

MATHEMATISCH CENTRUM

26 BOERHAAVESTRAAT 49
AMSTERDAM
STATISTISCHE AFDELING

Leiding: Prof. Dr D. van Dantzig

Chef van de Statistische Consultatie: Prof. Dr J. Hemelrijk

Rapport S 204 (ov 6)

Experimentele bepaling van optimale condities

(Overzichtsrapport)

door

Ir A.R. Bloemena

October

1956

Inhoud

blz

Hoofdstuk 1: Algemene Inleiding

1.1. Optimale condities	1
1.2. De rol van de statisticus	2
1.3. Chemische en metallurgische experimenten	2
1.4. De conventionele methode	3
1.5. De methode van BOX	6

Hoofdstuk 2: Theoretische overwegingen

2.1. Het mathematische model	8
2.2. Eigenschappen van kleinste kwadraten-schattingen	11
2.3. Bepaling van de steilste weg	12
2.4. De modelfoutentheorie	14
2.5. Proefopzetten	15
2.5.1. 2^k factoriële schema's	15
2.5.2. 2^k factoriële schema's met verstrengeling	19
2.5.3. Partiële 2^k -de schema's	21
2.5.4. 3^k factoriële schema's	21
2.5.5. Centrisch en excentrisch samengestelde proefopzet- ten	22

Hoofdstuk 3: Practische uitvoering

3.1. Eerste fase	23
3.2. Tweede fase	23
3.2.1. Lineaire effecten $\gg$ interactie-effecten	23
3.2.2. Lineaire effecten $\ll$ interactie-effecten	24
3.2.3. Lineaire effecten van dezelfde orde van grootte als de interactie-effecten	24
3.3. Derde fase	25
3.4. Enkele opmerkingen	27

Hoofdstuk 4: Voorbeelden van toepassingen

4.1. Eerste voorbeeld	27
4.2. Tweede voorbeeld	33

Hoofdstuk 5: Experimenten op bedrijfsschaal

5.1. Laboratorium-experimenten en experimenten op bedrijfsschaal	37
5.2. Het principe van evolutie naar het optimum	37
5.3. Practische uitvoering	38
5.3.1. De experimentencyclus	38
5.3.2. Verplaatsing van het centrale punt naar een punt met hogere responsie	39
5.3.3. Een schatting van σ^2	41

Memoranda

- S 168 (M 68): Sequentie toets voor het gemiddelde van een normale verdeling met gegeven spreiding, of voor het verschil der gemiddelden van twee normale verdelingen, waarvan de spreidingen gelijk zijn.
- S 168 (M 71): Kleinste kwadraten-schattingen voor de regressie-coëfficiënten van een meervoudige lineaire regressie-vergelijking.
- S 170 (M 74): 2^k -de factoriële schema's.

Hoofdstuk 1: Algemene Inleiding

1.1. Optimale condities

In de praktijk wordt men vaak geconfronteerd met het probleem optimale condities op te sporen voor de uitvoering van industriële bewerkingen. Onder optimale condities wordt daarbij verstaan condities, waarbij deze bewerkingen zo gunstig mogelijk verlopen. Wat dit "zo gunstig mogelijk" inhoudt, hangt van allerlei omstandigheden af; soms zal men speciaal geïnteresseerd zijn in een zo hoog mogelijke opbrengst, in een ander geval in zo laag mogelijke aanmaakkosten. Enkele voorbeelden van zulk soort problemen zijn:

- a. Een legering van vier metalen wil men een zodanige samenstelling geven, dat de treksterkte zo groot mogelijk zal zijn. Hoe kan men experimenteel bepalen, welke samenstelling de beste is?
- b. Een chemische reactie $A + B \rightarrow C + D$ wordt gebruikt om C te produceren. Hoe kan men door experimenten uitmaken hoe de reactietijd, reactietemperatuur, verhouding van de concentratie van A en B moeten worden om de opbrengst aan C voor een gegeven hoeveelheid A maximaal te maken? Of hoe produceert men C het goedkoopst?

Hoewel de statistiek zich reeds geruime tijd bezig houdt met het opstellen van proefschema's en het analyseren van de daarbij verkregen uitkomsten, is aan problemen tot voor enkele jaren weinig aandacht besteed ([19]). Sinds 1950 zijn op dit gebied echter essentiële vorderingen gemaakt. Door G.E.P. BOX, verbonden aan de Imperial Chemical Industries, werd een nieuwe methode van experimenteren uitgewerkt, die gebleken is doeltreffender te zijn dan de tot nu toe gebruikelijke wijze van werken.

De resultaten van deze onderzoeken zijn evenwel voor het industriële speurwerk in het algemeen niet voldoende toegankelijk. Het is het doel van dit rapport te trachten deze methode van experimenteren een grotere bekendheid te geven.

In het volgende zullen wij steeds de grootheid, die maximaal of minimaal gemaakt moet worden, aangeven als de "responsie". Een responsie is dus experimenteel te meten, of kan uit waarnemingen, bij een experiment verricht, berekend worden.

Ook zal hierna steeds het geval behandeld worden, dat de responsie gemaximaliseerd moet worden. Indien men de beschreven werkwijze wil toepassen op het geval, dat het optimum een minimum is, kan dit geschieden door de tegengestelde waarde te beschouwen.

Onder een "experiment" zal steeds verstaan worden één eenheid van handelingen, die één waarneming van de responsie oplevert. Een verzameling van experimenten duiden wij aan met "proef", een plan volgens welke een proef zal worden uitgevoerd als "proefopzet" of proefschema".

1.2. De rol van de statisticus

Het zal uit de in 1.1 gegeven voorbeelden zonder meer duidelijk zijn, dat het niet de taak van de statisticus kan zijn, de gehele proefopzet op te stellen. Immers de beschreven problemen zijn essentieel van technologische aard. De taak van de vaktechnicus is dus in eerste instantie aan te geven in welk gebied hij het optimum verwacht, en welke factoren het procédé beïnvloeden. Dan pas kunnen door voortdurende samenwerking tussen vaktechnicus en statisticus de proefschema's worden opgesteld, volgens welke de experimenten zullen worden uitgevoerd.

Het is van belang er op te wijzen, dat de door BOX ontwikkelde methode op verschillende trappen van verfijning kan worden uitgevoerd. In dit rapport zal slechts de eenvoudigste werkwijze worden aangegeven met enkele verwijzingen naar meer geraffineerde methoden. Men dient zich evenwel te realiseren, dat hoe verfijnder een methode is, des te gecompliceerder en moeilijker de uitvoering wordt, zodat het alleszins aan te bevelen is om in praktijkgevallen te beginnen met eenvoudige en overzichtelijke methoden.

1.3. Chemische en metallurgische experimenten

Uit de tot dusverre beschikbare literatuur blijkt wel, dat de nieuwe methode van experimenteren in hoofdzaak op chemische en metallurgische procédés is toegepast.

De chemische en de metallurgische industrie zijn om de volgende redenen bij uitstek geschikt voor succesvolle toepassing van de beschouwde methoden:

- a. de variantie van de meetonnauwkeurigheden is in de regel klein. Een schatting van deze variantie is meestal reeds bekend uit de resultaten van oriënterende experimenten en zodoende behoeft een proefopzet niet in eerste instantie ook gericht te zijn op het verkrijgen van een schatting van de variantie.
- b. de experimenten kunnen, wegens hun betrekkelijk korte duur, achter elkaar uitgevoerd worden; men kan dus bij elk experiment gebruik maken van de inlichtingen, verkregen uit de voorafgaande.
- c. de factoren zijn meestal kwantitatief (zoals temperatuur, tijd) in plaats van kwalitatief (zoals olie of gas als brandstof).

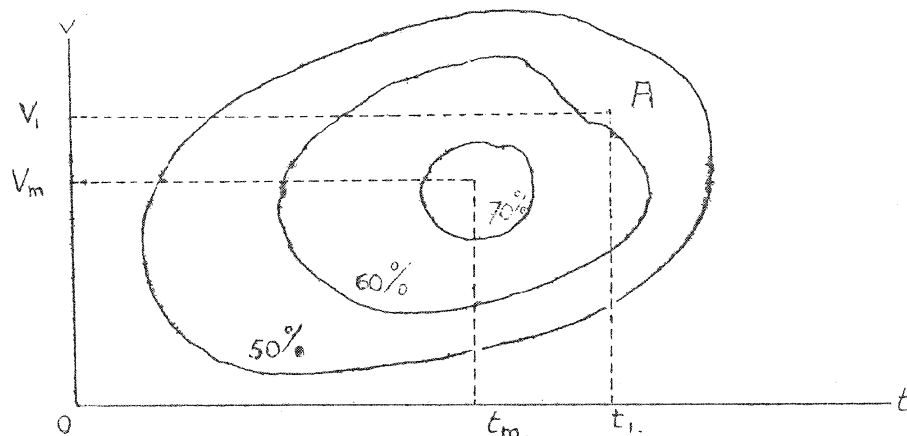
Hoewel aan deze drie voorwaarden meestal is voldaan bij chemische en aanverwante processen, is er geen reden om aan te nemen, dat de door BOX ontwikkelde methoden alléén voor zulke processen bruikbaar zouden zijn.

1.4. De conventionele methode

De methode voor het bepalen van optima, die in de regel in industrieel speurwerk wordt gebruikt, is de "stap voor stap" methode. Deze wordt uitvoerig beschreven in FRIEDMAN en SAVAGE [16]. Om deze methode te bespreken zal gebruik gemaakt worden van een eenvoudig voorbeeld van een "responsieoppervlak".

Stel dat men te maken heeft met een chemische reactie $A + B \rightarrow C + D$, en men is geïnteresseerd in de omstandigheden, waarbij de verhouding $\frac{\text{werkelijke opbrengst aan C}}{\text{theoretische opbrengst aan C}}$ zo groot mogelijk zal zijn voor een zekere hoeveelheid A (deze verhouding is dus de responsie). Stel de opbrengst aan C is alleen afhankelijk van de reactietemperatuur t en de verhouding $V = \frac{\text{concentratie B}}{\text{concentratie A}}$. In dit geval zegt men dat de responsie afhankelijk is van twee factoren. De situatie is dan zodanig, dat bij elk paar waarden voor t en V experimenten kunnen worden verricht en dat bij elk experiment de daarbij optredende responsie gemeten kan worden. Kent men de responsie bij een voldoende groot aantal paren waarden van t en V en ziet men voor het ogenblik af van waarnemingsonnauwkeurigheden, dan kan men in een tekening een indruk geven van het responsie-oppervlak door middel van lijnen van gelijke responsie, naar analogie van hoogtelijnen op kaarten van gebergten, isobaren

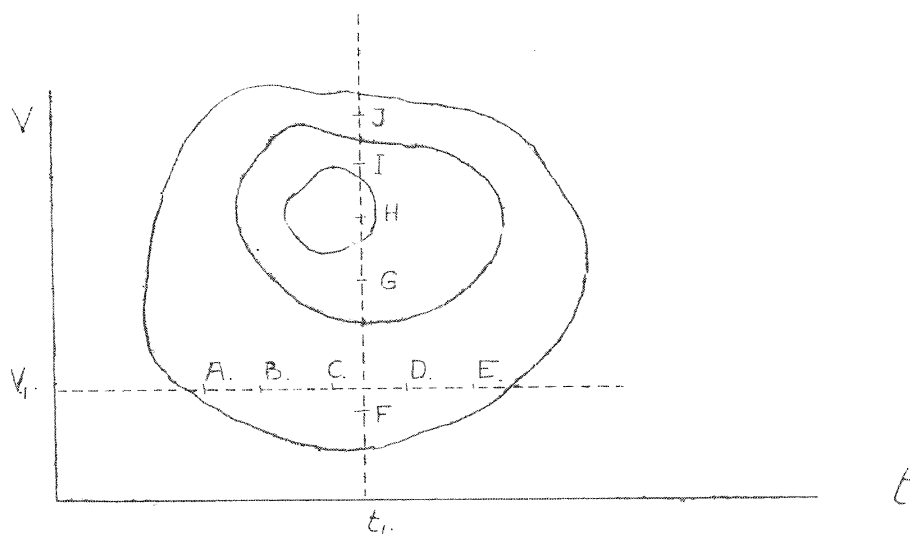
en isothermen in de meteorologie en thermodynamica, enz.
Een dergelijke hoogtelijnen-kaart van het responsie-oppervlak is in figuur 1 geschetst.



Figuur 1: Hoogtelijnen van het responsie-oppervlak voor twee factoren t en V.

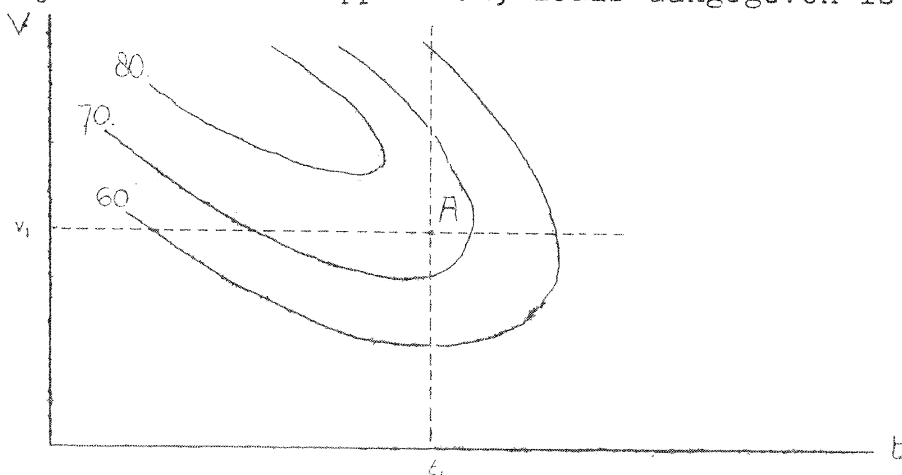
Hieruit kan worden afgelezen, dat voor bijvoorbeeld $t = t_1$ en $V = V_1$ de responsie ongeveer 59% bedraagt. Het doel van het onderzoek zal nu zijn de coördinaten t_m en V_m van het punt met maximale responsie te bepalen.

Met de "stap voor stap" methode gaat men nu als volgt te werk. Men kiest voor de concentratieverhouding een bepaalde waarde $V = V_1$ en voert experimenten uit met deze V_1 en verschillende waarden van t (zie figuur 2: experimenten A, B, C, D en E).



Figuur 2: "Stap voor stap" methode

Door middel van regressie-analyse kan men uit de waargenomen responsies schatten, waar op de lijn $V = V_1$ het maximum zal liggen. Een dergelijk maximum wordt een voorwaardelijk maximum genoemd, met $V = V_1$ als voorwaarde. Stel men vindt hiervoor een punt iets rechts van C. Dan houdt men de temperatuur constant, en wel gelijk aan de waarde $t = t_1$, waarvoor het voorwaardelijke maximum bereikt werd en voert experimenten uit bij verschillende waarden van C (experimenten F t/m J) en bepaalt opnieuw het maximum op de lijn $t = t_1$. Dan begint de tweede ronde: de concentratie wordt constant gehouden op de waarde, die overeenkwam met het voorwaardelijke maximum op $t = t_1$ en men doet weer experimenten bij verschillende temperaturen. Op deze wijze gaat men voort door steeds slechts één factor te variëren en de andere constant te houden. Uit figuur 2 blijkt wel dat men waarschijnlijk zeer spoedig de top van de berg bereikt zal hebben. Maar het geval van figuur 2 is dan ook een bijzonder geval, waarbij nl. de factoren temperatuur en concentratie onafhankelijk van elkaar werken. Voor elke concentratie ligt het voorwaardelijke maximum steeds bij dezelfde temperatuur en omgekeerd. Het algemene geval van een responsieoppervlak met 2 factoren kan echter moeilijkheden opleveren, bijvoorbeeld het oppervlak, zoals aangegeven is in figuur 3

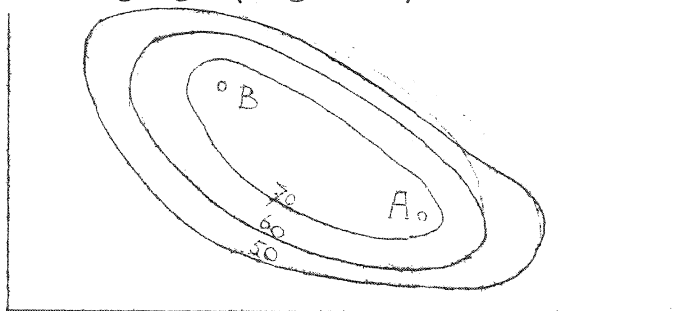


Figuur 3: Geval van een responsieoppervlak voor 2 factoren

Als men op dezelfde wijze als bij figuur 2 nagaat wat er in figuur 3 gebeurt als men de experimenten begint bij $V = V_1$ en verschillende temperaturen, dan zal het heel goed mogelijk zijn, dat men mede in verband met de waarnemingsonnauwkeurigheden, niet verder komt dan A. Men zal dan nooit te weten komen,

dat er toch ergens een gebied is met veel hogere responsie. De ervaring leert, dat dit type van responsie-oppervlak vaak voorkomt.

Een dergelijk geval, waar de "one factor at a time"-methode een onbevredigend resultaat zal geven, is het geval van een "bergrug" (figuur 4).



Figuur 4: Bergrug in een responsie-oppervlak

Het is heel goed mogelijk, dat men in A terecht zal komen en dus wel een punt bereikt met maximale responsie, maar slechts zelden zal men het bestaan te weten komen van een groot gebied, waar de responsie even groot is. En als bijvoorbeeld in B de technische apparatuur veel goedkoper zou zijn dan in A (werktemperatuur!), dan kan de wetenschap van het bestaan van zo'n "rug" in de hoogtelijnenkaart van zeer veel belang zijn.

Het is om deze redenen, dat wij met de meeste nadruk willen wijzen op de methode van experimenteren van BOX, die de zojuist genoemde bezwaren vermijdt.

Men heeft bij deze methode ook de mogelijkheid een goed inzicht te krijgen in het mechanisme van de chemische reactie. Dit is aan de hand van enkele voorbeelden zeer mooi uitgewerkt in 11.

Hoewel in deze paragraaf uitsluitend een proces met slechts 2 factoren ter sprake is gekomen, is dit geen verlies van algemeenheid. Het gehele betoog blijft van kracht voor een willekeurig aantal factoren.

1.5. De methode van BOX

In de vorige paragraaf werd een responsie-oppervlak vergeleken met een berg, waarvan men de top wilde bereiken. Deze parallel kan nog verder doorgetrokken worden. Indien men zich op de helling van de berg bevindt, en men wil langs de kortst mogelijke weg de top bereiken, dan zal men zich recht tegen de helling op gaan bewegen. of met andere woorden: loodrecht op de hoogtelijnen (zie figuur 5).



