_0 nem igaz). A 2^2 terv mért y_1 értékeire illesztett sík metszi a valóságban nemlineáris Y_1 felületet. A modell becsült b_0 értéke a sík középpontjában van, a centrumbeli mérések átlaga pedig tőle távol, a valódi Y_1 felület közelében van.

A próbastatisztika (a kétmintás *t*-próba analógiájára):

$$t_0=\frac{d}{s_d}\ , \tag{20.11a}$$

ahol most

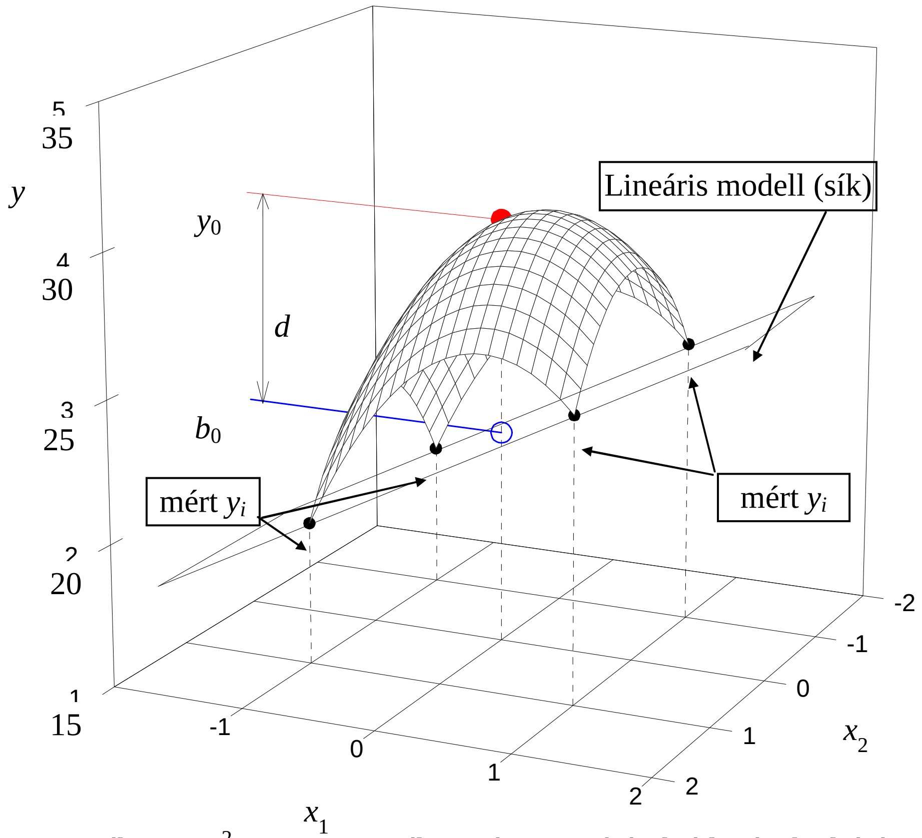
$$d=\bar{y}^0-b_0 , \tag{20.11b}$$

$$s_d^2=s_y^2\left(\frac{1}{k_c}+\frac{1}{N}\right), \tag{20.11c}$$

mivel

$$Var\left(\bar{y}^0-b_0\right)=Var\left(\bar{y}^0\right)+Var\left(b_0\right)=\frac{\sigma_y^2}{k_c}+\frac{\sigma_y^2}{N} . \tag{20.11d}$$

k_c a centrumban végzett ismétlések száma, l az illesztett modell paramétereinek száma. A t próbastatisztika szabadsági foka N-l+k_c-1, vagyis s_r^2 és s_{y0}^2 szabadsági fokainak összege.



20-8. ábra. A 2^2 terv centrumában végzett mérések átlagának eltérése a lineáris modell b_0 konstansától: a modell nem adekvát

A 20-1. példában: $d = 25.33 - 25 = 0.33$; $s_d^2 = 0.333\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{3}\right) = 0.1943$; $s_d = 0.441$;

$$t_0 = \frac{0.33}{0.441} = 0.748, \qquad t_0 < t_{0.05/2}(2) = 4.3,$$

tehát az adatok nem mondanak ellent annak a nullhipotézisnek, hogy az Y_1 felület lineáris, vagyis a modell adekvát.

A statisztikai programokban ezt a hipotézisvizsgálatot görbeség-ellenőrzésnek nevezik (curvature check).