

Eric Schoen

TNO Industrie en Techniek
 Signaalverwerking en Statistiek
 Postbus 155
 2600 AD Delft
 eric.schoen@tno.nl

Het versnellen van productontwikkeling

Bedrijven hebben er belang bij om nieuwe producten snel op de markt te brengen. Om die producten de gewenste kwaliteit te geven moet men de invloed van diverse instelbare factoren op de producteigenschappen in kaart brengen. Vaak gebeurt dat door experimenten te doen. Eric Schoen laat in dit artikel zien dat een programma van experimenten opgezet met behulp van een orthogonaal array helpt om in een beperkt aantal experimenten de gewenste informatie te krijgen. Eric Schoen werkt behalve bij TNO ook aan de Faculteit Wiskunde en Informatica van de Technische Universiteit Eindhoven.

Stel dat een bedrijf een nieuw voedingsproduct op de markt wil zetten. Dat product zal aan een reeks van eisen moeten voldoen. Zo moet de smaak van het product bevredigend zijn en moet het product technologisch verwerkt kunnen worden. Om aan de gestelde eisen te beantwoorden proberen de ontwikkelaars van het product een optimale combinatie van ingrediënten te vinden. Vaak kan men op grond van voorkennis al een aantal keuzes maken. Dat is zeker het geval als er een één-op-één relatie is tussen ingrediënt en eigenschap. Als het product bij voorbeeld geel moet zijn, dan kan men dat bereiken door een gele kleurstof toe te voegen. Maar als de effecten van instelbare variabelen (zoals de kleurstof) op producteigenschappen (zoals kleur of smaak) lastig te voorspellen zijn, dan moet men die effecten achterhalen door een aantal varianten van het product te maken en hun eigenschappen te bepalen. Uiteraard wil men in een bedrijf zo min mogelijk varianten testen en toch een goede indruk van de effecten krijgen. Experimenteren kost immers tijd en geld. Gelukkig is er wiskundige theorie voor handen die de productontwikkelaar helpt om een efficiënt programma van experimenten te formuleren. Deze theorie is verenigd onder de noemer *experimental design*, in het Nederlands ook wel *proefopzetten* genaamd.

Proefopzetten

In het empirisch onderzoek dat ik in de inleiding schetste wil men van

instelbare variabelen $X_1, \dots, X_n$ te weten komen of en, zo ja, hoe ze een meetbare responsvariabele y beïnvloeden. Laten we voor het doel van de proef per X_i een beperkte set van instellingen kiezen die we coderen met $x_i \in \{1, \dots, s_i\}$. Om de mogelijke invloed van de factoren te kwantificeren gebruiken we een *variantieanalysemodel* dat er als volgt uitziet:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^n \sum_{p=1}^{s_i} \beta_i^{(p)} + \sum_{i < j} \sum_{p,q} \beta_{ij}^{(pq)} + \epsilon \quad (1)$$

Hierin modelleert β_0 een gemiddelde waarde en $\beta_i^{(p)}$ het hoofdeffect van factor i . Dit is de afwijking van het gemiddelde die ontstaat als factor i de instelling p aanneemt. Verder modelleert $\beta_{ij}^{(pq)}$ de 2-factorinteractie van de factoren i en j . Dit is de afwijking van de gezamenlijke hoofdeffecten van de factoren i en j als de factoren respectievelijk instellingen p en q aannemen. We kunnen desgewenst ook 3-factor interacties tot en met n -factorinteracties modelleren. Tenslotte geven we met ϵ een stochast weer met verwachting nul. Deze modelleert dat metingen door toevalsfluctuaties kunnen afwijken van de werkelijkheid vervat in de optelsom van de β 's. In een experiment met een concrete set instellingen van $X_1, \dots, X_n$, kan y gemeten worden. Het gaat er nu om uit een aantal van die experimenten de coëfficiënten in model (1) te schatten. Voor een uitgebreide behandeling van variantieanalysemodellen verwijs ik naar [5].

Door zorgvuldig te experimenteren kan men ervoor zorgen dat de N realisaties van de stochast ϵ onderling onafhankelijk zijn. Als we er bovendien vanuit gaan dat ze een identieke verdeling volgen dan kunnen we de methode van de kleinste kwadraten toepassen om de parameters te schatten en zo mogelijk te toetsen of subsets van die parameters gelijk zijn aan 0 (zie [3]).

