

# Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

---

Milan Beneš; Jiří Likeš

Vyšetřování a určování optimálních technologických podmínek

*Pokroky matematiky, fyziky a astronomie*, Vol. 2 (1957), No. 5, 523--533

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/137192>

## Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 1957

Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of the Czech Republic provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This paper has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://project.dml.cz>

# VYŠETŘOVÁNÍ A URČOVÁNÍ OPTIMÁLNÍCH TECHNOLOGICKÝCH PODMÍNEK

MILAN BENEŠ,

Ústav pro výzkum rud, Praha

JIŘÍ LIKEŠ,

Ocelářský výzkumný ústav, Praha

Účelem práce je seznámit čtenáře s metodami určování optimálních podmínek, které jsou představovány úrovněmi faktorů, pro které je vyšetřovaná faktorová funkce maximální nebo minimální. Po úvodu, kde je objasněn význam těchto method pro použití v praxi, je v druhé části dodán krátký historický přehled vzniku method hledání maxima faktorové funkce experimentální cestou především s hlediska jejich možnosti použití v praxi. V další části jsou vyloženy theoretické principy metody největšího spádu. Dále jsou některé pojmy objasněny na příkladu experimentu z flotačního výzkumu. Poněkud podrobněji jsou rozvedeny otázky použití metody největšího spádu v úplných i neúplných faktorových experimentech typu  $2^n$  a ve složených experimentech. Poslední část je věnována stručnému přehledu vyšetřování faktorové funkce ve stacionární oblasti.

## Úvod

Při navrhování technologických postupů se hledají zpravidla nejprve ve výzkumu takové podmínky, pro které je navrhovaný technologický postup nejúčelnější a nejhospodárnější. Tyto podmínky je nutno určovat a ověřovat na základě určitých theoretických předpokladů experimentálním postupem. Je však důležité uspořádat a provádět pokusy takovým způsobem, abychom tyto optimální podmínky určili správně při provedení minimálního počtu pokusů.

V práci [7] byly uvedeny některé způsoby uspořádání pokusů při faktorových experimentech a byly stručně objasněny metody pro jejich hodnocení. Pojmy, které tam byly zavedeny, budeme užívat i v tomto článku. V závěru uvedené práce byly zhodnoceny dva nejdůležitější rysy průmyslových experimentů. Prvým z nich je postupné navrhování a provádění pokusů. Každý další pokus nebo skupina pokusů je prováděna obvykle tehdy, jestliže je znám výsledek pokusů předcházejících. Tato zkušenost z předcházejících pokusů umožňuje experimentátoru snížit počet pokusů. Dalším charakteristickým rysem průmyslových experimentů, pokud nejde teprve o předběžný technologický výzkum, je stanovit při daných faktorech jejich optimální úroveň. Těmito optimálními úrovněmi myslíme takové, při kterých bude výsledek pokusu jako funkce různých kombinací úrovní faktorů maximální nebo minimální. Tak na příklad bývá obvyklé experimentálně z pokusů určit takové úrovně faktorů, pro které výtěžek nebo obsah určité látky bude maximální; jindy na př. lze považovat za optimální technologický postup takový, pro který obsah nečistot nebo vynaložené náklady budou minimální.

V experimentu lze samozřejmě sledovat více kvalitativně odlišných výsledků, z nichž pro určité kombinace úrovní faktorů je proces optimální vzhledem k jednomu výsledku,

zatím co optimálních oblastí vzhledem k ostatním výsledkům může být dosaženo pro jiné kombinace úrovní faktorů. Potom rozhodování o úrovních faktorů, které jsou optimální ke všem sledovaným výsledkům, nebývá zpravidla jednoznačné a lze o nich rozhodovat v závislosti na konkrétní situaci. Toto rozhodování však již spadá do oboru, ve kterém se experiment provádí a není statistické povahy.

Nevýhody faktorových experimentů byly stručně shrnuty v závěru práce [7]. Tyto nevýhody spočívají především v tom, že všechny pokusy, pokud se jejich uspořádání provádí v praxi již vyloženým postupem, je nutno navrhovat pro celý experiment bez ohledu na to, jaké výsledky byly při jednotlivých pokusech získány. Proto byly hledány nové způsoby a možnosti uspořádání experimentů, které jsou vhodné pro zkoumání optimálních podmínek.

Dále budeme uvažovat při určování optimálních podmínek pouze faktory kvantitativní. Máme-li  $n$  faktorů  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , budeme nazývat  $n$ -rozměrný euklidovský prostor faktorů  $x_1, x_2, \dots, x_n$  faktorovým prostorem. Funkci faktorů  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , která je pro určitou kombinaci jejich úrovní (neuvažujeme-li experimentální chybu) reprezentována výsledkem pokusu, který studujeme a který je možno kvantitativně vyjádřit, označíme  $\eta = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , a tuto funkci budeme nazývat faktorovou funkcí (*response function*). Úkolem experimentátora je postupně navrhnout a uspořádat pokusy, t. j. posloupnost kombinací úrovní faktorů  $(x_{11}, x_{21}, \dots, x_{n1}), (x_{12}, x_{22}, \dots, x_{n2}), \dots, (x_{1j}, x_{2j}, \dots, x_{nj}), \dots$  tak, aby co nejdříve dosáhl nebo se aspoň dostatečně přiblížil k takové kombinaci úrovní faktorů, reprezentovanou bodem ve faktorovém prostoru  $(x_{1M}, x_{2M}, \dots, x_{nM})$ , pro který je sledovaný výsledek pokusů (bez ohledu na experimentální chybu) maximální, t. j.  $\max \eta = \eta_M = f(x_{1M}, x_{2M}, \dots, x_{nM})$ . Je ovšem možné, že existuje více bodů faktorového prostoru, pro které je faktorová funkce maximální. Problém hledání minima faktorové funkce je zcela obdobný a proto se jím nebudeme zabývat.

