

Qui hoạch yếu tố 2 mức độ

Chương 4

- Khái niệm chung
- Qui hoạch yếu tố toàn phần
- Qui hoạch yếu tố phần
- Tối ưu hóa bằng phương pháp leo dốc đứng

4.1. Khái niệm chung

Mô hình thực nghiệm.

- Nhằm mục đích dùng phương pháp toán học tiên đoán điểm tối ưu của thực nghiệm.
- Các biến ngẫu nhiên thường có mối quan hệ theo cách khi thay đổi biến này kéo theo sự thay đổi phân bố của biến kia.
- Sự thay đổi của biến ngẫu nhiên Y khi thay đổi biến ngẫu nhiên X thường chứa 2 thành phần: thành phần phụ thuộc và thành phần ngẫu nhiên.

- Nếu không có thành phần ngẫu nhiên, quan hệ giữa Y và X sẽ được thể hiện qua một hàm tương quan.
- Nếu cả hai thành phần cùng hiện diện thì quan hệ giữa chúng là quan hệ gần đúng.
- Có nhiều chỉ số dùng để biểu diễn quan hệ phụ thuộc. Trong đó **hệ số tương quan** quan trọng hơn cả.
- Hệ số quan hệ được định nghĩa

$$r = E[(X - \mu_x)(Y - \mu_y)] / \sigma_x \sigma_y$$

Nếu X và Y không có quan hệ thì $r = 0$

Trường hợp chung $-1 < r < +1$

- Mỗi quan hệ giữa hai biến ngẫu nhiên được xác định bởi một hàm phân bố có điều kiện. Tuy nhiên hàm này khó sử dụng. Người ta thường sử dụng giá trị trung bình μ_c và biến lượng σ_c^2 . Trong mỗi quan hệ với x thì mỗi quan hệ giữa μ_c và x thường sử dụng hơn và được gọi là *hồi qui* của μ_c theo x .
- Trong thực nghiệm chúng ta thường tìm phương trình hồi qui gần đúng; đánh giá mức độ và độ không chắc chắn của phương trình. Bài toán này đưa về tìm phương trình hồi qui và đánh giá sai số thường được gọi là “Phân tích hồi qui và tương quan”

Phân tích hồi qui ở dạng ma trận

Xem mô hình qui hoạch có dạng

$$y = b_0x_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + \dots + b_kx_k$$

dưới dạng ma trận có thể viết

$$Y = XB$$

Giải phương trình tìm B

$$B = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

$(X^T X)^{-1}$ là ma trận đảo của ma trận $(X^T X)$

Trường hợp ma trận qui hoạch là ma trận trực giao thì các ma trận $(X^T X)$ và $(X^T X)^{-1}$ là ma trận chéo. Khi đó giá trị các thành phần của ma trận đảo là nghịch đảo giá trị thành phần tương ứng của ma trận thuận

$$\begin{array}{c}
 Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ y_n \end{bmatrix} \\
 \\
 X = \begin{bmatrix} x_{01} & x_{02} & \cdot & \cdot & x_{0k} \\ x_{11} & x_{12} & \cdot & \cdot & x_{1k} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdot & \cdot & x_{nk} \end{bmatrix} \\
 \\
 X^T = \begin{bmatrix} x_{01} & x_{11} & \cdot & \cdot & x_{n1} \\ x_{02} & x_{12} & \cdot & \cdot & x_{n2} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ x_{0k} & x_{1k} & \cdot & \cdot & x_{nk} \end{bmatrix} \\
 \\
 B = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ b_k \end{bmatrix}
 \end{array}$$

- Ma trận qui hoạch có đặc tính

$$\bullet \sum_1^N x_{ji} x_{iu} = 0 \quad ; \quad u \neq j \quad ; \quad u = j = \overline{0, k}$$

$$\bullet \sum_1^N x_{ji} = 0 \quad ; \quad \forall j = \overline{1, k}$$

$$\bullet \sum_1^N x_{ji}^2 = N \quad ; \quad \forall j = \overline{0, k}$$

Đặc tính thứ nhất chính là đặc tính trực giao của qui hoạch. Nó cho phép trong xây dựng phương trình hồi qui có thể kiểm nghiệm độc lập riêng từng hệ số của phương trình

Ưu điểm của qui hoạch yếu tố 2 mức độ

- Đây là qui hoạch trực giao nên tính toán đơn giản vì tất cả các hệ số hồi qui không phụ thuộc nhau, nên khi bỏ đi các hệ số hồi qui không có nghĩa thì không phải tính lại các hệ số hồi qui có nghĩa
- Qui hoạch tối ưu D, nghĩa là định thức của ma trận thông tin $X^T X$ có giá trị cực đại N^N . Vì vậy thông tin do qui hoạch đưa ra là lớn nhất và tất cả các hệ số đều tính theo tất cả các thí nghiệm
- Qui hoạch là tâm quay, nghĩa là thông tin ở tâm là nhiều nhất. Lượng thông tin tỉ lệ nghịch với bình phương bán kính; vì vậy chỉ cần làm thí nghiệm lập tại tâm

1.2. Qui hoạch yếu tố toàn phần

- Trong qui hoạch này các yếu tố được kết hợp ở tất cả các mức độ. Số thí nghiệm N

$$N = n^k$$

n: số mức độ

k: số yếu tố

- Trường hợp các yếu tố được khảo sát ở 2 mức độ, số thí nghiệm là:

$$N = 2^k$$

Nếu số yếu tố khảo sát là 3 thì số thí nghiệm là 8

- Bảng qui hoạch toàn phần 2^3

STT	X0	X1	X2	X3	X1X2	X1X3	X2X3	X1X2X3	Đáp ứng y
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	Y1
2	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	Y2
3	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	Y3
4	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	Y4
5	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	Y5
6	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	Y6
7	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	Y7
8	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	Y8

- Phương trình hồi qui

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{14}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3$$

- Tính giá trị các hệ số.

$$b_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{ji} y_i$$

$$b_{ju} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{ji} x_{ui} y_i$$

- Kiểm định tính ý nghĩa của các hệ số của phương trình hồi qui

Vì tính chất trực giao của ma trận qui hoạch, độ lệch chuẩn của hệ số b_j – $s_{b_j} = s_e / \sqrt{N}$

tính ý nghĩa của hệ số b_j được kiểm nghiệm theo tiêu chuẩn student t

$$t_{stat} = |b_j| / s_{b_j}$$

- Tính tương thích của phương trình hồi qui được kiểm định theo tiêu chuẩn Fisher F

$$S_{res}^2 = \frac{\sum (y_i - \hat{y}_i)^2}{N - l}$$

l: số hệ số có ý nghĩa

- Trường hợp có thí nghiệm lặp lại và số thí nghiệm lặp lại của từng thí nghiệm là m thì biến lượng sai số được tính từ biến lượng của từng thí nghiệm, có độ tự do là $N(m-1)$

$$S_e^2 = \frac{1}{N} \sum_1^N S_i^2$$

và biến lượng của các hệ số b_j là

$$S_{b_j}^2 = S_e^2 / Nm$$

4.3. Qui hoạch yếu tố phần

- Hoạch định yếu tố phần là hoạch định cho phép khảo sát nhiều yếu tố hơn với cùng số thí nghiệm như hoạch định toàn phần.
- Để xây dựng qui hoạch yếu tố phần cần xác định các “Quan hệ xác định” hoặc “tương phản xác định”.
“*Quan hệ xác định*” biểu diễn mối quan hệ định trước khi xây dựng qui hoạch
“*Tương phản xác định*” là dạng của “quan hệ xác định” với vế bên trái của biểu thức là I.
- Số tương phản xác định của qui hoạch 2^{k-p} là $2^p - 1$

