

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

Milan Beneš; Jiří Likeš

Vyšetřování a určování optimálních technologických podmínek [Dokončení]

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 2 (1957), No. 6, 657--668

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/137301>

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>

POKROKY MATEMATIKY, FYSIKY A ASTRONOMIE

ROČNÍK II • ČÍSLO 6

VYŠETŘOVÁNÍ A URČOVÁNÍ OPTIMÁLNÍCH TECHNOLOGICKÝCH PODMÍNEK

MILAN BENEŠ (*Úst. pro výzkum rud, Praha*),

JIRÍ LIKEŠ (*Ocel. výzk. úst., Praha*)

(*Dokončení*)

Uspořádání experimentu při metodě největšího spádu

Jestliže máme pro aplikaci metody největšího spádu určit hodnoty regresních koeficientů, vyvstává nyní další otázka, jak máme ve zkoumané oblasti faktorového prostoru N pokusů uspořádat. Dříve než se budeme zabývat některými vhodnými typy uspořádání experimentu při hledání maxima faktorové funkce experimentální cestou, vrátíme se ještě k našemu případu flotačního výzkumu, ve kterém se jedná o nalezení takové kombinace množství daného sběrače a pěníče nejrychlejším způsobem, abychom pro tuto kombinaci dostali maximální výtěžnost. Účelem tohoto příkladu je ukázat použití některých vyložených pojmů a teorie.

Předpokládejme, že faktorovou funkci lze v oblasti faktorového prostoru, kde budou tyto pokusy provedeny, aproximovat polynomem druhého řádu, tedy

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2.$$

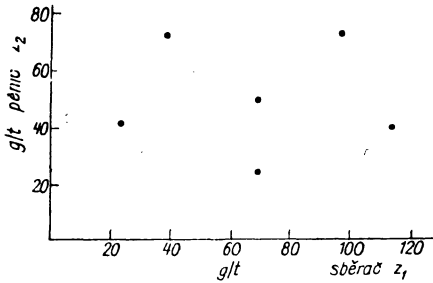
Jestliže chceme provést pouze $N = 6$ pokusů, je možno experiment uspořádat takovým způsobem, že souřadnice pro množství sběrače a pěníče označené z_1 a z_2 (symboly x_1 , x_2 použijeme nyní na rozdíl od dosavadního značení až po vhodné transformaci faktorů tvoří pětiúhelník se středem $z_1 = 70$ g/t, $z_2 = 50$ g/t. Souřadnice množství sběrače a pěníče ostatních pěti pokusů jsou zvoleny takto (po zaokrouhlení na jedno desetinné místo)

$$\begin{aligned} z_{11} &= 99,4 \text{ g/t}, & z_{21} &= 70,2 \text{ g/t}, \\ z_{12} &= 117,6 \text{ g/t}, & z_{22} &= 42,3 \text{ g/t}, \\ z_{13} &= 70,0 \text{ g/t}, & z_{23} &= 25,0 \text{ g/t}, \\ z_{14} &= 22,4 \text{ g/t}, & z_{24} &= 42,3 \text{ g/t}, \\ z_{15} &= 40,6 \text{ g/t}, & z_{25} &= 70,2 \text{ g/t}, \\ z_{16} &= 70,0 \text{ g/t}, & z_{26} &= 50,0 \text{ g/t}. \end{aligned}$$

Uspořádání těchto pokusů je znázorněno na obr. 2.

Pro další výpočty použijeme transformace

$$x_{1i} = 0,02 (z_{1i} - 70), \quad x_{2i} = 0,04 (z_{2i} - 50), \quad i = 1, 2, \dots, 6,$$



Obr. 2.

kteřá převede pětiúhelník na obr. 2 v pravidelný pětiúhelník, ve kterém je vzdálenost všech bodů reprezentujících pokusy od středu pětiúhelníka rovna jedné. Potom uspořádání pokusů je dáno maticí experimentu

$$C = \begin{vmatrix} & x_1 & x_2 \\ & 0,5878, & 0,8090 \\ & 0,9511, & -0,3090 \\ & 0,0000, & -1,0000 \\ - & 0,9511, & -0,3090 \\ - & 0,5878, & 0,8090 \\ & 0,0000, & 0,0000 \end{vmatrix}$$

Maticе nezávislých proměnných potom bude

$$X_1 = \begin{vmatrix} x_0 & x_1 & x_2 & x_1^2 & x_2^2 & x_1x_2 \\ 1, & 0,588, & 0,809, & 0,346, & 0,654, & 0,476 \\ 1, & 0,951, & -0,309, & 0,904, & 0,095, & -0,294 \\ 1, & 0,000, & -1,000, & 0,000, & 1,000, & 0,000 \\ 1, & -0,951, & -0,309, & 0,904, & 0,095, & 0,294 \\ 1, & -0,588, & 0,809, & 0,346, & 0,654, & -0,476 \\ 1, & 0,000, & 0,000, & 0,000, & 0,000, & 0,000 \end{vmatrix}$$