Poněvadž experimenty v průmyslovém výzkumu jsou většinou dost zdlouhavé a nákladné, chceme, aby počet pokusů, kterými se dostatečně přiblížíme k optimálním podmínkám, byl skutečně co nejmenší. Proto tato práce je zaměřena na výklad metod vypracovaných v poslední době, které mají za účel s nejmenším počtem pokusů určit optimální podmínky.

### Přehled vývoje method pro řešení optimálních podmínek

Problémy uspořádání pokusů a jejich hodnocení pro určení maxima faktorové funkce řešil již H. Hotelling v r. 1941 [1]. Omezil se však převážně na vyšetřování pouze jednoho faktoru a problematiku dvou faktorů spíše jen naznačil. Podstata jeho práce spočívá v tom, že výsledky pokusů vyrovnává parabolou druhého stupně a z její derivace počítá maximum. Pak jsou zkoumány chyby vzniklé jednak experimentální chybou, jednak nahrazením neznámé faktorové funkce parabolou druhého stupně. Aby tato chyba byla co nejmenší, je nutno již předem znát přibližnou polohu maxima faktorové funkce buď na základě určitých theoretických předpokladů nebo z předcházejících pokusů. Proto je vhodné ještě před uspořádáním experimentu, ze kterého má být maximum faktorové funkce určeno, provést několik postupně se zvětšujících předběžných informativních experimentů, ze kterých má být zřejmý přibližný tvar faktorové funkce. Celkově je proble-

matika této práce značně omezena především s hlediska počtu uvažovaných faktorů a proto, že se autor nezabýval otázkou, jak pokusy uspořádat, abychom mohli dosáhnout maxima. Na druhé straně je však již zřejmé, i když ne ještě zcela vyhraněně, sekvenční charakter prováděných pokusů, kterými se mají zjistit dané optimální podmínky reprezentované určitým maximem nebo minimem.

V roce 1946 upozornili na nevýhody faktorových experimentů, především s praktického hlediska velkého počtu pokusů, při studiu optimálních podmínek Savage a Friedman v práci [2]. Pro  $n$  faktorů, každý o  $k$  úrovních, je nutno provést v úplném faktorovém experimentu  $k^n$  pokusů. Jsou-li počet faktorů i úrovní větší, celkový počet pokusů je již tak velký, že je nelze v praxi provádět. Je-li počet úrovní faktorů velký, zkoumáme často též oblasti faktorového prostoru, která je značně vzdálena od oblasti, kde faktorová funkce je maximální a proto nás již tolik nezajímá. Jestliže naopak počet úrovní faktorů je malý (nejčastější případ faktorových experimentů), můžeme zkoumat oblasti faktorového prostoru, které maxima třeba vůbec neobsahují.

Proto Friedman a Savage navrhuji sekvenční opakování v podstatě klasicky uspořádaných experimentů. Změnami úrovní prvního faktoru při ostatních faktorech konstantních zjistíme úroveň prvního faktoru, pro kterou je faktorová funkce maximální. Pro tuto úroveň prvního faktoru měníme úrovně dalších faktorů a postupně zjišťujeme jejich optimální úrovně. Při změně posledního faktoru dostaneme určitou kombinaci úrovní faktorů vyjádřenou bodem faktorového prostoru  $(x_{11}, x_{21}, \dots, x_{n1})$ . Tento bod zpravidla nevyjadřuje optimální kombinaci, při které dostaneme maximum funkce  $\eta$  ve faktorovém prostoru  $R_n$ . Jestliže se chceme více přiblížit ke skutečnému maximu faktorové funkce  $\eta$ , je možno celý proces postupných změn úrovní jednotlivých faktorů opakovat. Poněvadž pro jednu fázi tohoto experimentu je třeba učinit  $kn$  pokusů, je možno ve srovnání

s úplným faktorovým experimentem provést  $\frac{k^n}{kn} = \frac{k^{n-1}}{n}$  fází. Pro větší počet faktorů i jejich úrovní je tedy možno provést více fází experimentu, čímž se lépe přiblížíme ke skutečnému maximu faktorové funkce  $\eta$ . V kterém případě dosáhneme tohoto maxima hned v první fázi experimentu, objasníme dále. V prvních fázích experimentu se zkoumají úrovně jednotlivých faktorů v širších rozmezích, v dalších fázích se tato rozmezí stávají stále užšími a tím je faktorová funkce prozkoumána podrobněji v okolí svého maxima. I přes tyto výhody má uvedená v podstatě klasická metoda celou řadu nevýhod, které již byly naznačeny v práci [7]. Pokud je známo, podrobnější matematická teorie těchto experimentů a jejich hodnocení nebyla dosud vypracována.