- Việc xác định “quan hệ xác định” cần chú ý để các yếu tố hoặc tương tác cần xác định không bị trùng lặp với các tương tác khác.
- Qui hoạch yếu tố phần có thể là $1/2, 1/4, 1/8$.
- Số thực nghiệm N trong qui hoạch yếu tố phần nên thỏa bất đẳng thức

$$k + 1 \leq N < 2^k$$

- Qui hoạch yếu tố toàn phần sẽ là tập hợp đầy đủ các qui hoạch yếu tố phần của chúng, nghĩa là qui hoạch yếu tố toàn phần sẽ gồm 2 qui hoạch yếu tố bán phần hoặc 4 qui hoạch yếu tố $1/4$...

Xem qui hoạch yếu tố toàn phần 2^3 .

STT	X0	X1	X2	X3	X1X2	X1X3	X2X3	X1X2X3	Đáp ứng y
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	Y1
2	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	Y2
3	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	Y3
4	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	Y4
5	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	Y5
6	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	Y6
7	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	Y7
8	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	Y8

- Qui hoạch này có thể chia thành 2 qui hoạch bán phần

STT	X0	X1	X2	X3	Đáp ứng Y
1	+1	+1	+1	+1	Y1
2	+1	+1	-1	-1	Y4
3	+1	-1	+1	-1	Y6
4	+1	-1	-1	+1	Y7

STT	X0	X1	X2	X3	Đáp ứng Y
1	+1	+1	+1	-1	Y2
2	+1	+1	-1	+1	Y3
3	+1	-1	+1	+1	Y5
4	+1	-1	-1	-1	Y8

- Trong qui hoạch thứ nhất ta có $x_3 = x_1x_2$
Trong qui hoạch thứ hai ta có $x_3 = -x_1x_2$
- Biểu thức $x_3 = x_1x_2$ được gọi là “quan hệ xác định” Khi nhân 2 vế với x_3 ta có

$$1 = x_1x_2x_3$$

Biểu thức trên được gọi là “tương phản xác định”. Như vậy tương phản xác định sẽ là cơ sở để hoạch định.

$$x_1 = x_1^2x_2x_3 = x_2x_3$$

$$x_2 = x_1x_2^2x_3 = x_1x_3$$

$$x_3 = x_1x_2x_3^2 = x_1x_2$$

- Như vậy với hoạch định yếu tố 2^{3-1} các tương tác sẽ lẫn với các yếu tố, nghĩa là ta không biết hiệu ứng là do tương tác hay yếu tố. Chỉ áp dụng được khi biết chắc chắn tương tác là không đáng kể
- Độ phân giải của một qui hoạch yếu tố phần là một đại lượng nói lên mức độ “trùng lẫn” giữa các yếu tố khảo sát. Khi số yếu tố khảo sát không đổi thì độ phân giải càng cao thì mức độ trùng lẫn càng ít đi

- Độ phân giải V hay cao hơn: an toàn khi sử dụng (đánh giá tổ yếu tố chính và tương tác bậc 1)
- Độ phân giải IV: cần cân nhắc khi tiến hành thực nghiệm (đánh giá tổ yếu tố chính, tương tác bậc 1 lẫn với nhau khó đánh giá)
- Độ phân giải III: Cần cân nhắc thật kỹ (yếu tố chính lẫn với tương tác bậc 1)

Tuy nhiên độ phân giải càng cao thì càng phải thực hiện nhiều thực nghiệm, tốn thời gian và chi phí

- Chọn lựa qui hoạch yếu tố phần

Số yếu tố	2	3	4	5	6	7	8
Số TN							
4	Full	1/2(III)	-	-	-	-	-
8	2 repl	Full	1/2(IV)	1/4(III)	1/8(III)	1/16(III)	-
16	4 repl	2 repl	Full	1/2(V)	1/4(IV)	1/8(IV)	1/16(IV)
32	8 repl	4 repl	2 repl	Full	1/2(VI)	1/4(IV)	1/8(IV)
64	16 repl	8 repl	4 repl	2 repl	Full	1/2(VII)	1/4(V)
128	32 repl	16 repl	8 repl	4 repl	2 repl	Full	1/2(VIII)