Maticе $X_1' X_1$ je zřejmě symetrická. K výpočtu regresních koeficientů vypočítáme inverzní maticі $(X_1' X_1)^{-1}$. Inverse symetrické matice vhodnou methodou je přehledně uvedena v práci [10] str. 555. Tutu methodu je výhodné při invertování matic tohoto typu použít. Provedeme-li inverzi matice $(X_1' X_1)^{-1}$, kde X_1 je uvedena nahoře, dostaneme

$$(X_1' X_1)^{-1} = \begin{vmatrix} 1, & 0, & 0, & -1, & -1, & 0 \\ 0, & 0,4, & 0, & 0, & 0, & 0 \\ 0, & 0, & 0,4, & 0, & 0, & 0 \\ -1, & 0, & 0, & 1,6, & 0,8, & 0 \\ -1, & 0, & 0, & 0,8, & 1,6, & 0 \\ 0, & 0, & 0, & 0, & 0, & 1,6 \end{vmatrix}$$

Transformační matice $T = (X_1' X_1)^{-1} X_1'$ potom bude

$$T = \begin{vmatrix} 0,000; & 0,000; & 0,000; & 0,000; & 0,000; & 1,000 \\ 0,235; & 0,380; & 0,000; & -0,380; & -0,235; & 0,000 \\ 0,324; & -0,124; & -0,400; & -0,124; & 0,324; & 0,000 \\ 0,076; & 0,524; & -0,200; & 0,526; & 0,076; & -1,000 \\ 0,324; & -0,124; & 0,600; & -0,124; & 0,324; & -1,000 \\ 0,761; & -0,470; & 0,000; & 0,470; & -0,761; & 0,000 \end{vmatrix}$$

Z této matice již snadno vypočítáme pomocí vztahu (11) odhady koeficientů pro dosažené výsledky pokusů y_1, y_2, \dots, y_6 .

Uvedený příklad dobře ukazuje účelnost maticové formulace návrhu experimentu. Zároveň ilustruje způsob použití některých uvedených pojmů a postup při návrhu experimentu méně známého typu.

Nyní se budeme zabývat některými typy experimentů, které jsou při metodě největšího spádu nejvýhodnější a mají značný význam.

Lze-li předpokládat, že ve vyšetřovaném oboru faktorového prostoru lze faktorovou funkci aproximovat regresní nadrovinou

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_n x_n, \quad (15)$$

je nejvýhodnější použít k odhadu jejich koeficientů faktorových experimentů typu 2^n . Kombinace úrovní $x_j = (x_{1j}, x_{2j}, \dots, x_{ij}, \dots, x_{nj})$, $j = 1, 2, \dots, N$, pro něž provedeme pokusy, je možno zobrazit jako body v R_n , při čemž i -tá souřadnice je dána úrovní i -tého faktoru $i = 1, 2, \dots, n$. Přitom je výhodné zvolit stupnice na osách tak, že úrovně každého faktoru jsou -1 a $+1$. Potom

$$x_{ij}^2 = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad j = 1, 2, \dots, N.$$

Použijeme-li pro odhad parametrů regresní nadroviny (15) úplného faktorového experimentu 2^n , dostaneme odhady regresních koeficientů $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n$ tak, že do vztahu (10) dosadíme

$$X_1 = \begin{pmatrix} 1, & x_{11}, & x_{21}, & \dots, & x_{n1} \\ 1, & x_{12}, & x_{22}, & \dots, & x_{n2} \\ \dots & & & & \\ 1, & x_{1N}, & x_{2N}, & \dots, & x_{nN} \end{pmatrix}$$

a vypočítáme transformační matici $T = (X_1' X_1)^{-1} X_1'$. Z vlastností úplných faktorových experimentů vyplývá, že $X_1' X_1 = N \cdot I_{n+1}$, kde I_{n+1} značí jednotkovou matici hodnosti $n + 1$, takže

$$T = \frac{1}{N} X_1'.$$

Ze vztahu (11) pak dostaneme

$$b = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1, & 1, & \dots, & 1 \\ x_{11}, & x_{12}, & \dots, & x_{1N} \\ x_{21}, & x_{22}, & \dots, & x_{2N} \\ \dots & & & \\ x_{n1}, & x_{n2}, & \dots, & x_{nN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \dots \\ y_N \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Odhady b_0, b_1, \dots, b_n jsou tedy nekorelované a dají se vypočítat nezávisle jeden na druhém tak, že každý koeficient b_i , $i = 1, 2, \dots, n$ je roven součtu součinů výsledků pokusů s hodnotami i -té nezávisle proměnné x_i , dělený počtem pokusů N , a $b_0 = \bar{y}$.

Pro faktorový experiment 2^n platí totiž $\sum_{j=1}^N x_{i_1 j} x_{i_2 j} = 0$ pro všechna $i_1, i_2 = 1, 2, \dots, n$, $i_1 \neq i_2$ (viz [7]), takže uspořádání je orthogonální.

Ze vztahu (12) dostaneme kovarianční matici náhodného vektoru b

$$\sigma^2 (\mathbf{X}'_1 \mathbf{X}_1)^{-1} = \sigma^2 \frac{1}{N} I_{n+1}.$$

Jsmo-li na pochybách, zda aproximace (15) je ve zkoumané oblasti faktorového prostoru vyhovující, lze zjistit strannost odhadů za předpokladu, že η lze aproximovat vhodnějším polynomem stupně druhého, t. j., že

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_n x_n + \beta_{11} x_1^2 + \dots + \beta_{nn} x_n^2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \dots + \beta_{n-1, n} x_{n-1} x_n. \quad (17)$$

Matrice strannosti D je pak rovna

$$D = \frac{1}{N} \mathbf{X}'_1 \mathbf{X}_1, \quad (18)$$

kde \mathbf{X}_1 je matice typu $N \times \frac{n(n+1)}{2}$ a obsahuje elementy, které jsou rovny čtvercům hodnot nezávisle proměnných x_i a součinům hodnot dvojic těchto nezávislých proměnných.