S theoretického hlediska bylo studováno uspořádání pokusů při hledání maxima faktorové funkce pomocí stochastických aproximací methodou původně vypracovanou Robbinsem a Munroem. V práci [3] byla navržena na základě posloupnosti konstant, splňující jisté vlastnosti, rekurentním způsobem posloupnost úrovní faktorů, která konverguje v pravděpodobnosti za určitých dosti obecných předpokladů k bodu, kde faktorová funkce je maximální. Methoda byla vypracována pouze pro sledování jednoho faktoru. Za poněkud obecnějších předpokladů dokázal J. Blum v práci [4], že rekurentní posloupnost úrovní faktorů konverguje skoro jistě (konvergence v míře). V [5] byla tato methoda založená na stochastických aproximacích zobecněna pro případ  $\eta \geq 2$  faktorů.

I když nelze popírat theoretický význam těchto method, přesto s hlediska praktických aplikací při postupném určování úrovní faktorů prováděných pokusů, je methoda značně obecná. Především při konkrétní aplikaci by bylo třeba pravděpodobně příliš mnoho

pokusů, abychom se dostatečně přesně přiblížili ke skutečnému maximu faktorové funkce, neboť nelze využít alespoň částečných předběžných znalostí, které často máme o jejím průběhu. Poněvadž vypracované metody mají limitní charakter (ve smyslu konvergence skoro jistě), lze předpokládat, že pro určení maxima bude třeba větší počet pokusů, zatím co požadujeme, aby jejich počet k dosažení maxima byl co nejmenší. Rovněž není dosud zcela jasné, jak máme v praxi volit pomocné posloupnosti konstant, na kterých záleží rychlost konvergence úrovní faktorů ke správné hodnotě maxima funkce, aby volba těchto posloupností konstant byla v nějakém smyslu optimální. Bylo by proto třeba pro praktické aplikace metodu založenou na stochastických aproximacích více konkretizovat, aby jí bylo možno s úspěchem použít při vyšetřování optimálních podmínek, neboť dosud byla uvedená metoda vypracována jako kritérium, které nevystihuje všechny okolnosti, které jsou důležité při rozhodování o uspořádání dalších pokusů.

V roce 1954 v práci [6] podrobil Bechhofer kritice běžné metody analýsy rozptylu, jejímž účelem je ověřit rovnost průměrů několika normálních základních souborů s tímž rozptylem. Hypotéza rovnosti průměrů idealisuje skutečný stav a většinou experimentátora nezajímá. Zpravidla jej bude totiž zajímat pořadí základních souborů vzhledem k velikosti průměrných hodnot (nejlepší je soubor buď s maximální nebo s minimální hodnotou). Bechhofer předpokládal, že máme  $k$  základních souborů a z každého vezmeme náhodný výběr pevného rozsahu. Ve výběru zjistíme hodnotu výběrového průměru a základní soubory seřadíme podle velikosti výběrových průměrů. V článku je pak sestrojena operativní charakteristika správného seřazení. Tím přejdeme od pouhého konstatování, zda hypotéza rovnosti průměrů je správná či nikoli, k pořadí základních souborů vzhledem k jejich průměrným hodnotám. Pro praktické použití stanovení optimálních podmínek má však metoda nevýhodu v tom, že v případě více faktorů předpokládá, že tyto faktory jsou ve svých efektech nezávislé.

### Principy Boxovy metody navrhování pokusů při výzkumu optimálních podmínek

Zcela jinak na rozdíl od předcházejících prací, jejichž podstata a význam byly stručně naznačeny, řešil P. Box otázku hledání nových možností pro navrhování pokusů, které by odstranily hlavní nedostatky klasického i faktorového způsobu uspořádání pokusů. Základní, převážně theoretické výsledky své práce, které byly dosaženy po několikaleté spolupráci s chemikem, publikoval v roce 1951 v práci [8]. Podrobný výklad navrhování pokusů více s praktického hlediska s četnými ilustrujícími příklady z praxe v chemickém průmyslu přinesla práce [9] a [10].

Problematiku uspořádání pokusů pro určování optimálních podmínek, především ve srovnání s klasicky uspořádanými pokusy, krátce vysvětlíme na příkladu z flotačního výzkumu. Pro jednoduchost se omezíme při tom pouze na dva faktory — pěnič a sběrač, které tvoří většinou složitější organické látky a jež mají na výsledek flotace nejdůležitější vliv. Obě reagentie jsou udány v  $g/t$ . Jedním z nejdůležitějších ukazatelů, charakterisujících účinnost flotačního procesu, je výtěžnost, udávaná zpravidla v % a udávající váhové množství cenné složky (kovu), které přešlo z původní rudy do koncentráту.

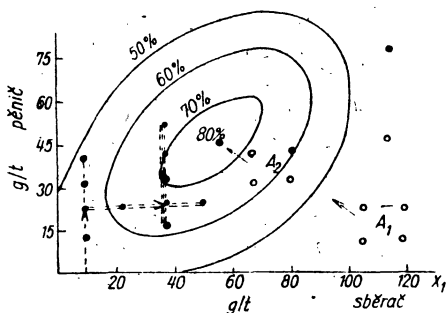
Na obr. 1 je graficky znázorněn způsob sekvenčního opakování klasicky uspořádaných pokusů, jak byl tento způsob již vysvětlen dříve. Proměnná  $x_1$  značí dávku sběrače,

$x_2$  značí dávku pěníče. Lze předpokládat, že určitou hodnotu výtěžnosti lze obdržet pro různé kombinace úrovní sběrače a pěníče, takže spojením těchto různých kombinací pro jednu hodnotu výtěžnosti dostaneme křivky znázorněné na obr. 1, které budeme nazývat obrysové křivky (*contour curves*). Zřejmě tyto křivky dostaneme v obecném případě jako všechna možná řešení rovnice  $f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \eta_P$ , kde  $\eta_P$  je určitá hodnota faktorové funkce pro jednu obrysovou křivku.