- Phương thức thực hiện các bước tiết theo hoạch định yếu tố phần

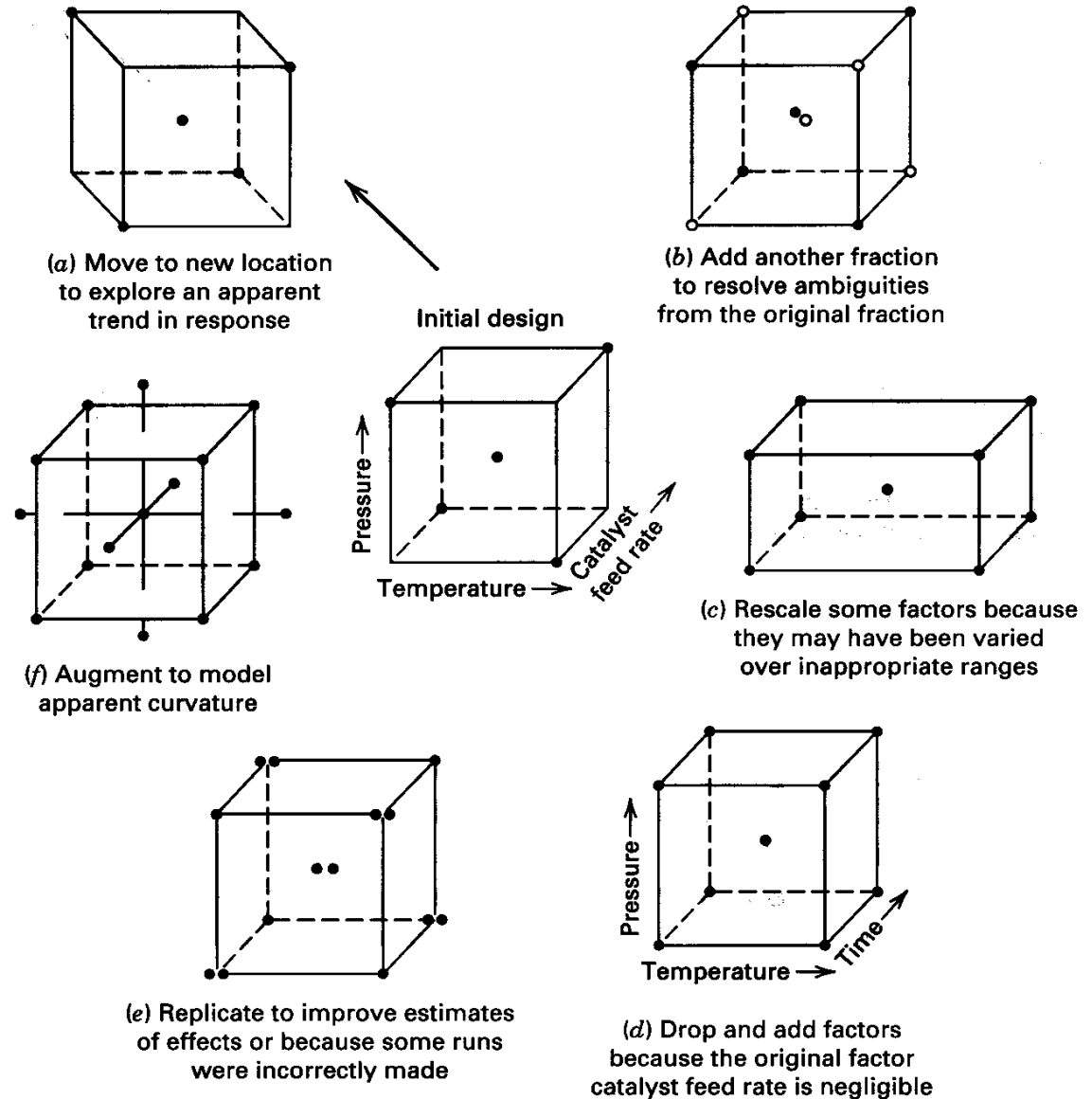


Figure 8-11 Possibilities for follow-up experimentation after a fractional factorial experiment (adapted from Box (1992–1993), with permission of the publisher).

Xem qui hoạch yếu tố phân 2^{4-1}

- Chọn tương phản xác định là $1 = x_1x_2x_3x_4$

Ta có:

$$x_1 = x_2x_3x_4 \quad ; \quad x_2 = x_1x_3x_4 \quad ; \quad x_3 = x_1x_2x_4$$

$$x_4 = x_1x_2x_3$$

$$x_1x_2 = x_3x_4 \quad ; \quad x_1x_3 = x_2x_4 \quad ; \quad x_1x_4 = x_2x_3$$

Các tương tác bậc cao thường không đáng kể. Do đó ta có thể đánh giá được các yếu tố chính, nhưng các tương tác thì lẫn với nhau nên khó xác định ảnh hưởng của tương tác.

- Chọn tương phản bất kỳ $1 = x_2x_3x_4$

Ta có

$$x_1 = x_1x_2x_3x_4 \quad ; \quad x_2 = x_3x_4 \quad ; \quad x_3 = x_2x_4 \quad ; \quad x_4 = x_2x_3$$

$$x_1x_2 = x_1x_3x_4 \quad ; \quad x_1x_3 = x_1x_2x_4 \quad ; \quad x_1x_4 = x_1x_2x_3$$

Với việc chọn tương phản xác định này thì ta có thể đánh giá các tương tác x_1x_2 ; x_1x_3 ; x_1x_4 . Tuy nhiên các yếu tố chính lại lẫn với các tương tác bậc 1, do đó có thể đưa đến kết luận sai

Xem qui hoạch 1/4 của qui hoạch 5 yếu tố: 2^{5-2}

- Để xây dựng qui hoạch 1/4 ta cần thêm 1 tương phản xác định thứ hai, tức phải có 2 tương phản xác định.

Thí dụ: $1 = x_1x_2x_3x_4 = x_1x_2x_5 = x_3x_4x_5$

Ta có: $x_1 = x_2x_3x_4 = x_2x_5 = x_1x_3x_4x_5$

$$x_2 = x_1x_3x_4 = x_1x_5 = x_2x_3x_4x_5$$

$$x_3 = x_1x_2x_4 = x_1x_2x_3x_5 = x_4x_5$$

$$x_4 = x_1x_2x_3 = x_1x_2x_4x_5 = x_3x_5$$

$$x_5 = x_1x_2x_3x_4x_5 = x_1x_2 = x_3x_4$$

$$x_1x_3 = x_2x_4 = x_2x_3x_5 = x_1x_4x_5$$

$$x_1x_4 = x_2x_3 = x_2x_4x_5 = x_1x_3x_5$$

4.4. Phương pháp leo dốc đứng

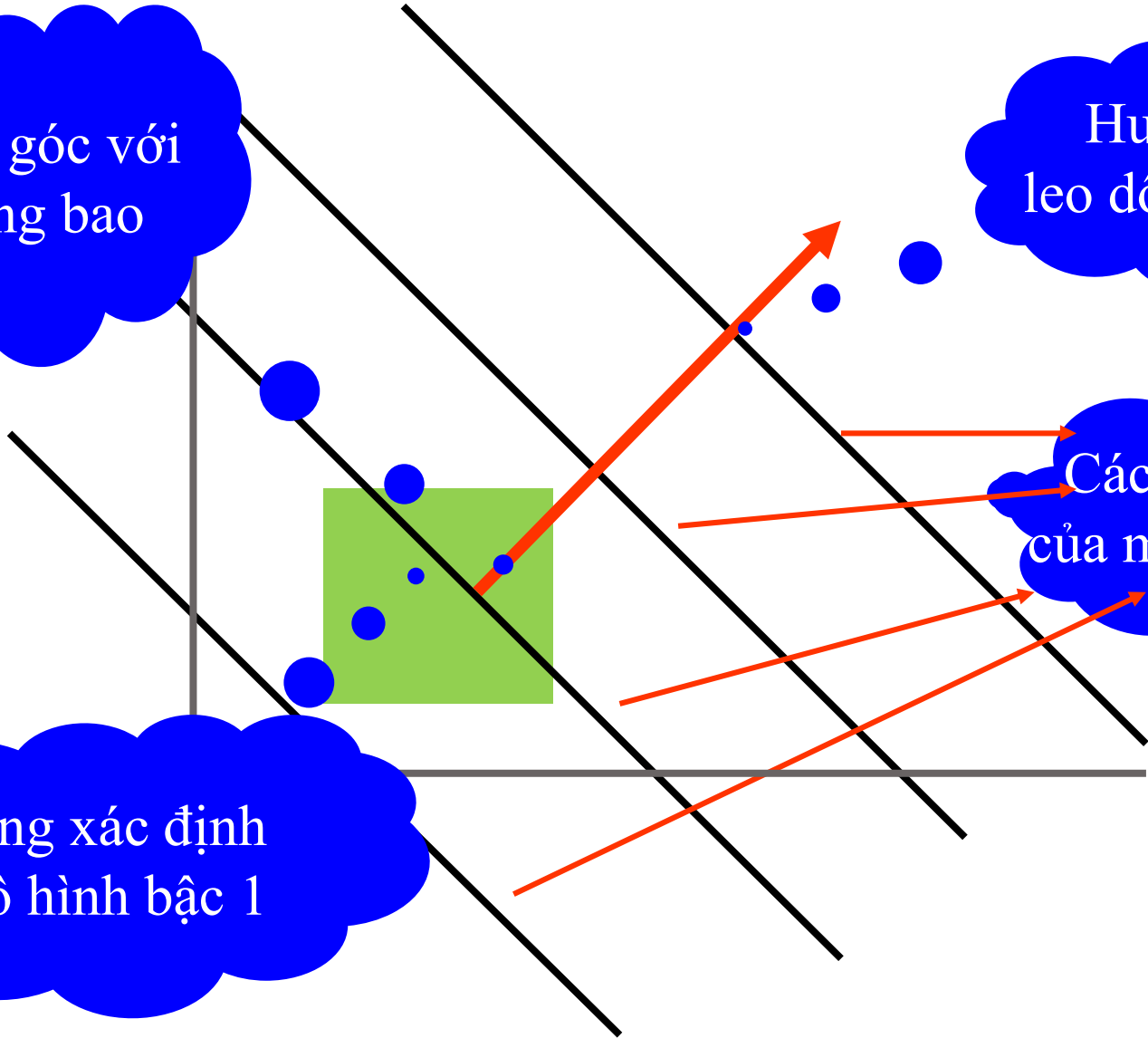
- Leo dốc đứng là phương pháp tìm điểm tối ưu của đáp ứng bằng cách tiến hành thí nghiệm theo phương thẳng góc với đường bao của mặt đáp ứng.
- Đây là hướng ngắn nhất để tới điểm tối ưu
- Khi đạt cực đại cục bộ đôi khi cần hoạch định yếu tố lại để xác định hướng leo dốc tiếp theo
- Khi gần vùng cực trị thì mô hình tuyến tính không phù hợp, phải dùng mô hình bậc hai

