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 reakcióidő, min;
z_2 hőmérséklet, °C;
z_3 fordulatszám, 1/min;
z_4 katalizátor koncentrációja, %;
z_5 felesleg, %;
z_6 nyomás, bar;
z_7 szennyezés-koncentráció, %.

.

z_1 reakcióidő, min;
z_2 hőmérséklet, °C;
z_3 fordulatszám, 1/min;
z_4 katalizátor koncentrációja, %;
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} rész-faktorterv, 3 ismétlés a centrumpontban:

$$x_4 = -x_1 x_2 \;;\quad x_5 = x_1 x_3 \;;\quad x_6 = x_2 x_3 \;;\quad x_7 = x_1 x_2 x_3$$

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

Effect Estimates; Var.:y; R-sqr=.99829; Adj:.99143 (4fb_example)
2**(7-4) design; MS Residual=1.366633
DV: y
Include condition: Blokk=1

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)idõ	15.50000	0.826630	18.7508	0.002832
(2)hõmérséklet	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

Confounding of Effects (4fb_example)
2**(7-4) design
(Factors are denoted by numbers)
Include condition: Blokk=1

Factor	Alias 1	Alias 2	Alias 3
1	2*4	3*5	6*7
2	1*4	3*6	5*7
3	1*5	2*6	4*7
4	1*2	3*7	5*6
5	1*3	2*7	4*6
6	1*7	2*3	4*5
7	1*6	2*5	3*4

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

Confounding of Effects (4fb_exampl

Factor	Alias 1	Alias 2
Curvatr.		
(1)idõ		
(2)hõmérséklet		
(3)ford.szám		
(4)kat.konc.		
(5)felesleg		
(6)nyomás		
(7)szenny.konc.		
1 by 2	3*7	5*6
1 by 3	2*7	4*6
1 by 4	3*6	5*7
1 by 5	2*6	4*7
1 by 6	2*5	3*4
1 by 7	2*3	4*5
2 by 4	3*5	6*7

Effect Estimates; Var.:y; R-sqr=.99852; Adj:.99378 (4fb_example)
7 factors at two levels; MS Residual=.939107
DV: y

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)idõ	15.07375	0.484538	31.1096	0.000001
(2)hõmérséklet	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

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

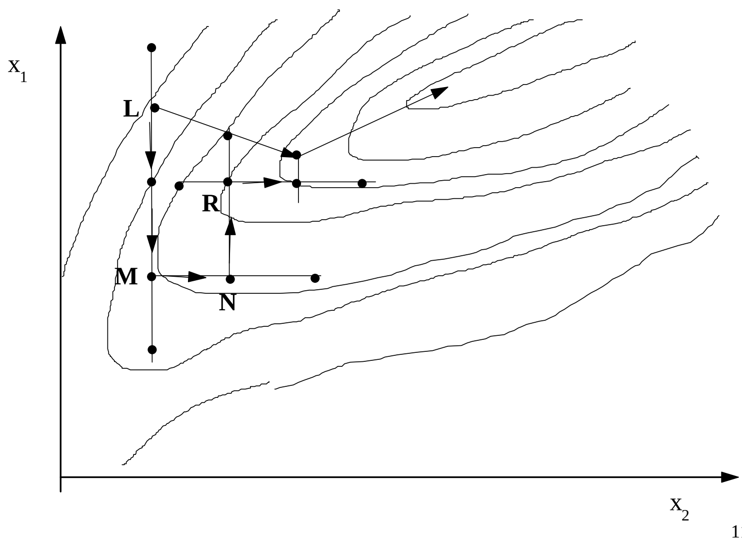
Az illesztett lineáris függvény:

$$\hat{Y} = 49.28 + 7.54x_1 + 11.61x_2 + 2.30x_5 = 51.58 + 7.54x_1 + 11.61x_2$$

$$49.28 + 2.30 \cdot (+1) = 51.58$$

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.