We zagen al dat hoofdeffecten in het model afwijkingen van een gemiddelde waarde modelleren. Op dezelfde manier zijn 2-factor-

Product	Variabele						
	A	B	C	D	E	F	G
1	0	0	0	1	1	1	0
2	0	0	1	1	0	0	1
3	0	1	0	0	1	0	1
4	0	1	1	0	0	1	0
5	1	0	0	0	0	1	1
6	1	0	1	0	1	0	0
7	1	1	0	1	0	0	0
8	1	1	1	1	1	1	1

Tabel 1 Een orthogonaal array van sterkte 2

interacties afwijkingen van afwijkingen van de gemiddelde waarde. Met interacties van een hogere orde kunnen we deze reeks nog even voortzetten.

Voor het ontwikkelen van producten neemt men gewoonlijk alleen de hoofdeffecten en de 2-factor-interacties mee, zoals dat al in (1) is weergegeven. Dat maakt het leven een stuk simpeler. Als alle effecten tot en met n -factor-interacties een rol zouden spelen, dan zouden we alle combinaties van instelbare factoren uit moeten proberen om die effecten te weten te komen. Als we mogen afkappen vanaf de 3-factor interacties, dan kunnen we met minder combinaties de gewenste informatie boven tafel krijgen. Twee van de vragen die de theorie van de proefopzetten wil beantwoorden zijn: (1) Hoe moet men N vectoren $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})^T$ kiezen om zo goed mogelijk de variabelen die werkelijk invloed hebben te detecteren en (2) Hoe kunnen we de parameters $\beta_{(j)}$ in (1) schatten uit de data?

Orthogonale arrays van verschillende sterkte

Voor detectie van variabelen die werkelijk invloed hebben en voor een eerste kwantificering van hun invloed maakt men veelvuldig gebruik van orthogonale arrays.

Definitie. Een orthogonaal array $OA(N; s_1, \dots, s_n; t)$ is een matrix van N rijen en n kolommen met de volgende eigenschappen.

1. In kolom i staan s_i verschillende symbolen.
2. Voor elke set van t kolommen komen alle mogelijke t -tupels van symbolen even vaak voor.

De parameter t wordt de sterkte van het array genoemd. In de context van een experimental design voor productontwikkeling corresponderen de N rijen van het array met verschillende producten en de n kolommen met de instelvariabelen. Als voorbeeld geef ik in tabel 1 een $OA(8; 2^7; 2)$. Het kan gebruikt worden om de invloed van zeven instelbare variabelen met behulp van acht verschillend producten te onderzoeken. In dit geval worden er per variabele twee instellingen bestudeerd. Het is de bedoeling dat de product-ontwikkelaars alle producten van het schema aanmaken. Daarna kunnen ze door middel van metingen de diverse producteigenschappen bepalen en de effecten tussen deze eigenschappen en de instelvariabelen kwantificeren. De kleinste-kwadraten-methode reduceert in dit geval tot een simpel recept: per variabele trekken we het productgemiddelde over de met 0 gemerkte instellingen af van het gemiddelde over de met 1 gemerkte instellingen. Zo krijgen we een set van zeven gemiddelde effecten of hoofdeffecten. Deze hebben de prettige eigenschap dat ze orthogonaal zijn: het effect van een variabele is automatisch gecorrigeerd

voor de gemiddelde effecten van de overige variabelen. Tegenover de 0-instelling van een variabele vindt men namelijk steeds evenveel 0-instellingen als 1-instellingen van elke andere variabele. Zonder deze eigenschap zou het gemiddelde van een variabele scheefgetrokken kunnen worden door een bijzonder (on)gunstig effect van een andere variabele. Orthogonaliteit van effecten helpt om de interpretatie en de statistische beoordeling van de effecten simpel te houden. Zo zijn er voor deze situatie grafische methoden voor handen die invloedrijke effecten kunnen scheiden van effecten met weinig invloed; zie [2].

Helaas zijn de hoofdeffecten die men met een schema van sterkte 2 kan uitrekenen gevoelig voor onderlinge wisselwerkingen tussen de instelbare variabelen. Stel dat bij een toepassing van het schema uit tabel 1 de combinatie $B = 1$ en $D = 1$ bijzonder (on)gunstig is. Dan zou het gemiddelde van de producten die voor variabele A de eerste instelling krijgen daar last van kunnen hebben, omdat de (on)gunstige combinatie van de variabelen B en D alleen daar voorkomt. In het ergste geval is van een gemiddeld effect van de factor A niets meer te zien.