Provedeme-li nyní flotační pokusy klasickým sekvenčním způsobem za tím účelem, abychom dosáhli maximální výtěžnosti, budou tyto pokusy znázorněny graficky jak je uvedeno na obr. 1.

Jak je z obr. 1 zřejmé, blížíme se k maximální výtěžnosti, kterou chceme pokusy dosáhnout, určitou schodovitou čarou a záleží na počtu fází, tedy i na celkovém počtu pokusů v experimentu, jak spolehlivě se chceme k maximální výtěžnosti přiblížit. V praxi se však provádí většinou pouze prvá fáze pokusů. Je zřejmé, že již v této prvé fázi lze doáhnout maximální výtěžnosti (nebereme-li v úvahu experimentální chybu), bude-li interakce nulová. V této souvislosti se nám znovu objevuje, kdy je plně oprávněn klasický způsob uspořádání pokusů.

Naskytá se však nyní otázka, zda-li nelze pokusy uspořádat výhodnějším způsobem, který by odstranil schodovitou čáru klasických pokusů na obr. 1 a zmenšil tak počet pokusů v experimentu. Uspořádáme-li pokusy tak, že budeme určitým způsobem měnit úrovně sběrače i pěníče a zvolíme-li vhodně tyto úrovně, jak je na př. na obr. 1 serie pokusů  $A_1$ , je možno odhadnout maximální stoupání faktorové funkce. Provedou-li se nyní další pokusy ve směru tohoto maximálního spádu, lze předpokládat, že se budeme experimentálně k hodnotě maximální výtěžnosti blížit nejrychlejším způsobem s nejmenším počtem pokusů. Provedeme-li určitou extrapolaci, lze navrhnout na základě provedených pokusů další pokusy, na př. serii pokusů  $A_2$ , atd., při kterých bychom měli dostat větší výtěžnosti. Tuto metodu budeme dále nazývat metodou největšího spádu (*steepest ascent*). Je však ihned zřejmé, že s theoretického i praktického hlediska zde vyvstává celá řada problémů, které je nutno vyřešit, aby tato metoda vedla k úspěchu. Je nutno zde zdůraznit, že navržená metoda pro postupné uspořádání pokusů, i když lze ji matematicky dosti obecně formulovat, je především nejvíce závislá na konkrétní situaci, ve které se pokusy provádějí a že k jejímu provádění je třeba dosti značných zkušeností. Matematický aparát, který je možno při této metodě použít, může být značně rozsáhlý. V případě, že metoda nemá úspěch, ihned se to projeví při dalších pokusech, kdy nedojde ke zvýšení, ale k případnému snížení hodnot faktorové funkce. Na rozdíl od běžnějších metod, na př. analýzy rozptylu, které je možno velmi často použít pouze jako jistá kritéria pro určité rozhodovací postupy, je metoda největšího spádu velmi konkrétním, ale též jemným nástrojem pro navrhování pokusů ve výzkumu. Poněvadž počet pokusů, který stačí k použití této metody je velmi malý, je důležité, aby experimentální chyba byla rovněž dosti malá. (Doporučuje se asi 1 %). Tohoto požadavku lze však



Obr. 1.

- Pokusy uspořádané klasickým sekvenčním postupem.
- Pokusy uspořádané metodou největšího spádu.

někdy bez větších obtíží dosáhnout tím, že počet pokusů zvýšíme větším počtem úrovní nebo provedeme opakování pokusů.

Celou problematiku navrhování a hodnocení pokusů je možno rozdělit do dvou po sobě následujících etap. V první etapě se jedná především o to, jakým způsobem navrhovat a uspořádat pokusy, t. zn. úrovně jednotlivých faktorů, abychom se přiblížili co nejrychleji a nejspolehlivěji ke skutečnému maximu faktorové funkce. Tuto oblast faktorového prostoru, kde se nachází bod  $(x_{1M}, x_{2M}, \dots, x_{nM})$ , pro který faktorová funkce nabývá svého maxima, budeme nazývat stacionární oblastí. Její přesnou definici nelze obecně dobře uvést, neboť záleží vždy na situaci, za které se pokusy provádějí. Druhou etapou výzkumné práce je pak vyšetřování vlastností faktorové funkce ve stacionární oblasti. Tato práce může mít značný význam pro vysvětlení a pochopení mechanismu celého jevu, který experimentem zkoumáme. Na př. pro náš případ výzkumu flotace, která je velmi složitým fyzikálně-chemickým dějem ještě dosud bez jednotného hlediska, kde jsme pro jednoduchost předpokládali pouze dva vlivy — sběrač a pěnič, může přinést značný užitek znalost toho, jak reaguje výtěžnost na různé změny dávky sběrače a pěniče v oblasti maximální výtěžnosti. Obr. 1 totiž představuje jen jeden možný typ faktorové funkce, i když je pravděpodobné, že tento typ bude v praxi nejobvyklejší. Tato analýza v druhé etapě, je-li faktorů více a nebyl-li proveden větší počet pokusů, může být po theoretické a především numerické stránce značně komplikována. Rozbor a matematický výklad těchto otázek bude uveden v jedné z dalších kapitol.