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

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

116

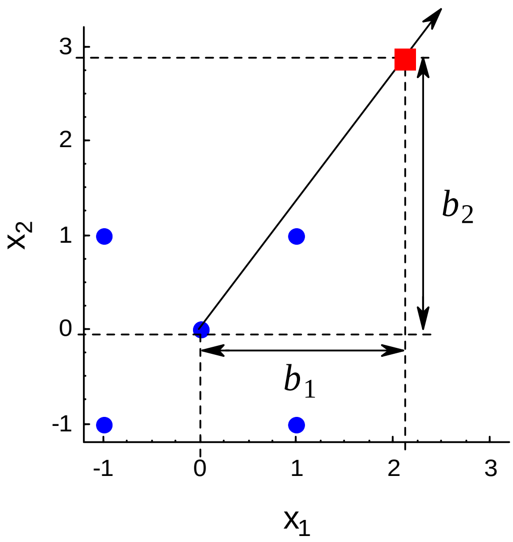
A gradiens-függvény:

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

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 .

117

A gradiens:



A tervpontokra illesztett modell:

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

● tervpontok
■ lépésterv

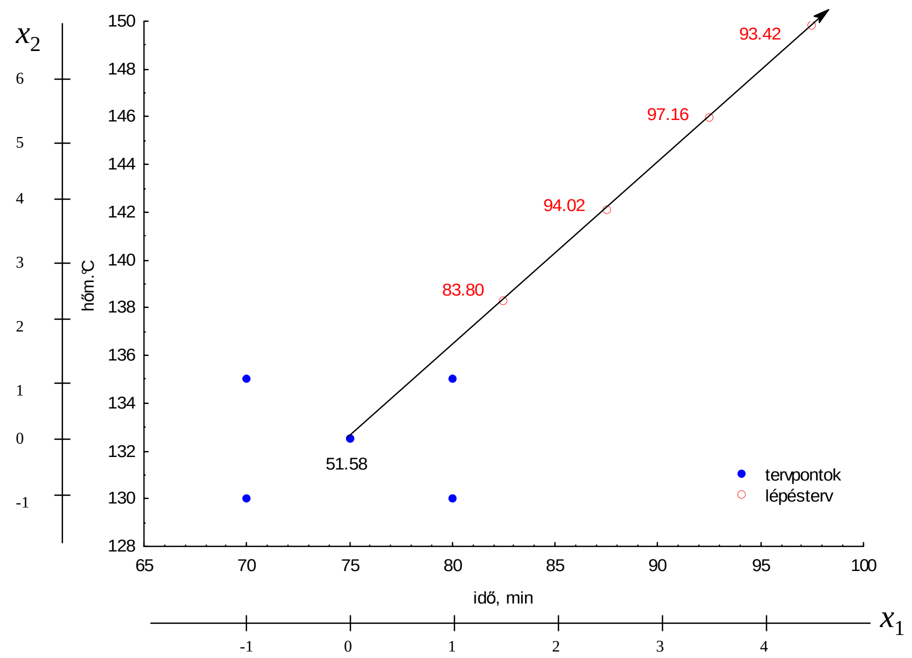
5. példa: a 4. példa folytatása;
lépésterv a gradiens mentén

A tervpontokra illesztett egyenlet: $\hat{Y} = 51.58 + 7.54 x_1 + 11.61 x_2$

j	1	2
z_j^0	75	132.5
Δz_j	5	2.5
b_j	7.54	11.61
$b_j \Delta z_j$	37.70	29.03
lépés	2.5	1.92

$$\frac{b_2}{b_1} = \frac{11.61}{7.54} = 1.540$$

sorszám	x_1	x_2	idő, min	hőm., °C	y, %
tervcentrum	0	0	75.0	132.5	
	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	idő, min	hőm., °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

Effect Estimates; Var.:y; R-sqr=.98868; Adj:.96605 (6-7_example)
2**(2-0) design; MS Residual=.7016333
DV: y
Include condition: Block=1

Factor	Effect	Std.Err.	t(2)	p
Mean/Interc.	89.277	0.4188	213.17	0.000022
Curvatr.	10.972	1.2795	8.57	0.013329
(1)idõ	3.665	0.8376	4.38	0.048469
(2)hõmérséklet	4.115	0.8376	4.91	0.039026
1 by 2	-6.375	0.8376	-7.61	0.016830

Másodfokú modell illesztésére alkalmas terv szükséges!

