MATHEMATISCH CENTRUM
2e BOERHAAVESTRAAT 49
AMSTERDAM

STATISTISCHE AFDELING

Leiding: Prof. Dr D. van Dantzig
Chef van de Statistische Consultatie: Prof. Dr J. Hemelrijk

Rapport S 198A

Verwerking en interpretatie van de waarnemingsuitkomsten, verkregen bij het uitvoeren van de proefopzet, beschreven in S 198.

door

Ir A.R. Bloemena
en
Ph. van Elteren

Mei 1956

In dit rapport zullen enkele bijzonderheden betreffende de verwerking en interpretatie worden aangegeven van de waarnemingsuitkomsten, die kunnen worden verkregen bij het uitvoeren van de proefopzet, aangegeven in rapport S 198.

De notatie, die zal worden aangehouden, komt geheel overeen met die in [1] en [2] wordt gebruikt.

In tegenstelling tot rapport S 198 zullen de factoren, die in het onderzoek betrokken zijn, worden genummerd met 1,...,9 in de volgorde zoals deze in de inleiding van S 198 zijn genoemd.

Teneinde de interpretatie van de waarnemingsuitkomsten aan te kunnen geven, zal eerst de bij de proefopzet gevolgde werkwijze op een meer formele wijze, dan in S 198 worden aangegeven.

Bij een experiment, waarbij k continue te variëren factoren $x_1,\dots,x_k$ zijn betrokken, meet men de responsie $\underline{y}$*), die men zich voorstelt als een functie van deze k factoren en van de responsiefluctuatie onder constante experimentele condities (waarnemingsonnauwkeurigheid) $\underline{v}$:

$$\underline{y} = \varphi(x_1,\dots,x_k) + \underline{v}. \qquad (1)$$

Het doel van het onderzoek kan nu worden gezien als het vinden van drie combinaties van waarden van de factoren, $x_1^m,\dots x_k^m$, waarvoor $\varphi(x_1,\dots,x_k)$ maximaal is.

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

1. $\mathcal{E}\,\underline{v} = 0$
2. de verdeling van $\underline{v}$ is dezelfde voor alle combinaties van waarden van de k factoren (var $\{\underline{v}\} = \sigma^2$).

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

$$\mathcal{E}\,\underline{y}_u = \varphi(x_{1u},\dots,x_{ku}). \qquad (2)$$

In aansluiting op de twee hierboven genoemde onderstellingen zal nog een derde gemaakt worden:

3. de waarnemingen zijn onderling onafhankelijk.

Nemen wij aan, dat de functie φ in het beschouwde gebied van de k dimensionale ruimte continue afgeleiden heeft, dan kan (2) worden ontwikkeld in een reeks van TAYLOR. Hiertoe voeren wij de volgende notatie in:

Voor de waarden van φ in de oorsprong:

----

*) Stochastische variabelen worden onderstreept. Hetzelfde symniet onderstreept, wordt gebruikt om een waarde aan te geven, die deze variabele aangenomen heeft.

$$\left.\begin{array}{l} \left[\varphi\right]_{x_1=\dots=x_k=0} = \varphi_0, \\ \text{voor de partiëel afgeleide naar } x_i \text{ in } 0: \\ \left[\dfrac{\partial\varphi}{\partial x_i}\right]_{x_1=\dots=x_k} = \varphi_i, \\ \text{voor de tweede partiëel afgeleide in } 0: \\ \left[\dfrac{\partial^2\varphi}{\partial x_i \partial x_j}\right]_{x_1=\dots=x_k} = \varphi_{ij}. \end{array}\right\} \qquad (3)$$