### Principy metody největšího spádu

Nejprve zdůvodníme theoretické principy metody největšího spádu. Předpokládejme, že faktorová funkce a všechny její derivace ve faktorovém prostoru  $R_n$  jsou spojité (zřejmě tento předpoklad s praktického hlediska nelze považovat za nějak omezující).

Dále předpokládejme, že jsme provedli první pokus pro kombinaci faktorů  $0 = (x_{11}, x_{21}, \dots, x_{n1}) = (0, 0, \dots, 0)$  a pro tento bod faktorového prostoru  $0 \in R_n$  jsme dostali, neuvažujeme-li experimentální chybu, výsledek pokusu  $\eta_0$  (bod  $0 = (0, 0, \dots, 0)$  jsme zvolili z toho důvodu, abychom celou problematiku mohli vysvětlit co nejjednodušeji; tato volba však není na újmu obecnosti řešení).

Chceme nyní vědět, jak máme navrhnout a provést další pokus, t. j. určit úrovně faktorů dané bodem  $K = (x_{12}, x_{22}, \dots, x_{n2})$ , jestliže chceme tento další pokus uspořádat v dané vzdálenosti  $d$  ve faktorovém prostoru od prvního pokusu a jestliže požadujeme, aby pro tuto vzdálenost  $d$  zvýšení hodnoty faktorové funkce bylo maximální.

Vzdálenost kombinací úrovní faktorů obou pokusů ve faktorovém prostoru bude

$$d = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}. \quad (1)$$

Dále označme  $\eta_k = f(K)$ .

Souřadnice kombinací úrovní faktorů pro maximální vzrůst faktorové funkce ve vzdálenosti  $d$  od bodu představujícího první pokus určíme, použijeme-li metody Lagranžových multiplikátorů, jako hodnoty, pro něž funkce

$$\tau = f(K) - \eta_0 - \frac{1}{2} \lambda \sum_{i=1}^n x_i^2,$$

je maximální.

Řešením vztahů  $\frac{\partial \tau}{\partial x_i} = 0$  pro  $i = 1, 2, \dots, n$  pak dostaneme

$$x_i = \frac{1}{\lambda} \frac{\partial \eta}{\partial x_i}(K), i = 1, 2, \dots, n, \quad (2)$$

kde  $\frac{\partial \eta}{\partial x_i}(K)$  značí parciální derivace prvního řádu v bodě  $K$ . Umocněním a dosazením (2) do (1) lze nyní vypočítat hodnotu konstanty

$$\lambda = \pm \left[ \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{\partial \eta}{\partial x_i}(K) \right\}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{d}, \quad (3)$$

kteřá právě určuje podmínku, aby vzdálenost druhého pokusu  $K$  od bodu  $0$  byla právě  $d$  při maximálním vzrůstu faktorové funkce.

Ze vztahu (2) je zřejmé, že souřadnice dalšího pokusu, má-li být vzrůst faktorové funkce ve vzdálenosti  $d$  maximální, musí být úměrné hodnotám parciálních derivací prvního řádu faktorové funkce v bodě  $K$ , kde konstanta úměrnosti je dána vztahem (3).

Vztah (2) je též základní myšlenkou pro kritérium navržené mnohem později J. Blumem v práci [5] pro volbu úrovní faktorů v  $n$ -rozměrném případě na základě metody stochastických aproximací. Ovšem použití a aplikace této základní myšlenky při metodě největšího spádu navržené Boxem je zcela odlišné.

Abychom tedy určili souřadnice nového pokusu, bylo by nutno, jak je zřejmé ze vztahu (2), vypočítat parciální derivace prvního řádu faktorové funkce v bodě  $K$  reprezentujícího druhý pokus. Poněvadž však tvar faktorové funkce nám není znám, ani neznáme bod  $K$ , t. j. souřadnice dalšího pokusu, který ještě nebyl proveden, bude vhodné rozvést faktorovou funkci v bodě  $0 = (0, 0, \dots, 0)$  v Taylorovu řadu až do řádu  $k \geq 1$ , při čemž členy vyšších řádů v tomto rozvoji zanedbáme. Provedeme-li tento rozvoj jako pro funkci  $n$  proměnných, potom faktorová funkce bude (zanedbáme-li členy řádu  $(k+1)$  a vyššího)

$$\eta = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \cong \sum_{l=0}^k \frac{1}{l!} \left\{ \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} x_j \right\}^l f(0),$$

a parciální derivace tohoto rozvoje, které dosadíme do výrazu (2) budou

$$\frac{\partial \eta}{\partial x_i} \cong \sum_{l=0}^k \frac{1}{l!} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} x_j \right\}^l f(0). \quad (4)$$

Zanedbáme-li v nejjednodušším případě všechny členy řádu druhého a vyššího, dostaneme

$$\frac{\partial \eta}{\partial x_i}(K) \cong \frac{\partial \eta}{\partial x_i}(0), i = 1, 2, \dots, n. \quad (5)$$

Možnost této aproximace bude záviset především na tvaru funkce  $\eta$  a na zvolené vzdálenosti  $d$  obou pokusů ve faktorovém prostoru. Čím tato vzdálenost bude menší, tím lépe budeme moci uvedené aproximace použít.