Másodfokú kísérleti tervek

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

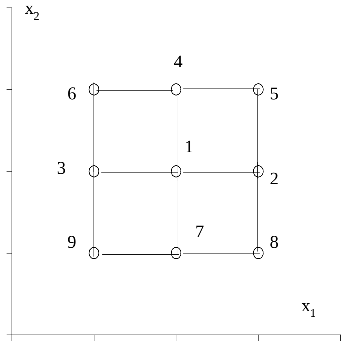
A másodfokú modell paraméterei nem becsülhetők a 2^p és 2^{p-r} tervek eredményeiből.

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	–	–



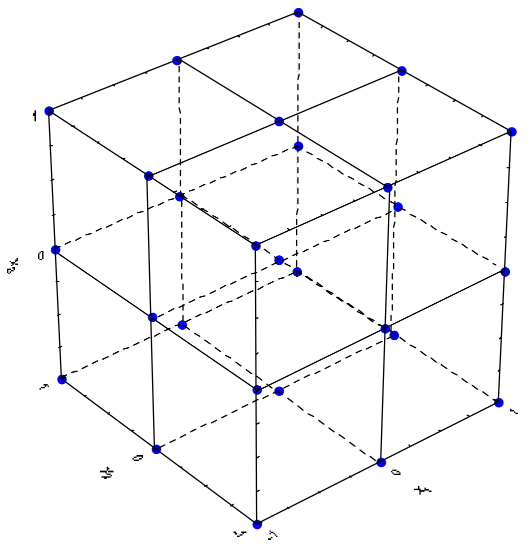
Két faktorra a 3^2 kísérleti terv

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

i	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x_1^2	x_1'	x_2'	$x_1'x_2'$
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	0	-2/3	1/3	-2/9
8	+	0	-	0	0	-2/3	1/3	-2/9
9	+	0	0	0	0	-2/3	-2/3	4/9

centering and scaling

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

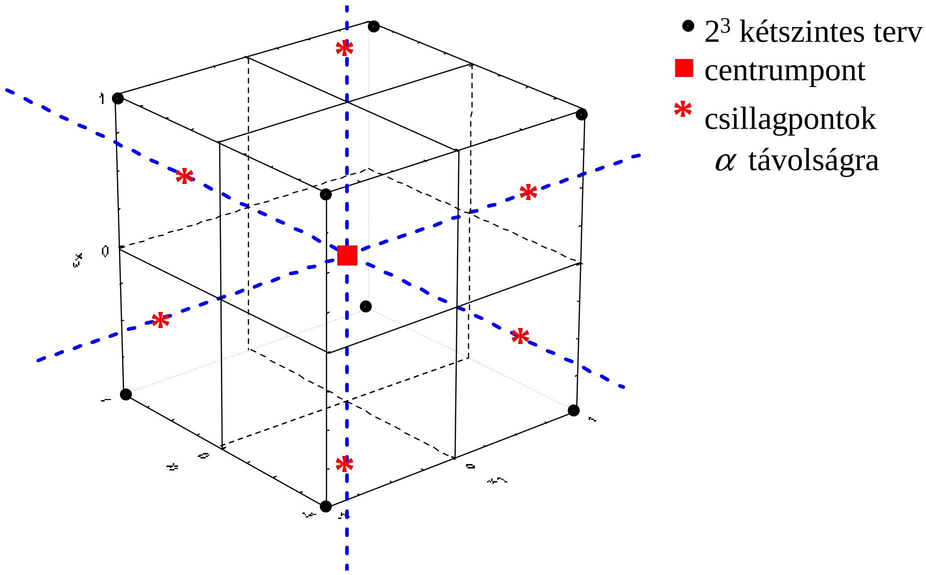
magja egy $2p$ típusú teljes faktoros kísérleti terv ($p \geq 5$ esetén részfaktorterv).
$2p$ csillagpont a centrumtól α távolságra
és k_c centrumbeli kísérlet.