Figuur 5: De steilste weg

Om zich echter loodrecht op de hoogtelijnen te kunnen gaan bewegen, moet men eerst de richting ervan kennen. In het algemeen kan men als volgt te werk gaan: Om het punt A als centrum wordt een proef uitgevoerd, die bestaat uit een zeker aantal experimenten. Aan de responsies, die bij deze experimenten gevonden worden, wordt een eerste of tweede-graads oppervlak aangepast. Het "werkelijke" responsie-oppervlak zal in het algemeen een zeer ingewikkelde vorm hebben, maar plaatselijk zal het aangepaste oppervlak toch een zeer redelijke benadering zijn. Uit de vergelijking van het aangepaste oppervlak wordt nu de richting loodrecht op de hoogtelijnen bepaald. Men beweegt zich nu van uit A een zekere afstand langs de steilste weg omhoog naar een punt A', dat als centrum van een nieuwe proefopzet gekozen wordt. Op deze wijze beweegt men zich loodrecht op de hoogtelijnen naar het maximum. Heeft men dit tenslotte bereikt, dan zal het oppervlak, dat aangepast is aan de laatste serie experimenten tevens een indruk geven van de vorm van het responsie-oppervlak ter plaatse. Hierdoor wordt men in staat gesteld eventuele bergruggen te ontdekken.

Deze werkwijze, die zoals reeds is vermeld vooral door BOX is ontwikkeld, is beschreven in [1], [2], [3], [5], [6], [7] en [9].

In hoofdstuk 2 van dit rapport zal besproken worden het bepalen van de steilste weg uit de responsies van een proef, hoofdstuk 3 zal de praktische uitvoering van de methode behandelen, waarbij in hoofdstuk 4 uitgewerkte voorbeelden gegeven zullen worden. Tenslotte zal in hoofdstuk 5 besproken worden hoe men de aangegeven methode kan toepassen, indien men te maken heeft met experimenten op bedrijfsschaal.

Hoofdstuk 2: Theoretische overwegingen

2.1. Het mathematische model

Literatuur [7] .

Bij een experiment, waarbij k continue te variëren factoren $x_1, \dots, x_k$ zijn betrokken, meet men een responsie $\underline{y}$, die men zich voorstelt als een functie van deze k factoren en een responsie-fluctuatie onder constante experimentele condities, $\underline{e}$:

$$\underline{y} = \Phi(x_1, \dots, x_k) + \underline{e}.^{1)} \quad (2.1;1)$$

Het doel van het onderzoek kan nu worden gezien als het vinden van die combinatie van waarden van de factoren, $x_1^{(m)}, \dots, x_k^{(m)}$, waarvoor $\Phi(x_1, \dots, x_k)$ maximaal is.

Betreffende de waarnemingsonnauwkeurigheid $\underline{e}$ maken wij de volgende onderstellingen:

1. $\sum \underline{e} = 0$.
2. de verdeling van $\underline{e}$ is dezelfde voor alle combinaties van waarden van de k factoren ($\text{var}\{\underline{e}\} = \sigma^2$).

Bij de proef worden nu N experimenten uitgevoerd, en dus N metingen van de responsie ~~verkregen~~. Het u -de experiment van deze proef wordt zo uitgevoerd, dat daarbij de k factoren de waarden $x_{1u}, x_{2u}, \dots, x_{ku}$ aannemen. Men kan op de volgende wijze elk experiment opvatten als een punt in de k -dimensionale ruimte. Elke coördinaat van een k -dimensionaal ~~assenstelsel~~ komt overeen met een van de factoren. Het u -de experiment kan men dan voorstellen als het punt met coördinaten $x_{1u}, x_{2u}, \dots, x_{ku}$. In het volgende zal herhaaldelijk van deze wijze van afbeelden gebruik gemaakt worden.

Is de bij het u -de experiment waargenomen responsie y_u , dan geldt

$$\sum y_u = \Phi(x_{1u}, \dots, x_{ku}). \quad (2.1;2)$$

In aansluiting op de hierboven gemaakte onderstellingen, zal een derde onderstelling gemaakt worden:

-
- 1) Onderstreepte grootheden zijn stochastisch, d.w.z. zij bezitten een kansverdeling. Een waargenomen waarde van een dergelijke grootheid wordt weergegeven, door hetzelfde - niet onderstreepte - symbool.

3. de waarnemingen zijn onderling onafhankelijk.

De twee laatste onderstellingen kunnen in matrixnotatie (zie Appendix I) geschreven worden als

$$E(\underline{y} - E\underline{y})(\underline{y} - E\underline{y})' = \sigma^2 I \quad (2.1;3)$$

Nemen wij aan, dat de functie Φ in het beschouwde deel van de k-dimensionale ruimte continue afgeleiden bezit, dan kan (2.1;2) worden ontwikkeld in een reeks van TAYLOR. Hiertoe voeren wij de volgende notatie in:

voor de waarde van de functie Φ in de oorsprong 0:

$$[\Phi]_{x_1 = \dots = x_k = 0} = \varphi_0,$$

voor de partieel afgeleiden naar x_i in 0:

$$\left[\frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right]_{x_1 = \dots = x_k = 0} = \varphi_{1i}, \quad (2.1;4)$$

voor de tweede partieel afgeleide in 0:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{x_1 = \dots = x_k = 0} = \varphi_{1ij}.$$

Voorts:

$$x_{ou} \stackrel{\text{def}}{=} +1. \quad (2.1;5)$$

Nu kan, onder de genoemde voorwaarden (2.1;2) worden geschreven als:

$$\begin{aligned} E(\underline{y}_u) = & \varphi_0 x_{ou} + \varphi_1 x_{1u} + \dots + \varphi_k x_{ku} + \frac{1}{2} \varphi_{11} x_{1u}^2 + \dots + \frac{1}{2} \varphi_{kk} x_{ku}^2 + \\ & + \varphi_{12} x_{1u} x_{2u} + \dots + \varphi_{k-1,k} x_{k-1,u} x_{ku} + \dots + \\ & + \frac{1}{6} \varphi_{111} x_{1u}^3 + \dots + \frac{1}{2} \varphi_{122} x_{1u} x_{2u}^2 + \dots \end{aligned} \quad (2.1;6)$$

Hierin noemen wij

- φ_i = het i-de lineaire effect,
- $\frac{1}{2} \varphi_{ii}$ = het i-de quadratische effect en
- φ_{ij} = het (i,j) interactie-effect.

Op grond van bepaalde onderstellingen van de functie Φ kan men veelal aannemen, dat termen van de graad d en hoger in x verwaarloosbaar klein zijn. Zo zal, indien Φ plaatselijk goed te benaderen is door een plat vlak gelden:

$$E \underline{y}_u = \varphi_0 x_{0u} + \varphi_1 x_{1u} + \dots + \varphi_k x_{ku}. \quad (2.1;7)$$

Men noemt dit het model, en wel het lineaire model.

Is Φ plaatselijk bij benadering een tweede-graads-oppervlak, dan komt men tot het kwadratisch model:

$$E \underline{y}_u = \varphi_0 x_{0u} + \varphi_1 x_{1u} + \dots + \varphi_k x_{ku} + \frac{1}{2} \varphi_{11} x_{1u}^2 + \dots + \frac{1}{2} \varphi_{kk} x_{ku}^2 + \\ + \varphi_{12} x_{1u} x_{2u} + \dots + \varphi_{k-1,k} x_{k-1,u} x_{ku}. \quad (2.1;8)$$

Deze modellen stellen alleen exact het oppervlak voor, als Φ een plat vlak, resp. een tweede-graads-oppervlak is. Evenwel zal, indien Φ lokaal slechts weinig van een plat vlak, resp. tweede-graads-oppervlak afwijkt, de rechterleden in (2.1;7) en (2.1;8) redelijke benaderingen zijn.

Welk model in een praktijkgeval zal worden gekozen, hangt van verschillende omstandigheden af; wij komen hierop nader terug in de paragraaf over de modelfoutentheorie.

Uitgaande van een bepaald model zullen uit de waargenomen responsies y_u ($u=1, \dots, N$) schattingen van de φ_0 , φ_i , en eventueel φ_{ii} worden berekend. Hierdoor wordt een indruk verkregen van het gedrag van de functie Φ in het voor ons interessante gebied.

Daar wij de schaal ten opzichte waarvan elke x_i gemeten zal worden naar willekeur kunnen veranderen, kunnen wij met behulp hiervan een zekere standaardisatie bereiken, waardoor onderlinge vergelijking van proefopzetten mogelijk wordt. Daartoe wordt het nulpunt en de eenheid van de schaal zo gekozen, dat voor $i=1, \dots, k$

$$\sum_{u=1}^N x_{iu} = 0$$

en

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = N.$$

(2.1;9)

Indien gebruik wordt gemaakt van matrixnotatie kan zowel 2.1;7 als 2.1;8 worden geschreven als

$$E \underline{y} = X \varphi, \quad (2.1;10)$$

waarbij X de matrix der x_{iu} (u = rijnummer, i = kolomnummer) en y , resp. φ de kolomvector der y_u resp. der afgeleiden van ϕ voorstelt. Immers (2.1;6) kan geschreven worden als:

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{01} & x_{11} & \dots & x_{k1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{0N} & x_{1N} & \dots & x_{kN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_k \end{pmatrix} \quad (2.1;11)$$

Op analoge wijze kan (2.1;7) geschreven worden als:

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{01}x_{11}\dots x_{k1} & x_{11}^2\dots x_{k1}^2 & (x_{11}x_{21})\dots(x_{k-1,1}x_{k1}) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{0N}x_{1N}\dots x_{kN} & x_{1N}^2\dots x_{kN}^2 & (x_{1N}x_{2N})\dots(x_{k-1,N}x_{kN}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \varphi_1 \\ \vdots \\ \frac{1}{2}\varphi_{kk} \\ \varphi_{12} \\ \vdots \\ \varphi_{k-1,k} \end{pmatrix} \quad (2.1;12)$$

Enkele begrippen uit de matrixrekening zijn uiteengezet in Appendix I.

2.2. Eigenschappen van kleinste kwadraten-schattingen

Wij nemen aan dat een bepaald model gekozen is en zullen nu aangeven, hoe schattingen van de φ 's kunnen worden berekend uit de vector y van de waarnemingsresultaten.

De volgende eisen kunnen gesteld worden aan de schattingen van de φ 's:

- zij moeten zuiver zijn en
- van alle mogelijke zuivere schattingen de kleinste variantie hebben.

De methode der kleinste kwadraten geeft hiervoor de oplossing, die vooral in verband met (2.1;3) eenvoudig van vorm is (zie [26] en het aan dit rapport toegevoegde memorandum S 168 (M 71)). De volgende resultaten worden hierbij verkregen (uitgaande van (2.1;10)):

a. voor de schattingen f van φ :

$$f = (X'X)^{-1}X'y, \quad (2.2;1)$$

b. voor de covariantie-matrix van deze schattingen:

$$E(f-\varphi)(f-\varphi)' = (X'X)^{-1}\sigma^2, \quad (2.2;2)$$

c. voor een zuivere schatting van σ^2 :

$$s^2 = (N-L)^{-1}(y'y - f'X'Xf), \quad (2.2;3)$$

waarin N = het aantal experimenten

L = het aantal elementen van de vector β .

Er zijn evenwel twee voorwaarden, waaraan voldaan moet zijn:

a. $N \geq L$, dus het aantal experimenten moet minstens even groot zijn als het aantal te schatten coëfficiënten,

en

b. $(X'X)$ mag niet singulier zijn (d.i. determinant 0 hebben). Dan bestaat dus de inverse matrix $(X'X)^{-1}$.

Een belangrijk feit is dat als een bepaalde proefopzet uitgevoerd zal worden, de matrices $(X'X)$, $(X'X)^{-1}$ en $(X'X)^{-1}X'$ reeds van te voren kunnen worden uitgerekend (voor het invertieren van matrices, dat hierbij te pas komt, zie [15]).

Wij weten dan reeds hoe groot de varianties en covarianties van de f 's zullen worden. Dit is dus een middel om de efficienties van verschillende proefopzetten te vergelijken. Bovendien kan worden nagegaan, of voldaan is aan de eis, dat $(X'X)$ niet singulier mag zijn. Voor een proefopzet, waarbij hieraan niet voldaan was, verwijzen wij naar [23].

2.3. Bepaling van de steilste weg

Aan de hand van de gevonden schattingen der f 's zullen wij nu trachten het centrum van de volgende serie experimenten zo gunstig mogelijk te kiezen. Wij zullen zeker verlangen, dat dit centrum zal liggen in een gebied met hogere responsie.

Met betrekking tot de k -dimensionale ruimte, waarin de experimenten als punten afgebeeld konden worden, betekent dit, dat een punt P met coördinaten $x_1^P, x_2^P, \dots, x_k^P$ gevonden zal moeten worden, dat op een afstand r van O ligt (waarbij wij eraan herinneren, dat wij de oorsprong van het coördinatenstelsel beeldpunt van de oorspronkelijke proefopzet hebben verplaatst) en waar de responsie maximaal is. Met andere woorden: wij zullen $\Phi(P) - \Phi(O)$ maximaliseren onder de bijvoorwaarde

$$r^2 = \sum_{t=1}^k (x_t^P)^2 \quad (2.3;1)$$

Het eenvoudigste kan dit geschieden door gebruik te maken van de multiplicator van LAGRANGE. Dan moet gemaximaliseerd worden:

$$\psi = \Phi(P) - \Phi(O) - \frac{1}{2}\mu \sum_{t=1}^k (x_t^P)^2 \quad (2.3;2)$$

Door de partiële differentiaalquotiënten naar $x_1^P, \dots, x_k^P$ nul te stellen, vinden wij:

$$\mu x_1^P = \varphi_1(P), \quad (2.3;3)$$

waarbij $\varphi_1(P)$ de partiële afgeleide is van Φ naar x_1 in het punt P . De coördinaten van P moeten dus volgens (2.3;3) zo gekozen worden, dat deze evenredig zijn met de afgeleiden in P . Daar wij deze afgeleiden niet kennen, moeten hiervoor benaderingen worden ingevoerd.

Is de proef ver van het maximum verricht, dan kan het responsie-oppervlak ter plaatse in de regel goed worden benaderd door een plat vlak (model 2.1;7)) en gaat (2.3;3) over in

$$\mu x_1^P = \varphi_1, \quad i = 1, \dots, k \quad (2.3;4)$$

Dit geeft dus aan, dat als de lineaire benadering toegestaan is, de coördinaten van P gekozen moeten worden evenredig met de partiële afgeleiden in het punt O (en deze afgeleiden kunnen, zoals in de vorige paragraaf is aangegeven, worden geschat met behulp van de methode van de kleinste kwadraten). Indien wij op deze wijze handelen, zal het beeldpunt van de proefopzet zich loodrecht op de hoogtelijnen in O verplaatsen, dit is in de inleiding beschreven als de methode van de steilste weg.

Als men dicht bij het maximum is, gaat men anders te werk, daar de lineaire benadering in dit geval zeker niet toegestaan is. Wij komen hierop in hoofdstuk 3 terug, waar tevens behandeld zal worden, hoe men uit kan maken, of men het maximum reeds dicht genaderd is.

2.4. De modelfoutentheorie

Er zijn twee oorzaken, waardoor de schattingen f zullen afwijken van de "werkelijke" waarden,

1. aangezien de f 's slechts schattingen zijn, die als zodanig altijd van de "werkelijke" waarden zullen afwijken en
2. door eventuele keuze van een verkeerd model.

De covariantiematrix, zoals deze is gegeven in (2.2;2) geeft een indruk van welke orde van grootte de eerste soort van afwijkingen zijn.

De modelfouten kunnen worden beoordeeld aan de hand van de door BOX ontwikkelde modelfoutentheorie.

Stel dat wij een model:

$$\underline{E}_Y = X_1 \varphi_1, \quad (2.4;1)$$

hebben gekozen, waarin X_1 een $M \times N$ -matrix is, maar dat het responsie-oppervlak exact kan worden voorgesteld door een model met een groter aantal regressiecoëfficiënten:

$$\underline{E}_Y = X_1 \varphi_1 + X_2 \varphi_2, \quad (2.4;2)$$

waarin X_2 een $S \times N$ -matrix is.

De kleinste kwadraten schattingen van de φ 's worden nu op grond van het gekozen model volgens (2.2;1) en (2.4;1)

$$f = (X_1' X_1)^{-1} X_1' y. \quad (2.4;3)$$

Deze zijn niet zuiver, want:

$$\begin{aligned} E f &= (X_1' X_1)^{-1} X_1' E Y = \\ &= (X_1' X_1)^{-1} X_1' X_1 \varphi_1 + (X_1' X)^{-1} X_1' X_2 \varphi_2 = \\ &= \varphi_1 + A \varphi_2, \end{aligned} \quad (2.4;4)$$

waarin

$$A = (X_1' X_1)^{-1} X_1' X_2. \quad (2.4;5)$$

A is de zogenaamde modelfoutenmatrix. Evenals de matrices $X_1'X$ enz. kan deze voor een bepaald type proefopzet en voor een bepaalde keuze van φ_2 van te voren worden berekend, waardoor een goed inzicht wordt verkregen van de kwaliteit van de verkregen schattingen (zie par. 2.5).

BOX onderscheidt in dit verband twee typen van proefopzetten:

- a. proefopzetten van het type A en orde d: dit zijn proefopzetten, waarbij alle regressiecoëfficiënten tot en met die van de orde d (dus behorende bij termen van de graad d in de x'en) alleen zuiver te schatten zijn, indien in werkelijkheid geen coëfficiënten van de orde d+1 voorkomen.
- b. proefopzetten van het type B en orde d: dit zijn proefopzetten, waarbij alle regressiecoëfficiënten tot en met die van de orde d alleen zuiver te schatten zijn, als in werkelijkheid geen coëfficiënten van de orde d+2 voorkomen. De aanwezigheid van coëfficiënten van de orde d+1 is dus in dit geval niet van belang.

Voor de toepassing van de methode van de steilste weg is een schatting f_0 van φ_0 niet nodig, daarom is het al of niet zuiver zijn van f_0 daarbij niet van belang.

2.5. Proefopzetten

Om de invloed van veranderingen in de experimentele condities te bestuderen, worden in de regel experimenten uitgevoerd volgens een proefopzet. Daarbij worden een aantal typen van proefopzetten, met name de 2^k -de en 3^k -de factoriële schema's zeer veelvuldig toegepast, hetgeen verband houdt met de eenvoudige wijze waarop de schattingen van de effecten te berekenen zijn, en de gunstige eigenschappen van deze schattingen. Wij zullen nu nagaan, welke eigenschappen deze proefopzetten bezitten, indien deze gebruikt worden voor het opsporen van optimale condities.

2.5.1. 2^k -de factoriële schema's

Als aanhangsel aan dit rapport is toegevoegd het memorandum S 190 (M 74), waarin de opbouw van de 2^k factoriële schema's en hun voornaamste eigenschappen besproken worden. De begrippen, die daarbij uiteengezet zijn, zullen hier verder als bekend worden verondersteld.