Vzhledem k tomu, že u úplných faktorových experimentů typu 2^n se při násobení úrovní libovolných dvou faktorů vyskytne stejněkrát $+1$ a -1 , nezávislé odhady parametrů $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$ (efektů prvního řádu) na kvadratických efektech $\beta_{11}, \beta_{22}, \dots, \beta_{nn}$. Avšak odhad b_0 je těmito efekty ovlivněn, neboť ze vztahu (18) vyplývá, že střední hodnota $E(b_0) = \beta_0 + \beta_{11} + \dots + \beta_{nn}$.

Místo úplných faktorových experimentů typu 2^n lze užít neúplných faktorových experimentů tohoto typu. Tak na př. pro tři faktory je možné uvažovat pouze čtyři kombinace úrovní, na př. tak, že použijeme jen ty, pro něž $x_{1j} x_{2j} x_{3j} = 1$. Potom $x_{3j} = 1/x_{1j} x_{2j}$ a matice \mathbf{X}_1 je

$$\mathbf{X}_1 = \begin{pmatrix} 1, & 1, & -1, & -1 \\ 1, & -1, & 1, & -1 \\ 1, & -1, & -1, & 1 \\ 1, & 1, & 1, & 1 \end{pmatrix}.$$

Transformační matice pak bude

$$T = \frac{1}{4} \mathbf{X}'_1,$$

takže

$$b = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1, & 1, & 1, & 1 \\ 1, & -1, & -1, & 1 \\ -1, & 1, & -1, & 1 \\ -1, & -1, & 1, & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix}.$$

Zřejmě opět odhady b_0, b_1, b_2, b_3 jsou nekorelovány a lze je získat nezávisle na sobě stejnou metodou jako při úplném faktorovém experimentu 2^n , při čemž pro rozptýly jednotlivých odhadů platí

$$D(b_0) = D(b_1) = D(b_2) = D(b_3) = \frac{\sigma^2}{4}.$$

Matice strannosti v případě platnosti (17) je

$$D = \frac{1}{4} X_1' X_2 = \begin{vmatrix} 1, & 1, & 1, & 0, & 0, & 0 \\ 0, & 0, & 0, & 0, & 0, & 1 \\ 0, & 0, & 0, & 0, & 1, & 0 \\ 0, & 0, & 0, & 1, & 0, & 0 \end{vmatrix}$$

Dosažením do vztahu (13) pak dostaneme

$$E(b_1) = \beta_1 + \frac{1}{4} X_1' X \beta_2,$$

kde β_1' a β_2' jsou řádkové vektory

$$\begin{aligned} \beta_1' &= \|\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3\|, \\ \beta_2' &= \|\beta_{11}, \beta_{22}, \beta_{33}, \beta_{12}, \beta_{13}, \beta_{23}\|, \end{aligned}$$

takže

$$\begin{aligned} E(b_0) &= \beta_0 + \beta_{11} + \beta_{22} + \beta_{33}, \\ E(b_1) &= \beta_1 + \beta_{23}, \\ E(b_2) &= \beta_2 + \beta_{13}, \\ E(b_3) &= \beta_3 + \beta_{12}. \end{aligned}$$

Opět tedy pouze $E(b_0)$ závisí na kvadratických efektech $\beta_{11}, \beta_{22}, \beta_{33}$. Odhady efektů prvního řádu mají střední hodnotu, která závisí na interakčním efektu zbývajících dvou faktorů.

Při používání neúplných faktorových experimentů pro n faktorů je zapotřebí si uvědomit, že počet kombinací úrovní N , pro něž provedeme pokusy, nesmí být menší než n , chceme-li odhadnout nezávisle všechny parametry rovnice (15).

Nyní se budeme zabývat případem, kdy pro aproximaci faktorové funkce je zapotřebí použít polynomu druhého stupně. Předpokládejme, že faktorovou funkci lze s dostatečnou přesností vyjádřit vztahem (17). Potom uspořádání pokusů lze provést tak, že použijeme úplných faktorových experimentů typu 3^n . Kombinace úrovní pak opět zobrazíme jako body ve faktorovém prostoru tak, že úrovně každého faktoru jsou $-1, 0, +1$.

V tomto případě však vyjádření faktorové funkce pomocí (17) není příliš vhodné, neboť odhady efektů jsou korelovány. Je výhodnější vyjádřit polynom druhého stupně ve tvaru

$$\begin{aligned} \eta &= \eta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_n x_n + \beta_{11} \left(x_1^2 - \frac{2}{3}\right) + \dots + \beta_{nn} \left(x_n^2 - \frac{2}{3}\right) + \\ &+ \beta_{12} x_1 x_2 + \dots + \beta_{n-1'n} x_{n-1} x_n, \end{aligned} \quad (19)$$

kde

$$\eta_0 = \beta_0 + \frac{2}{3} (\beta_{11} + \beta_{22} + \dots + \beta_{nn}),$$

neboť platí

$$\sum_{j=1}^N x_{ij} = 0, \quad \sum_{j=1}^N x_{ij}^2 = \frac{2}{3} N$$

pro všechna $i = 1, 2, \dots, n$.

