S 190 (M 74)

2^k-de factoriële schema's

Stichting Mathematisch Centrum
Statistische Afdeling
1956

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]

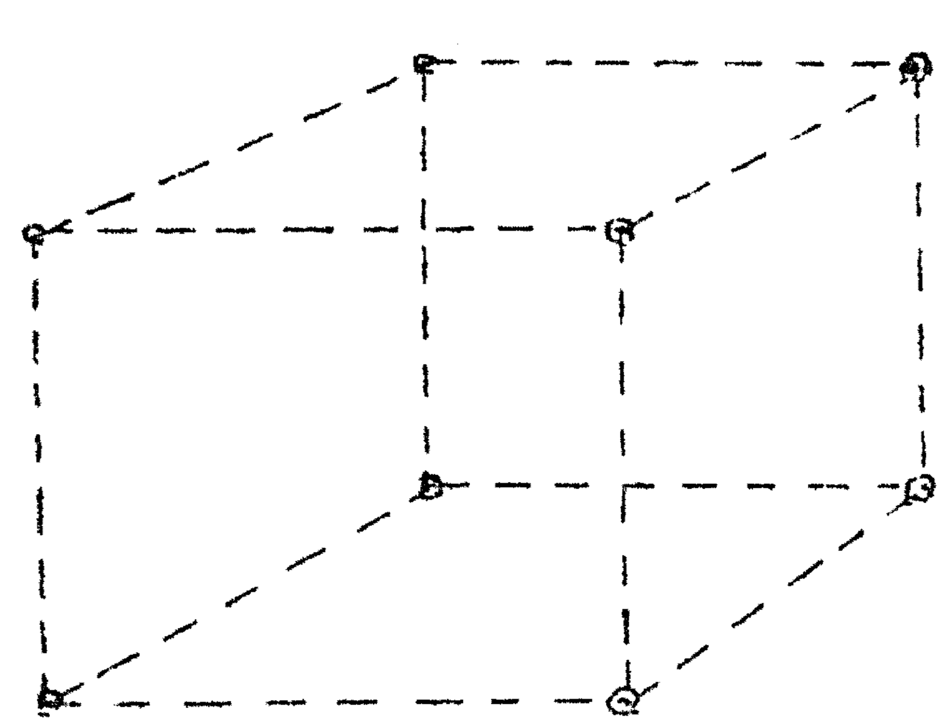
0. Inleiding

Door het uitvoeren van experimenten volgens een factorieel 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 factorieel schema, d.w.z. er zijn drie factoren, die ieder op twee niveaux 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 niveaux van de drie factoren gebruikt wordt.

De eenheden, waarin de niveaux 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 factorieel schema voor te stellen door een kubus, waarvan ieder hoekpunt correspondeert met een der experimenten (zie figuur 1).

Ook kunnen wij een programma-matrix 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



Figuur 1: een 2^3 factorieel schema.

---

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

$$P = \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 \\ -1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 \\ -1 & -1 & +1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \qquad \ldots . \; (0,1)$$

1. <u>Het mathematisch model</u>

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

$$\underline{y}_u = \eta_u + \underline{v}_u \qquad (1.1)$$

waarbij dus $E\,\underline{v}_u =$ en waarbij bovendien een onderstelling gemaakt wordt:

$$E\,\underline{v}_u^2 = \sigma^2 \qquad (1.2)$$

Voorts wordt de η_u als volgt opgebouwd gedacht:

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

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 μ_0, μ_1, μ_2, μ_3, μ_{12}, μ_{13}, μ_{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) geschrevem 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:

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

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

$$\sum_{u=1}^{8} x_{1u}\eta_u = \sum_{u=1}^{8} \big(x_{0u}x_{1u}\mu_0 + x_{1u}^2\mu_1 + x_{1u}x_{2u}\mu_2 + x_{1u}x_{3u}\mu_3 +$$

$$+ x_{1u}^2 x_{2u}\mu_{12} + x_{1u}^2 x_{3u}\mu_{13} + x_{1u}x_{2u}x_{3u}\mu_{23} +$$

$$+ x_{1u}^2 x_{2u}x_{3u}\mu_{123}\big) =$$

$$= 8\mu_1$$

Op analoge wijze verkrijgt men:

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

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

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,...,8

$$y_u = y_u^* \qquad (2.1$$

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:

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

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 programmamatrix.