Nu kan een factor zich ook actief tonen in de vorm van onderlinge wisselwerkingen met andere factoren. Helaas zijn die in schema's van sterkte 2 vaak verstrengeld met hoofdeffecten van weer andere factoren. Verder wordt een speurtocht naar onderlinge wisselwerkingen vaak beperkt tot die tussen factoren met een actief hoofdeffect. Een onzichtbaar hoofdeffect is dus onhandig omdat we dan niet meer op het idee komen dat de desbetreffende factor actief is.

Voor een verantwoorde productontwikkeling willen we in ieder geval de hoofdeffecten éénduidig te weten komen. Verder is het gewenst om ook een paar sterke onderlinge wisselwerkingen te kunnen identificeren — als die er echt zijn. Voor dat doel zijn orthogonale arrays van sterkte 3 bijzonder geëigend. Bij zo'n schema komen immers tegenover elke instelling van een factor alle combinaties van twee andere factoren voor. Hierdoor worden gemiddelde effecten niet meer scheefgetrokken.

Als voorbeeld van een array van sterkte 3 vindt u in tabel 2 een manier om zeven instelbare variabelen te onderzoeken met zestien producten (en twee instellingen per variabele). U merkt al aan dit voor-

Product	Variabele						
	A	B	C	D	E	F	G
1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	1	1	1	0
3	0	0	1	0	1	1	1
4	0	0	1	1	0	0	1
5	0	1	0	0	1	0	1
6	0	1	0	1	0	1	1
7	0	1	1	0	0	1	0
8	0	1	1	1	1	0	0
9	1	0	0	0	0	1	1
10	1	0	0	1	1	0	1
11	1	0	1	0	1	0	0
12	1	0	1	1	0	1	0
13	1	1	0	0	1	1	0
14	1	1	0	1	0	0	0
15	1	1	1	0	0	0	1
16	1	1	1	1	1	1	1

Tabel 2 Een orthogonaal array van sterkte 3

Product	Variabele										Set
	X_1	X_2	X_3	X_4	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	7
2	0	0	1	3	1	1	1	0	1	0	5
3	0	0	2	2	1	0	1	1	0	1	8
4	0	0	3	1	0	1	0	1	1	1	6
5	0	1	0	3	1	1	0	1	0	1	7
6	0	1	1	2	0	0	0	0	1	1	4
7	0	1	2	1	0	1	1	0	0	0	8
8	0	1	3	0	1	0	1	1	1	0	3
9	0	2	0	2	0	1	1	1	1	0	2
10	0	2	1	1	1	0	0	1	0	0	4
11	0	2	2	0	1	1	0	0	1	1	1
12	0	2	3	3	0	0	1	0	0	1	3
13	0	3	0	1	1	0	1	0	1	1	2
14	0	3	1	0	0	1	1	1	0	1	5
15	0	3	2	3	0	0	0	1	1	0	1
16	0	3	3	2	1	1	0	0	0	0	6
17	1	0	0	3	0	0	1	1	1	1	4
18	1	0	1	2	0	1	0	1	0	0	1
19	1	0	2	1	1	0	0	0	1	0	3
20	1	0	3	0	1	1	1	0	0	1	2
21	1	1	0	2	1	0	1	0	0	0	5
22	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
23	1	1	2	0	0	0	0	1	0	1	6
24	1	1	3	3	0	1	0	0	1	0	2
25	1	2	0	1	0	1	0	0	0	1	5
26	1	2	1	0	0	0	1	0	1	0	8
27	1	2	2	3	1	1	1	1	0	0	6
28	1	2	3	2	1	0	0	1	1	1	7
29	1	3	0	0	1	1	0	1	1	0	4
30	1	3	1	3	1	0	0	0	0	1	8
31	1	3	2	2	0	1	1	0	1	1	3
32	1	3	3	1	0	0	1	1	0	0	7
33	2	0	0	2	1	1	0	0	1	1	8
34	2	0	1	1	0	0	1	0	0	1	6
35	2	0	2	0	0	1	1	1	1	0	7
36	2	0	3	3	1	0	0	1	0	0	5
37	2	1	0	1	0	0	0	0	1	1	8
38	2	1	1	0	1	1	0	0	0	0	3
39	2	1	2	3	1	0	1	0	1	1	7
40	2	1	3	2	0	1	1	1	0	1	4
41	2	2	0	0	1	0	1	1	0	1	1
42	2	2	1	3	0	1	0	1	1	1	3
43	2	2	2	2	0	0	0	0	0	0	2
44	2	2	3	1	1	1	1	0	1	0	4
45	2	3	0	3	0	1	1	0	0	0	1
46	2	3	1	2	1	0	1	1	1	0	6
47	2	3	2	1	1	1	0	1	0	1	2
48	2	3	3	0	0	0	0	0	1	1	5
49	3	0	0	1	1	1	1	1	0	0	3
50	3	0	1	0	1	0	0	1	1	1	2
51	3	0	2	3	0	1	0	0	0	1	4
52	3	0	3	2	0	0	1	0	1	0	1
53	3	1	0	0	0	1	1	0	1	1	6
54	3	1	1	3	0	0	1	1	0	0	2
55	3	1	2	2	1	1	0	1	1	0	5
56	3	1	3	1	1	0	0	0	0	1	1
57	3	2	0	3	1	0	0	0	1	0	6
58	3	2	1	2	1	1	1	0	0	1	7
59	3	2	2	1	0	0	1	1	1	1	5
60	3	2	3	0	0	1	0	1	0	0	8
61	3	3	0	2	0	0	0	1	0	1	3
62	3	3	1	1	0	1	0	0	1	0	7
63	3	3	2	0	1	0	1	0	0	0	4
64	3	3	3	3	1	1	1	1	1	1	8