Potom

$$X_1 = \begin{pmatrix} 1, x_{11}, x_{21}, \dots, x_{n1}, x_{11}^2 - \frac{2}{3}, x_{21}^2 - \frac{2}{3}, \dots, x_{n1} - \frac{2}{3}, x_{11} x_{21}, \dots, x_{n-1,1} x_{n1} \\ 1, x_{12}, x_{22}, \dots, x_{n2}, x_{12}^2 - \frac{2}{3}, x_{22}^2 - \frac{2}{3}, \dots, x_{n2} - \frac{2}{3}, x_{12} x_{22}, \dots, x_{n-1,2} x_{n2} \\ \dots \\ 1, x_{1N}, x_{2N}, \dots, x_{nN}, x_{1N}^2 - \frac{2}{3}, x_{2N}^2 - \frac{2}{3}, \dots, x_{nN} - \frac{2}{3}, x_{1N} x_{2N}, \dots, x_{n-1,N} x_{nN} \end{pmatrix},$$

takže $(X_1' X_1)^{-1}$ je čtvercové matice hodnosti $\binom{n+2}{2}$ obsahující nenulové prvky pouze v hlavní diagonále.

Odhady jednotlivých efektů jsou tudíž nekorelovány a lze je určit tak, že příslušný řádek matice X_1' násobíme sloupcovým vektorem y výsledků pokusů a tento výsledek dělíme součtem čtverců hodnot téhož řádku matice X_1' . Odhad b_0 pak dostaneme z odhadů $b_{11}, b_{22}, \dots, b_{nn}$ a průměrného výsledku pokusů pomocí vztahu

$$b_0 = \bar{y} - \frac{2}{3} (b_{11} + b_{22} + \dots + b_{nn}).$$

Rozptyl odhadu je roven rozptylu σ^2 , dělenému jmenovatelem odhadu (t. j. součtem čtverců hodnot příslušného řádku matice X_1'), kromě b_0 , jehož rozptyl je roven

$$D(b_0) = \frac{\sigma^2}{N} + \frac{4}{9} [D(b_{11}) + D(b_{22}) + \dots + D(b_{nn})].$$

Uspořádání experimentů pro odhad všech efektů až do druhého řádu metodou úplných faktorových experimentů typu 3^n není však příliš vhodné; především z toho důvodu; že počet pokusů, které je zapotřebí pro takovéto uspořádání provést, je příliš veliký vzhledem k počtu efektů, které máme odhadnout. Počet odhadovaných efektů je roven

$$1 + n + n + \binom{n}{2} = \frac{(n+1)(n+2)}{2},$$

takže poměr počtu pokusů k tomuto číslu s rostoucím počtem faktorů rychle roste. Zdálo by se, že tuto nevýhodu lze zmírnit použitím neúplných faktorových experimentů 3^n . Avšak ani tyto typy experimentů při metodě největšího spádu většinou nevyhovují, neboť i zde potřebný počet pokusů je zpravidla zbytečně veliký. Tak na př. je-li $n = 5$, lze užít k odhadu 21 efektů neúplného experimentu, zkráceného na jednu třetinu. Potom však je zapotřebí provést 81 pokusů, což je v případě malé experimentální chyby neúměrně vysoký počet. Pro některá n (na př. $n = 4$) se nedá ani vhodný neúplný experiment sestrojít.

Box v práci [8] navrhl jiný způsob uspořádání experimentů. Nazval je složenými uspořádáními (*composite designs*). Složená uspořádání pro určení efektů až do druhého řádu vychází z úplných případně neúplných faktorových experimentů typu 2^n , pomocí nichž je možné z výsledků pokusů sestrojít odhady všech efektů prvního řádu a všech

interakčních efektů druhého řádu. Potom je uspořádání doplněno dalšími $2n + 1$ kombinacemi úrovní (body ve faktorovém prostoru), takže lze sestavit i odhady kvadratických efektů. Pro $n = 2, 3, 4$ se použije úplných faktorových experimentů 2^n , pro $n \geq 5$ lze užít neúplných faktorových experimentů tohoto typu.

Doplnění $2n + 1$ body navrhuje Box tak, že jeden leží v počátku faktorového prostoru, zbývajících $2n$ bodů leží na souřadnicových osách ve vzdálenosti $\pm d_i$ ($i = 1, 2, \dots, n$). Na volbě hodnot d_i pak závisí, zda odhady kvadratických efektů jsou pak nekorelovány s ostatními odhady či nikoli. Zvolíme-li $d_1 = d_2 = \dots = d_n = d_0$, pak pro $n = 2$ je složené uspořádání dávající nekorelované odhady všech efektů ekvivalentní s úplným faktorovým experimentem 3^2 t. j. $d_0 = 1$. V práci [10] jsou pro $n = 3, 4, 5$ faktorů uvedeny hodnoty d_0 , na základě nichž sestavená složená uspořádání jsou orthogonální.