Daar alle waarnemingen een inhaerente waarnemingsonnauwkeurigheid bezitten, kan uit het simpele feit van het verkrijgen van een getalwaarde voor $m_1, \ldots m_{123}$ 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 beinvloed. 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,...,8)

$$(\; x_{0u} \quad x_{1u} \quad x_{2u} \quad x_{3u} \quad x_{1u}x_{2u} \quad x_{1u}x_{3u} \quad x_{2u}x_{3u} \quad x_{1u}x_{2u}x_{3u} \;)$$

De kolommen zullen wij aangeven met:

$$(E) \quad (1) \quad (2) \quad (3) \quad (12) \quad (13) \quad (23) \quad (123)$$

Uitgaande van de matrix P vinden wij dan:

$$
X = \begin{array}{cccccccc}
(E) & (1) & (2) & (3) & (12) & (13) & (23) & (123) \\
\end{array}
$$

$$
X = \begin{bmatrix}
+1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\
+1 & +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & -1 \\
+1 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 \\
+1 & +1 & -1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 \\
+1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 & -1 \\
+1 & -1 & +1 & -1 & -1 & +1 & -1 & +1 \\
+1 & -1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 \\
+1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 & +1 & -1
\end{bmatrix} \qquad (2.3$$

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

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

terwijl de overeenkomstige schattingen aangegeven worden door

$$\grave{m} = (m_0, \quad \cdots \quad, m_{123})$$

Is voorts de vector der waarnemingsresultaten:

$$\grave{y} = (y_1, \quad \cdots \quad, y_8)$$

dan gaat (2.5) over in:

$$m = \tfrac{1}{8}\grave{X}y. \qquad 2.4$$

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 <u>verstrengeling</u> bij het experiment betrekken (Engels: confounding)
2. van een 2^k schema slechts een gedeelte, bijvoorbeeld de helft uit te voeren: dit leidt tot <u>partiële schema's</u> (Engels: fractional designs)

3. <u>Verstrengeling</u>

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'.

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

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 :

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

Men geeft dit aan door de z.g. <u>groepsrelatie</u>:

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

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 = eenheid, geldt:

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

Op gelijke wijze vindt men:

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

en

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

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

$$y_u = \eta_u + \underline{v}_u$$

en

$$\eta_u = \mu_0 x_{0u} + \mu_1 x_{1u} + \mu_2 x_{2u} + \mu_3 x_{3u} + \mu_4 x_{4u} + \mu_{12} x_{1u} x_{2u} + \\ + \cdots + \mu_{34} x_{3u} x_{4u} + \mu_{123} x_{1u} x_{2u} x_{3u} + \cdots + \\ + \mu_{234} x_{2u} x_{3u} x_{4u} + \mu_{1234} x_{1u} x_{2u} x_{3u} x_{4u} . \qquad (3.5)$$

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

$$\eta_u = (\mu_0 + \mu_{1234}) x_{0u} + (\mu_1 + \mu_{234}) x_{1u} + (\mu_2 + \mu_{134}) x_{2u} + \\ + (\mu_3 + \mu_{124}) x_{3u} + (\mu_{12} + \mu_{34}) x_{1u} x_{2u} + (\mu_{13} + \mu_{24}) x_{1u} x_{3u} + \\ + (\mu_{23} + \mu_{14}) x_{2u} x_{3u} + (\mu_{123} + \mu_4) x_{1u} x_{2u} x_{3u} . \qquad (3.6)$$

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

$$\left.\begin{aligned}
\mu_0 + \mu_{1234} &= \frac{1}{8}\sum_{u=1}^{8} \eta_u \\
\mu_1 + \mu_{234} &= \frac{1}{8}\sum_{u=1}^{8} x_{1u}\,\eta_u \\
\mu_2 + \mu_{134} &= \frac{1}{8}\sum_{u=1}^{8} x_{2u}\,\eta_u \\
\mu_3 + \mu_{124} &= \frac{1}{8}\sum_{u=1}^{8} x_{3u}\,\eta_u \\
\mu_{12} + \mu_{34} &= \frac{1}{8}\sum_{u=1}^{8} x_{1u}\,x_{2u}\,\eta_u \\
\mu_{13} + \mu_{24} &= \frac{1}{8}\sum_{u=1}^{8} x_{1u}\,x_{3u}\,\eta_u \\
\mu_{23} + \mu_{14} &= \frac{1}{8}\sum_{u=1}^{8} x_{2u}\,x_{3u}\,\eta_u \\
\mu_{123} + \mu_{4} &= \frac{1}{8}\sum_{u=1}^{8} x_{1u}\,x_{2u}\,x_{3u}\,\eta_u
\end{aligned}\right\} \qquad (3.7)$$

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} <u>verstrengeld</u> 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. 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:

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

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 = 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. (editor) Design and analysis of industrial experiments Oliver and Boyd, Edinburgh 1953.

5 MANN, H.B. Analysis and design of experiments. Dover publications, New York, 1949.