Nu kan, onder genoemde voorwaarden . (2) geschreven worden als

$$\underset{=}{E}\, y_u = \varphi_0 + \varphi_1 x_{1u} + \varphi_2 x_{2u} + \dots + \varphi_k x_{ku} + \tfrac{1}{2}\varphi_{11} x_{1u}^2 + \dots + \tfrac{1}{2}\varphi_{kk} x_{ku}^2 +$$

$$+ \varphi_{12} x_{1u} x_{2u} + \dots + \varphi_{k-1,k} x_{k-1,u} x_{ku} + \tfrac{1}{6}\varphi_{111} x_{1u}^3 + \dots +$$

$$+ \tfrac{1}{2}\varphi_{112} x_{1u}^2 x_{2u} + \dots \qquad (4)$$

Op grond van bepaalde onderstellingen ~~over~~ de functie φ kan men veelal aannemen, dat termen van de graad d en hoger verwaarloosbaar klein zijn, zo zal indien φ plaatselijk goed door een plat vlak te benaderen zal zijn, gelden:

$$\underset{=}{E}\, y_u = \varphi_0 + \varphi_1 x_{1u} + \dots + \varphi_k x_{ku}. \qquad (5)$$

Men noemt dit het <u>lineaire model</u>.
Is φ evenwel plaatselijk slechts goed te benaderen door een tweedegraadsoppervlak, dan gaat men uit van het quadratische model:

$$\underset{=}{E}\, y_u = \varphi_0 + \varphi_1 x_{1u} + \dots + \varphi_k x_{ku} + \tfrac{1}{2}\varphi_{11} x_{1u}^2 + \dots + \tfrac{1}{2}\varphi_{kk} x_{ku}^2 +$$

$$+ \varphi_{12} x_{1u} x_{2u} + \dots + \varphi_{k-1,k} x_{k-1,u} x_{ku}. \qquad (6)$$

Hierin noemen wij

φ_i : het i-de hoofdeffect

$\frac{1}{2}\varphi_{ii}$: het i-de quadratische effect

φ_{ij} : het ixj interactieeffect.

De proefopzet zoals deze in rapport S 198 is voorgesteld, is het $\frac{1}{16}$ deel van een 2^8 factorieel schema in duplo, gekenmerkt door de groepsrelatie (zie het als bijlage bijgevoegde memorandum S 198 (M 74)) eenheid = 11 = 22 = ... = 88 = 1235 = 1246 = 1347 = 2348 = 3456 = 1567 = 2457 = 3578 = 1278 = 2367 = 1368 = 1458 = 1678. Uitgaande hiervan kunnen 16 verschillende effecten worden geschat; deze schattingen zullen wij aanduiden met m_0, $m_1, \dots, m_8$, m_{12}, m_{13}, m_{14}, m_{23}, m_{24}, m_{34} en m_{1234} of met de vector $\underset{\smile}{m} = (m_0, \dots, m_{1234})$ *)

----

*) Een vector is een kolomvector, een rijvector geven wij aan als een getransponeerde kolomvector.

De verwachtingen van de genoemde schattingen stellen nu combinaties voor van coëfficiënten van x in de reeksontwikkeling (4) en wel, indien wij de term "is een schattingvan" aangeven met een pijl,

$$\begin{array}{lll}
m_0 & \rightarrow & \varphi_0 + \tfrac{1}{2}\varphi_{11} + \tfrac{1}{2}\varphi_{22} + \quad . \quad . \quad . \quad . \quad + \tfrac{1}{2}\varphi_{88} + \text{4de orde effecten} \\
m_1 & \rightarrow & \varphi_1 + \text{derde orde effecten} \\
m_2 & \rightarrow & \varphi_2 + \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \text{"} \\
. & & . \\
. & & . \\
. & & . \\
m_8 & \rightarrow & \varphi_8 + \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \text{"} \\
m_{12} & \rightarrow & \varphi_{12} + \varphi_{35} + \varphi_{46} + \varphi_{78} + \text{4de orde effecten} \\
m_{13} & \rightarrow & \varphi_{13} + \varphi_{25} + \varphi_{47} + \varphi_{68} + \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \text{"} \\
m_{14} & \rightarrow & \varphi_{14} + \varphi_{26} + \varphi_{37} + \varphi_{58} + \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \text{"} \\
m_{23} & \rightarrow & \varphi_{23} + \varphi_{15} + \varphi_{48} + \varphi_{67} + \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \text{"} \\
m_{24} & \rightarrow & \varphi_{24} + \varphi_{16} + \varphi_{38} + \varphi_{57} + \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \text{"} \\
m_{34} & \rightarrow & \varphi_{34} + \varphi_{17} + \varphi_{28} + \varphi_{56} + \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \text{"} \\
m_{1234} & \rightarrow & \varphi_{45} + \varphi_{18} + \varphi_{27} + \varphi_{36} + \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \text{"}
\end{array}$$