Celý složený experiment se provede ve dvou krocích. Nejprve se provedou pokusy pro body, určené faktorovým experimentem 2^n , t. j. předpokládáme, že

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_n x_n + \beta_{12} x_1 x_2 + \dots + \beta_{n-1, n} x_{n-1} x_n.$$

Odhady těchto parametrů určíme z rovnice (11), kde

$$T = \frac{1}{N} X_1' = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1, & 1, & \dots, & 1 \\ x_{11}, & x_{12}, & \dots, & x_{1N} \\ \dots & & & \\ x_{n1}, & x_{n2}, & \dots, & x_{nN} \\ x_{11} x_{21}, & x_{12} x_{22}, & \dots, & x_{1N} x_{2N} \\ \dots & & & \\ x_{n-11} x_{n1}, & x_{n-1,2} x_{n2}, & \dots, & x_{n-1,N} x_{nN} \end{pmatrix}.$$

Zjistí-li se, že efekty prvního řádu převažují a že interakční efekty jsou malé, lze pokračovat v hledání optimálních podmínek největšího spádu tak, že uvažujeme jen efekty prvního řádu. Jestliže naproti tomu je z relativní velikosti efektů prvního řádu a interakčních efektů vidět, že je zapotřebí určit všechny efekty druhého řádu, provedou se další pokusy tak, že uspořádání se doplní dalšími $2n + 1$ body. Potom předpokládáme, že faktorovou funkci lze vyjádřit vztahem (17), případně její úpravou (19).

Proto složené experimenty mají velkou výhodu vzhledem k faktorovým experimentům, neboť umožňují rozhodnutí, zda máme provést další pokusy nebo zda stačí aproximovat faktorovou funkci pouze regresní nadrovinou, kterou lze odhadnout z menšího počtu pokusů.

Splnění podmínky orthogonality složeného uspořádání je požadováno především z důvodu jednodušších výpočtů odhadů jednotlivých efektů. Není-li uspořádání orthogonální vlivem hodnot d_i , lze přesto odhadnout efekty prvního řádu a interakční efekty druhého řádu stejným způsobem jako při orthogonálním složeném uspořádání experimentu. Pro odhad zbývajících n kvadratických efektů $\beta_{11}, \beta_{22}, \dots, \beta_{nn}$ a pro β_0 lze sestavit $n + 1$ rovnic, jejichž řešením dostaneme odhady těchto parametrů. Tyto rovnice jsou

$$\begin{aligned} Nb_0 + k_{011} b_{11} + k_{022} b_{22} + \dots + k_{0nn} b_{nn} &= N\bar{y}, \\ k_{011} b_0 + k_{1111} b_{11} + k_{1122} b_{22} + \dots + k_{11nn} b_{nn} &= k_{y11}, \\ \dots & \\ k_{0nn} b_0 + k_{11nn} b_{11} + k_{22nn} b_{22} + \dots + k_{nnnn} b_{nn} &= k_{y_{nn}}, \end{aligned} \quad (20)$$

kde koeficienty v rovnicích představují součty hodnot nezávislých proměnných x_1^2, x_2^2, \dots ,

x_n^2 , součty součinů hodnot dvojic těchto proměnných a konečně součty součinů hodnot těchto proměnných a výsledků pokusů y .

Na př.

$$k_{011} = \sum_{j=1}^N x_{1j}^2, k_{1122} = \sum_{j=1}^N x_{1j}^2 x_{2j}^2, k_{y11} = \sum_{j=1}^N x_{1j}^2 y_j$$

a pod.

Označíme-li K matici koeficientů v systému (20), který je systémem $n + 1$ lineárních nehomogenních rovnic o $n + 1$ neznámých, lze určit inverzní matici K^{-1} a pomocí ní a veličin \bar{y} , k_{y11} , \dots , k_{ynn} určit odhady b_0 , b_{11} , b_{22} , \dots , b_{nn} . Pro menší počet faktorů lze provést řešení systému (21) metodou eliminační, avšak řešení pomocí K^{-1} je výhodnější, neboť $\sigma^2 K^{-1}$ je kovarianční maticí odhadů b_0 , b_{11} , \dots , b_{nn} , takže pomocí jejich elementů se zjistí rozptyly a kovariance těchto odhadů. Další výhoda tohoto způsobu řešení se projeví v případě, kdy uvažujeme několik kvalitativně různých výsledků při stejném uspořádání experimentu. Potom matice K^{-1} , jejíž elementy nezávisí na výsledcích pokusů, lze užít k sestrojení odhadů a jejich rozptylu a kovariancí pro každý výsledek.

Vyšetřování faktorové funkce ve stacionární oblasti

Jestliže jsme metodou největšího spádu, vyloženou v předchozí kapitole, experimentálně dosáhli stacionární oblasti, chceme nyní blíže určit její povahu a maximum faktorové funkce. V této oblasti je nutno uvažovat efekty alespoň druhého řádu, neboť zde již experimentální chyba vzhledem k efektům prvního řádu se stala dosti značnou.

Metoda vyšetřování stacionární oblasti, navržená Boxem, je založena na tom, že pro odhad faktorové funkce je použito polynomu druhého stupně

$$Y = b_0 + b_1 x_1 + \dots + b_n x_n + b_{11} x_1^2 + \dots + b_{nn} x_n^2 + b_{12} x_1 x_2 + \dots + b_{n-1, n} x_{n-1} x_n, \quad (21)$$

kde b_0 , b_1 , \dots , $b_{n-1, n}$ jsou odhady regresních koeficientů ve vztahu (17), získané při aplikaci metody největšího spádu.