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

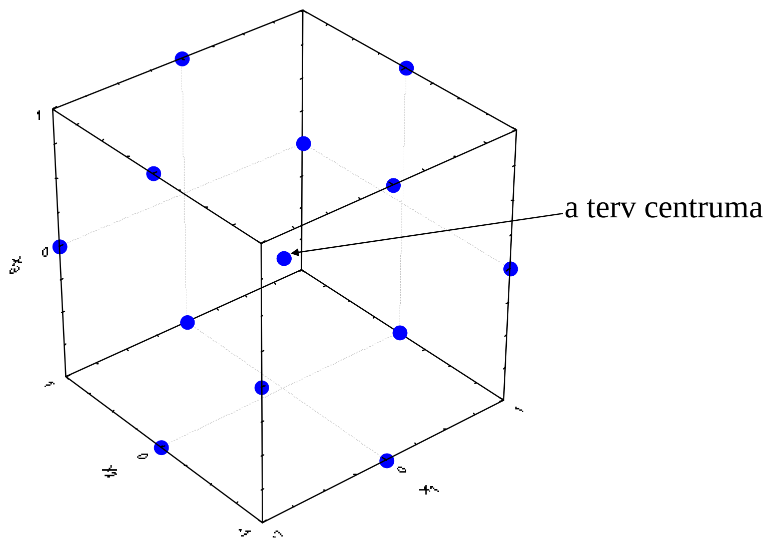
Az α értékének megválasztása szerint a terv lehet ortogonális vagy forgatható. Ortogonális terv és $k_c=1$ esetére:

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



Box-Behnken terv 3 faktorra



11. 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	1	90	145	94.84
8	**2**	**75.858**	**145**	**88.62**
9	**2**	**104.142**	**145**	**92.18**
10	**2**	**90**	**137.929**	**85.80**
11	**2**	**90**	**152.071**	**91.12**
12	**2**	**90**	**145**	**94.87**
13	**2**	**90**	**145**	**95.36**
14	**2**	**90**	**145**	**95.18**

2^2 terv

Csillagpontok és centrumpont

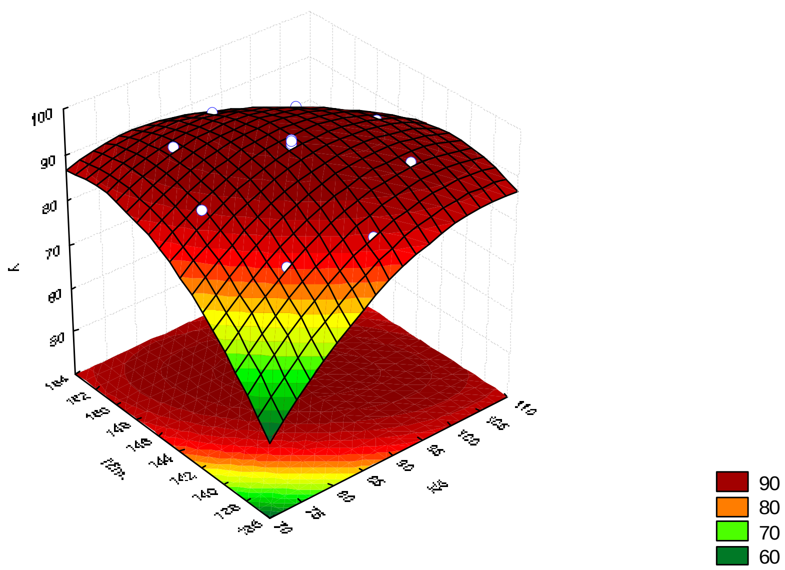
Effect Estimates; Var.:y; R-sqr=.9888; Adj:.9792 (6-7_example)
2 factors, 2 Blocks, 14 Runs; MS Residual=.3269877
DV: y