Hieruit blijkt, dat indien het responsieoppervlak ter plaatse met voldoende goede benadering door een tweedegraadsoppervlak is voor te stellen, dat:

1. de hoofdeffecten zuiver geschat worden,
2. de quadratische effecten niet geschat worden,
3. de interacties bij vier tegelijk worden geschat.

Daar in de omgeving van een maximum de matrix van de tweede orde effecten negatief definiet is geldt daar:

$$\varphi_{ii}\,\varphi_{jj} < \varphi_{ij}^2 \tag{7}$$

Indien een quadratisch effect dus niet klein is, zal dit zeker tot uitdrukking komen in de grootte van de interacties. In dit verband is het geen ernstig bezwaar dat bij de eerste fase van de proefopzet de quadratische effecten niet kunnen worden geschat.

De berekening van de schattingsvector b kan als volgt geschieden. Geeft men de gevonden waarde van de bij het i-de experiment aan met y_i ($i = 1,\ldots,32$), dan berekent men het gemiddelde van de y_i over de duplowaarnemingen (vgl. tabel I van S 198):

$$\begin{array}{ll}
o_1 = \tfrac{1}{2}(y_{23} + y_8) & o_9 = \tfrac{1}{2}(y_{31} + y_{20}) \\
o_2 = \tfrac{1}{2}(y_4 + y_{25}) & o_{10} = \tfrac{1}{2}(y_{19} + y_6) \\
o_3 = \tfrac{1}{2}(y_{10} + y_7) & o_{11} = \tfrac{1}{2}(y_{27} + y_9) \\
o_4 = \tfrac{1}{2}(y_{29} + y_{24}) & o_{12} = \tfrac{1}{2}(y_{16} + y_{14}) \\
o_5 = \tfrac{1}{2}(y_{21} + y_{11}) & o_{13} = \tfrac{1}{2}(y_{32} + y_{28}) \\
o_6 = \tfrac{1}{2}(y_{26} + y_1) & o_{14} = \tfrac{1}{2}(y_3 + y_{18}) \\
o_7 = \tfrac{1}{2}(y_{17} + y_{15}) & o_{15} = \tfrac{1}{2}(y_2 + y_{22}) \\
o_8 = \tfrac{1}{2}(y_{13} + y_{12}) & o_{16} = \tfrac{1}{2}(y_5 + y_{30})
\end{array}$$

De vector $(O_1,\ldots O_{16})$ zullen wij aanduiden met $\grave{O}$.

Definieren wij de matrix X als:

E	(1)	(2)	(3)	(4)	(5=123)	(6=124)	(7=134)	(8=234)	(12)	(13)	(14)	(23)	(24)	(34)	(1234)
+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
+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
+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
+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

(zie ook het memorandum S 190 M74)

dan is de kleinste kwadratenschatting: $m = \frac{1}{16} X' O$. (10)

Maakt men de onderstelling, dat de $\underline{v}$ in (1) een normale verdeling bezit, dan bestaat de mogelijkheid, elk van de elementen van de vector m te toetsen, of deze systematisch van 0 verschilt. Dit kan door middel van een t-toets geschieden, daar een schatting van de variantie van v te berekenen is, uit het verschil tussen de duplowaarnemingen.