Ze vztahu (21) není zřejmá struktura faktorové funkce a proto je zapotřebí tento vztah vyjádřit vhodnějším způsobem. Je-li počet faktorů roven dvěma nebo třem, lze sestrojit pro vhodně zvolenou $Y = Y_p$ obrysové křivky nebo plochy. Tato metoda je však pracná a pro $n > 3$ ji nelze použít. Proto je výhodnější převést (21) na nový tvar pomocí transformace souřadnic

$$t_i = \sum_{l=1}^n m_{il} (x_l - x_{ls}), \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (22)$$

při čemž koeficienty m_{il} , $i, l = 1, 2, \dots, n$ jsou určeny tak, že transformace je ortogonální.

Hodnoty x_{1s} , x_{2s} , \dots , x_{ns} jsou souřadnice bodu S , který je zvolen jako nový počátek a nalezneme je řešením systému rovnic

$$\frac{\partial Y}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (23)$$

Bod S nazveme stacionárním bodem a hodnota Y , v tomto bodě se nalezne tak, že

souřadnice x_1, x_2, \dots, x_n dosadíme do (21). Postup při výpočtu nových souřadnic na konkrétních příkladech je možno nalézt v práci [10].

Pomocí transformace (22) lze převést polynom (21) na tvar

$$Y - Y_S = \lambda_1 t_1^2 + \lambda_2 t_2^2 + \dots + \lambda_n t_n^2 \quad (24)$$

kde koeficienty $\lambda_i, i = 1, 2, \dots, n$ nalezneme řešením charakteristické rovnice matice B ,

$$B = \begin{vmatrix} b_{11} & \frac{1}{2} b_{12} & \dots & \frac{1}{2} b_{1n} \\ \frac{1}{2} b_{12} & b_{22} & \dots & \frac{1}{2} b_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{1}{2} b_{1n} & \frac{1}{2} b_{2n} & \dots & b_{nn} \end{vmatrix}$$

Pravá strana rovnice (24) udává změnu ve výsledku vzhledem k bodu S pro bod, jehož souřadnice jsou t_1, t_2, \dots, t_n . Pomocí tohoto vztahu lze nyní pro daný počet faktorů n provést rozbor funkce Y ve stacionární oblasti.

Je-li $n = 2$, je

$$Y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{11} x_1^2 + b_{22} x_2^2 + b_{12} x_1 x_2,$$

a transformací (22) se převede na tvar

$$Y - Y_S = \lambda_1 t_1^2 + \lambda_2 t_2^2 \quad (25)$$

Nyní bude nejvýhodnější znázornit vztah (25) pomocí systému obrysových křivek pro vhodně zvolené hodnoty Y . Přitom tvar obrysových křivek bude záviset pouze na hodnotách koeficientů λ_1, λ_2 .

Předpokládejme, že byly určeny rovnice nových souřadnicových os a že stacionární bod byl nalezen v bezprostřední blízkosti uspořádaného experimentu. Potom

1. je-li $\lambda_1 < 0, \lambda_2 < 0$, obrysové křivky budou elipsy a stacionární bod S bude bodem, v němž funkce Y bude mít své maximum. Tvar elipsy bude záviset na relativní velikosti λ_1 a λ_2 . Je-li na př. $|\lambda_1| > |\lambda_2|$, budou elipsy prodloužené podél osy t_2 . Tento typ je charakteristický tím, že funkce nabývá svého maxima v jediném bodě vyšetřované stacionární oblasti;
2. je-li $\lambda_1 < 0, \lambda_2 > 0$, budou obrysové křivky hyperboly a podle relativních velikostí $|\lambda_1|, \lambda_2$ se opět určí stupeň prodloužení podél os;
3. jestliže je jeden z koeficientů nulový, na př. $\lambda_2 = 0$, zatím co $\lambda_1 < 0$, je $Y - Y_S = \lambda_1 t_1^2$, kde Y_S je výsledek pro libovolný bod ležící na ose t_2 . Tento příklad je limitním případem předchozích dvou alternativ pro $\lambda_2 \rightarrow 0$, t. zn. nekonečném prodloužení obrysových čar podél osy t_2 .