Tabel 3 Een $4^4 2^6$ array van sterkte 3 in 8 sets van 8 producten

beeld dat er voor zo'n schema meer producten nodig zijn dan voor de eerdere schema's. Dat is de prijs die men voor een veiliger productontwikkeling moet betalen. Daar staat tegenover dat men door de bredere basis waar het onderzoek op is gebaseerd een vervolgonderzoek sneller kan afronden.

In een orthogonaal array van sterkte 3 hoeft een combinatie van een tweetal factoren niet even vaak voor te komen tegenover elke combinatie van een ander tweetal factoren. Dit impliceert een probleem in de interpretatie van actieve interacties. Als men zich ook tegen dit probleem wil indekken, dan moet men schema's van sterkte 4 gebruiken. Ook nu geldt: meer zekerheid kost meer experimenten. Zo is mij geen schema bekend van sterkte 4 waarmee ik zeven instelbare variabelen met twee instellingen per variabele kan onderzoeken in minder dan 64 experimenten. Men is beter af als men start met een schema met sterkte 3. De hoofdeffecten van zo'n array zijn simpel met behulp van gemiddelden te schatten. Voor interacties moet men zoekmethoden hanteren die verschillende modellen met elkaar vergelijken, zie [3]. Pas als uit de resultaten blijkt dat er veel onderlinge wisselwerkingen zijn, dan kan men overwegen om het aantal experimenten uit te breiden.

Er is al erg veel bekend over orthogonale arrays van sterkte 2; zie het boek [4]. Op de website van de auteurs van dit boek [6] staat een tabel met alle orthogonale arrays van sterkte 2 en $N \leq 100$. Van de arrays van sterkte 3 is er veel minder bekend, met name van gemengde

arrays, waar de factoren niet alle hetzelfde aantal instellingen hebben. Op de TUE zijn we bezig om systematisch alle gemengde arrays van sterkte 3 en $N \leq 100$ te construeren en hun eigenschappen in kaart te brengen. Arrays die zo geconstrueerd zijn hoeven niet lang op een praktische toepassing te wachten.

Praktijkvoorbeeld

In december 2003 kwam een klant bij mij te rade voor het ontwikkelen van een voedingsproduct. Het was van belang om dat product snel op de markt te brengen. Tegelijk moest de klant zoeken naar de beste combinatie van tien ingrediënten. Vier hadden elk vier mogelijke varianten en zes hadden elk twee mogelijke varianten. Het was op grond van bestaande theorie al mogelijk om de 16384 mogelijke combinaties terug te brengen tot 128 en toch een schema te krijgen van sterkte 3. Gelukkig voor de klant was er een paar maanden voor zijn bezoek een schema ontwikkeld waarin het aantal combinaties nog eens met een factor 2 wordt teruggebracht (zie [1]). Laten we de factoren met 4 instellingen $X_1, \dots, X_4$ noemen en hun instellingen coderen met 0, 1, 2 of 3. Laten we de factoren met 2 instellingen $A_1, \dots, A_6$ noemen, met instellingen 0 of 1. Het schema kan dan als volgt worden geconstrueerd.