Vezmeme-li v úvahu i členy druhého řádu a zanedbáme členy řádů vyšších dostaneme

$$\frac{\partial \eta}{\partial x_i} (K) \cong \frac{\partial \eta}{\partial x_i} (0) + \frac{\partial \eta}{\partial x_i} (0) \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 \eta}{\partial x_i \partial x_j} (0) x_j. \quad (6)$$

Dosažením aproximace (6) do vztahu (2) a jeho řešením jako systému lineárních rovnic získáme souřadnice bodu ve faktorovém prostoru pro další pokus tak, aby vzrůst faktorové funkce byl maximální. Tyto souřadnice jsou nyní vyjádřeny v parciálních derivacích v bodě 0, t. j. v bodě faktorového prostoru, pro který již byl první pokus proveden.

Při aplikaci metody největšího spádu bude tedy nutno určit parciální derivace faktorové funkce v bodě faktorového prostoru pro první pokus.

Abychom tyto parciální derivace mohli určit, nebude stačit provést pouze jeden pokus, jak jsme dosud předpokládali, neboť analytický výraz takové funkce nám není znám. Rovněž jsme dosud uvažovali experimentální chybu nulovou, t. zn. předpokládali jsme, že pokusem byla určena hodnota faktorové funkce  $\eta$  přesně.

Předpokládejme, tak jak to v praxi bývá, že jsme provedli  $N$  pokusů representovaných body  $X_1, X_2, \dots, X_N$  v určité oblasti faktorového prostoru  $R_n$  a výsledky pokusů jsou  $y_1, y_2, \dots, y_N$ . Budeme dále předpokládat, že  $y_1, y_2, \dots, y_N$  jsou náhodné nezávislé veličiny s průměry  $E(y_j) = \eta_j = f(x_{1j}, x_{2j}, \dots, x_{nj})$ ,  $j = 1, 2, \dots, N$ , a se stejnými rozptyly  $\sigma^2$ . Ve zkoumané oblasti faktorového prostoru  $R_n$  lze nyní faktorovou funkci aproximativně vyjádřit jako polynom tvaru

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_n x_n + \beta_{11} x_1^2 + \dots + \beta_{12} x_1 x_2 + \dots + \beta_{111} x_1^3 + \dots \quad (7)$$

U mocniny  $x_1^{k_1} x_2^{k_2} \dots x_n^{k_n}$  je tedy koeficient, u něhož se index 1 opakuje  $k_1$ krát, index 2  $k_2$ krát, až konečně index  $n$   $k_n$ krát. Koeficienty, které obsahují pouze jeden index, budeme nazývat efekty prvního řádu, se dvěma indexy efekty druhého řádu a pod. Efekty druhého řádu jsou buď kvadratické efekty nebo interakční efekty druhého řádu  $\beta_{il}$ ,  $i \neq l$ .<sup>1)</sup>

Srovnáme-li nyní v Taylorově rozvoji faktorové funkce a ve funkci (7) příslušné koeficienty, zjistíme, že koeficientu u  $x_1^{k_1} x_2^{k_2} \dots x_n^{k_n}$  v regresní funkci (polynomu) odpovídá v Taylorově rozvoji koeficient

$$\frac{1}{k_1! k_2! \dots k_n!} \frac{\partial^{k_1 + k_2 + \dots + k_n} \eta}{\partial x_1^{k_1} \partial x_2^{k_2} \dots \partial x_n^{k_n}} (0), \quad (8)$$

kde předcházející výraz značí parciální derivaci řádu  $(k_1 + k_2 + \dots + k_n)$  podle proměnných  $x_1, x_2, \dots, x_n$ .

Jestliže koeficienty ve vztahu (7) určíme methodou nejmenších čtverců na základě regresní funkce, kterou jsme proložili pozorovanými hodnotami výsledku pokusu  $y_1, y_2, \dots, y_N$ , dostaneme odhady regresních koeficientů ve vztahu (7) označené  $b_0, b_1, \dots$

<sup>1)</sup> Je nutno upozornit na to, že interakční efekty jsou určitými násobky interakcí definovaných u faktorových experimentů a že řád interakčního efektu je vždy o jeden stupeň vyšší než řád interakce ve faktorových experimentech.

$b_n, b_{11}, \dots, b_{12}, \dots$ . Pomocí vztahu (8) je pak již možno provést odhady parciálních derivací v Taylorově rozvoji.

Nyní se budeme zabývat konstrukcí odhadů koeficientů v regresní funkci (7). Označme hodnoty úrovní faktorů při  $j$ -tém pokuse  $x_{1j}, x_{2j}, \dots, x_{nj}$  ( $j = 1, 2, \dots, N$ ). Matici hodnot  $x_{ij}$  ( $i = 1, 2, \dots, n; j = 1, 2, \dots, N$ ) typu  $N \times n$  hodnoti  $n$  budeme nazývat maticí experimentu a budeme ji značit  $C$ .