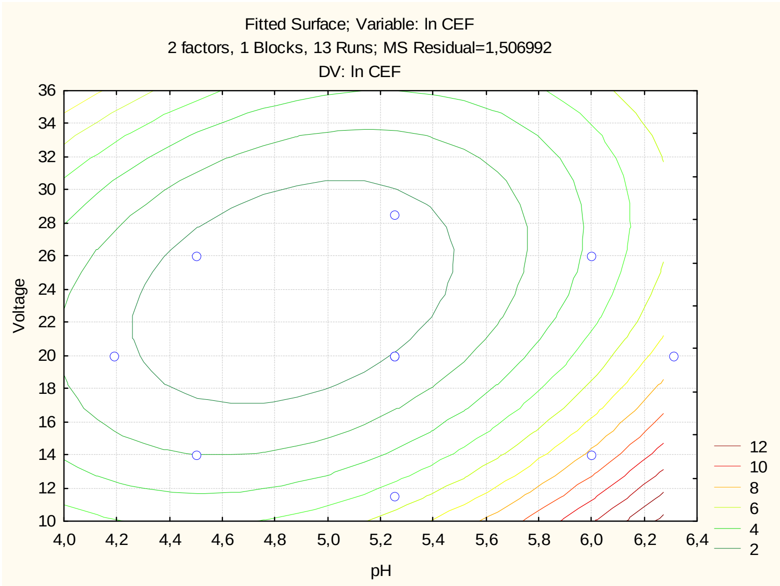
Factor	Effect	Std.Err.	t(7)	p
Mean/Interc.	94.950	0.233	406.73	0.000000
Block(1)	0.247	0.306	0.81	0.445370
(1)idõ (L)	3.091	0.404	7.64	0.000122
idõ (Q)	-4.626	0.421	-10.99	0.000011
(2)hõmérséklet(L)	3.938	0.404	9.74	0.000025
hõmérséklet(Q)	-6.566	0.421	-15.60	0.000001
1L by 2L	-6.375	0.572	-11.15	0.000010

A blokk nem szignifikáns

Factor	Regr. Coefficients; Var.:y; R-sqr=.9888; Adj:.9792 (6-7_example) 2 factors, 2 Blocks, 14 Runs; MS Residual=.3269877 DV: y			
	Regressn Coeff.	Std.Err.	t(7)	p
Mean/Interc.	-3756.48	193.9816	-19.37	0.000000
Block(1)	0.12	0.1528	0.81	0.445370
(1)idõ (L)	13.56	0.9118	14.87	0.000001
idõ (Q)	-0.02	0.0021	-10.99	0.000011
(2)hõmérséklet(L)	44.22	2.4949	17.72	0.000000
hõmérséklet(Q)	-0.13	0.0084	-15.60	0.000001
1L by 2L	-0.06	0.0057	-11.15	0.000010

Fitted Surface; Variable: y
2 factors, 2 Blocks, 12 Runs; MS Residual=.5666198
DV: y




Fitted Surface; Variable: ln CEF
2 factors, 1 Blocks, 13 Runs; MS Residual=1,506992
DV: ln CEF
Voltage
pH
36
34
32
30
28
26
24
22
20
18
16
14
12
10
4,0
4,2
4,4
4,6
4,8
5,0
5,2
5,4
5,6
5,8
6,0
6,2
6,4
12
10
8
6
4
2