Thẳng góc với đường bao

Hướng leo dốc đứng

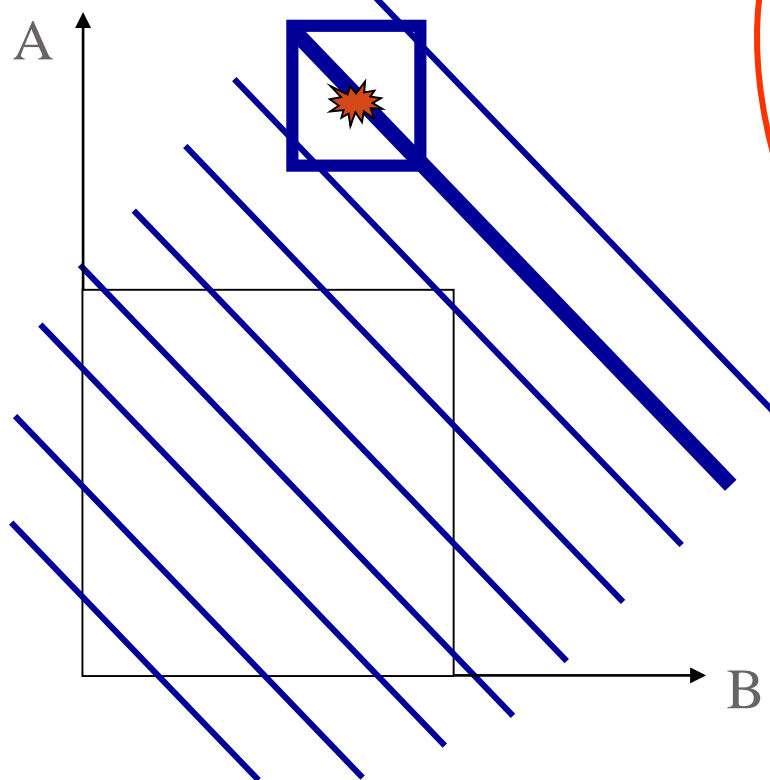
Các đường bao của mô hình bậc 1

Vùng xác định mô hình bậc 1

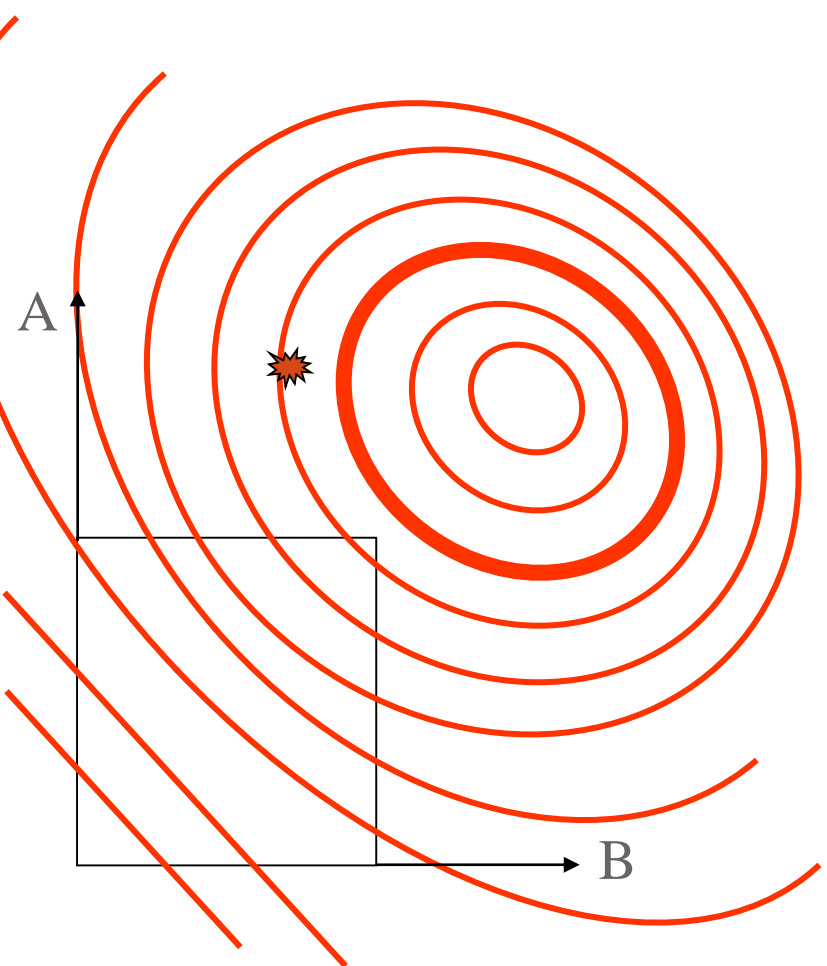


Đáp ứng

Điều kiện tối ưu chọn được