In het algemeen varieert men bij een onderzoek naar optimale condities ieder der factoren slechts over een klein interval. Men maakt op grond hiervan in de regel de onderstellingen, dat het responsie-oppervlak in het door de experimenten bestreken gebied met goede benadering door een tweede graads oppervlak weer te geven is (model (2.1;8)). Uit de waargenomen waarden van de responsie schat men dan de φ 's, die in de vergelijking van dit oppervlak voorkomen. Voert men de experimenten evenwel uit volgens een 2^k factoriëel schema, dan treedt hierbij een complicatie op, die wij zullen aangeven voor het geval $k = 3$. Het model (2.1;8) wordt dan:

$$\begin{aligned} E y_u = & \varphi_0 x_{0u} + \varphi_1 x_{1u} + \varphi_2 x_{2u} + \varphi_3 x_{3u} + \frac{1}{2} \varphi_{11} x_{1u}^2 + \frac{1}{2} \varphi_{22} x_{2u}^2 + \\ & + \frac{1}{2} \varphi_{33} x_{3u}^2 + \varphi_{12} x_{1u} x_{2u} + \varphi_{13} x_{1u} x_{3u} + \varphi_{23} x_{2u} x_{3u}. \end{aligned} \quad (2.5.1;1)$$

De programmamatrix van een 2^3 factorieel schema is:

$$P = \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 \\ -1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 \\ -1 & -1 & +1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.5.1;2)$$

Hierin geeft de u-de rij de coördinaten x_{1u}, x_{2u}, x_{3u} aan van het u-de experiment. Het nulpunt en de schaal is zodanig gekozen, dat het hoge niveau van een factor door +1, het lage niveau door -1 wordt weergegeven. Door deze keuze van eenheid en schaal, die dus aan (2.1;9) voldoet, geldt voor elke u:

$$x_{1u}^2 = x_{2u}^2 = x_{3u}^2 = +1 = x_{0u}, \quad (2.5.1;3)$$

hetgeen symbolisch kan worden aangegeven door de groepsrelatie:

$$11 = 22 = 33 = \text{eenheid} \quad (2.5.1;4)$$

(2.5.1;1) kan dus geschreven worden als:

$$\begin{aligned} E y_u = & (\varphi_0 + \frac{1}{2} \varphi_{11} + \frac{1}{2} \varphi_{22} + \frac{1}{2} \varphi_{33}) x_{0u} + \varphi_1 x_{1u} + \varphi_2 x_{2u} + \varphi_3 x_{3u} + \\ & + \varphi_{12} x_{1u} x_{2u} + \varphi_{13} x_{1u} x_{3u} + \varphi_{23} x_{2u} x_{3u}. \end{aligned} \quad (2.5.1;5)$$

Uit de waarnemingsresultaten, verkregen volgens een 2^k factorieel schema, kunnen volgens (2.5.1;5) dus geen schattingen van de kwadratische effecten $\frac{1}{2}\varphi_{ii}$ verkregen worden, daar deze alle tezamen geschat worden met de φ_0 .

In memorandum S 190 (M 74) is een eenvoudige wijze aangegeven, waarop voor 2^k factoriële schema's de kleinste kwadraten schattingen van de effecten te berekenen zijn. Wij duiden deze schattingen, die in het memorandum met m 's zijn aangegeven, aan met $f_0, \dots, f_{12}$. Geven wij voorts door een pijl aan, dat het rechterlid door het linkerlid wordt geschat, dan volgt uit (2.5.1;5):

$$f_0 \longrightarrow \varphi_0 + \frac{1}{2}\varphi_{11} + \frac{1}{2}\varphi_{22} + \frac{1}{2}\varphi_{33}$$

$$f_1 \longrightarrow \varphi_1$$

$$f_2 \longrightarrow \varphi_2$$

$$f_3 \longrightarrow \varphi_3$$

(2.5.1;6)

$$f_{12} \longrightarrow \varphi_{12}$$

$$f_{13} \longrightarrow \varphi_{13}$$

$$f_{23} \longrightarrow \varphi_{23}$$

Uiteraard is het ook van belang na te gaan, hoe deze schattingen zullen worden beïnvloed door afwijkingen van het model (2.5.1;1). Stel bijvoorbeeld, dat het responsie-oppervlak ter plaatse exact een derde graads oppervlak is:

$$\begin{aligned} E y_u = & \varphi_0 x_{0u} + \varphi_1 x_{1u} + \dots + \varphi_{23} x_{2u} x_{3u} + \frac{1}{6} \varphi_{111} x_{1u}^3 + \frac{1}{6} \varphi_{222} x_{2u}^3 + \\ & + \frac{1}{6} \varphi_{333} x_{3u}^3 + \frac{1}{2} \varphi_{112} x_{1u}^2 x_{2u} + \frac{1}{2} \varphi_{113} x_{1u}^2 x_{3u} + \dots + \\ & + \varphi_{123} x_{1u} x_{2u} x_{3u}. \end{aligned} \quad (2.5.1;7)$$

Met behulp van de modelfoutentheorie zijn de verwachtingen van de schattingen (2.5.1;6) te berekenen. Evenwel is in dit geval ook op andere wijze na te gaan, hoe (2.5.1;6) zal worden. Immers uit (2.5.1;3) volgt:

$$\left. \begin{aligned} x_{1u}^3 &= x_{1u} x_{1u}^2 = x_{1u}, \\ x_{1u}^2 x_{2u} &= x_{2u}, \text{ etc.} \end{aligned} \right\} \quad (2.5.1;8)$$

hetgeen men ook kan vinden, uitgaande van de groepsrelatie:
vermenigvuldigt men beide zijden van

$$11 = \text{eenheid}$$

met 1, dan verkrijgt men

$$111 = 1 \quad (2.5.1;9)$$

Evenzo, indien men links en rechts met 2 vermenigvuldigt

$$112 = 2 ,$$

etc.

Uit uitdrukkingen van het type (2.5.1;8) (of (2.5.1;9))
volgt nu dat (2.5.1;7) geschreven kan worden als:

$$\begin{aligned} \epsilon_{yu} = & (\varphi_0 + \frac{1}{2}\varphi_{11} + \frac{1}{2}\varphi_{22} + \frac{1}{2}\varphi_{33})x_{0u} + (\varphi_1 + \frac{1}{6}\varphi_{111} + \frac{1}{2}\varphi_{122} + \frac{1}{2}\varphi_{133})x_{1u} + \\ & + (\varphi_2 + \frac{1}{2}\varphi_{112} + \frac{1}{6}\varphi_{222} + \frac{1}{2}\varphi_{233})x_{2u} + (\varphi_3 + \frac{1}{2}\varphi_{113} + \frac{1}{2}\varphi_{223} + \\ & + \frac{1}{6}\varphi_{333})x_{3u} + \varphi_{12}x_{1u}x_{2u} + \varphi_{13}x_{1u}x_{3u} + \varphi_{23}x_{2u}x_{3u} + \quad (2.5.1;10) \\ & + \varphi_{123}x_{1u}x_{2u}x_{3u} , \end{aligned}$$

zodat (2.5.1;6) in dit geval overgaat in

$$\begin{aligned} f_0 & \rightarrow \varphi_0 + \frac{1}{2}\varphi_{11} + \frac{1}{2}\varphi_{22} + \frac{1}{2}\varphi_{33} \\ f_1 & \rightarrow \varphi_1 + \frac{1}{6}\varphi_{111} + \frac{1}{2}\varphi_{122} + \frac{1}{2}\varphi_{133} \\ f_2 & \rightarrow \varphi_2 + \frac{1}{2}\varphi_{112} + \frac{1}{6}\varphi_{222} + \frac{1}{2}\varphi_{233} \\ f_3 & \rightarrow \varphi_3 + \frac{1}{2}\varphi_{113} + \frac{1}{2}\varphi_{223} + \frac{1}{6}\varphi_{333} \\ f_{12} & \rightarrow \varphi_{12} \\ f_{13} & \rightarrow \varphi_{13} \\ f_{23} & \rightarrow \varphi_{23} \\ f_{123} & \rightarrow \varphi_{123} \end{aligned} \quad (2.5.1;11)$$

Is het responsie-oppervlak en oppervlak van een hogere
graad dan 3, dan worden door $f_0, f_{12}, f_{13}, f_{23}$ bovendien nog 4-de
orde effecten geschat, en door f_1, f_2, f_3 en f_{123} nog 5-de orde
effecten.

Uit (2.5.1;11) volgt dat een 2^k factorieel schema een
proefopzet van het type B en orde 1 (zie par. 2.4). De lineaire
effecten zijn nl. zuiver te schatten, ook al zijn er tweede orde
effecten aanwezig. De derde orde effecten moeten evenwel verwaar-
loosbaar klein zijn.

De groepsrelatie blijkt een zeer eenvoudig hulpmiddel, dat ons in staat stelt betrekkingen van het type (2.5.1;11) direct op te schrijven. Elke f schat nl. de som van de effecten, waarvan de indices verkregen worden, door de index van de f te vermenigvuldigen met de groepsrelatie. Treedt er in een op deze wijze verkregen product tweemaal eenzelfde cijfer op, dan laat men deze cijfers weg uit het product.

2.5.2. 2^k factoriële schema's met verstrengeling

Wil men de invloed van vier factoren onderzoeken, dan kan men een 2^3 factoriëel schema uitvoeren, waarbij de vierde factor wordt geïntroduceerd door verstrengeling (zie het memorandum S 190 (M 74)) met de hoogste orde interactie van de drie andere. Nu is dus voor elke u :

$$x_{4u} = x_{1u} \cdot x_{2u} \cdot x_{3u}$$

of symbolisch geschreven:

$$4 = 123.$$

Vermenigvuldigt men beide zijden met 4, dan is:

$$44 = 1234 = 123123 = \text{eenheid},$$

zodat de groepsrelatie wordt:

$$11 = 22 = 33 = 44 = 1234 = \text{eenheid} \quad (2.5.2;1)$$

Met behulp hiervan zijn direct de verwachtingen van de schattingen $f_1, \dots, f_{123}$ aan te geven.

$f_0 \rightarrow \varphi_0 + \frac{1}{2}\varphi_{11} + \frac{1}{2}\varphi_{22} + \frac{1}{2}\varphi_{33} + \frac{1}{2}\varphi_{44}$	hogere orde effecten		
$f_1 \rightarrow \varphi_1 + \frac{1}{6}\varphi_{111} + \frac{1}{2}\varphi_{122} + \frac{1}{2}\varphi_{133} + \frac{1}{2}\varphi_{144} + \varphi_{234} +$	"	"	"
$f_2 \rightarrow \varphi_2 + \frac{1}{2}\varphi_{112} + \frac{1}{6}\varphi_{222} + \frac{1}{2}\varphi_{233} + \frac{1}{2}\varphi_{244} + \varphi_{134} +$	"	"	"
$f_3 \rightarrow \varphi_3 + \frac{1}{2}\varphi_{113} + \frac{1}{2}\varphi_{223} + \frac{1}{6}\varphi_{333} + \frac{1}{2}\varphi_{344} + \varphi_{124} +$	"	"	"
$f_{123} = f_4 \rightarrow \varphi_4 + \frac{1}{2}\varphi_{114} + \frac{1}{2}\varphi_{224} + \frac{1}{2}\varphi_{334} + \frac{1}{6}\varphi_{444} + \varphi_{123} +$	"	"	" (2.5.2;2)
$f_{12} \rightarrow \varphi_{12} + \varphi_{34} +$	hogere orde effecten		
$f_{13} \rightarrow \varphi_{13} + \varphi_{24} +$	"	"	"
$f_{23} \rightarrow \varphi_{23} + \varphi_{14} +$	"	"	"

De verandering, die t.o.v. 2.5.1 zijn opgetreden, hebben dus vooral betrekking op de interactie-effecten; deze worden nu paarsgewijze geschat.

Zet men nu de verstrengeling voort, door met de interacties tussen 1 en 2, 1 en 3, 2 en 3 nog verdere factoren (resp. 5, 6 en 7) te associëren, dan wordt de groepsrelatie:

$$11 = 22 = \dots = 77 = 1234 = 225 = 136 = 237 ,$$

maar ook is

$$\text{eenheid} = 1234.125 = 345 ,$$

dus de symbolen, die ontstaan door onderlinge vermenigvuldiging van elementen van de groepsrelatie, behoren ook tot deze groepsrelatie, die tenslotte dus wordt:

$$11 = 22 = \dots = 77 = 1234 = 125 = 136 = 237 = 345 = 246 = 147 \\ (2.5.2;3)$$

Hieruit volgt, dat de verwachtingen van de schattingen zijn:

$$\begin{aligned} f_0 &\rightarrow \varphi_0 + \frac{1}{2}\varphi_{11} + \frac{1}{2}\varphi_{22} + \dots + \frac{1}{2}\varphi_{77} + \text{hogere orde effecten} \\ f_1 &\rightarrow \varphi_1 + \varphi_{25} + \varphi_{36} + \varphi_{47} + \text{hogere orde effecten} \\ f_2 &\rightarrow \varphi_2 + \varphi_{15} + \varphi_{37} + \varphi_{46} + \text{" " " } \\ f_3 &\rightarrow \varphi_3 + \varphi_{16} + \varphi_{27} + \varphi_{45} + \text{" " " } \\ f_4 = f_{123} &\rightarrow \varphi_4 + \varphi_{35} + \varphi_{26} + \varphi_{17} + \text{" " " } \\ f_5 = f_{12} &\rightarrow \varphi_5 + \varphi_{12} + \varphi_{34} + \varphi_{67} + \text{" " " } \\ f_6 = f_{13} &\rightarrow \varphi_6 + \varphi_{13} + \varphi_{24} + \varphi_{57} + \text{" " " } \\ f_7 = f_{23} &\rightarrow \varphi_7 + \varphi_{14} + \varphi_{23} + \varphi_{56} + \text{" " " } \end{aligned} \quad (2.5.2;4)$$

Deze proefopzet is dus van het type A: zuivere schattingen van de hoofdeffecten zijn alleen te verkrijgen, indien tweede orde effecten afwezig zijn. De programma-matrix, die bij deze proefopzet van 7 factoren in 8 experimenten behoort, is

$$P = \begin{matrix} & \begin{matrix} (1) & (2) & (3) & (4) & (5) & (6) & (7) \end{matrix} \\ \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 & -1 & -1 & +1 \\ -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & -1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & -1 \\ -1 & -1 & +1 & +1 & +1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 & +1 \end{pmatrix} & \end{matrix} \quad (2.5.2;5)$$

2.5.3. Partiële 2^k -de schema's

Zoals in het memorandum S 190 (M 74) is aangegeven, kan een partiëel schema ook worden opgevat als een volledig schema voor een aantal van de factoren, waarbij de overige door verstrengeling zijn geïntroduceerd. De consequentie van het uitvoeren van partiële schema's volgen dus op eenvoudige wijze uit de in par. 2.5.2 gegeven overwegingen.

2.5.4. 3^k factoriële schema's

Een belangrijk bezwaar van een 2^k factoriëel schema is, dat men hiermee niet de coëfficiënt φ_{ii} van x_i^2 ($i = 1, \dots, k$) kan schatten. Men kan hieraan tegemoet komen door in plaats van een 2^k - een 3^k -factoriëel schema te gebruiken.

Een 3^k factoriëel schema bezit echter andere belangrijke nadelen:

- 1) Het aantal experimenten wordt, reeds voor betrekkelijk kleine k prohibitief hoog.
- 2) Partiële schema's bestaan wel, maar de interpretatie ervan is zeer moeilijk.
- 3) De varianties van de schattingen van kwadratische en interactie-effecten worden verschillend gewogen.

Het derde punt kan het beste toegelicht worden aan een 3^2 factoriëel schema. De matrix X (2.1;12) wordt in verband met (2.1;9):

$$X = \begin{pmatrix} x_0 & x_1 & x_2 & x_1^2 & x_2^2 & x_1 x_2 \\ 1 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{3}{2} & \frac{3}{2} & \frac{3}{2} \\ 1 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{3}{2} & \frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \\ 1 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{3}{2} & \frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \\ 1 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{3}{2} & \frac{3}{2} & \frac{3}{2} \\ 1 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 \\ 1 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 \\ 1 & 0 & +\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & \frac{3}{2} & 0 \\ 1 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & \frac{3}{2} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.5.4;1)$$

Dus:

$$X'X = 9 \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \frac{3}{2} & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \frac{3}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.5.4;2)$$

en

$$(X'X)^{-1} = \frac{1}{9} \cdot \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 & -2 & -2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.5.4;3)$$

hetgeen, vermenigvuldigd met σ^2 , volgens (2.2;2) de covariantie-matrix is van de schattingen $\hat{f}$. Uit deze matrix is dus af te lezen, dat de variantie van de kwadratische effecten tweemaal zo groot is als die van het interactie-effect. Daar het kwadratische effect per definitie $\frac{1}{2}\varphi_{ii}$ is, volgt hieruit, dat de schatting van φ_{ii} een achtmaal zo grote variantie heeft als die van de φ_{ij} . Omdat φ_{ii} en φ_{ij} als "gelijkwaardige" coëfficiënten optreden in het model, is deze situatie niet erg bevredigend.

2.5.5. Centrisch en excentrisch samengestelde proefopzetten

In de praktijk bestond de behoefte aan een eenvoudig type van proefopzetten, waarmee de kwadratische effecten geschat konden worden en die niet de bezwaren hadden van de 3^k factoriële schema's. In deze behoefte is voorzien in de ontwikkeling en het gebruik van samengestelde proefopzetten. Er zijn hiervan weer twee typen: het centrische en het excentrische. Welk type in een bepaald geval gebruikt zal worden, hangt af van de resultaten van het eerste deel van het onderzoek. Om deze reden zal de bespreking van de samengestelde proefopzetten worden uitgesteld tot het volgende hoofdstuk.

Een ingewikkelder type van proefopzetten, dat door Box is ontwikkeld, zijn de zgn. "rotatable designs". Deze zullen in dit rapport niet besproken worden.

Hoofdstuk 3: Practische uitvoering

3.1. Eerste fase

Indien k factoren in het onderzoek betrokken zullen worden, zal de proefopzet van de eerste proef gewoonlijk een 2^k factoriëel schema zijn, eventueel een 2^{k-1} schema met verstrengeling of een 2^k partiëel schema.

Evenwel is het van veel belang om nog voor deze proef wordt opgezet, een aantal oriënterende experimenten te verrichten. Het doel hiervan is o.a. om een schatting van de waarnemingsonnauwkeurigheid te verkrijgen.