De volgende situaties kunnen zich voordoen:

1. de lineaire effecten zijn groot t.o.v. de interacties. In dit geval kan een methode van steilste weg worden toegepast. Om een punt (te bepalen door enkele oriënterende experimenten) op deze weg kan dan de eerste fase van het onderzoek herhaald worden.
2. de lineaire effecten zijn van dezelfde orde van grootte als, of kleiner dan de interacties. In dit geval zullen alle coëfficiënten in het quadratisch model (6) geschat dienen te worden, waartoe een proef met een groter aantal experimenten verricht zal moeten worden.

Tot hier is slechts gesproken over het maximaliseren van de opbrengst. Evenwel dient ook de reinigingsfactor in het onderzoek betrokken te worden. Dit kan geschieden, door op dezelfde wijze, als in de vorige paragraaf besproken is, een oppervlak aan te passen aan de waarnemingsresultaten van de reinigingsfactor. Geven wij dit oppervlak aan met $\zeta(x_1, \ldots x_8)$, dan geschiedt het bepalen van het optimum voor de opbrengst onder de beperking dat $\zeta(x_1, \ldots x_8)$ de vastgestelde waarden R^* heeft. In het geval dat φ en ζ tweede graads oppervlakken zijn, kan dit zeer eenvoudig geschieden door gebruik te maken van een Lagrange-multiplicator.

<u>Literatuur</u>

1 BOX, G.E.P: The exploration and exploitation of response surfaces, Biometrics 1954, <u>10</u>, 16-61

2 BOX, G.E.P. and K.B. WILSON: On the experimental attainment of optimum conditions. Journ. Roy. Stat. Soc. 1951, <u>B13</u>, 1-45.

3 DAVIES, O.L. et al. Design and Analysis of experiments, Oliver and Boyd, Edinburgh, 1953.

4 COCHRAN, W.G. and G.M. COX: Experimental Designs. Wiley, New York, 1950.

5 FRIEDMAN, M. and L.J. SAVAGE: Planning Experiments seeking maxima. Hoofdstuk 13 van EISENHART, HASTAY and WALLIS: Techniques of Statistical Analysis, Mc Graw Hill, New York, 1947.

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]

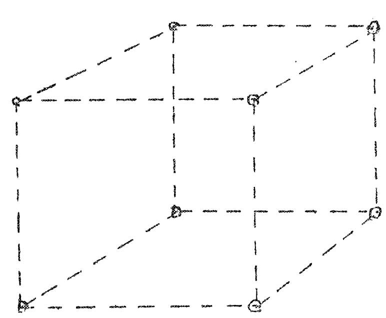
0. Inleiding

Door het uitvoeren van experimenten volgens een factoriëel 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 factoriëel 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 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



Figuur 1: een 2^3 factoriëel schema.

---

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

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

1. Het mathematisch model

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 $i = 1,2,3$

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

---

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 <u>hoofdeffecten</u>. Daar evenwel de effecten van twee factoren veelal niet onafhankelijk zijn, moet men teneinde de hoofdeffecten te kunnen optellen, hierbij een correctiefactor invoeren, de <u>interacties</u>. 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

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

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):

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

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

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

$$= 8\mu_1$$

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:

$$X = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccccc} (E) & (1) & (2) & (3) & (12) & (13) & (23) & (123) \end{array} \\ \left[\begin{array}{cccccccc} +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 & +1 & -1 \end{array}\right] \end{array} \qquad (2.3$$

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

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

Is voorts de vector der waarnemingsresultaten:

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

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 leidttot <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'.

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

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:

$$\left.\begin{aligned} x_{2u} x_{3u} x_{4u} &= x_{1u} . \\ \text{Op gelijke wijze vindt men:} & \\ x_{1u} x_{2u} x_{3u} &= x_{4u} \\ x_{1u} x_{2u} x_{4u} &= x_{3u} \\ \text{en} \qquad x_{1u} x_{3u} x_{4u} &= x_{2u} . \end{aligned}\right\} \qquad (3.4)$$

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

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

en

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

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:

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

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} 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. 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.