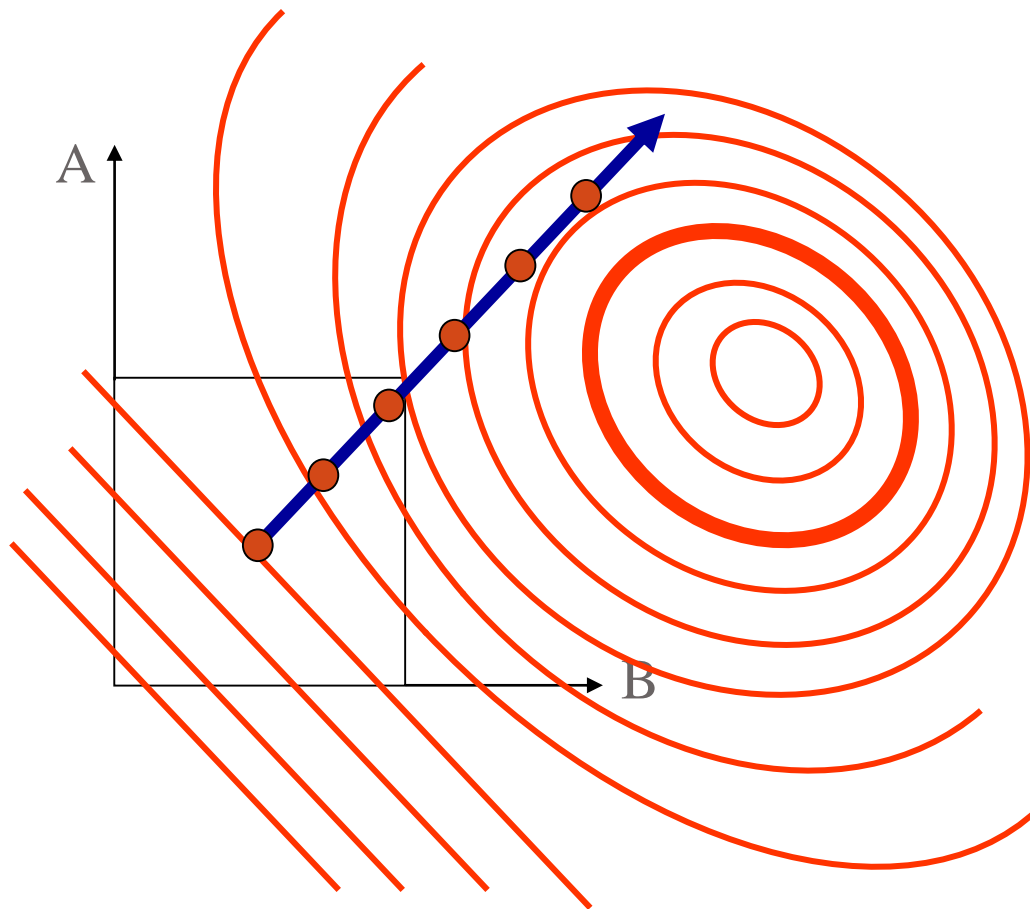


Mô hình giả định

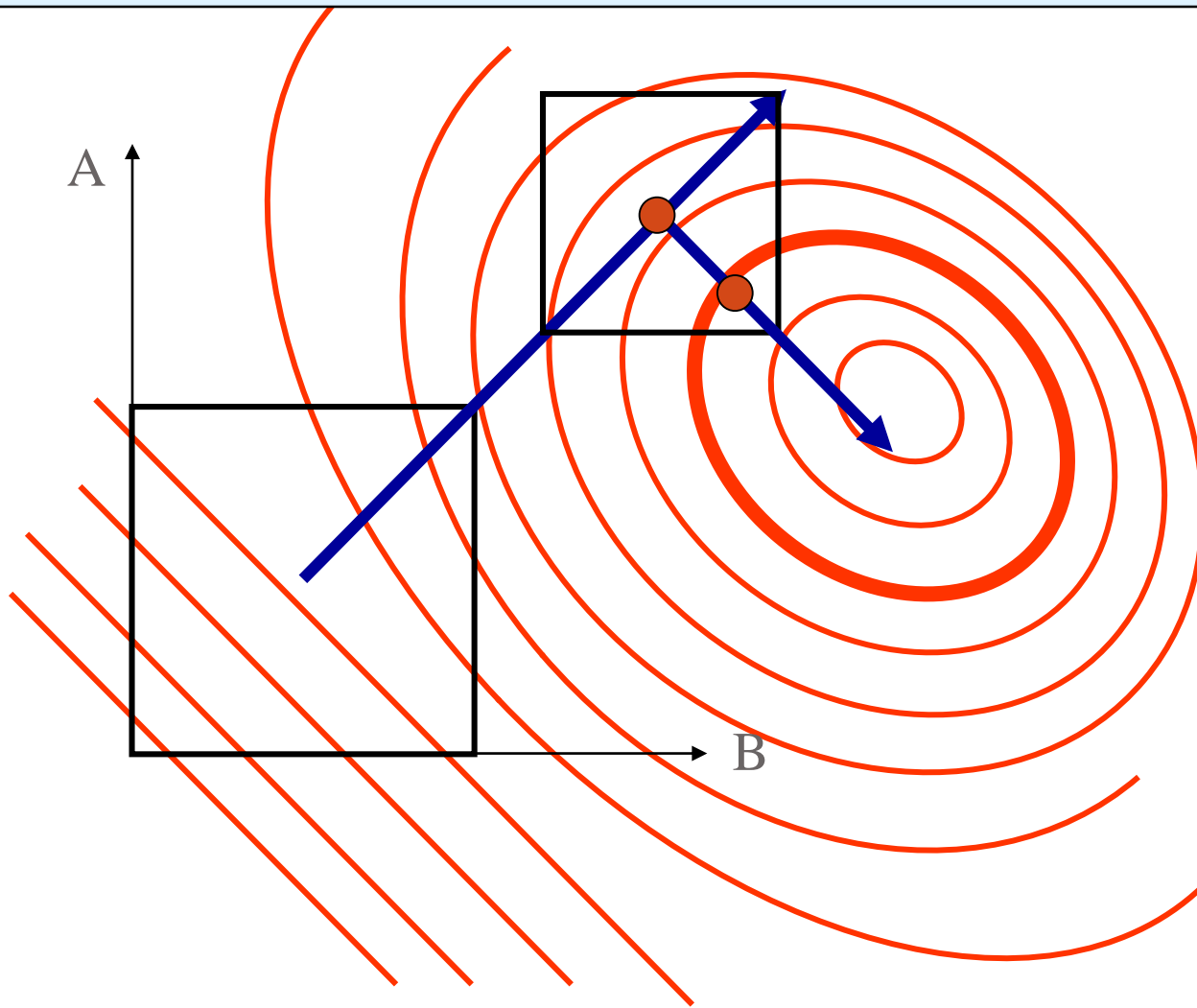


Mô hình thực tế

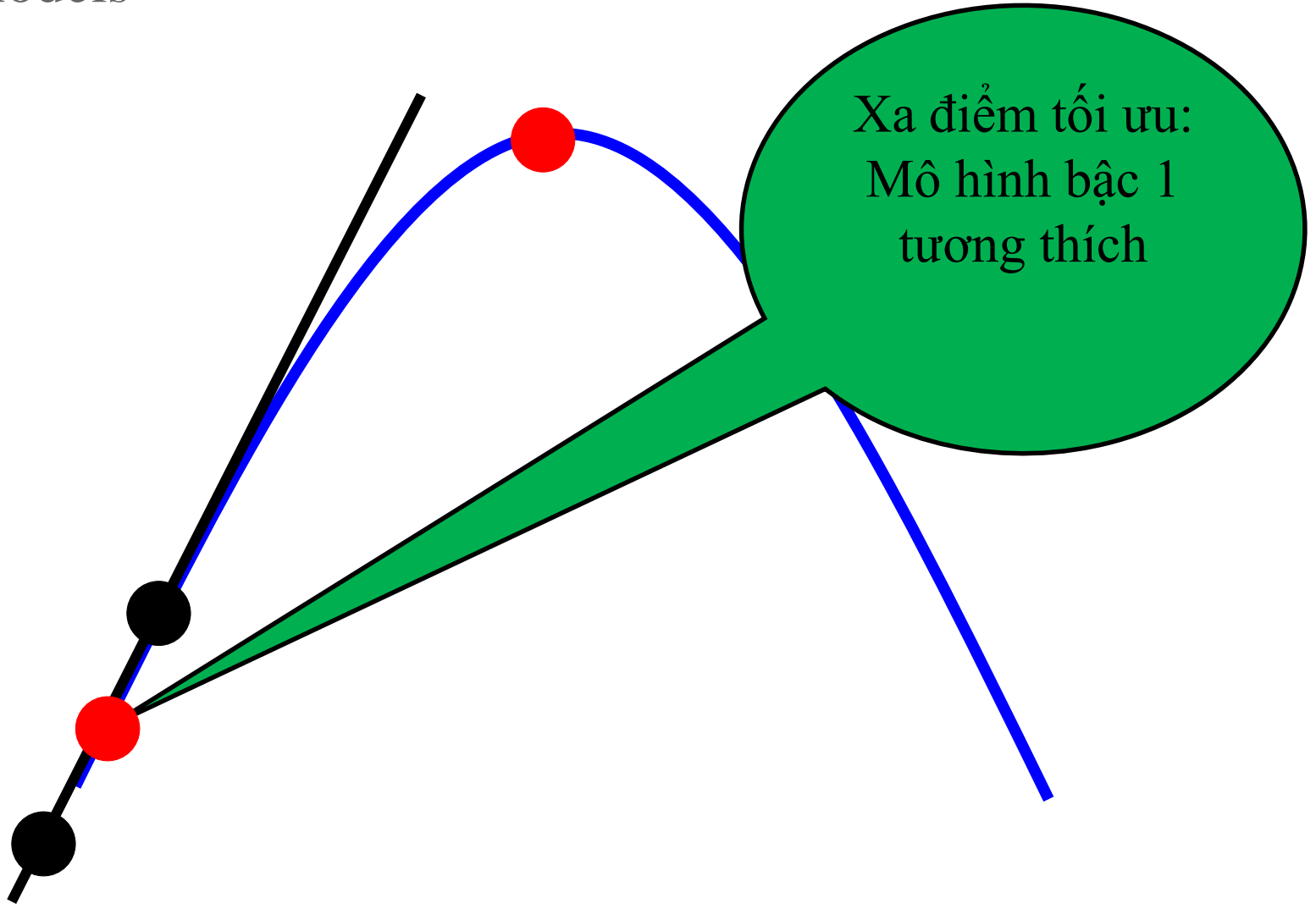
**Quá trình sẽ tiến hành từng các bước theo lộ trình này.