Výraz (7) lze též psát ve tvaru

$$\eta_j = \sum_{l=1}^S X_{jl} \beta_l, \quad j = 1, 2, \dots, N,$$

kde hodnoty  $X_{jl}$  jsou úrovně faktorů nebo jejich součiny a mocniny v  $j$ -tém pokuse. Označíme-li matici hodnot  $X_{jl}$  ( $j = 1, 2, \dots, N; l = 1, 2, \dots, S$ ), hodnoti  $S \leq N$  jako  $X_1$  dále  $\eta' = \|\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N\|$ ,  $\beta' = \|\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_S\|$ , lze v maticové formě psát předcházející vztah

$$\eta = X_1 \beta. \quad (9)$$

Poněvadž  $X_1' X_1$  je nesingulární čtvercová matice typu  $S \times S$  vyplývá z rovnice (9) vztah

$$\beta = (X_1' X_1)^{-1} X_1' \eta. \quad (10)$$

Matice  $T = (X_1' X_1)^{-1} X_1'$  typu  $S \times N$  se nazývá transformační matice. Označme dále odhady koeficientů  $\beta_l$  symboly  $b_l$  ( $l = 1, 2, \dots, S$ ), takže  $b' = \|b_1, b_2, \dots, b_S\|$  a vektor výsledků pokusů  $y' = \|y_1, y_2, \dots, y_N\|$ .

Nejllepší lineární odhad elementů vektoru  $\beta$  dostaneme tak, že v rovnici (10) nahradíme  $\eta$  vektorem výsledků  $y$ , takže

$$b = T y. \quad (11)$$

Jestliže rozptyl náhodné proměnné  $y_j$  je roven  $\sigma^2$  pro všechna  $j = 1, 2, \dots, N$ , potom platí, že kovarianční matice vektoru  $b$  je

$$\sigma^2 (X_1' X_1)^{-1}. \quad (12)$$

Ve speciálním případě, kdy vektor  $y$  má  $N$ -rozměrné normální rozdělení, potom  $b$  má  $N$ -rozměrné normální rozdělení s průměrem (11) a s kovarianční maticí (12).

Při vztahu (9) jsme předpokládali, že faktorovou funkci  $\eta$  je možno vyjádřit ve zkoumané oblasti faktorového prostoru polynomem určitého řádu.

Jestliže bychom místo vztahu (9) aproximovali faktorovou funkci regresní funkcí obsahující pouze  $P < S$  parametrů tvaru

$$\eta_j = \sum_{l=1}^P X_{jl} \beta_l, \quad j = 1, 2, \dots, N, \text{ t. j. } \eta = X_1 \beta_1,$$

vztah (9) je možno vyjádřit

$$\eta = X_1 \beta_1 + X_2 \beta_2,$$

kde  $X_1$  je matice typu  $N \times P$ ,  $X_2$  typu  $N \times (S - P)$ ;

$$\beta_1' = \|\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_P\|, \quad \beta_2' = \|\beta_{P+1}, \dots, \beta_S\|.$$

Podobně jako byl vyjádřen vztah (11), je možno psát

$$\mathbf{b}_1 = (\mathbf{X}'_1 \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}'_1 \mathbf{y},$$

kde  $\mathbf{b}'_1 = \|\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \dots, \mathbf{b}_P\|$  je odhadem vektoru  $\beta'_1$ . Střední hodnota předcházejícího výrazu bude, označíme-li  $E(\mathbf{b}'_1) = \|E(\mathbf{b}_1), E(\mathbf{b}_2), \dots, E(\mathbf{b}_P)\|$ ,

$$\begin{aligned} E(\mathbf{b}_1) &= (\mathbf{X}'_1 \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}'_1 E(\mathbf{y}) = (\mathbf{X}'_1 \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}'_1 [\mathbf{X}_1 \beta_1 + \mathbf{X}_2 \beta_2] = \\ &= \beta_1 + (\mathbf{X}'_1 \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}'_1 \mathbf{X}_2 \beta_2. \end{aligned} \quad (13)$$

Matice  $\mathbf{D} = (\mathbf{X}'_1 \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}'_1 \mathbf{X}_2$  se nazývá matice strannosti (*alias matrix*).

Z předcházejícího výrazu vyplývá, že střední hodnotu regresních koeficientů lze psát

$$E(b_l) = \beta_l + \sum_{k=P+1}^S d_{lk} \beta_k, \quad l = 1, 2, \dots, S.$$

Jestliže tedy po určité  $l$  ( $l = 1, 2, \dots, S$ ) všechna  $d_{lk} = 0$  pro  $k = P+1, \dots, S$ , bude  $E(b_l)$  nestranným odhadem  $\beta_l$ . Matice  $\mathbf{D} = (\mathbf{X}'_1 \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}'_1 \mathbf{X}_2 = \mathbf{T} \mathbf{X}_2$  udává vlastnosti odhadů regresních koeficientů  $b_l$  ( $l = 1, 2, \dots, S$ ), jestliže jsme předpokládali polynom nižšího stupně než ve skutečnosti je a dopustili jsme se tedy určité chyby tím, že odhady regresních koeficientů nejsou nestranné.