Worden daarna experimenten volgens een factoriële proefopzet uitgevoerd, dan kunnen uit de bij deze experimenten verkregen responsies met behulp van (2.2;1) schattingen f worden berekend. Er kunnen zich nu drie gevallen voordoen:

1. de lineaire effecten zijn veel groter dan de interactie-effecten (zie 3.2.1),
2. de lineaire effecten zijn veel kleiner dan de interactie-effecten (zie 3.2.2), of
3. de lineaire effecten zijn van dezelfde orde van grootte als de interactie-effecten (zie 3.2.3).

Hierbij wordt steeds gesproken over interactie-effecten. Immers uit een 2^k factoriëel schema zijn van de tweede orde effecten alleen de interactie-effecten te schatten. In het algemeen zullen, als de interactie-effecten niet verwaarloosbaar klein zijn, de kwadratische effecten dit evenmin zijn. Wij kunnen dit slechts bewijzen als het optimum een maximum is. De matrix van de tweede afgeleide is hier positief definit, en dus geldt voor iedere i en j : $\varphi_{ii} \cdot \varphi_{jj} > \varphi_{ij}^2$.

3.2. Tweede fase

3.2.1. Lineaire effecten $\gg$ interactie-effecten

In dit geval is een lineair model reeds een goede benadering voor het responsie-oppervlak. Het gezochte optimum zal dus nog niet bereikt zijn en kan zelfs relatief ver weg liggen. Toepassing van de methode van de steilste weg zal hier leiden tot het bepalen van de richting waarin men het optimum in eerste instantie moet zoeken. Langs de op deze wijze gevonden steilste weg worden enkele experimenten uitgevoerd, en op grond van de hierbij gevonden responsies wordt met een punt van deze weg als centrum, de eerste

fase van het onderzoek herhaald. Op deze wijze zal men in de regel een gebied bereiken, dat zo dicht bij het maximum ligt, dat de interactie-effecten niet meer verwaarloosbaar klein zijn (zie 3.2.2 of 3.2.3).

3.2.2. Lineaire effecten << interactie-effecten

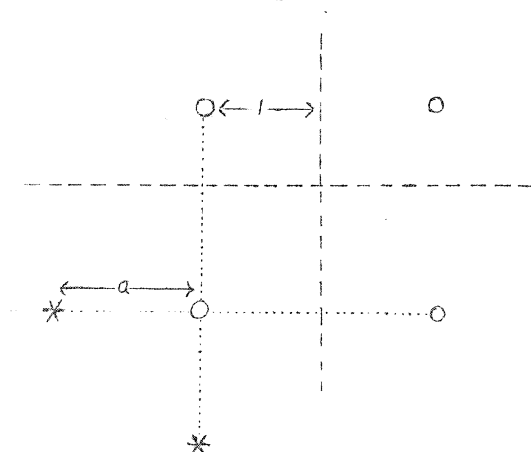
Als de lineaire effecten veel kleiner zijn dan de interactie-effecten, is dit een sterke aanwijzing, dat een optimum (of eventueel een zadelpunt) zich in het door de experimenten bestreken gebied bevindt. In dit geval is het van belang het model (2.5.1;1) uit te breiden tot model (2.1; 8, waartoe de kwadratische effecten geschat moeten worden. De proefopzet wordt nu uitgebreid tot een centrisch samengestelde proefopzet, door bijvoorbeeld experimenten uit te voeren in de hoekpunten van een octaeder (of het meerdimensionale analogon), en bovendien één in het centrum van de proefopzet. De hoekpunten van het octaeder zijn alle op dezelfde afstand van het centrum gelegen; deze afstand is echter zelf nog vrij te kiezen. Men kan deze afstand zo kiezen, dat de interactie- en de kwadratische effecten worden geschat met gelijke varianties of bijvoorbeeld zodanig, dat de schattingen van kwadratische en interactie-effecten onderling ongecorreleerd zullen zijn.

3.2.3. Lineaire effecten van dezelfde orde van grootte als de interactie-effecten

Zijn de lineaire effecten van dezelfde orde van grootte als de interactie-effecten, dan zal het optimum zich of in het door experimenten bestreken gebied bevinden of in de onmiddellijke nabijheid hiervan. Men kan op grond van de tekens van de lineaire effecten en op grond van onderlinge vergelijking van de responsies trachten uit te maken in welk deel van de k-dimensionale ruimte het optimum zich waarschijnlijk zal bevinden. In die richting zal men dan de proefopzet willen uitbreiden, waardoor

- a. het zwaartepunt van de proefopzet dichterbij het optimum komt te liggen en
- b. schatting van kwadratische effecten mogelijk wordt.

Men gebruikt hiervoor de excentrisch samengestelde proefopzet. Het 2^k factoriële schema wordt daartoe uitgebreid vanuit dat hoekpunt, waarvan men verwacht, dat het dichtst bij het optimum gelegen is. Op een afstand a langs het verlengde van de ribben, die in het genoemde hoekpunt samenkomen, worden experimenten verricht. De keuze van de afstand a kan weer op dezelfde gronden gebaseerd worden als in par 3.2.2.



Figuur 6: Excentrisch samengestelde proefopzet voor $k = 2$
 $\circ$ experimenten verricht in 2^2 factoriële schema
 $*$ uitbreiding

In figuur 6 is voor $k = 2$ de zo verkregen samengestelde proefopzet geschetst.

3.3. Derde fase

Zowel voor het geval van par. 3.2.2 als van par. 3.2.3 is een schatting van alle constanten in het model (2.1;13) berekend. Zoals reeds eerder uiteengezet is, mogen wij slechts verwachten, dat de verkregen vergelijking slechts plaatselijk een goede benadering zal zijn van het responsie-oppervlak. Een onderzoek van deze kwadratische vorm zal ons dan ook in staat stellen ons een globaal beeld te vormen van het responsie-oppervlak in de directe omgeving van het door de experimenten bestreken gebied.

Allereerst kan het centrumpunt bepaald worden door partiële differentiëren en nul stellen (vergelijk (2.3;4) met $\mu = 0$). Door translatie en rotatie kan vervolgens de kwadriek op de hoofdassen worden getransformeerd. De vergelijking gaat dan over in:

$$y - y_0 = \lambda_1 x_1^2 + \lambda_2 x_2^2 + \dots + \lambda_k x_k^2 ,$$

waarin y_0 de responsie is in het centrumpunt.

(zie [11])

(3.3.1)

Men kan nu uit de tekens en de grootten van de λ_i verschillende conclusies trekken:

- a. Zijn alle λ_i negatief, dan is het centrale punt een maximum
- b. Zijn alle λ_i positief, dan is het centrale punt een minimum
- c. Zijn enkele λ 's positief en andere negatief, dan is het centrale punt een zadelpunt. Op zichzelf kan dit punt geen optimum zijn, maar de vergelijking (3.3;1) zal direct een richting (nl. de richting met de grootste) suggereren, die zal leiden tot punten van hogere responsie.
- d. Zijn enkele λ 's zeer klein in verhouding tot andere, dan is het responsie-oppervlak uitgerekte in de richting van de overeenkomstige hoofdassen. Dit is een aanwijzing, dat er een gebied is met punten van dezelfde responsie (een "bergrug"). Het is van belang door verdere experimenten deze aanwijzing te controleren.
- e. Het geval kan zich voordoen, dat het stelsel vergelijkingen (2.3;4) voor $\mu = 0$, een oplossing heeft, die meetkundig gesproken, ver buiten het gebied ligt, dat door de genomen experimenten bestreken wordt. Men kan niet verwachten dat het model (2.1.8) het beeld van het responsie-oppervlak in dit verrepunt zal weergeven. Heeft het optimum bijvoorbeeld een coördinaat X_i , die zeer groot is, dan is λ_i klein, en heeft men te doen met een zeer langzaam opduikende "bergrug", waarvan de top ver weg ligt. Door de translatie $X_j = X_j + a$ is de vergelijking (3.3.1) te herleiden op een coördinatensysteem met als oorsprong een punt in het bestreken gebied; (3.3.1) gaat dan over in

$$y - y^0 = -2a\lambda_i X_i' + \lambda_i X_i'^2 + \dots + \lambda_k X_k'^2, \quad (3.3.2)$$

waarin $2a\lambda_i$ een maat is voor de helling van de "bergrug". Men kan deze helling volgen tot zover mogelijk is, waardoor men punten met steeds hogere responsie kan bereiken.

Als afsluiting van de derde fase zal men in het algemeen door experimenten trachten te bevestigen, wat men tot zover gevonden heeft. Men krijgt dan opnieuw een aantal responsies en deze kunnen eventueel tezamen met die uit de 1ste en de 2de fase van het onderzoek, gebruikt worden om nieuwe schattingen f te berekenen. Deze schattingen zullen in het algemeen beter zijn, daar zij gebaseerd zijn op een groter aantal experimenten. Door transformatie van de op deze wijze verkregen vergelijking op de hoofdassen verkrijgt men weer een vergelijking van het type (3.3.1).

Door PLACKETT [22] is een aantal eigenschappen afgeleid voor kleinste kwadratenschattingen, die in dit deel van het onderzoek zeer veel werk kunnen besparen. Het is nl. niet nodig de schattingen opnieuw te berekenen uit (2.2;1), maar men kan op eenvoudige wijze correcties aanbrengen op de bestaande schattingen.

3.4. Enkele opmerkingen

De mogelijkheid bestaat, een betrouwbaarheidsgebied te bepalen voor de plaats van het maximum (zie [2]). Als extra-onderstelling moet dan de normaliteit van de waarnemingson-nauwkeurigheden worden ingevoerd. Daar de vorm en de grootte van het betrouwbaarheidsgebied in hoge mate afhankelijk zijn van omstandigheden, waarover men geen zeggenschap heeft (de "conditioning" van vergelijking (2.3;4)), zal hierop niet verder worden ingegaan.

Indien een optimum bereikt wordt, kan het zijn, dat dit slechts een plaatselijk optimum is.

Als de waarnemingen niet onafhankelijk zijn, zoals bijv. bij een split-plot design, moet (2.1;3) worden vervangen door

$$L(\underline{y}-\underline{\eta})(\underline{y}-\underline{\eta})' = V\sigma^2 \quad (3.4;1)$$

waarin V een al of niet bekende matrix is. Ook in dit geval blijven de methoden toepasbaar, zij het dan met kleine wijzigingen: zie [17] en [26].

Is de chemische reactie ook afhankelijk van kwalitatieve factoren, dan brengt de gehele gedachtengang met zich mee, dat bij elk van de niveaus van deze factoren het optimum bepaald wordt. Door vergelijking kan men beslissen, welk van deze voor-waardelijke optima het optimum is voor het gehele proces.

Hoofdstuk 4: Voorbeelden van toepassingen

Deze voorbeelden zijn ontleend aan BOX [3] en [4].

4.1. Eerste voorbeeld

Een chemisch proces van het type $A+B+C \rightarrow D$ + andere producten (waarbij C wordt bijgevoegd in een oplosmiddel E) werd gebruikt om D te produceren. Men kende omstandigheden, waarbij het omzettingsrendement 45% bedroeg, maar men hield het niet voor onmogelijk, dat dit bedrag hoger zou kunnen worden. Om deze reden werd besloten in het laboratorium door experimenten na te gaan of en in hoeverre dit mogelijk zou zijn.

De waarnemingsspreiding van de "responsie" onder constante experimentele condities schatte men op 1%.

Bij het overleg tussen de chemicus en de statisticus bleek, dat 5 factoren in het onderzoek dienden te worden betrokken:

hoeveelheid van het oplosmiddel E	=	X_1
verhouding van de concentraties van C en A	=	X_2
concentratie van C in E	=	X_3
reactietijd	=	X_4
verhouding van de concentraties van B en A	=	X_5

Door theoretisch beschouwingen kwam de chemicus tot de conclusie, dat waarschijnlijk de X_1 en X_3 niet onafhankelijk van elkaar zouden werken. Bij de proefopzet moest dus rekening gehouden worden met een interactie $X_1 X_3$. Evenwel was het heel goed mogelijk, dat men bij de oorspronkelijke proefopzet nog zover van het maximum verwijderd was, dat de andere interacties klein zouden zijn in verhouding tot de lineaire effecten. Hierom hield men de eerste fase van het onderzoek zo klein mogelijk, door verstrengeling toe te passen. Men gebruikt een 2^3 factorieel schema en associeerde de x_4 met de interactie $X_1 X_2 X_3$ en de X_5 met minus $X_2 X_3$. Hierbij wordt de $X_1 X_3$ niet verstrengeld met een lineair effect. Immers de groepsrelatie wordt:

$$11 = 22 = 33 = 44 = 55 = 1234 = -235 = -145 = 0, \quad (4.1;1)$$

en dus wordt $X_1 X_3$ slechts verstrengeld met de kleine interactie $X_2 X_4$.

De keuze van het gebied, dat door de experimenten bestreken zal worden, is als regel vrij moeilijk. Kiest men een te groot gebied, dan zullen de interactie-effecten groot worden, zelfs bij een responsie-oppervlak, dat bijna een plat vlak is. Verstrengeling kan dan niet zeer effectief gebruikt worden. Kiest men een te klein gebied, dan bestaat de mogelijkheid, dat de effecten te klein zijn, en door de waarnemingson nauwkeurigheden gemaskeerd worden. In ons voorbeeld werden de eenheden gekozen als vermeld in Tabel 4;1.

Tabel 4;1: Niveaux voor de eerste groep experimenten

niveau factor	-1	+1	
x_1	200	250	cc
x_2	4,0	4,5	g mol/g mol
x_3	90	93	%
x_4	1	2	uur
x_5	3,0	3,5	g mol/g mol

De matrix X heeft de vorm (2.5.1;2), met de kolom $X_1 X_2 X_3 = X_4$. Verder heeft de kolom $X_2 X_3$ tegengestelde tekens gekregen en is dan $= X_5$.

De vector van de waargenomen responsies was:

$$y = \begin{pmatrix} 58,6 \\ 50,2 \\ 62,4 \\ 54,1 \\ 45,1 \\ 31,2 \\ 51,6 \\ 34,4 \end{pmatrix} \quad (4.1;2)$$

De volgende schattingen werden uit (4.1;2) berekend.

$$\begin{aligned} f_{0..} &\rightarrow \varphi_0 \left(+\frac{1}{2}\varphi_{11} + \frac{1}{2}\varphi_{22} + \frac{1}{2}\varphi_{33} + \frac{1}{2}\varphi_{44} + \frac{1}{2}\varphi_{55} \right) = 48,5 \pm 0,4 \\ f_{1..} &\rightarrow \varphi_1 (-\varphi_{45}) = 7,9 \pm 0,4 \\ f_{2..} &\rightarrow \varphi_2 (-\varphi_{35}) = -2,2 \pm 0,4 \\ f_{3..} &\rightarrow \varphi_3 (-\varphi_{25}) = 6,0 \pm 0,4 \\ f_{123} &\rightarrow \varphi_4 (-\varphi_{15}) = 0,4 \pm 0,4 \\ f_{23} &\rightarrow -\varphi_5 (+\varphi_{14} + \varphi_{23}) = -0,4 \pm 0,4 \\ f_{13} &\rightarrow (+\varphi_{13} + \varphi_{24}) = -1,8 \pm 0,4 \\ f_{12} &\rightarrow (+\varphi_{12} + \varphi_{34}) = 0,2 \pm 0,4 \end{aligned}$$

Achter de getalwaarde van de schattingen is opgenomen een schatting van de spreiding van deze waarde, die $\frac{1}{\sqrt{8}} \approx \frac{1}{2,8} \approx 0,4$ is. De spreiding van een waarneming was immers ongeveer 1%; het aantal betreffende waarnemingen is 8.

Duidelijk blijkt dat de lineaire effecten veel groter zijn dan de interactie-effecten, met uitzondering van de $\varphi_3 (+\varphi_{24})$. Er is dus reden om de methode van de steilste weg toe te passen, hoewel niet geheel voldaan is aan de voorwaarde van het klein zijn van de interactie-effecten.

De bepaling van de steilste weg geschiedt als in Tabel 4;2.

Het is natuurlijk vaak niet goed mogelijk te zeggen of het toepassen van de methode van de steilste weg gerechtvaardigd is of niet. Want de lineaire effecten mogen dan wel relatief groot zijn, maar tengevolge van de verstrengeling is het niet zonder meer te zien, of inderdaad wel alle interactie-effecten klein zijn (dezelfde moeilijkheid treedt ook op bij fractionele schema's). In ons geval zouden φ_{12} en φ_{34} beide (even) groot kunnen zijn, en in het geval van ongelijke tekens van deze interacties zouden wij hun bestaan niet opmerken.

Tabel 4;2: Steilste weg na proef 1

factor	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
	cc	g mol / g mol	%	uur	g mol / g mol
basis (zie Tabel 1)	225	4,25	91,5	1,5	3,25
eenheid(")	25	0,25	1,5	0,5	0,25
geschatte afgeleiden	7,9	- 2,2	6,0	0,4	0,4
eenheid x afgeleide	197,5	- 0,55	9,0	0,2	0,1
verandering in niveaux per 10 cc verandering in x_1	10	- 0,028	0,456	0,011	0,005
<u>Punten van de steilste weg:</u> experiment 9 → experiment 10 →	225	4,25	91,5	1,5	3,25
	235	4,22	92,0	1,5	3,25
	245	4,19	92,4	1,5	3,26
	255	4,17	92,9	1,5	3,26
	265	4,14	93,3	1,5	3,27
	275	4,11	93,8	1,6	3,27
	285	4,08	94,2	1,6	3,28
	295	4,06	94,7	1,6	3,28
	305	4,03	95,1	1,6	3,29

Zou echter de toepassing van de methode van de steilste weg niet gerechtvaardigd zijn geweest, dan blijkt dit vanzelf: de verwachte toename van de responsie blijft dan uit, als wij langs deze weg experimenten verrichten.

In ons voorbeeld werden twee experimenten nr 9 en nr 10 verricht langs de aangegeven weg (Tabel 4;2) en waarbij responsies van 80, resp. 79,4% gevonden werden. Op grond hiervan werd in principe besloten een nieuwe factoriële proefopzet uit te voeren met als centrum de coördinaten van het experiment nr 10.

In het eerste gedeelte van het onderzoek vertoonden x_4 en x_5 geen effect van betekenis. Dit kan de volgende oorzaken hebben:

1. de factoren hebben inderdaad geen invloed op het verloop van de reactie,
2. de factoren hebben wel invloed, maar deze is zo gering, dat de gekozen eenheid te klein was, om dit effect duidelijk tot uitdrukking te laten komen. Dus dat bijv. in het geval van de eerst een tijdsverschil van 2 of 3 uur tussen de niveaux +1 en -1 een duidelijk te constateren effect te zien zou geven.

3. de factoren hebben wel invloed, maar de gekozen niveaus van de factoren zijn aan weerszijden van een voorwaardelijk maximum gelegen.

Het is van groot belang te weten met welke van deze drie mogelijkheden wij te maken hebben. De eenvoudigste methode om dit uit te maken is bij de volgende experimenten de betreffende factoren niet op die niveaus te houden, die aangegeven werden door de steilste weg, maar hiervoor sterk afwijkende waarden te kiezen, en bovendien de eenheid (d.i. de helft van de afstand tussen +1 en -1) te vergroten.