Đáp ứng Y sẽ được đo lường và so sánh với giá trị mục tiêu.**

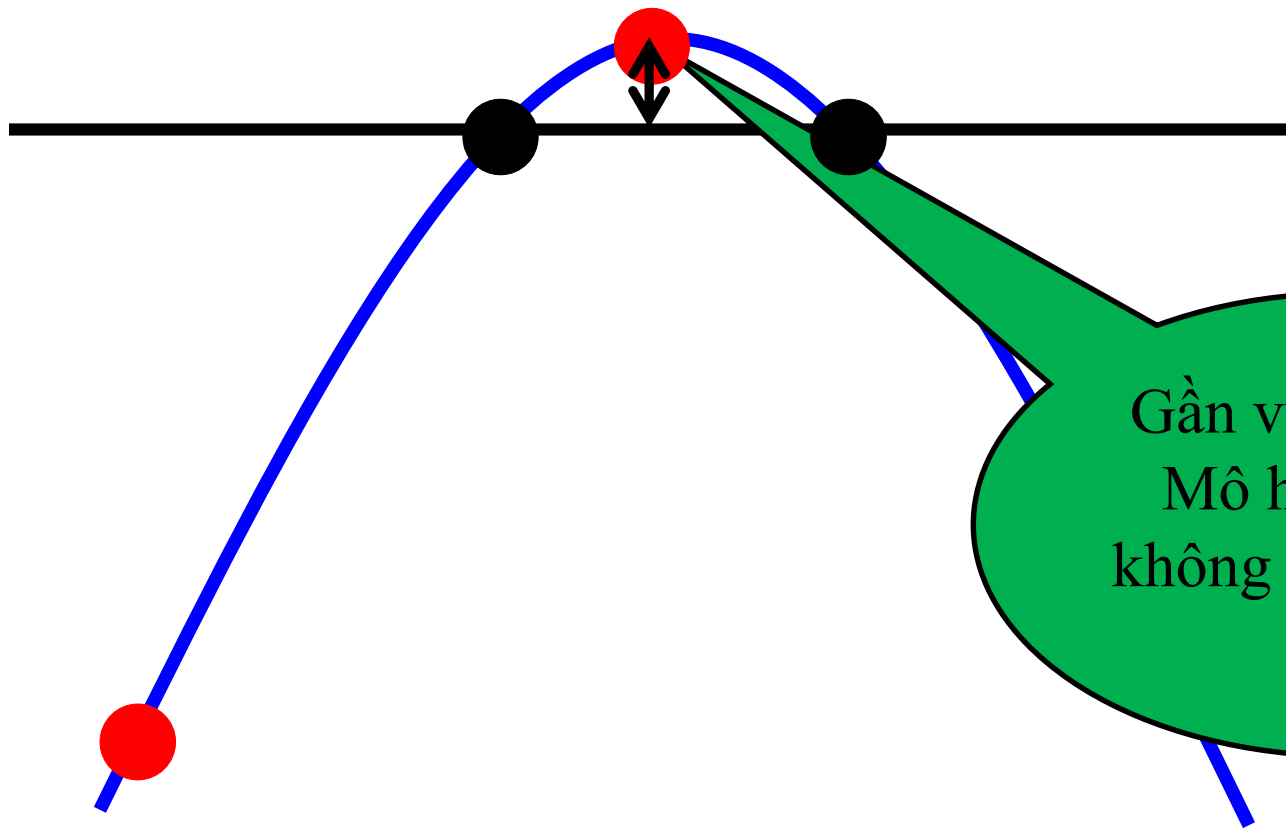


Một số trường hợp khi đạt đến cực đại cục bộ để có được điểm tối ưu cần tiến hành hoạch định yếu tố khác để xác định hướng leo dốc tiếp theo