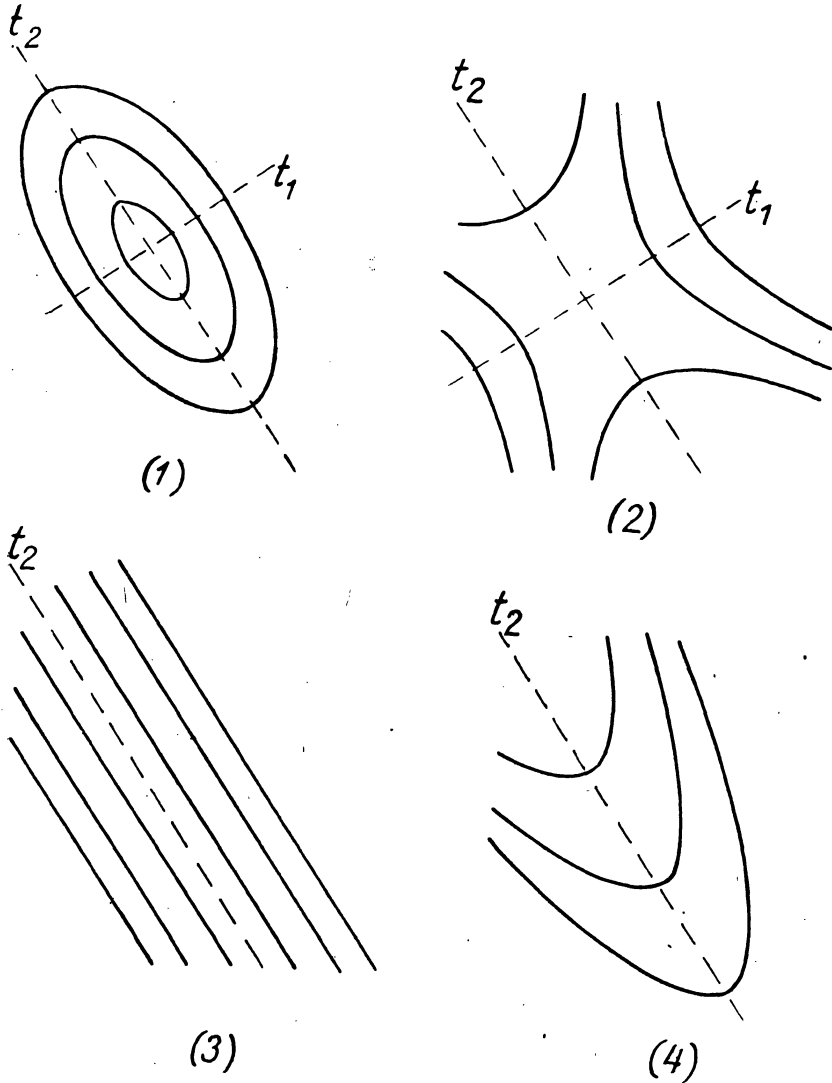
V tomto případě dosahuje faktorová funkce maxima pro všechny body, ležící na ose t_2 .

V případě, že stacionární bod nepadne do oblasti, v níž byl očekáván, ale je od této oblasti velmi vzdálen, potom

4. předpokládáme-li, že S leží v nekonečnu na ose t_2 a $\lambda_2 < 0$, jsou obrysové křivky paraboly. Vezmeme-li v tom případě jako střed systému nějaký vhodně zvolený bod S' , ležící ve vyšetřované oblasti na ose t_2 , má rovnice (25) tvar

$$Y - Y_{S'} = \lambda_1 t_1^2 + \lambda'_2 t_2.$$

Systemy obrysových čar pro případ 1.—4. jsou znázorněny na *obr. č. 3* podle práce [10]. Pro případ tří a více faktorů zůstávají v podstatě jednotlivé typy rovnice (24), mající praktický význam, podobné uvedeným případům pro dva faktory. Ovšem vzhledem k tomu, že na př. u typu (2) může být jedno nebo několik λ_i pozitivních, podobně u případu (3) jedno nebo několik λ_i se může blížit nule, jsou tvary obrysových systémů se stoupajícím počtem faktorů rozmanitější. Tak na příklad pro $n = 3$ je v práci [10] uvedeno sedm různých trojrozměrných systémů.



Obr. 3

S hlediska provádění experimentální práce je třeba dodat, že typy (3) a (4), tak jak byly uvedeny, jsou dosti nepravděpodobné. Tak na př. se v praxi dá velmi těžko předpokládat, že některá λ_i jsou rovna nule, ale je pravděpodobné, že jejich hodnota bude blízká nule. V tomto případě by se experimentátor přesvědčil o jejich povaze ještě několika dodatečnými pokusy. Tento typ je ovšem v praxi velmi důležitý, neboť určuje čáru, plochu nebo prostor, v němž výsledky jsou prakticky konstantní. V této oblasti můžeme potom povést nejhodnější opatření vzhledem k nějakým dalším pomocným proměnným tak, aby určení optimálních podmínek bylo provedeno vzhledem k celému komplexu sledovaných výsledků.

Podobně lze těžko předpokládat, že jsou splněny podmínky typu (4), ale může se stát, že bod S bude vzdálen od vyšetřované oblasti. Jelikož interpretaci vztahu (21) resp. jeho úpravy (24) lze provést pouze v bezprostředním okolí uspořádaného experimentu, nelze provést závěry o okolí vzdáleného bodu S . Provedeme však rozbor ve zkoumané oblasti tak, že uvažujeme pomocný bod S' , vhodně zvolený na příslušné osy i_i (pro niž λ_i ve srovnání s ostatními je malé) a v praxi opět experimentátor by pravděpodobně provedl vyšetřování hodnot y podél této osy.

Nakonec je třeba poznamenat, že zkoumání stacionárních oblastí v případě většího počtu faktorů je po numerické stránce poměrně značně složitě a že vždy je nutno postupovat podle povahy konkrétního případu experimentu, aby výsledky tohoto výzkumu bylo možno interpretovat. V pracích [9] a [10] jsou uvedeny konkrétní příklady z chemického výzkumu, na nichž se je možno dobře objasnit problematiku vyšetřování stacionární oblasti s hlediska aplikace těchto method.