Een volgend punt van belang is het kiezen van de eenheid voor de factoren, die wel een duidelijk effect geven. Hierbij spelen de volgende overwegingen een rol:

1. Wordt de eenheid veel verkleind, dan bestaat het gevaar dat de effecten te klein worden t.o.v. waarnemingson nauwkeurigheden. De lineaire effecten, geschat uit de eerste groep experimenten zijn veel groter dan de waarnemingson nauwkeurigheden, dus veel gevaar uit deze hoek bestaat nog niet.
2. Wordt de eenheid vergroot, dan zullen de interacties ook snel groter worden, dit moet vermeden worden, daar het in het beschouwde geval van belang was te trachten de methode van de steilste weg nogmaals toe te passen, zodat het nodig is de interacties klein te houden.

Tenslotte werden zo de niveaus gekozen als in Tabel 4;3 (met punt 10 als centrum).

Tabel 4;3: Niveaus voor de 2^{de} groep experimenten

niveau factor	-1	+1	
x_1	280	310	cc
x_2	3,85	4,15	g mol/g mol
x_3	94	96	%
x_4	2	4	uur
x_5	3,5	5,5	g mol/g mol

De experimenten werden uitgevoerd in een 2^3 factorieel schema met verstrengeling. Evenwel werd X_5 hier geassocieerd met X_1X_2 , (groepsrelatie: 11 = 22 = 33 = 44 = 55 = 1234 = 125 = 345) zodat F_{23} alléén de effecten $\varphi_{23} + \varphi_{14}$ zou schatten, dus een andere combinatie dan die bij de eerste groep. De hierboven besproken mogelijkheid van twee elkaar opheffende interactie-effecten kan hiermee onderzocht worden. Evenals in

De vector van de responsies (met betrekking tot matrix (2.5.1;2)) was:

$$y = \begin{pmatrix} 65,9 \\ 71,5 \\ 68,4 \\ 67,9 \\ 72,6 \\ 75,5 \\ 69,0 \\ 77,1 \end{pmatrix}, \quad (4.1;3)$$

en de hieruit berekende schattingen:

$$\begin{aligned} f_0 &\longrightarrow \varphi_0 \left(+\frac{1}{2}\varphi_{11} + \frac{1}{2}\varphi_{22} + \frac{1}{2}\varphi_{33} + \frac{1}{2}\varphi_{44} + \frac{1}{2}\varphi_{55} \right) = 70,7 \pm 0,4 \\ f_1 &\longrightarrow \varphi_1 (+\varphi_{25}) = - 2,8 \pm 0,4 \\ f_2 &\longrightarrow \varphi_2 (+\varphi_{15}) = 0,1 \pm 0,4 \\ f_3 &\longrightarrow \varphi_3 (+\varphi_{45}) = - 2,3 \pm 0,4 \\ f_{123} &\longrightarrow \varphi_4 (+\varphi_{35}) = - 1,7 \pm 0,4 \\ f_{12} &\longrightarrow \varphi_5 (+\varphi_{12} + \varphi_{34}) = - 0,4 \pm 0,4 \\ f_{13} &\longrightarrow (+\varphi_{13} + \varphi_{24}) = 0,5 \pm 0,4 \\ f_{23} &\longrightarrow (\varphi_{23} + \varphi_{14}) = - 0,4 \pm 0,4 . \end{aligned}$$

Een belangrijke conclusie, die hieruit te trekken is, heeft betrekking op de tijdsfactor X_4 . Deze heeft nl. wel invloed, en dus hadden wij bij de eerste groep experimenten te maken met geval 3 van pagina 31. Dit blijkt uit het vrij grote negatieve effect φ_4 .

Een tweede belangrijke conclusie is dat de factor X_5 inderdaad geen invloed heeft op het proces. Dit volgt uit het feit, dat X_5 ondanks de grotere eenheid en de andere richting nog geen effect vertoont.

Uit de negatieve tekens van φ_1 en φ_3 is op te maken, dat wij hier te ver zijn gegaan langs de steilste weg. Wij gaan dus weer terug: zie Tabel 4;4. Langs deze weg werden drie experimenten gedaan, waarbij de volgende responsies werden gevonden:

experiment no 19:	80,8%
" " 20:	84,0%
" " 21:	81,5% .

Om het punt 20 werd tenslotte nog een 2^2 factorieel schema uitgevoerd, waarbij de factoren X_1 en X_3 betrokken waren. Dit leidde alleen tot lagere responsies. Het experiment no 20 vertegenwoordigt dus ongeveer de optimale condities.

Tabel 4;4: (Steilste weg van proef 2)

factor	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
	cc	$\text{g mol}^1/\text{g mol}$	%	uur	$\text{g mol}^1/\text{g mol}$
Steilste weg (vergelijk centrum tabel 2)	295	4,0	95,0	3,0	4,5
experiment 19	285	4,0	94,5	2,6	4,4
	275	4,0	93,9	2,2	4,3
experiment 20	265	4,0	93,4	1,8	4,2
	255	4,0	92,8	1,4	4,1

Hoewel het door verdere experimenten (fase 2 en 3) mogelijk zou zijn geweest een betere indruk van het responsie-oppervalk te verkrijgen, werd in dit stadium besloten het procédé verder te ontwikkelen op bedrijfsschaal (zie Hoofdstuk 5).

4.2. Tweede voorbeeld

Twee stoffen, A en B, werden samengesmolten tot een derde stof C. Men wilde C zo goedkoop mogelijk produceren en voerde daarom een onderzoek naar een kostenminimum uit, waarbij de volgende factoren betrokken werden:

smelttemperatuur T (in $^{\circ}\text{C}$),
 smelttijd t (in uren),
 verhouding van de
 concentraties van $\left. \begin{array}{l} \text{A en B} \end{array} \right\} M$ ($\text{g mol}^1/\text{g mol}$)

De hoeveelheid B werd constant gehouden.

Als eerste fase van het onderzoek, werd een 2^3 factorieel schema uitgevoerd in de gestandaardiseerde factoren:

$$x_1 = \frac{T - 247,5}{2,5},$$

$$x_2 = \frac{t - 20}{4},$$

en

$$x_3 = \frac{M - 5,0}{0,5}.$$

Die niveaus van de originele variabelen zijn aangegeven in Tabel 4;5.

Tabel 4;5: niveaux van de originele variabelen

factor \ niveau	+1	-1	
T	450	430	°C
t	24	16	uren
M	5,5	4,5	g mol ¹ /g mol

De matrix X , die betrekking heeft op dit onderzoek is dezelfde als (2.5.1;2). De uit de waarnemingen berekende kosten zijn:

$$y = \begin{pmatrix} 37 \\ 70 \\ 70 \\ 39 \\ 64 \\ 74 \\ 48 \\ 18 \end{pmatrix}. \quad (4.2;1)$$

Uit (4.2;1) kunnen de volgende schattingen worden bepaald:

$$\begin{aligned}
 f_0 &\longrightarrow \varphi_0 + \frac{1}{2} \varphi_{11} + \frac{1}{2} \varphi_{22} + \frac{1}{2} \varphi_{33} + \dots = 52,50 \pm 3,00 \\
 f_1 &\longrightarrow \varphi_1 = 1,50 \pm 3,00 \\
 f_2 &\longrightarrow \varphi_2 = 8,75 \pm 3,00 \\
 f_3 &\longrightarrow \varphi_3 = 2,25 \pm 3,00 \\
 f_{12} &\longrightarrow \varphi_{12} = -9,25 \pm 3,00 \\
 f_{13} &\longrightarrow \varphi_{13} = -2,75 \pm 3,00 \\
 f_{23} &\longrightarrow \varphi_{23} = -13,00 \pm 3,00 \\
 f_{123} &\longrightarrow \varphi_{123} = -3,00 \pm 3,00.
 \end{aligned}$$

Achter de schattingen is een ruwe schatting opgenomen van de spreiding hiervan, gebaseerd op een spreiding van 8 eenheden in de enkele waarneming.

Uit de schattingen blijkt, dat hier de lineaire effecten van dezelfde orde van grootte zijn als de interactie-effecten. Volgens paragraaf 3.2;3 is de beste methode het 2^3 schema uit te breiden tot een excentrisch samengestelde proefopzet, en wel vanuit het hoekpunt $(-1, -1, -1)$. Immers:

1. de laagste kosten zijn in dit hoekpunt gevonden, en
2. de lineaire effecten zijn positief, hetgeen in verband met het feit, dat wij een minimum zoeken, naar $(-1, -1, -1)$ leidt.

Experimenten werden daarop uitgevoerd als volgt:

exp. no	x_1	x_2	x_3	kosten
9	-3	-1	-1	90
10	-1	-3	-1	52
11	-1	-1	-3	16

Verder werden bij vergissing nog enkele experimenten uitgevoerd,

exp. no	x_1	x_2	x_3	kosten
12	0	0	0	38
13	-3	-3	-3	48
14	-1	-1	0	33

Alle coëfficiënten van model (2.1;13) kunnen reeds uit de experimenten 1 t/m 11 geschat worden, maar men kan uiteraard ook met 12 t/m 14 rekening houden. De vergelijking van het responsie-oppervlak wordt dan:

$$y = 28,19 + 1,53 x_1 + 8,78 x_2 + 2,31 x_3 + 11,23 x_1^2 + 10,85 x_2^2 + 3,11 x_3^2 + 7,28 x_1 x_2 - 0,81 x_1 x_3 - 11,06 x_2 x_3 \quad (4.2;2)$$

De coördinaten van het centrale punt en de daarbij behorende kosten zijn

$$x_{1c} = 3,87$$

$$x_{2c} = 10,13 \quad (4.2;3)$$

$$x_{3c} = 18,12$$

en

$$y_c = 96,61$$

Door de transformatie:

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,1871 & 0,4897 & 0,8516 \\ 0,7995 & 0,4290 & -0,4205 \\ 0,5695 & -0,7599 & 0,3133 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 - 3,87 \\ x_2 - 10,13 \\ x_3 - 18,12 \end{pmatrix} \quad (4.2;4)$$

gaat (4.2;2) over in:

$$y - 96,61 = -0,16 X_1^2 + 9,49 X_2^2 + 15,86 X_3^2 \quad (4.2;5)$$

Wij zien dus:

1. uit (4.2;2) dat er geen lineaire effecten zijn, die groot zijn ten opzichte van de tweede orde effecten,
2. uit (4.2;5) dat een van de coëfficiënten van de op de hoofdassen getransformeerde vergelijking klein is en uit (4.2;3) dat het centrale punt ver verwijderd is van het door de experimenten bestreken gebied (immers daar de tekens van de kwadratische termen niet alle gelijk zijn, is dit een zadelpunt; om de kosten te minimaliseren moet men X_2 en $X_3 = 0$ houden en X_1 zover mogelijk van $X_1 = 0$ afhouden).

Hieruit mogen wij concluderen (zie hoofdstuk 3, par. 3^e) dat wij met een langzaam afdalend rivierdal (in drie dimensies) te maken hebben.

Wij zullen vergelijking (4.2;5) transformeren op een coördinatensysteem met als oorsprong het punt op de X_1 -as, dat zo dicht mogelijk bij $X_1 = 0$, $X_2 = 0$, $X_3 = 0$ ligt. Daartoe wordt in (4.2;4) $x_1 = 0$, $x_2 = 0$ en $x_3 = 0$ ingevuld. Dit geeft $X_1 = -21,116$. De oorsprong van het $X_1 X_2 X_3$ assenkruis wordt nu verschoven naar $X_1 + 21,116$, X_2, X_3 . (4.2;5) gaat dan over in:

$$y - 27,32 = +6,56 X_1' - 0,16 X_1'^2 + 9,49 X_2'^2 + 15,86 X_3'^2 \quad (4.2;6)$$

De coëfficiënt 6,56 geeft aan, dat als men één eenheid langs de X_1 beweegt, de kosten ongeveer 6 eenheden groter of kleiner zullen worden. Zodoende kunnen wij voor $X_2 = 0$ en $X_3 = 0$ en met behulp van (4.2;4) dat punt berekenen, waar de kosten = 10, 0 en -10 zijn. Dit komt uit op:

T	t	M	theoretisch voorspelde kosten	experimenteel gevonden waarden
434,4	25,7	4,01	10	
432,0	28,2	3,46	0	2,6
429,6	30,7	2,91	-10	

In het punt, waar de kosten = 0 zouden worden werd een experiment verricht, dat op 2,6 uitkwam. Verder dan dit punt kon de "bergrug" niet gevolgd worden wegens mechanische moeilijkheden.

Dit onderzoek, dat een grote besparing opleverde, werd verricht op een procédé, dat reeds grondig onderzocht was met behulp van de "one factor at a time" methode. Men had hierbij het bestaan van de bergrug niet onderkend en is daardoor niet tot de grote kostenbesparing gekomen, die door BOX werd gevonden.

Hoofdstuk 5: Experimenten op bedrijfsschaal

5.1. Laboratorium-experimenten en experimenten op bedrijfsschaal

Om verschillende redenen is het gewenst, dat bepaling van optimale condities door middel van experimenten niet alleen in het laboratorium, maar ook op bedrijfsschaal kan geschieden. De voornaamste reden is wel, dat het bij vele chemische en metallurgische processen moeilijk, zo niet onmogelijk is, in het laboratorium zodanige experimenten te verrichten, dat de daaruit getrokken conclusies kwantitatief kunnen worden toegepast in het bedrijf.

De laboratoriumtechniek voor het bepalen van optima is echter niet toepasbaar op experimenten in het bedrijf door de volgende oorzaken:

1. De bedrijfsleiding kan niet toestaan, dat een productieproces gedurende enige tijd zou werken onder een ongunstige combinatie van factoren.
2. De waarnemingsfout bij elk experiment is veel groter dan die in het laboratorium. Daarom zullen vele waarnemingen van de responsie bij elke factor-combinatie nodig zijn.
3. De opeenvolgende waarnemingen zijn als regel niet onafhankelijk, omdat deze verricht worden aan één installatie.

Door BOX is een methode ontwikkeld, die parallel loopt aan die van de laboratoriumexperimenten, maar waarbij rekening wordt gehouden met de drie bovengenoemde bezwaren. Een belangrijke (psychologische) moeilijkheid blijft dat bij dit soort van experimenten de bedrijfsleiding het als regel zeer onaangenaam vindt dat elke dag, of elke week kleine veranderingen in het productieproces aangebracht worden.

De gegevens voor de volgende paragrafen zijn ontleend aan een door BOX te Parijs gehouden lezing [10].

5.2. Het principe van evolutie naar het optimum

De grondgedachte van de methode van BOX heeft enkele markante punten gemeen met de theorie der evolutie.

Zo leert de theorie van de evolutie o.a. dat ons paard, equus caballus, geëvolueerd is uit een dier ter grootte van een hond, eohippus geheten. Deze evolutie geschiedde via tussenstadia als orohippus, meshippus en meryhippus, waarvan fossiele resten gevonden zijn. Zonder in te gaan op de evolutietheorie zelf kunnen wij toch zeggen, dat als er een evolutie is opgetreden, aan de volgende voorwaarden voldaan moet zijn geweest:

- a. er moet variatie in grootte en vormen zijn geweest in de op een bepaald ogenblik levende "paarden" en
- b. gemiddeld moeten de grotere wezens beter tegen uitsterven bestand zijn geweest dan de kleinere.

Er kan nu een volledige parallel getrokken worden met ons streven experimenten op bedrijfsschaal zo uit te voeren, dat het proces langzamerhand naar het optimum evolueert. Daartoe zal bij de experimenten dus als volgt te werk moeten worden gegaan:

- a'. Er zullen verschillende factor-combinaties gekozen moeten worden, die om een centraal punt liggen en met welke combinaties afwisselend gewerkt zal worden.
- b'. Zodra een factorencombinatie een hogere responsie geeft dan die verkregen in het centrale punt, wordt het centrale punt daarheen verplaatst. Het proces zal dan evolueren naar het optimum.

5.3. Practische uitvoering

5.3.1. De experimentencyclus

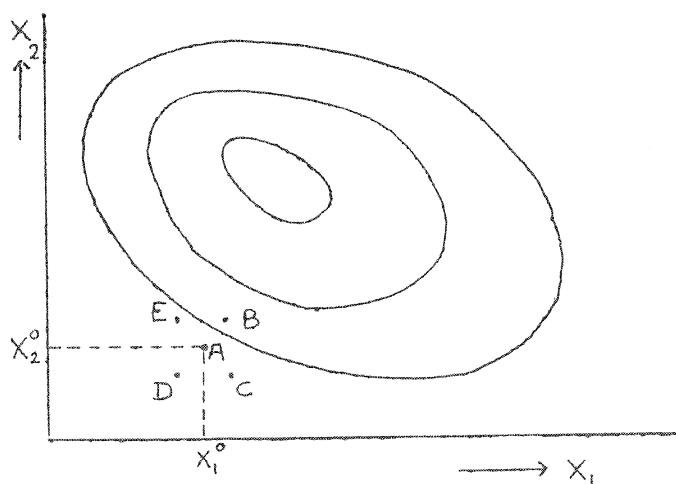


fig. 7: responsie-oppervlak voor twee factoren

Wij zullen de praktische uitvoering bespreken aan de hand van het voorbeeld, dat ook reeds ter sprake kwam in par. 1.4. Dit is nl. het geval van een proces, dat slechts afhankelijk is van twee factoren, X_1 en X_2 . Het responsie-oppervlak, dat ten grondslag ligt aan dit proces is bijv. van de vorm als is geschetst in fig. 7. De factoren-combi-

natie, waaronder gewerkt wordt in het bedrijf is gegeven door het punt $A(X_1^0, X_2^0)$. De beperking van de bespreking tot het geval van twee factoren betekent ook hier geen verlies van algemeenheid. Het gehele betoog blijft van kracht voor een willekeurig aantal factoren.

Er worden nu experimenten verricht volgens een proefopzet, die bestaat uit een of ander schema van punten, die om A gelegen zijn, bijv. in B, C, D en E. Hoe lang men het bedrijf zal laten werken onder elk van de factorencombinaties, gegeven door B, C, D en E is een in het algemeen moeilijk te beantwoorden vraag. Om de gedachten te bepalen nemen wij aan, dat elk experiment één dag duurt.

De punten B, C, D en E zullen zo dicht bij A gelegen zijn, dat ernstige verliezen tengevolge van lage responsies niet te vrezen zullen zijn. Hieruit volgt direct dat ook grote toenames in de responsies niet te verwachten zijn. In verband met de vrij grote waarnemingson nauwkeurigheid zal men dus de experimenten vele malen dienen te herhalen, eer men verschillen in de responsies kan opmerken.