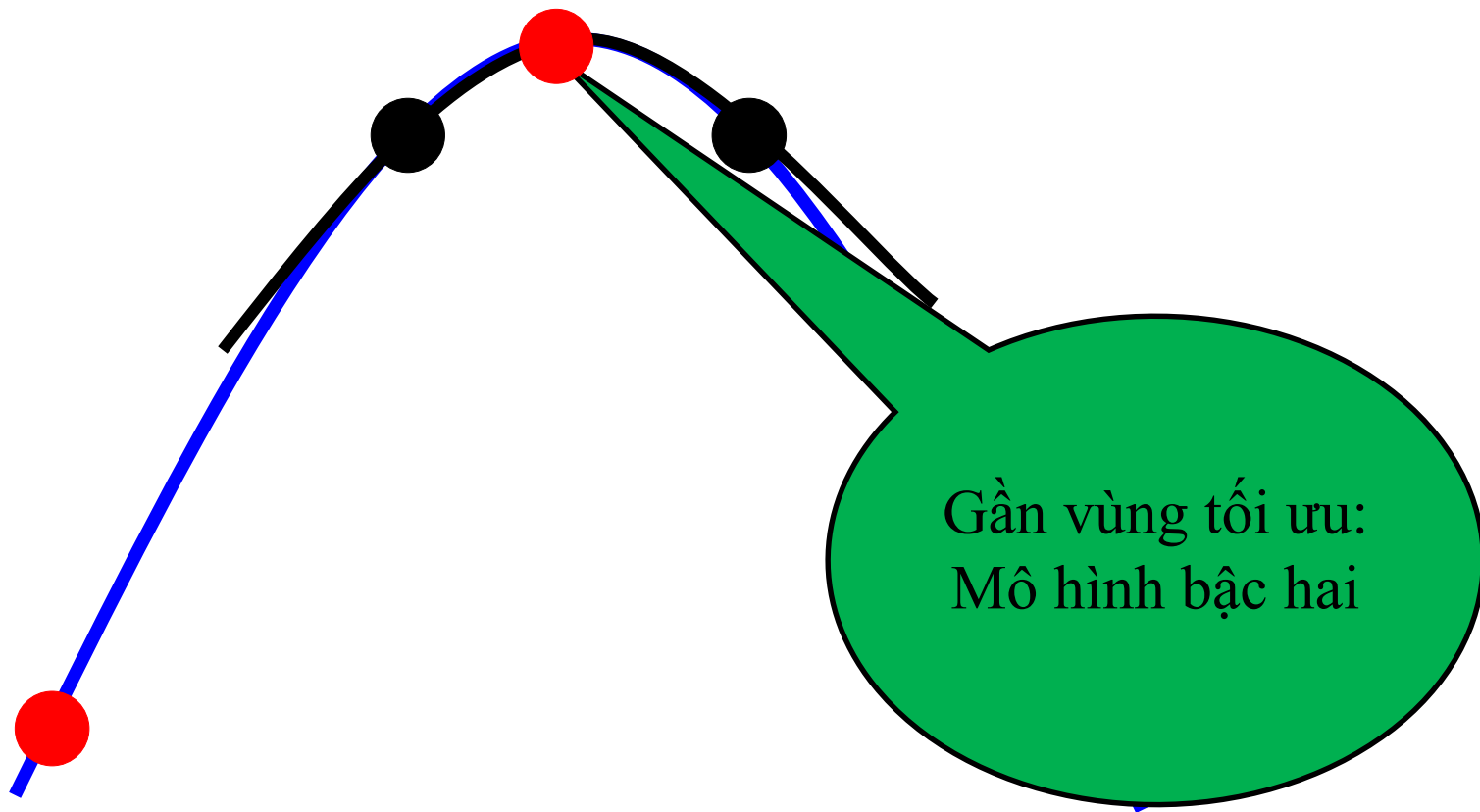


Models





Gần vùng tối ưu:
Mô hình bậc 1
không tương thích



Các bước tiến hành

- Bước 1. Xác định hệ số của phương trình hồi qui từ hoạch định yếu tố

$$Y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3$$

- Bước 2. Chọn yếu tố chính
 - Có hệ số lớn nhất (nên chọn)
 - Khó thay đổi nhất
 - Các mức rời rạc
- Bước 3. Xác định độ lớn của bước leo dốc mà ta sẽ thực hiện trên yếu tố chính

- Bước 4. Tính các bước leo dốc của các yếu tố còn lại
- Bước 5. Lập bảng biểu diễn lộ trình leo dốc. Tiến hành thực nghiệm theo lộ trình này đến khi đạt được đáp ứng tối ưu hay đạt được tối ưu cục bộ.
- Bước 6. Nếu cần thiết tiến hành hoạch định mới tại điểm tối ưu cục bộ và thực hiện leo dốc đứng từ bước 1 đến bước 5.

Example of Projection Vector Method

Step 1:

Obtain the coefficients for the prediction equation from a factorial DOE

Term	Effect	Coef	Coef	StDev T	P
Constant		52.354	0.3013	173.79	0.000
B	3.187	1.594	0.3013	5.29	0.006
C	-5.367	-2.684	0.3013	-8.91	0.001
B*C	0.412	0.206	0.3013	0.68	0.531

$$\hat{Y} = 52.35 + 1.59*B - 2.68*C + error \quad (\text{in coded units})$$

The above example equation was obtained from your last DOE and we want to remember our practical problem of increasing Y.

Step 2:

Select the base factor

In this case let's select C as the primary variable:

- 3 reasons for selecting the primary variable.
 - Largest coefficient (This is recommended)
 - Most difficult to adjust
 - Discrete levels

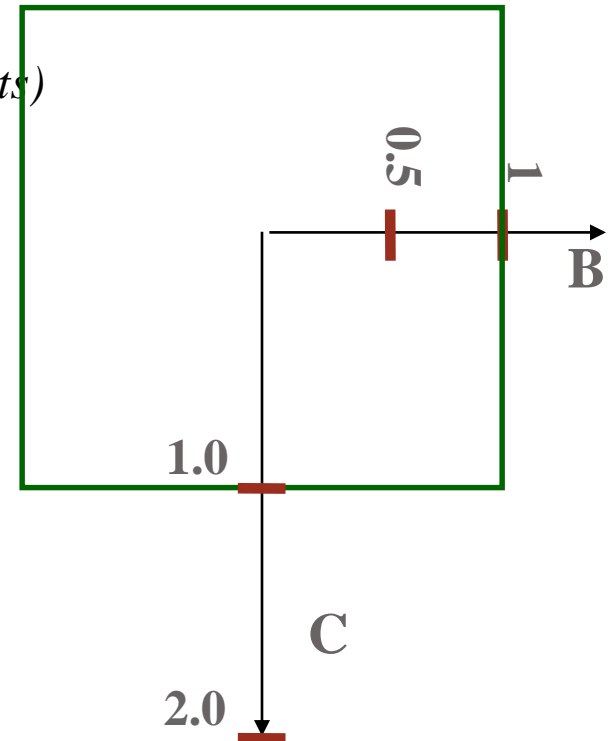
Choosing Step Size

Step 3:

Determine the step size for the base factor

We choose to move in the C direction in steps of 1.0 coded units and start at the center of the original DOE design. Remember we want to increase our output, Y, so we must reduce C. Look at our equation and see the negative coefficient for factor C.