Vztah (12) nám vyjadřuje přesnost odhadů regresních koeficientů faktorové funkce a vztah (13) vhodnost aproximace polynomem určitého řádu, jestliže lze očekávat, že správnější aproximace je polynomem řádu vyššího. Poněvadž oba vztahy (12) a (13) závisí pouze na maticích  $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2$  a tyto matice závisí pouze na matici  $\mathbf{C}$  (za předpokladu polynomů určitých řádů), je možno stanovit ze vztahu (12) a (13), jak vhodné je uspořádání.

$N$  pokusů, které jsou reprezentovány body ve faktorovém prostoru. Je proto účelné zkoumat různá uspořádání experimentů tak, aby tato uspořádání byla co nejvhodnější.

Při aplikaci vztahu (12) je možno pro  $\sigma^2$ , které zpravidla nebývá známé, sestrojit nestranný odhad jako residuální rozptyl

$$\begin{aligned} s^2 &= \frac{1}{N-S} [(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b})'(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b})] = \\ &= \frac{1}{N-S} [\mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{b}'\mathbf{X}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{X}\mathbf{b} + \mathbf{b}'\mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{b}] = \frac{1}{N-S} [\mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{X}\mathbf{b}]. \end{aligned} \quad (14)$$

Používáme-li vztahu (13), většinou předpokládáme, že polynom může být stupně o jeden řád vyšší, než který byl při výpočtu regresních koeficientů uvažován.

Konkrétní aplikace metody největšího spádu spočívá pak v tom, že se navrhne experiment  $N$  pokusů, které se provedou v určité oblasti faktorového prostora.

Volba této oblasti závisí na zkušenostech z minulých experimentů, případně na určitých theoretických předpokladech. V každém případě se však snažíme, abychom tuto oblast zvolili tam, kde lze očekávat faktorovou funkci maximální. Faktorovou funkci aproximujeme zpravidla polynomem určitého řádu, zpravidla však řádu prvního nebo nejvýše druhého; v jiných případech by se totiž, aspoň při složitějších experimentech, metoda stávala po numerické stránce značně komplikovaná. Za předpokladu určitého typu faktorové funkce (t. j. polynomu určitého řádu), lze ze vztahu (11) pomocí transformační matice získat hodnoty regresních koeficientů, které udávají vzrůst faktorové funkce

ve směru jejího maximálního stoupání. Pro tento směr v určitých zvolených jednotkách úrovní jednotlivých faktorů pak počítáme hodnoty faktorové funkce, t. j. jako bychom prováděli v tomto směru další pokusy, při kterých bychom měli dostávat stále lepší výsledky, které sledujeme. Tento postup t. zn. výpočet takových kombinací úrovní faktorů, které nám mají dávat vyšší hodnoty, není však možno provádět stále až do nalezení skutečného maxima. Když se uvedeným postupem dostaneme do oblasti faktorového prostoru, která je více nebo méně vzdálena od oblasti, ve které byly pokusy první fáze provedeny, je nutno provést další pokusy, kterými se má ověřit, zda skutečně došlo k lepšímu výsledkům pokusů t. j. ke zvýšení výsledků, hledáme-li maximum. Na základě těchto nových pokusů provedeme nový odhad regresních koeficientů a na jejich základě případnou změnu směru při dalším hledání maximální hodnoty faktorové funkce.

Na začátku celého výzkumu většinou předpokládáme, že stoupání faktorové funkce je značné vzhledem k experimentální chybě, které se při pokusech dopustíme, takže regresní koeficienty je možno dobře odhadnout. Proto v tomto stadiu výzkumu stačí obvykle uvažovat pouze polynomy prvního řádu. Čím více se však blížíme ke skutečnému maximumu, tím horší bude aproximace nadrovinami a odhady regresních koeficientů budou stále nespolehlivější. Proto v tomto stadiu výzkumu, kdy se výsledky pokusů v oblasti faktorového prostoru mění již velmi málo, používáme pro nalezení skutečného maxima jiné techniky, která bude popsána dále. V tomto případě uvažujeme již polynomy druhého řádu, které lépe aproximují faktorovou funkci ve stacionární oblasti.

Při konkrétní aplikaci této metody však vzniká celá řada dalších otázek, které zde není možno všechny rozebírat. Má-li na př. faktorová funkce lokální maxima, potom se tato metoda navrhování pokusů může stát velmi obtížnou nebo dokonce nepřilíš úspěšnou.

Velmi důležitá při této metodě je vhodná volba úrovní faktorů a výchozí oblasti faktorového prostoru, ve které provádíme pokusy. Se zvětšováním vzdáleností mezi jednotlivými úrovněmi určitého faktoru od sebe je nutno počítat s tím, že se nám mohou již značně projevit vlivy regresních koeficientů vyšších řádů. Z toho důvodu je vhodné počítat matici, která nám udává strannosti při odhadech regresních koeficientů, jestliže předpokládáme polynom řádu o jeden stupeň vyšší. Na druhé straně jestliže provádíme pokusy na úrovních faktorů, které jsou sobě blízké, může vliv experimentální chyby převýšit vliv skutečných účinků jednotlivých faktorů na výsledek pokusu a tím může být odhad regresních koeficientů značně skreslený a metoda největšího spádu se v důsledku toho může stát značně nespolehlivou, neboť nevede, aspoň nikoliv nejrychlejším způsobem, ke správné hodnotě maxima faktorové funkce.

*(Dokončení v příštím čísle)*