Teneinde aan de twee volgende bezwaren tegemoet te komen:

1. de afhankelijkheid der waarnemingen, en
2. een verloop in de tijd van de responsies (bijv. tengevolge van verandering in grondstoffen)

zal men als regel de experimenten uitvoeren in achtereenvolgende groepen, waarbinnen over alle experimentele punten geaselecteerd is. Dus bijv.

$$\underbrace{D E C A B}_{1ste\ groep} \cdot \underbrace{C A E B D}_{2de\ groep} \cdot \underbrace{A E C D B}_{3de\ groep} \dots \quad (5.3.1;1)$$

Een andere mogelijkheid is een volledige aselecte volgorde, bijv.:

$$E A C E D B B E C A E A \dots \quad (5.3.1;2)$$

maar (5.3.1;1) heeft enkele voordelen. Immers men wil de verschillen B-A, C-A, D-A en E-A vinden. Hierom is het beter bij elke keer dat een experiment B, C, D en E uitgevoerd is ook één experiment in A te verrichten.

De experimentencyclus (5.3.1.1) wordt zover afgewerkt totdat besloten kan worden, of één, en zo ja welke van de experimentele condities B, D, D of E beter is dan A. Het karakter van het probleem suggereert het gebruik van sequente methoden.

5.3;2. Verplaatsing van het centrale punt naar een punt met hogere responsie

Als extra onderstelling zal hier worden ingevoerd, dat de waarnemingson nauwkeurigheden normaal verdeeld zijn met gelijke varianties. Zoals wij in par. 5.3;3 nog zullen aangeven, beschikken wij in de regel over een schatting s^2 van σ^2 , gebaseerd op een zo groot aantal vrijheidsgraden, dat de sequente toets voor het verschil der gemiddelden van twee normale verdelingen met gegeven gelijke spreidingen hier kan worden toegepast, voor het toetsen van de hypothese

$$H_0: \eta_A \leq \eta_B,$$

(waarbij η_A de responsie in A voorstelt) tegen de alternatieve hypothese

$$H_1: \eta_A > \eta_B.$$

Deze toets is beschreven in het bij dit rapport bijgevoegde memorandum S 168 (M 68).

Elke keer, dat een groep van 5 experimenten verricht is, kan het verschil in responsie A en B bepaald worden uit de waarnemingen. De volgende beslissingen kunnen dan genomen worden:

1. de hypothese H_0 te verwerpen, dus te besluiten tot $\eta_A < \eta_B$,
2. de hypothese H_0 niet te verwerpen, waarbij als regel wordt gehandeld alsof dan H_0 juist is, dus $\eta_B < \eta_A$
3. nog een serie experimenten te verrichten.

Dezelfde toets wordt gelijktijdig uitgevoerd voor het verschil tussen

$$\begin{aligned} &\eta_A \text{ en } \eta_B \text{ (zoals hier boven beschreven)} \\ &\eta_A \text{ en } \eta_C \\ &\eta_A \text{ en } \eta_D \\ &\eta_A \text{ en } \eta_E \end{aligned} \quad (5.3.2;1)$$

Zodra één van deze toetsen een uitkomst geeft van de aard $\eta_P < \eta_A$ ($P = B, C, D$ of E), kan bij de volgende series experimenten het punt P worden overgeslagen. Geeft een van de toetsen het resultaat $\eta_A < \eta_P$, dan wordt het experiment afgebroken en het centrale punt wordt verplaatst naar het punt P. Om dit punt P wordt nu met een nieuwe experimentencyclus begonnen. Men zal nu wel niet altijd naar een punt van hogere responsie evolueren, immers als H_0 verworpen wordt, dan bestaat er altijd een zekere kans α dat dit ten onrechte gebeurt. Deze α wordt echter bij de toetsen (5.3.2;2) zo klein gekozen, dat het centrale punt gemiddeld zeker in de richting van het optimum evolueert.

In verband met de niet-onafhankelijke toetsen (5.3.2;1) wordt aangeraden voor de α te kiezen $\frac{10}{\text{aantal toetsingen}} \%$. In dat geval zal men gemiddeld in één van de tien gevallen besluiten tot $\eta_A > \eta_P$ als in werkelijkheid $\eta_P > \eta_A$ is ($P = B, C, D$ of E).

In het voorafgaande is een verfijning aan te brengen, indien men een toets met drie beslissingsmogelijkheden toepast, d.w.z. men wil twee van de drie volgende hypothesen verwerpen:

$$\left. \begin{aligned} H_1: & \eta_A - \eta_B < -\delta_2 \\ H_2: & -\delta_2 < \eta_A - \eta_B < \delta \\ H_3: & \eta_A - \eta_B > \delta \end{aligned} \right\} \quad (5.3.2;3)$$

waardoor vooral in de omgeving van het optimum een meer soepele gang van zaken zal worden bereikt. Voor een beschrijving van deze toets wordt men verwezen naar SOBEL en WALD [24] .

5.3.3. Een schatting van σ^2

Uitgaande van de veronderstelling, dat σ^2 constant is, voor waarnemingen van responsies verkregen bij verschillende factor-combinaties, kan men een schatting bepalen van de σ^2 uit de bedrijfsresultaten van maanden, voorafgaande aan het begin van de experimenten.

Daartoe superponeert men op deze bedrijfsresultaten, die dus alle bij éénzelfde factorcombinatie zijn verkregen de experimentencyclus zoals men deze zal gaan toepassen.

Deze werkwijze, die wij hier slechts zeer vluchtig noemen, geeft ook de mogelijkheid om een experimentencyclus te bepalen, die de kleinst mogelijke σ^2 heeft. Voor al deze bijzonderheden verwijzen wij naar [10] .

Literatuuroverzicht

A Technical Reports, prepared under Office of Ordnance Research Contracts Nos. DA - 36 - 034 - ORD - 1177 en 1517, published in the Mimeo-Series of the Institute of Statistics of the Consolidated University of North Carolina, U.S.A.

- [1] BOX, G.E.P., en J.S. HUNTER: A confidence region for the solution of a set of simultaneous equations with an application to experimental design. Techn.Rep. no. 3. Ook gepubliceerd in Biometrika, 1954, 41, 190-199.
- [2] BOX, G.E.P., The exploration and exploitation of response surfaces, Techn.Rep. no. 4. Ook gepubliceerd in Biometrics, 1954, 10, 16-61.
- [3] BOX, G.E.P., J.S. HUNTER en R.J. HADER: The effect of inadequate models in surface fitting. Techn.Rep. no. 5.

B Andere publicaties

- [5] ANDERSON, R.L., en T.A. BANCROFT: Statistical theory in Research, Mc Graw Hill, New York, 1952.
- [6] ANDERSON, R.L.: Recent advances in finding best operating conditions, J.A.S.A., 1953, 48, 789-798.
- [7] BOX, G.E.P., en K.B. WILSON: On the experimental attainment of optimum conditions. J.R.S.S., 1951, B 13 1-45.
- [8] BOX, G.E.P.: Multifactor designs of first order. Biometrika, 1952, 39, 49.
- [9] BOX, G.E.P., L.R. CONNOR, W.R. COUSINS, O.L. DAVIES, F.R. HINSWORTH, G.P. SILLITO: Design and analysis of experiments, Oliver and Boyd, Edinburgh, 1953.
- [10] BOX, G.E.P.: Bepalen van optimale condities door experimenten op bedrijfsschaal, Lezing gehouden voor de conference on Statistical Quality Control, Parijs, Juli 1955.

- [11] BOX, G.E.P., en P.V. YÖULE: The exploration and exploitation of response surfaces: An example of the link between the fitted surface and the basic mechanism of the system, Biometrics, 1955, no. 3, 11, 287-323.
- [12] DE BRUIJN, N.G.: Kwadratische vormen en kwadratische oppervlakken. Handleiding bij het onderwijs aan de Technische Hogeschool, Delftse Uitgeversmaatschappij, Delft, 1952.
- [13] COCHRAN, W.G., en G.M. COX: Experimental designs, John Wiley, New York, 1950.
- [14] DAVIES, O.L., en W.A. HAY: The construction and use of fractional factorial designs in industrial research, Biometrics, 1950, 6, 233-249.
- [15] FOX, L.: Practical methods for the solution of linear equations and the inversion of matrices. J.R.S.S., 1950, B 12, 120-136.
- [16] FRIEDMAN, M., en L.J. SAVAGE: Planning experiments seeking maxima. Hoofdstuk 13 van EISENHART, HASTAY and WALLIS, Techniques of statistical analysis, Mc Graw Hill, New York, 1947.
- [17] HADER, R.J.: Variances of regression coefficients for splitplot multi-factor experiments, Mimeo series no. 113, Institute of Stat., University of North Carolina, U.S.A.
- [18] HAMAKER, H.C., en F.J. VAN DUN: Verslag van een lezing van O.L. DAVIS, Statistica 1955, 9.4, 189.
- [19] HOTELLING, H.: The experimental determination of the maximum of a function, Ann. Math. Stat., 1941, 12, 20-45.
- [20] MAC DUFFEE, C.C.: Vectors and matrices, Carus Mathematical Monographs.
- [21] MANN, H.B.: Analysis and Design of Experiments, Dover Publications, New York, 1949.
- [22] PLACKETT, R.L.: Some theorems on least squares, Biometrika, 1950, 37, 149.

- [23] READ, D.R.: The design of chemical experiments, Biometrics, 1954, 10, 1-16.
- [24] SOBEL, M., en A. WALD: A sequential decision procedure for choosing one of three hypotheses concerning the mean of a normal distribution, Ann. Math. Stat., 1949, 20, 502-522.
- [25] STATISTICAL RESEARCH GROUP, Columbia University: Sequential Analysis of Statistical Data: Applications. Columbia University Press, New York, 1945.
- [26] VAN IJZEREN, J.: De theoretische zijde van de methode der kleinste kwadraten, Statistica, 1954, 8.1, 21-47.

Appendix

Enkele begrippen uit de matrixrekening

(Literatuur [20])

Een matrix is een schema van $m \times n$ getallen, gerangschikt in m rijen, ieder van n getallen. Zo is

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}.$$

een $m \times n$ matrix, die aangegeven kan worden door A , $A^{m \times n}$ of door (a_{ij}) . Het element van de matrix, dat in de i -de rij en de j -de kolom voorkomt, wordt als regel weergegeven door $(A)_{ij}$ of a_{ij} .

Een vector is een $m \times 1$ matrix, bijvoorbeeld

$$b = \begin{pmatrix} b_{11} \\ \vdots \\ b_{m1} \end{pmatrix}.$$

Verwisselt men rijen en kolommen in een matrix A , dan verkrijgt men de getransponeerde matrix A' :

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{m1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}.$$

Een getransponeerde vector is een zogenaamde rijvector:

$$b' = (b_{11} \dots b_{m1}).$$

Verschillende bewerkingen zijn gedefinieerd voor matrices (en dus ook voor vectoren).

1. De optelling van twee of meer matrices kan geschieden als de betrokken matrices evenveel rijen en evenveel kolommen hebben, en verloopt als volgt:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & \dots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & \dots & b_{mn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & \dots & a_{1n} + b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} + b_{m1} & \dots & a_{mn} + b_{mn} \end{pmatrix}$$

ofwel

$$a_{ij} + b_{ij} = (a + b)_{ij}.$$

Er bestaat een matrix, de nulmatrix O , die bij optelling bij een andere matrix deze matrix onveranderd laat. De $m \times n$ nulmatrix bestaat uit m rijen van ieder n getallen 0 .

De op bovenstaande wijze gedefiniëerde optelling is:

- a) commutatief $A + B = B + A$
 b) associatief $A + (B+C) = (A+B) + C$.

2. De vermenigvuldiging $A \cdot B$ kan alleen geschieden, als A evenveel kolommen heeft als B rijen, bijvoorbeeld

$$A^{2 \times 3} B^{3 \times 4} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & b_{34} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} + a_{13}b_{31} & a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} + a_{13}b_{32} & a_{11}b_{13} + a_{12}b_{23} + a_{13}b_{33} & a_{11}b_{14} + a_{12}b_{24} + a_{13}b_{34} \\ a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} + a_{23}b_{31} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} + a_{23}b_{32} & a_{21}b_{13} + a_{22}b_{23} + a_{23}b_{33} & a_{21}b_{14} + a_{22}b_{24} + a_{23}b_{34} \end{pmatrix} = C^{2 \times 4}$$

Algemeen is, als $A^{m \times n} B^{n \times k} = C^{m \times k}$

dan $c_{ij} = \sum_{h=1}^n a_{ih} b_{hj}$

De op deze wijze gedefiniëerde vermenigvuldiging is:

- 1) associatief $A(BC) = (AB)C$
 2) distributief t.o.v. de optelling $(A+B)C = AC + BC$

NB: de vermenigvuldiging is als regel niet commutatief, dus:

$$AB \neq BA.$$

3. De vermenigvuldiging van een matrix A met een scalaire grootheid α is gedefiniëerd als volgt: men vermenigvuldigt op overeenkomstige wijze elk element van de matrix A met α . De betekenis van de woorden "op overeenkomstige wijze" blijkt uit:

is $\alpha A = C$, dan is $c_{ij} = \alpha a_{ij}$
 is $A\alpha = C$, dan is $c_{ij} = a_{ij}\alpha$.

Een matrix met evenveel rijen als kolommen heet een vier-
kante matrix.

Een zeer bijzondere vierkante matrix is de eenheidsmatrix I , die op de hoofddiagonaal (van links boven naar rechts onder) elementen 1 heeft en verder 0

$$I^{n \times n} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \dots & & 1 \end{pmatrix}.$$

Vermenigvuldigt men een matrix met de eenheidsmatrix, dan blijft de eerste matrix onveranderd,

$$AI = IA = A.$$

Onder een bepaalde voorwaarde (de determinant van de matrix moet $\neq 0$ zijn) bestaat er bij een vierkante matrix A een andere matrix B , zodanig dat

$$AB = BA = I.$$

Men noemt B de inverse van A en duidt deze aan met A^{-1} .

In het voorafgaande rapport wordt op enkele plaatsen (o.a. 2.1;3 en 2.2;2) de notatie $b b'$ gebruikt, waarbij b een vector is. Uiteraard is $b b'$ volgens het bovenstaande gedefinieerd als :

$$(b_1, \dots, b_n) \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = b_1^2 + b_2^2 + \dots + b_n^2.$$

Daarentegen is $b b'$ een notatiewijze voor de matrix

$$\begin{pmatrix} b_1^2 & b_1 b_2 & \dots & b_1 b_n \\ \vdots & & & \\ b_n b_1 & b_n b_2 & \dots & b_n^2 \end{pmatrix}.$$

MATHEMATISCH CENTRUM,
2e Boerhaavestraat 49,
A m s t e r d a m - 0.

Statistische Afdeling
S 168 (M 68)

Sequente toets voor het gemiddelde van een normale verdeling met gegeven spreiding, of voor het verschil der gemiddelden van twee normale verdelingen, waarvan de spreidingen gelijk zijn.¹⁾

Wij beschouwen een stochastische variabele $\underline{x}$ ²⁾, die een normale verdeling bezit met gemiddelde μ en spreiding σ . Men wil voor gegeven waarde μ_0 de hypothese $\mu \leq \mu_0$ toetsen tegen $\mu > \mu_0$. Bij de hier te behandelen sequente methode verricht men waarnemingen $x_1, x_2, x_3, \dots$ van $\underline{x}$. Na iedere waarneming wordt nagegaan of de som van de gevonden waarden van $\underline{x}$ tussen twee nader aan te geven grenzen ligt of niet. Zodra de som één van deze grenzen overschrijdt, is het experiment beëindigd en kan de hypothese $\mu \leq \mu_0$ worden aanvaard of verworpen.

De hier te behandelen methode is ook van toepassing op het volgende geval: de stochastische variabelen $\underline{u}$ en $\underline{v}$ hebben normale verdelingen met gemiddelden $\mathcal{E}\underline{u} = \mu'$ en $\mathcal{E}\underline{v} = \mu''$ en dezelfde gegeven spreiding σ' ; men wenst voor een gegeven waarde μ_0 de hypothese $\mu' - \mu'' \leq \mu_0$ te toetsen tegen de hypothese $\mu' - \mu'' > \mu_0$. Men verricht nu paren waarnemingen: $(u_1, v_1), (u_2, v_2), \dots$ van $\underline{u}$ en $\underline{v}$. Indien men nu $\underline{x} = \underline{u} - \underline{v}$, $x_i = u_i - v_i$, $\mu = \mu' - \mu''$ en $\sigma = \sigma' \sqrt{2}$ stelt, is dit geval herleid tot het voorafgaande.

Het is niet mogelijk om een sequente toets te construeren, waarbij men slechts een kleine kans heeft om $\mu \leq \mu_0$ te verwerpen voor iedere waarde van μ die iets kleiner is dan μ_0 , en tevens een kleine kans om $\mu \leq \mu_0$ te aanvaarden voor iedere waarde van μ die iets groter is dan μ_0 . Wel kan men bereiken, dat behoudens een kleine kans, hoogstens α , $\mu \leq \mu_0$ aanvaard wordt als $\mu \leq \mu_1 < \mu_0$ is en behoudens een kleine kans, hoogstens β , $\mu \leq \mu_0$ verworpen wordt als $\mu \geq \mu_2 > \mu_0$ is; de waarden van μ_1, μ_2, α en β moeten door de onderzoeker vooraf vastgesteld worden.

- 1) Dit memorandum is slechts bedoeld ter oriëntatie en streeft niet naar volledigheid of volledige exactheid.
- 2) Stochastische grootheden worden door onderstreepte letters aangeduid.

De toets kan dan als volgt uitgevoerd worden.

Bereken:

$$a = \frac{\mu_1 + \mu_2}{2}$$

$$b_1 = \frac{\sigma^2}{\mu_2 - \mu_1} \ln \frac{\beta}{1-\alpha}$$

$$b_2 = \frac{\sigma^2}{\mu_2 - \mu_1} \ln \frac{1-\beta}{\alpha}$$

Teken in een rechthoekig coördinatenstelsel met de assen y en z de evenwijdige rechten :

$$L_1: y = az + b_1$$

$$L_2: y = az + b_2$$

Men zet nu hierin de waarneming x_1 uit in het punt: $z=1, y=x_1$

Ligt dit punt onder of op L_1 , dan aanvaardt men $\mu \leq \mu_0$; ligt het boven of op L_2 , dan verworpt men $\mu \leq \mu_0$; ligt het tussen de beide lijnen, dan verricht men een tweede waarneming x_2 en bepaalt dan het punt: $z=2, y=x_1+x_2$

Ligt dit punt onder of op L_1 , dan aanvaardt men $\mu \leq \mu_0$; ligt het boven of op L_2 , dan verworpt men $\mu \leq \mu_0$; ligt het tussen beide lijnen dan verricht men een derde waarneming enz.