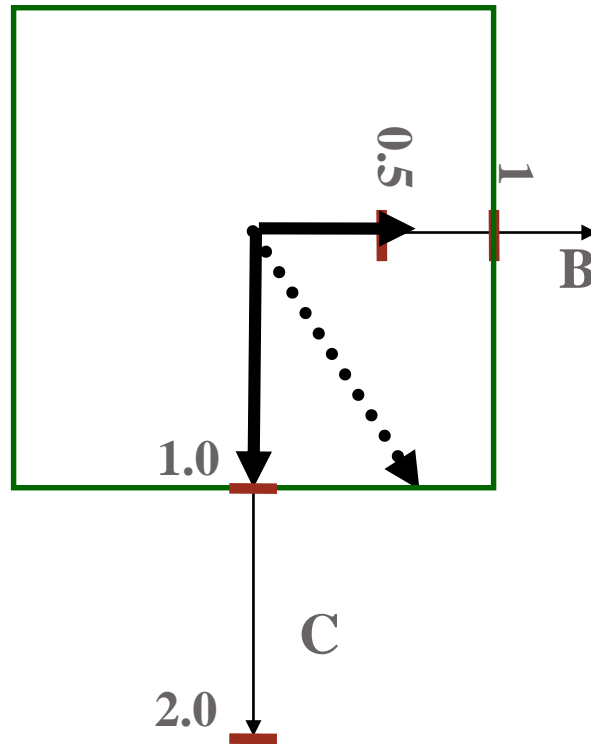
$$\hat{Y} = 52.35 + 1.59*B - 2.68*C + \text{error (in coded units)}$$



Other Factor Step Size

Step 4: Determine the step size for the other factors

- Use the ratio of the coefficients to determine the step size in the direction of the other factors

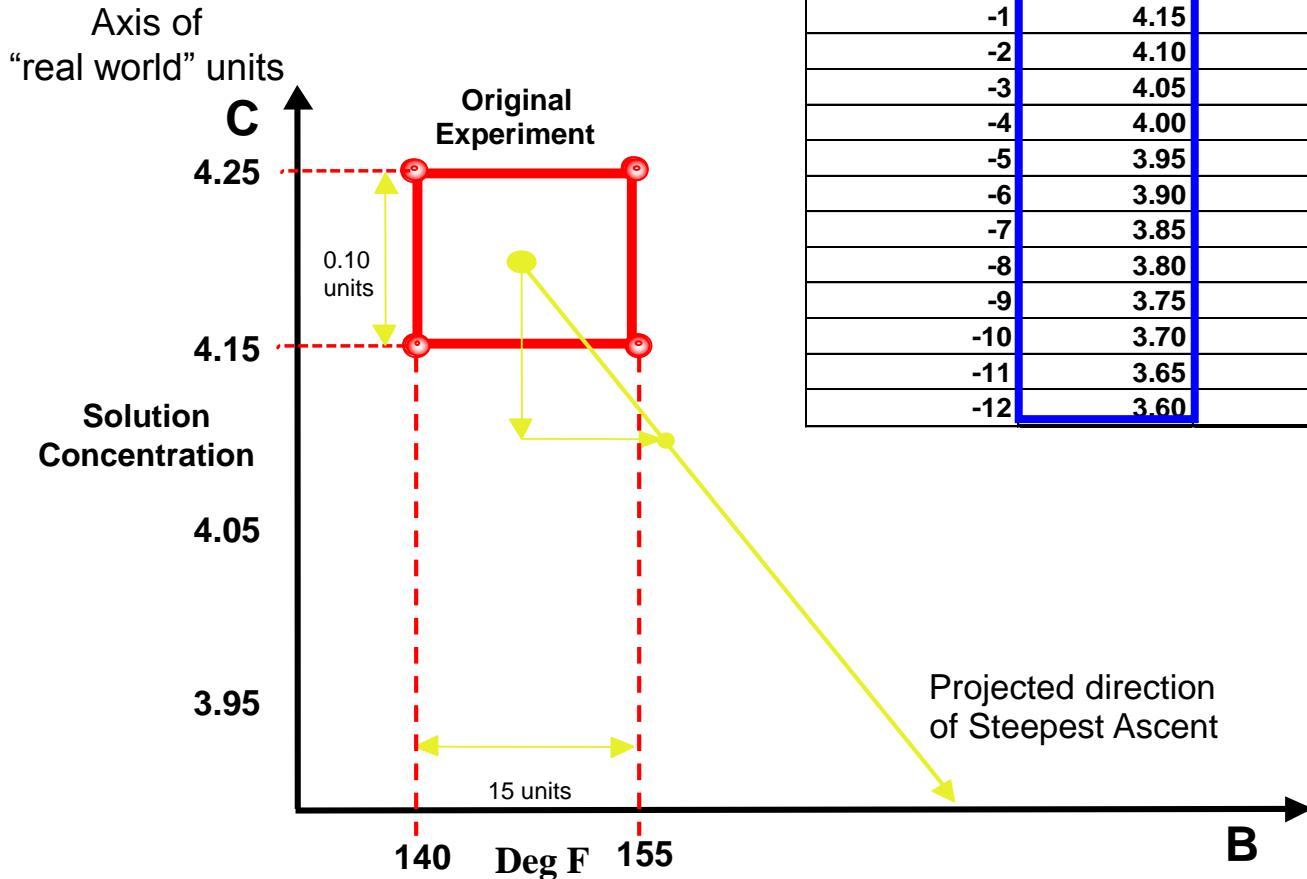


$$\begin{aligned} \text{Step}_B &= \frac{\text{Coeff}_B}{\text{Coeff}_C} * \text{Step}_C \\ &= \frac{1.59}{-2.68} * -1.0 \\ &= 0.59 \end{aligned}$$

Step 5:
Move along the path and run
the process at each step

Use file
Ascent.mtw

Coding Increment	1	Unit		
Base Factor - C		B		
Coding Unit	0.05	Coding Unit	7.5	
Coefficient	-2.684	Coefficient	1.594	
Coded	Uncoded	Coded	Uncoded	Trial
				Results
0	4.20	0.0	147.5	56.1
-1	4.15	0.6	152.0	62.8
-2	4.10	1.2	156.4	69.0
-3	4.05	1.8	160.9	73.7
-4	4.00	2.4	165.3	77.4
-5	3.95	3.0	169.8	80.6
-6	3.90	3.6	174.2	82.1
-7	3.85	4.2	178.7	82.7
-8	3.80	4.8	183.1	82.5
-9	3.75	5.3	187.6	80.9
-10	3.70	5.9	192.0	78.6
-11	3.65	6.5	196.5	74.3
-12	3.60	7.1	201.0	69.7



It is easy to work with
coded units but we must
know what
settings to put our
process.

Step 5:
Move along the path and run the process at each step

Coding Increment	1	Unit			
Base Factor - C		B			
Coding Unit	0.05	Coding Unit	7.5		
Coefficient	-2.684	Coefficient	1.594		
				Trial	
Coded	Uncoded	Coded	Uncoded	Results	
0	4.20	0.0	147.5	56.1	
-1	4.15	0.6	152.0	62.8	
-2	4.10	1.2	156.4	69.0	
-3	4.05	1.8	160.9	73.7	
-4	4.00	2.4	165.3	77.4	
-5	3.95	3.0	169.8	80.6	
-6	3.90	3.6	174.2	82.1	
-7	3.85	4.2	178.7	82.7	
-8	3.80	4.8	183.1	82.5	
-9	3.75	5.3	187.6	80.9	
-10	3.70	5.9	192.0	78.6	
-11	3.65	6.5	196.5	74.3	
-12	3.60	7.1	201.0	69.7	

As Factor C is decreased and Factor B is increased, we notice Y increases until reaching a maximum near 82.5 and then decreases. If we set the operation to run at C=3.85 and B=180 in uncoded units, we should be able to increase the response values to about 82.5.