- Schrijf alle 64 combinaties op van de factoren X_1, X_2, X_3 .
- Bereken de instellingen van X_4 met $x_4 = 3x_1 + 3x_2 + 3x_3 \pmod{4}$.
- Bereken instellingen $q_1, \dots, q_6$ voor 6 hulpfactoren $Q_1, \dots, Q_6$ met $q_i = (x_1, x_2, x_3) \mathbf{p}_i \pmod{4}$. Hierbij is $\mathbf{p}_i$ een kolomvector met 3

elementen; de 6 vectoren $\mathbf{p}_i$ bestaan uit alle permutaties van de getallen 1,2 en 3.

4. Bereken de instellingen $a_1, \dots, a_6$ als $a_i = \lfloor (0.5 \times q_i) \rfloor$, waarbij $\lfloor b$ het grootste gehele getal kleiner dan b is.

Met behulp van een begrenzingstheorema dat afkomstig is van Rao (zie [4]) kunnen we aantonen dat 64 experimenten het kleinste aantal is om een $4^4 2^6$ schema van sterkte 3 te maken. Het schema is afgedrukt als tabel 3.

Voor de praktijktoepassing van het schema moest ik een groepsindeling in acht sets van acht producten toevoegen. Dat was nodig omdat de producten niet alle 64 tegelijk gemaakt konden worden. Ook de keuring door een smaakpanel kon niet in één enkele sessie plaatsvinden, maar wel in acht. De groepsindeling vindt u in de laatste kolom van tabel 3. Hij kan als volgt worden bepaald.

1. Maak hulpvariabelen R_1 en R_2 door de instellingen van X_1 om te zetten in respectievelijk (0, 0, 1, 1) en (1, 0, 0, 1).
2. Maak hulpvariabele S_1 door de instellingen van X_2 om te zetten in (0, 1, 0, 1).
3. Bereken de hulpvariabelen B_1, B_2, B_3 met $b_1 = a_1 + r_1 \pmod{2}$, $b_2 = a_6 + r_1 \pmod{2}$, $b_3 = r_2 + s_1 \pmod{2}$.

4. Geef alle experimenten met één en dezelfde waarde (b_1, b_2, b_3) een uniek setnummer.

Als we een hulpvariabele B_i uit één enkele factor zouden construeren, dan zouden de producten in een set alle dezelfde instelling van die factor hebben. Dat is niet handig, omdat het corresponderende hoofdeffect dan last heeft van verschillen die door de productiedagen of de sessies van het smaakpanel worden geïntroduceerd. Dit voorkomen we door meer dan één factor te gebruiken bij de constructie van de hulpvariabelen. De toegevoegde indeling levert een $OA(64; 8^1 4^4 2^6; 2)$ op. Op grond van de eigenschappen van zo'n array hebben de gemiddelde effecten van de instelbare variabelen inderdaad geen last van eventuele verschillen tussen de sets.

Met de panelbeoordelingen en de fysische metingen aan het product konden we statistische modellen opstellen voor het verband tussen de diverse eigenschappen en de gehanteerde ingrediënten. Met de modellen in de hand kon de klant zelfs uit meer dan één recept kiezen, die allemaal producten met de gewenste eigenschappen leverden. Enkele van die recepten werden toegepast, en uit de producten werd er één uitgekozen om op de markt te brengen. ◀

Referenties

- 1 A.E. Brouwer, A.M. Cohen, and M.V.M. Nguyen (2004), 'Fractional factorial designs of strength 3 and small run sizes', *Journal of Statistical Planning and Inference*, to appear.
- 2 C. Daniel (1959), 'Use of half-normal plots in interpreting factorial two-level experiments', *Technometrics* 1 p. 311-342.
- 3 N.R. Draper, and H. Smith (1998), *Applied Regression Analysis* (3rd edition; New York, Wiley).
- 4 A.S. Hedayat, N.J.A. Sloane, and J. Stufken (1999), *Orthogonal Arrays* (New York, Springer).
- 5 D.C. Montgomery (2004), *Design and Analysis of Experiments* (6th edition; New York, Wiley).
- 6 <http://www.research.att.com/~njas/doc/cent4.html>