Methoda největšího spádu i vyšetřování stacionární oblasti je založena na lineárních odhadech efektů zpravidla prvního a druhého řádu. Konstrukce těchto odhadů nezávisí na předpokladu rozdělení výsledků pokusů. Chceme-li však sestavit intervalové odhady efektů nebo provést jejich testy významnosti, je nutno vyjít z předpokladu o určitém tvaru rozdělení výsledků pokusů. Pokud předpokládáme normální rozdělení, je možno aplikovat obecnou teorii normální regrese, viz [11]. V práci [12] byla vypracována methoda stanovení oblasti spolehlivosti pro souřadnice stacionárního bodu. Tato methoda je založena na simultánním rozdělení koeficientů při řešení systému lineárních rovnic.

Závěr

Methody pro určování optimálních podmínek byly v této práci vyloženy jen stručně. Po theoretické i praktické stránce zbývá ještě řada otázek, které nemohly být všechny v práci vyloženy a které mohou mít význam ve speciálních případech, především s hlediska numerického usnadnění výpočtů. Tyto otázky a různé příklady z práce, které mohou více osvětlit tyto methody, najde čtenář v uvedené literatuře, která je dnes stále četnější. Lze se oprávněně domnívat, že methody vypracované P. Boxem dávají správný směr vývoje navrhování a uspořádání experimentů v průmyslu a jejich hodnocení s theoretického a především s praktického hlediska. Můžeme proto v budoucnosti očekávat jejich další rozvoj.

Literatura

- [1] H. Hotelling, *Experimental Determination of the Maximum of a Function*, Annals of Mathematical Statistics, 1941, vol. 12.
- [2] L. Savage, M. Friedman, *Planning Experiments Seeking Maxima*, Selected Techniques of Statistical Analysis (Statistical Research Group, Columbia University), 1947.
- [3] Kiefer-Wolfowitz, *Stochastic Estimation of the Maximum of a Regression Function*, Annals of Mathematical Statistics, 1952, vol. 23.

- [4] J. Blum, *Approximation Methods which converge with Probability One*, Annals of Mathematical Statistics, vol. 1954, 25.
- [5] J. Blum, *Multidimensional Stochastic Approximation Methods*, Annals of Mathematical Statistics, 1954, vol. 25.
- [6] R. Bechhofer, *A Single — Sample Multiple Decision Procedure for Ranking Means of Normal Populations with Known Variances*, Annals of Mathematical Statistics, 1954, vol. 25.
- [7] M. Beneš, J. Likeš, *Faktorové experimenty v průmyslovém výzkumu*, Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, 1957, č. 1.
- [8] P. Box, B. Wilson, *On the Experimental Attainment of Optimum Conditions*, Journal of the Royal Statistical Society, Series B, 1951, vol. 13, No 1.
- [9] P. Box, *The Exploration and Exploitation of Response Surfaces: Some General Considerations and Examples*, Biometrics 1954, vol. 10, No 1.
- [10] L. Davies, *Design and Analysis of Experiments*, 1954.
- [11] O. Fischer, *Analýza rozptylu*, 1956.
- [12] P. Box, J. Hunter, *A Confidence Region for the Solution of a Set of Simultaneous Equations with An Application to Experimental Design*, Biometrika 1954, vol. 41.

MATEMATICKO-STATISTICKÉ METODY PŘI KONTROLE HROMADNÉ VÝROBY

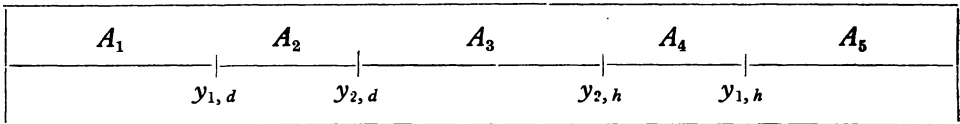
Ing. Dr. B. PARDUBSKÝ,
(Výzk. úst. tepelné techniky, Praha)
(Dokončení)

3.4 Metoda individuálních hodnot

Uvažujme n nezávislých pozorování náhodné proměnné η , které přísluší normální rozdělení $N(0,1)$ a nabývá hodnot y . Nechtě jsou dány čtyři hodnoty $y_{1,d} < y_{2,d} < y_{2,h} < y_{1,h}$, které tvoří krajní body pěti intervalů:

$$A_1 : (-\infty; y_{1,d}), \quad A_2 : (y_{1,d}; y_{2,d}), \quad A_3 : (y_{2,d}; y_{2,h}),$$

$$A_4 : (y_{2,h}; y_{1,h}), \quad A_5 : (y_{1,h}; \infty), \quad (\text{viz obr. 1}).$$



Obr. 1

Potom pravděpodobnost, že mezi n výsledky pozorování y_i pro $i = 1, 2, \dots, n$ nebude v intervalech A_1 a A_5 ležet žádná hodnota a v intervalech A_2 a A_4 nejvýše po jedné hodnotě je rovna

$$\begin{aligned}
 & [F(y_{2,h}) - F(y_{2,d})]^n + n [F(y_{2,d}) - F(y_{1,d})] [F(y_{2,h}) - F(y_{2,d})]^{n-1} + \\
 & + n [F(y_{1,h}) - F(y_{2,h})] [F(y_{2,h}) - F(y_{2,d})]^{n-1} + n(n-1) [F(y_{2,d}) - F(y_{1,d})] \cdot \\
 & \cdot [F(y_{1,h}) - F(y_{2,h})] [F(y_{2,h}) - F(y_{2,d})]^{n-2} = 1 - \alpha, \quad (50)
 \end{aligned}$$