De toets eindigt bij de n^{de} waarneming, als $z=n, y=x_1+x_2+\dots+x_n$ het eerst punt is het punt, dat niet tussen de lijnen L_1 en L_2 ligt. Men kan bewijzen, dat dit steeds na een eindig aantal waarnemingen het geval zal zijn.

Literatuur:

A. Wald, Sequential Analysis (1947) chapter 7.

Statistical Research Group, Columbia University (1945), Sequential Analysis of statistical data, Section 4. (Hierin vindt men een aantal voor de toepassing nuttige tabellen).

S 168 (M 71)

Kleinste kwadraten-schattingen voor de regressie-coëfficiënten
van een meervoudige lineaire regressie-vergelijking ¹⁾.

1. Inleiding.

We onderstellen dat n waarnemingen $y_1, \dots, y_n$ ²⁾ verricht worden welke aan de volgende betrekkingen voldoen:

$$(1,1) \quad \begin{aligned} y_1 &= \alpha + \beta_1 x_{11} + \dots + \beta_k x_{k1} + \underline{v}_1, \\ y_2 &= \alpha + \beta_1 x_{12} + \dots + \beta_k x_{k2} + \underline{v}_2, \\ &\vdots \\ y_n &= \alpha + \beta_1 x_{1n} + \dots + \beta_k x_{kn} + \underline{v}_n, \end{aligned}$$

waarin $\alpha, \beta_1, \dots, \beta_k$ onbekende regressie-coëfficiënten zijn, x_{ij} ($i = 1, \dots, k; j = 1, \dots, n$) bekende waarden van de onafhankelijke variabelen en $\underline{v}_j$ ($j = 1, \dots, n$) niet waarneembare onafhankelijke stochastische grootheden met verwachting $E \underline{v}_j = 0$ en gelijke (onbekende) spreidingen.

De kleinste kwadratenschattingen voor de coëfficiënten $\alpha, \beta_1, \dots, \beta_k$ zijn nu die waarden $a, b_1, \dots, b_k$ welke voor $\alpha, \beta_1, \dots, \beta_k$ gesubstitueerd de volgende kwadratische vorm minimaliseren:

$$(1,2) \quad Q = \sum_{j=1}^n (y_j - \alpha - \beta_1 x_{1j} - \dots - \beta_k x_{kj})^2.$$

Zij voldoen dus aan de relaties:

$$(1,3) \quad \left\{ \frac{\partial Q}{\partial \alpha} \right\}_{\substack{\alpha=a \\ \beta=b}} = 0$$

en

$$(1,4) \quad \left\{ \frac{\partial Q}{\partial \beta_i} \right\}_{\substack{\alpha=a \\ \beta=b}} = 0 \quad ; \quad i = 1, \dots, k,$$

waarbij $\beta = b$ betekent $\beta_1 = b_1, \beta_2 = b_2, \dots, \beta_k = b_k$.

1) Dit memorandum is slechts bedoeld ter oriëntatie en streeft niet naar volledigheid of volledige exactheid.

2) Stochastische grootheden geven we met onderstreepte letters aan; denken we speciaal aan de door deze grootheden aangenomen waarden dan geven we deze met dezelfde letters, maar zonder onderstreping, aan.

We zullen de uitdrukking voor a en $b_1, \dots, b_k$ eerst afleiden voor het geval $k = 2$ en daarna met behulp van matrixnotatie de algemene formules geven.

2. Kleinste kwadratschattingen voor het geval $k = 2$.

De relaties (1,3) en (1,4) luiden nu

$$(2,1) \quad \left\{ \frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \alpha} \right\}_{\substack{\alpha=a \\ \beta=b}} = -2 \sum_{j=1}^n (y_j - a - b_1 x_{1j} - b_2 x_{2j}) = 0$$

en

$$(2,2) \quad \begin{cases} \left\{ \frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \beta_1} \right\}_{\substack{\alpha=a \\ \beta=b}} = -2 \sum_{j=1}^n x_{1j} (y_j - a - b_1 x_{1j} - b_2 x_{2j}) = 0, \\ \left\{ \frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \beta_2} \right\}_{\substack{\alpha=a \\ \beta=b}} = -2 \sum_{j=1}^n x_{2j} (y_j - a - b_1 x_{1j} - b_2 x_{2j}) = 0. \end{cases}$$

Uit (2,1) volgt:

$$\begin{aligned} a &= \sum_{j=1}^n y_j / n - b_1 \sum_{j=1}^n x_{1j} / n - b_2 \sum_{j=1}^n x_{2j} / n = \\ &= \bar{y} - b_1 \bar{x}_1 - b_2 \bar{x}_2. \end{aligned}$$

Substitutie in (2,2) geeft:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n x_{1j} [y_j - \bar{y} - b_1 (x_{1j} - \bar{x}_1) - b_2 (x_{2j} - \bar{x}_2)] = 0, \\ \sum_{j=1}^n x_{2j} [y_j - \bar{y} - b_1 (x_{1j} - \bar{x}_1) - b_2 (x_{2j} - \bar{x}_2)] = 0, \end{cases}$$

of:

$$\begin{cases} b_1 \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)^2 + b_2 \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{2j} - \bar{x}_2) = \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(y_j - \bar{y}), \\ b_1 \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{2j} - \bar{x}_2) + b_2 \sum_{j=1}^n (x_{2j} - \bar{x}_2)^2 = \sum_{j=1}^n (x_{2j} - \bar{x}_2)(y_j - \bar{y}). \end{cases}$$

(Immers sommen als $\sum_{j=1}^n \bar{x}_1 (y_j - \bar{y})$ zijn nul en dus mag $\sum_{j=1}^n x_{1j} (y_j - \bar{y})$ vervangen worden door $\sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(y_j - \bar{y})$, enz.)

De oplossing van deze lineaire vergelijkingen kunnen wij schrijven in de vorm:

$$b_1 = \frac{\begin{vmatrix} \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(y_j - \bar{y}) & \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{2j} - \bar{x}_2) \\ \sum_{j=1}^n (x_{2j} - \bar{x}_2)(y_j - \bar{y}) & \sum_{j=1}^n (x_{2j} - \bar{x}_2)^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)^2 & \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{2j} - \bar{x}_2) \\ \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{2j} - \bar{x}_2) & \sum_{j=1}^n (x_{2j} - \bar{x}_2)^2 \end{vmatrix}}$$

en

$$b_2 = \frac{\begin{vmatrix} \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)^2 & \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(y_j - \bar{y}) \\ \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{2j} - \bar{x}_2) & \sum_{j=1}^n (x_{2j} - \bar{x}_2)(y_j - \bar{y}) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)^2 & \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{2j} - \bar{x}_2) \\ \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{2j} - \bar{x}_2) & \sum_{j=1}^n (x_{2j} - \bar{x}_2)^2 \end{vmatrix}}.$$

Voor het geval $k = 1$ zouden we op deze manier de bekende uitdrukking:

$$b_1 = \frac{\sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(y_j - \bar{y})}{\sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)^2}$$

gevonden hebben.

3. Kleinste kwadratenschattingen voor het algemene geval.

Ook in het algemene geval vinden we voor a , als oplossing van

$$(3,1) \quad \left(\frac{\partial Q}{\partial a} \right)_{\substack{\alpha=a \\ \beta=b}} = -2 \sum_{j=1}^n (y_j - a - b_1 x_{1j} - \dots - b_k x_{kj}) = 0,$$

de uitdrukking

$$\begin{aligned} a &= \sum_{j=1}^n y_j / n - b_1 \sum_{j=1}^n x_{1j} / n - \dots - b_k \sum_{j=1}^n x_{kj} / n = \\ &= \bar{y} - b_1 \bar{x}_1 - \dots - b_k \bar{x}_k. \end{aligned}$$

Substitueren we dit weer in $\left(\frac{\partial Q}{\partial \beta_i} \right)_{\substack{\alpha=a \\ \beta=b}} = 0 \quad (i=1, \dots, k)$ dan ontstaat:

$$\sum_{j=1}^n x_{ij} [y_j - \bar{y} - b_1 (x_{1j} - \bar{x}_1) - \dots - b_k (x_{kj} - \bar{x}_k)] = 0 \quad (i=1, \dots, k),$$

of

$$(3,2) \quad b_1 \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{ij} - \bar{x}_i) + \dots + b_k \sum_{j=1}^n (x_{kj} - \bar{x}_k)(x_{ij} - \bar{x}_i) = \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_i)(y_j - \bar{y}) \quad (i=1, \dots, k).$$

We zullen nu om overzichtelijker formules te verkrijgen de volgende matrix notatie invoeren:

$$\begin{aligned} y &\stackrel{\text{def.}}{=} \begin{pmatrix} y_1 - \bar{y} \\ y_2 - \bar{y} \\ \vdots \\ y_n - \bar{y} \end{pmatrix}; \quad X \stackrel{\text{def.}}{=} \begin{pmatrix} x_{11} - \bar{x}_1 & x_{12} - \bar{x}_2 & \dots & x_{1k} - \bar{x}_k \\ x_{21} - \bar{x}_1 & x_{22} - \bar{x}_2 & \dots & x_{2k} - \bar{x}_k \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} - \bar{x}_1 & x_{n2} - \bar{x}_2 & \dots & x_{nk} - \bar{x}_k \end{pmatrix}; \quad v \stackrel{\text{def.}}{=} \begin{pmatrix} v_1 - \bar{v} \\ v_2 - \bar{v} \\ \vdots \\ v_n - \bar{v} \end{pmatrix}; \\ \beta &\stackrel{\text{def.}}{=} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{pmatrix} \quad \text{en} \quad b \stackrel{\text{def.}}{=} \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_k \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Nu volgt uit (1,1) dat

$$\bar{y} = a + \beta_1 \bar{x}_1 + \dots + \beta_k \bar{x}_k + \bar{v},$$

zodat we voor (1,1) ook mogen schrijven:

$$(y_j - \bar{y}) = \beta_1 (x_{1j} - \bar{x}_1) + \dots + \beta_k (x_{kj} - \bar{x}_k) + v_j - \bar{v}; \quad j=1, \dots, n.$$

Met de bovengedefinieerde matrices is dit te schrijven als

$$(3,3) \quad \underline{y} = X \beta + \underline{v}.$$

De kwadratische vorm welke we moeten minimaliseren heeft nu de gedaante

$$(3,4) \quad \underline{Q} = (\underline{y} - X\beta)' (\underline{y} - X\beta) \quad 3)$$

3) A' , de getransformeerde van matrix A , ontstaat uit A door rijen en kolommen te verwisselen, dus $\begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \\ a_{13} & a_{23} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{pmatrix}.$

en de lineaire vergelijkingen waaraan de kleinste kwadraten-schattingen moeten voldoen gaan over in:

$$(X'X) \underline{b} = X' \underline{y}.$$

Hierin is $(X'X)$ een $k \times k$ -matrix. Is deze niet singulier dan geeft

$$(3,5) \quad \underline{b} = (X'X)^{-1} X' \underline{y}$$

de gezochte kleinste kwadratenschattingen voor $\beta_1, \dots, \beta_k$. Om te bereiken dat $(X'X)$ een inverse bezit, moeten we eisen dat

X de rang k bezit, hetgeen overeenkomt met de eis dat de regressievectoren $(x_{11} - \bar{x}_1, \dots, x_{1n} - \bar{x}_1), (x_{21} - \bar{x}_2, \dots, x_{2n} - \bar{x}_2), \dots, (x_{k1} - \bar{x}_k, \dots, x_{kn} - \bar{x}_k)$ lineair onafhankelijk zijn, dus niet via lineaire betrekkingen in elkaar uitgedrukt kunnen worden.

Dit betekent o.a. ook dat $n > k$ is.

De kleinste kwadratenschattingen zijn de beste zuivere lineaire schattingen d.w.z.: ze bezitten van alle mogelijke zuivere lineaire schattingen de kleinste variantie. Het minimum van Q , dat voor de waarden $\underline{b}$ van $\underline{\beta}$ bereikt wordt, is:

$$(3,6) \quad \begin{aligned} Q_{\min} &= (\underline{y} - X\underline{b})'(\underline{y} - X\underline{b}) = \underline{y}'\underline{y} - \underline{b}'X'\underline{y} - \underline{y}'X\underline{b} + \underline{b}'X'X\underline{b} = \\ &= \underline{y}'\underline{y} - \underline{y}'X(X'X)^{-1}X'\underline{y} - \underline{y}'X(X'X)^{-1}X'\underline{y} + \underline{y}'X(X'X)^{-1}X'X(X'X)^{-1}X'\underline{y} = \\ &= \underline{y}'\underline{y} - \underline{y}'X(X'X)^{-1}X'\underline{y} = \underline{y}'\underline{y} - \underline{b}'X'\underline{y}. \end{aligned}$$

4. Verwachtingen, varianties van $\underline{b}_1, \dots, \underline{b}_k$.

Uit de uitdrukking (3,5) voor $\underline{b}$ zien we dat de $\underline{b}$'s steeds lineaire combinaties van $\underline{y}_1, \dots, \underline{y}_n$ zijn. Daar in (3,3)

$\sum \underline{y}_j = 0$ is en dus $\sum \underline{y}_j = X\underline{\beta}$, geldt voor de verwachting van $\underline{b}$:

$$\begin{aligned} E \underline{b} &= (X'X)^{-1} X' E \underline{y} = (X'X)^{-1} X' X \underline{\beta} = \\ &= I \underline{\beta} = \underline{\beta}. \end{aligned}$$

De schattingen $\underline{b}_i$ zijn dus zuiver. Dit geldt ook, indien de $\underline{y}_i$ niet onderling onafhankelijk zijn en/of verschillende spreidingen bezitten, doch wel $\sum \underline{y}_i = 0$ is ($i = 1, \dots, n$).

Zijn de grootheden $\underline{y}_1, \dots, \underline{y}_n$ wel onderling onafhankelijk verdeeld met dezelfde variantie σ^2 , dan kunnen we als volgt de covariantiematrix van $\underline{b}_1, \dots, \underline{b}_k$ bepalen. We maken weer gebruik van het feit dat $\sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(y_j - \bar{y}) = \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1) y_j$ is, dus dat

$$X' \underline{y} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(y_j - \bar{y}) \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^n (x_{kj} - \bar{x}_k)(y_j - \bar{y}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1) y_j \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^n (x_{kj} - \bar{x}_k) y_j \end{pmatrix}.$$

We kunnen dan, volgens (3,5) $\underline{b}_1, \dots, \underline{b}_k$ schrijven als:

$$\begin{cases} \underline{b}_1 = A_{11} y_1 + \dots + A_{1n} y_n, \\ \vdots \\ \underline{b}_k = A_{k1} y_1 + \dots + A_{kn} y_n, \end{cases}$$

waarin de $k \times k$ -matrix $A = (X'X)^{-1} X'$ is. Voor de covariantiematrix van $\underline{b}_1, \dots, \underline{b}_k$ geldt dan, daar $\sigma\{y_j, y_\ell\} = 0$ ($j \neq \ell$) en $\sigma^2\{y_j\} = \sigma^2$ is,

$$\begin{aligned} (4,1) \quad \sigma^2\{\underline{b}_i, \underline{b}_k\} &= \left(\sum_{j=1}^n A_{ij} A_{kj} \sigma^2\{y_j\} \right) = \\ &= \sigma^2 \cdot \left(\sum_{j=1}^n A_{ij} A_{kj} \right) = \sigma^2 \cdot A A' = \\ &= \sigma^2 (X'X)^{-1} X'X (X'X)^{-1} = \sigma^2 (X'X)^{-1}. \end{aligned}$$

Voor het geval $k = 1$ is dus:

$$\sigma^2\{\underline{b}_1\} = \sigma^2 / \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)^2.$$

Voor het geval $k = 2$ is, wanneer we

$$Z \stackrel{\text{def}}{=} \begin{vmatrix} \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)^2 & \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{2j} - \bar{x}_2) \\ \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{2j} - \bar{x}_2) & \sum_{j=1}^n (x_{2j} - \bar{x}_2)^2 \end{vmatrix} = X'X$$

stellen:

$$\begin{aligned} \sigma^2\{\underline{b}_1\} &= \sigma^2 \cdot \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)^2 / |Z|, \\ \sigma^2\{\underline{b}_2\} &= \sigma^2 \cdot \sum_{j=1}^n (x_{2j} - \bar{x}_2)^2 / |Z|, \\ \sigma^2\{\underline{b}_1, \underline{b}_2\} &= -\sigma^2 \cdot \sum_{j=1}^n (x_{1j} - \bar{x}_1)(x_{2j} - \bar{x}_2) / |Z|. \end{aligned}$$

En in 't algemeen wanneer we de minor van het element in de i^e rij en k^e kolom van Z door $|Z_{ik}|$ voorstellen:

$$(4,2) \quad \sigma^2\{\underline{b}_i, \underline{b}_k\} = \sigma^2 \cdot |Z_{ik}| / |Z|.$$

Men kan aantonen dat

$$(n - k - 1)^{-1} \underline{\mathcal{Q}}_{\min}$$

een zuivere schatting voor σ^2 is (J. van YZEREN (1954)).

Zijn $\underline{v}_1, \dots, \underline{v}_n$ onderling onafhankelijk normaal verdeeld met gelijke spreidingen, dan komen de kleinste kwadratenschattingen voor $\alpha, \beta_1, \dots, \beta_k$ overeen met de meest aannemelijke schattingen (maximum likelihood estimates). De meest aannemelijke schatting voor σ^2 is dan $n^{-1} \underline{\mathcal{Q}}_{\min}$ deze is asymptotisch aequivalent met de zuivere schatting $(n - k - 1)^{-1} \underline{\mathcal{Q}}_{\min}$. De grootte $\underline{\mathcal{Q}}_{\min} / \sigma^2$ heeft nu een χ^2 -verdeling met $(n - k - 1)$ vrijheidsgraden en is onafhankelijk verdeeld van $\underline{a}, \underline{b}_1, \dots, \underline{b}_k$.

Literatuur

- H.B. MANN (1949), Analysis and design of experiments,
hoofdstuk 4.
New York, Dover Publications, Inc.
- H. CRAMÉR (1951), Mathematical methods of statistics,
hoofdstuk 37.
Princeton, University Press.
- J. VAN IJZEREN (1954), De theoretische zijde van de methode der
kleinste kwadraten.
Statistica, 8, pp 21-45.

MATHEMATISCH CENTRUM,
2e Boerhaavestraat 49,
A m s t e r d a m - O .

Statistische Afdeling
S 190 (M 74)

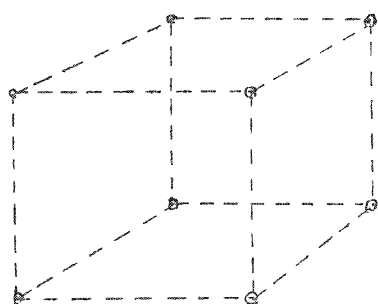
2^k -de factoriële schema's ¹⁾

0. Inleiding

Door het uitvoeren van experimenten volgens een factoriël schema kunnen de uitwerkingen van een aantal factoren gelijktijdig bestudeerd worden. Wij zullen dit laten zien aan de hand van een eenvoudig voorbeeld.

Stel, de proefopzet, die uitgevoerd is (of zal worden), is een 2^3 factoriël schema, d.w.z. er zijn drie factoren, die ieder op twee niveaus bij de experimenten **betrokken worden**. In totaal worden er dus $2^3 = 8$ experimenten verricht, waarbij voor elk van deze 8 experimenten een andere combinatie van de twee niveaus van de drie factoren gebruikt wordt.

De eenheden, waarin de niveaus van de factoren uitgedrukt kunnen worden, zijn vrij te kiezen. Door invoering van schaalfactoren kan dit zodanig worden gedaan, dat het hoge niveau van een factor door +1 wordt aangegeven, en het lage niveau door -1. Met deze keuze van schaalfactoren is een 2^3 factoriël schema voor te stellen door een kubus, waarvan ieder hoekpunt correspondeert met een der experimenten (zie figuur 1).



Figuur 1: een 2^3 factoriël schema.

Ook kunnen wij een programmamatrix aangeven, d.w.z. een matrix, waarvan de u -de rij de coördinaten aangeeft van het punt corresponderende met het u -de experiment. In dit geval is de programmamatrix

1) Dit memorandum is slechts bedoeld ter oriëntatie en streeft niet naar volledigheid of volledige exactheid.

$$P = \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 \\ -1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 \\ -1 & -1 & +1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \dots (0,1)$$

1. Het mathematisch model

Geven wij een waarneming aan met y_u ²⁾, dan wordt voor een 2^3 factorieel schema uitgegaan van het model, dat de y_u ($u = 1, \dots, 8$) onderling onafhankelijke stochastische variabelen zijn met mathematische verwachtingen η_u , dus:

$$y_u = \eta_u + \varepsilon_u \quad (1.1)$$

waarbij dus $E \varepsilon_u = 0$ en waarbij bovendien een onderstelling gemaakt wordt:

$$E \varepsilon_u^2 = \sigma^2 \quad (1.2)$$

Voorts wordt de η_u als volgt opgebouwd gedacht:

$$\eta_u = \mu_0 x_{0u} + \mu_1 x_{1u} + \mu_2 x_{2u} + \mu_3 x_{3u} + \mu_{12} x_{1u} x_{2u} + \mu_{13} x_{1u} x_{3u} + \mu_{23} x_{2u} x_{3u} + \mu_{123} x_{1u} x_{2u} x_{3u} \quad (1.3)$$

hetgeen geen enkele beperking oplegt aan de waarden, die de η_u kunnen bezitten.

Hierin noemen wij:

μ_0 = het gemiddelde

μ_i = het i-de hoofdeffect

μ_{ij} = de i,j interactie (een interactie van de eerste orde)

μ_{ijk} = de i,j,k interactie (" " " " tweede ")

Verder is:

$$x_{0u} \equiv 1$$

en voor $i = 1, 2, 3$

$$x_{iu} = \begin{cases} +1 & \text{als de i-de factor bij het u-de experiment op het +1} \\ & \text{niveau gehouden werd} \\ -1 & \text{als de i-de factor bij het u-de experiment op het -1} \\ & \text{niveau gehouden werd.} \end{cases}$$

2) Een stochastische grootheid is een grootheid, die een waarschijnlijkheidsverdeling bezit. Stochastische grootheden worden door onderstreepte letters aangegeven; dezelfde letters niet onderstreept worden vaak gebruikt voor waarden, die zij aan kunnen nemen of aangenomen hebben.

De interpretatie van (1.3) is dat men de verwachting van een waarneming opgebouwd denkt uit een gemiddelde waarde en een aantal bijdragen van de factoren: de hoofdeffecten. Daar evenwel de effecten van twee factoren veelal niet onafhankelijk zijn, moet men teneinde de hoofdeffecten te kunnen optellen, hierbij een correctiefactor invoeren, de interacties. Een interactie tussen factor 1 en 2 betekent, dus dat factor 2 bij een experiment, waarbij factor 1 op het +1 niveau betrokken is, een andere invloed heeft, dan bij een experiment, waarbij factor 1 op het -1 niveau gehouden werd.

In 1.3 is η_u uitgedrukt in $\mu_0, \mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_{12}, \mu_{13}, \mu_{23}$ en μ_{123} . Gebruik makende van enkele bijzondere eigenschappen van de factoriele proefopzetten kan men ook ieder der μ 's uitdrukken in de η_u . Zoals nl. uit de definitie van de x_{iu} volgt, kan de u-de rij van de programmamatrix (0,1) geschreven worden als

$$(x_{1u} \quad x_{2u} \quad x_{3u})$$

Hieruit blijkt dan, dat voor $i = 1, 2, 3$ en $j = 0, 1, 2$ en 3 geldt:

$$\left. \begin{aligned} \sum_{u=1}^8 x_{iu} &= 0 \\ \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{ju}^2 &= 1 \\ \text{en als } i \neq j \quad \sum_{u=1}^8 x_{iu} x_{ju} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (1.4)$$

Vermenigvuldigt men 1.3 rechts en links met en sommert men over u, dan is in verband met (1.4):

$$\begin{aligned} \sum_{u=1}^8 x_{iu} \eta_u &= \sum_{u=1}^8 (x_{0u} x_{iu} \mu_0 + x_{1u}^2 \mu_1 + x_{1u} x_{2u} \mu_2 + x_{1u} x_{3u} \mu_3 + \\ &\quad + x_{1u}^2 x_{2u} \mu_{12} + x_{1u}^2 x_{3u} \mu_{13} + x_{1u} x_{2u} x_{3u} \mu_{23} + \\ &\quad + x_{1u}^2 x_{2u} x_{3u} \mu_{123}) = \\ &= 8 \mu_1 \end{aligned}$$

Op analoge wijze verkrijgt men:

$$\mu_0 = \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 \eta_u$$

$$\left. \begin{aligned}
 \mu_1 &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{1u} \eta_u \\
 \mu_2 &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{2u} \eta_u \\
 \mu_3 &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{3u} \eta_u \\
 \mu_{12} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{1u} x_{2u} \eta_u \\
 \mu_{13} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{1u} x_{3u} \eta_u \\
 \mu_{23} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{2u} x_{3u} \eta_u \\
 \mu_{123} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{1u} x_{2u} x_{3u} \eta_u
 \end{aligned} \right\} \quad (1.5)$$

Men kan ook direct na (1.1) deze μ 's volgens (1.5) definiëren en vervolgens aantonen dat (1.3) geldt.

2. Schattingen van de effecten

Uitgaande van de waargenomen waarden y_u zullen nu schattingen van de effecten worden berekend. Deze schattingen zullen wij met een m met overeenkomstige indices aangeven.

Allereerst zullen schattingen voor de η_u berekend worden, daar indien deze bekend zijn uit (1.5) de schattingen voor de effecten volgen. Volgens het principe der kleinste quadraten kiezen wij de schattingen y_u^* van y_u zodanig, dat

$$Q = \sum_{u=1}^8 (y_u - y_u^*)^2$$

minimaal wordt. Zoals zonder meer in te zien is, wordt Q minimaal (en wel gelijk aan 0), indien voor $u = 1, \dots, 8$

$$y_u = y_u^* \quad (2.1)$$

Volgens (2.1) zijn de waarnemingen y_u dus de beste schattingen van η_u . Invoering in (1.5) geeft dan voor de schattingen van de μ :

$$\left. \begin{aligned}
 m_0 &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 y_u \\
 m_1 &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{1u} y_u \\
 m_2 &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{2u} y_u \\
 m_3 &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{3u} y_u \\
 m_{12} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{1u} x_{2u} y_u \\
 m_{13} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{1u} x_{3u} y_u \\
 m_{23} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{2u} x_{3u} y_u \\
 m_{123} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{1u} x_{2u} x_{3u} y_u
 \end{aligned} \right\} \quad (2.2)$$

Uit deze uitdrukkingen blijkt dat de schattingen op zeer eenvoudige wijze te verkrijgen zijn. De m_1 wordt bijvoorbeeld verkregen door de y_u een + of een - teken toe te kennen naar gelang de 1e factor op het hoge of het lage niveau bij het u-de experiment betrokken is, daarna over deze waarden te sommeren en door 8 te delen. De m_{12} wordt op analoge wijze verkregen; in dit geval krijgt de y_u een + of een - teken, al naar gelang $x_{1u} x_{2u} + 1$ of -1 is. De berekening van de schattingen verloopt dan ook zeer eenvoudig, indien men gebruik maakt van de program-matrix.

Daar alle waarnemingen een inhaerente waarnemingson nauwkeurigheid bezitten, kan uit het simpele feit van het verkrijgen van een getalwaarde voor $m_1, \dots, m_{123}$ nog niet besloten worden tot het bestaan van systematische hoofdeffecten en interacties. De variantieanalyse biedt evenwel een mogelijkheid dit nader te onderzoeken. Hiervoor wordt verwezen naar de handboeken op dit gebied o.a. [1], [2] en [5], waarin bovendien verdere literatuurverwijzingen zijn opgenomen. Indien bij toetsing bijvoorbeeld blijkt, dat behoudens een zekere (kleine) onbetrouwbaarheid aangenomen moet worden, dat er een interactie m_{12} aanwezig is als systematisch effect, dan wil dit zeggen, dat de eerste factor en de tweede factor niet onafhankelijk werken.

De schattingen, die op hierboven beschreven wijze berekend zijn, hebben enkele eigenschappen, die hier slechts kort zullen worden aangegeven. Zoals alle kleinste quadraten-schattingen zijn zij zuiver. Bovendien zijn zij onderling ongecorreleerd. Is bijvoorbeeld m_1 zeer groot en m_2 en m_3 zeer klein, dan toch worden de schattingen van m_{12} etc. hier niet door beïnvloed. Deze eigenschap hangt zeer nauw samen met de orthogonaliteitsrelaties (1.4) en men zegt daarom wel dat alle schattingen "orthogonaal" zijn. Door deze eigenschappen en door hun eenvoud zijn factoriële schema's proefopzetten, die zeer bruikbaar zijn o.a. voor industriële experimenten.

De schattingen (2.2) krijgen een zeer eenvoudige vorm indien men van matrixnotatie gebruik maakt. Hiertoe definieert men de matrix X als volgt: de u-de rij van X bestaat uit de elementen ($u = 1, \dots, 8$)

(x_{0u} x_{1u} x_{2u} x_{3u} $x_{1u}x_{2u}$ $x_{1u}x_{3u}$ $x_{2u}x_{3u}$ $x_{1u}x_{2u}x_{3u}$)
De kolommen zullen wij aangeven met:

(E) (1) (2) (3) (12) (13) (23) (123)

Uitgaande van de matrix P vinden wij dan:

$$X = \begin{matrix} & \begin{matrix} (E) & (1) & (2) & (3) & (12) & (13) & (23) & (123) \end{matrix} \\ \begin{matrix} +1 \\ +1 \\ +1 \\ +1 \\ +1 \\ +1 \\ +1 \\ +1 \end{matrix} & \begin{bmatrix} +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 & +1 & -1 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (2.3)$$

Wij verstaan onder een vector een kolomvector en geven een rijvector aan als de getransponeerde kolomvector (dus als $\hat{a}$). Definieren wij

$$\mu = (\mu_0, \mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_{12}, \mu_{13}, \mu_{23}, \mu_{123})$$

terwijl de overeenkomstige schattingen aangegeven worden door

$$m = (m_0, \dots, m_{123})$$

Is voorts de vector der waarnemingsresultaten:

$$y = (y_1, \dots, y_8)$$

dan gaat (2.5) over in:

$$m = \frac{1}{8} X' y. \quad 2.4$$

Bij een 2^k experiment is het aantal uit te voeren experimenten zeer groot, als k niet al te klein is. Om het aantal experimenten binnen redelijke grenzen te houden kan men op de volgende wijze te werk gaan:

1. een 2^{k-1} schema uitvoeren en de k-de factor door verstrengeling bij het experiment betrekken (Engels: confounding)
2. van een 2^k schema slechts een gedeelte, bijvoorbeeld de helft uit te voeren: dit leidt tot partiële schema's (Engels: fractional designs)

3. Verstrengeling

Stel men wenst de invloed van vier factoren te onderzoeken. Men kan dan een 2^3 factorieel schema uitvoeren, waar de 4e factor verstrengeld is met een van de interacties van de eerste drie. Men kan dit bijvoorbeeld doen door in de matrix P, een nieuwe kolom in te voegen waarvan ieder element hetzelfde teken heeft als het product van de elementen op diezelfde rij in de eerste drie kolommen. Men verkrijgt op deze wijze een nieuwe programmamatrix P'.

$$P' = \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & +1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & +1 & +1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

Bij het u-de experiment houdt men de vierde factor op het +1 (resp. -1) niveau als in de programmamatrix op de u-de rij en vierde kolom een +1, resp. -1 voorkomt.

Uit de wijze, waarop de vierde factor werd ingevoerd blijkt, dat voor elke u geldt:

$$x_{1u}^2 = x_{2u}^2 = x_{3u}^2 = x_{4u}^2 = x_{1u} x_{2u} x_{3u} x_{4u} = 1. \quad (3.2)$$

Men geeft dit aan door de z.g. groepsrelatie:

$$11 = 22 = 33 = 44 = 1 \ 2 \ 3 \ 4 = \text{eenheid}. \quad (3.3)$$

Indien men de laatste gelijkheid in (3.2) links en rechts met x_{1u} vermenigvuldigt, is:

$$x_{1u}^2 x_{2u} x_{3u} x_{4u} = x_{1u}$$

of daar (weer volgens (3.2)) $x_{1u}^2 = \text{eenheid}$, geldt:

$$\left. \begin{aligned} x_{2u} x_{3u} x_{4u} &= x_{1u} \\ x_{1u} x_{2u} x_{3u} &= x_{4u} \\ x_{1u} x_{2u} x_{4u} &= x_{3u} \\ x_{1u} x_{3u} x_{4u} &= x_{2u} \end{aligned} \right\} \quad (3.4)$$

en

Het model voor een volledig factorieel schema met 4 factor is: (naar analogie van 1.1 en 1.3)

$$\begin{aligned} \eta_u &= \mu_0 x_{0u} + \mu_1 x_{1u} + \mu_2 x_{2u} + \mu_3 x_{3u} + \mu_4 x_{4u} + \mu_{12} x_{1u} x_{2u} + \\ &+ \dots + \mu_{34} x_{3u} x_{4u} + \mu_{123} x_{1u} x_{2u} x_{3u} + \dots + \\ &+ \mu_{234} x_{2u} x_{3u} x_{4u} + \mu_{1234} x_{1u} x_{2u} x_{3u} x_{4u}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Uit de relaties (3.4) volgt, dat (3.5) voor het geval dat de vierde factor op de bovenbeschreven wijze geïntroduceerd is, ook kan worden geschreven als:

$$\begin{aligned} \eta_u &= (\mu_0 + \mu_{1234}) x_{0u} + (\mu_1 + \mu_{234}) x_{1u} + (\mu_2 + \mu_{134}) x_{2u} + \\ &+ (\mu_3 + \mu_{124}) x_{3u} + (\mu_{12} + \mu_{34}) x_{1u} x_{2u} + (\mu_{13} + \mu_{24}) x_{1u} x_{3u} + \\ &+ (\mu_{23} + \mu_{14}) x_{2u} x_{3u} + (\mu_{123} + \mu_{4}) x_{1u} x_{2u} x_{3u}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Op dezelfde wijze als in 2 kunnen de μ 's uitgedrukt worden in de η 's:

$$\left. \begin{aligned} \mu_0 + \mu_{1234} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 \eta_u \\ \mu_1 + \mu_{234} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{1u} \eta_u \\ \mu_2 + \mu_{134} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{2u} \eta_u \\ \mu_3 + \mu_{124} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{3u} \eta_u \\ \mu_{12} + \mu_{34} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{1u} x_{2u} \eta_u \\ \mu_{13} + \mu_{24} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{1u} x_{3u} \eta_u \\ \mu_{23} + \mu_{14} &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{2u} x_{3u} \eta_u \\ \mu_{123} + \mu_4 &= \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 x_{1u} x_{2u} x_{3u} \eta_u \end{aligned} \right\} \quad (3.7)$$

Dus in dit geval zal men, indien men voor η_u de schattingen y_u invoert, volgens 3.7 niet alle μ 's apart schatten, maar twee aan twee bij elkaar.

Zo bijvoorbeeld schat men de som van $\mu_1 + \mu_{234}$, en men kan uit deze acht experimenten niets meer te weten komen over μ_1 en μ_{234} apart. Men zegt dan dat μ_1 en μ_{234} verstrengeld zijn. Men ziet dus uit 3.7 dat elk effect verstrengeld is met een ander effect. Door vermenigvuldiging van de indices van een effect met de groepsrelatie (3.3), verkrijgt men de indices van het effect, dat ermee verstrengeld is. Zo is bijvoorbeeld μ_{12} verstrengeld met μ_{34} , daar $12 \cdot 1234 = 34$.

Het gebruik van verstrengeling is meestal dan slechts zinvol, als van de met de hoofdeffecten verstrengelde interacties op redelijke gronden aangenomen mag worden, dat zij zeer gering of afwezig zijn.

Het zou in dit verband te ver voeren, de verschillende methoden van verstrengeling te bespreken. Men wordt hiervoor verwezen naar de bestaande handboeken.

4. Partiële schema's

Men komt tot dezelfde matrix P' (2.1), indien van een 2^4 factoriële proefopzet slechts die experimenten uitgevoerd worden waarvoor:

$$x_{1u} x_{2u} x_{3u} x_{4u} = +1, \quad (4.1)$$

en die experimenten achterwege laat waarvoor:

$$X_{1u} X_{2u} X_{3u} X_{4u} = -1$$

In dit geval noemt men dit een half factorieel schema. Indien men op de door (4.1) gedefinieerde wijze te werk gaat, blijven de geschatte effecten orthogonaal.

De consequenties van het uitvoeren van een partieel schema t.a.v. de schattingen zijn geheel gelijk aan die, besproken in 3. Zo volgt uit 4.1 weer de groepsrelatie:

$$1234 = \text{eenheid.}$$

5. Literatuur

- 1 ANDERSON, R.L. and T.A. BANCROFT: Statistical theory in research. McGrawHill, New York 1952.
- 2 COCHRAN, W.G. and G.M. COX: Experimental designs, Wiley, New York, 1950.
- 3 DAVIES, O.L. and W.A. HAY: The construction and use of fractional designs in industrial research. Biometrics 1950, 6, 233-249.
- 4 DAVIES, O.L. Design and analysis of industrial experiments (editor) Oliver and Boyd, Edinburgh 1953.
- 5 MANN, H.B. Analysis and design of experiments. Dover publications, New York, 1949.