

Oponentský posudek na disertační práci:

ING. PAVEL HRABEC: TEORETICKÉ VLASTNOSTI A APLIKACE POKROČILÝCH METOD
PLÁNOVÁNÍ EXPERIMENTU

Uchazeč se v předložené práci zabývá metodou odezvových ploch (response surface methodology) a zkoumá vlastnosti centrálního kompozitního a Box-Behnkenova návrhu experimentu v kombinaci s automatickou selekcí regresorů. Po dvou úvodních kapitolách následuje podrobná analýza několika již publikovaných skutečných experimentů týkajících se elektroerozivního drátového řezání. Ve čtvrté kapitole uchazeč pomocí počítačových simulací ukazuje, že použití krokové regrese s velkou pravděpodobností vede k chybnému vypuštění některých vysvětlujících proměnných.

Aktuálnost tématu Podle odborné literatury, např. [Wu, C. J., Hamada, M. S. (2009). Experiments: planning, analysis, and optimization, 2nd edition. Wiley] je metoda odezvových ploch (RSM) v zásadě sekvenční a skládá se ze screeningu a následných experimentů prvního a druhého řádu, viz [WH, sekce 10.2]. Cílem screeningu je především vyloučení statisticky nevýznamných proměnných, typicky pomocí (zkrácených) faktoriálních experimentů. Cílem experimentů prvního řádu (obvykle faktoriální experiment doplněný o centrální body) je určit, jestli experiment probíhá v blízkosti optimálních hodnot důležitých parametrů; pokud tomu tak není, tak se na základě výsledků experimentu prvního řádu volí hodnoty pro další provedení experimentu. V blízkosti optimálních hodnot se pak používá model druhého řádu, který umožňuje výpočet stacionárního bodu a nalezení optimálních hodnot vstupních parametrů (zde se pak používá centrální kompozitní nebo Box-Behnkenův plán). Celý postup je založen na předpokladu, že kvadratická aproximace je dobrou lokální aproximací i v situaci, kdy aproximovaná funkce v celém rozsahu zkoumaných parametrů kvadratická není.

Zdá se, že předložená práce se snaží všechny tři kroky provést najednou; některé vysvětlující proměnné se vyloučí pomocí krokové regrese (modernější by mohlo být použití metody LASSO) a výsledný model se používá k určení optimálních hodnot (ideově podobný postup je navržen například v práci [Jones, B., Nachtsheim, C. J. (2011). A class of three-level designs for definitive screening in the presence of second-order effects. Journal of Quality Technology, 43(1), 1-15]). Tento postup má však následující zřejmé nevýhody:

1. Používá se jediný model, který implicitně předpokládá platnost globálního kvadratického modelu. Tento předpoklad však v praxi nemusí být splněn a v předložené práci se jeho platnost nijak neověřuje. U klasické RSM přitom stačí předpokládat platnost kvadratické aproximace pouze lokálně, tj. v přiměřeně malém okolí optimálních hodnot parametrů.
2. Chybné vyloučení důležitých kvadratických členů (ke kterému podle simulační studie v kapitole 4 dochází velice často) pak vede k tomu, že se optimální hodnoty nachází na hranici zkoumané oblasti, tj. pro největší nebo nejmenší možné hodnoty jednotlivých parametrů. Centrální kompozitní návrh experimentu se tedy nepoužívá k nalezení stacionárního bodu, ke kterému byl původně navržen (jinými slovy, podobný výsledek lze v této situaci získat i s menším počtem pozorování při použití modelu prvního řádu).

Analýza dat K praktické části práce mám následující připomínky:

1. Použitý návrh experimentu (tabulka 3.2) začíná všemi deseti axiálními body, lze tedy pochybovat o tom, že pořadí experimentů bylo skutečně správně znáhodněno. Navíc by se stejné pořadí měření nemělo používat ve všech provedených experimentech.
2. Prosím o vysvětlení rozdělení pozorování do bloků (str. 34) a o vysvětlení vlivu bloků na provedenou analýzu. Nebylo by zde lepší při plánování experimentu sloučit efekt bloku s vhodně zvolenou interakcí vyššího řádu? Efekt bloku se navíc v následujících modelech bez jakéhokoli komentáře vynechává.
3. Nikde není řečeno, v jakém rozsahu lze měnit nastavení obráběcích parametrů a není tak možné posoudit, jestli jsou získaná optimální nastavení skutečně optimální. Například v modelu pro řeznou rychlost (obrázek 3.2) lze snadno zvýšit predikovanou řeznou rychlost při nastavení $I(A) > 35$ a $T_{on} > 10$ (v porovnání s ‘optimálními’ hodnotami uvedenými v prvním odstavci na straně 36).
4. Měření provedená v axiálních bodech jsou ve většině uvedených modelů zbytečná: nelinearitu lze otestovat pouze pomocí použitého polovičního faktorového plánu doplněného o centrální body (stačí tedy např. 22 měření v bloku 2). Axiální body by pak stačilo doměřit až po případném zamítnutí linearitu (např. v sekci 3.1).
5. Devět nulových reziduí na obrázku 3.16 svědčí o chybném zpracování dat (pozorovaná nulová variabilita je zjevně nesmyslná).

I přes tyto nedostatky považuji výsledné modely za prakticky použitelné (alespoň za neověřeného předpokladu, že odhadovaná odezвовá plocha je skutečně přibližně lineární nebo kvadratická v celém rozsahu zkoumaných hodnot, za předpokladu, že efekt bloku je zanedbatelný, a za předpokladu, že cílem je hledání optimálních nastavení pouze v rozmezí hodnot zkoumaných v tabulce 3.2).

Formální úprava Formální úprava práce je dostatečně kvalitní, nelíbí se mi však častý překlep Box-Bhenken (místo Box-Behnken), který se opakovaně vyskytuje v kapitole 3 i 4. Také v popisu obrázku 3.7 je chybně uvedeno Bnoferroni. Některé odkazy v tezích disertační práce (na začátku sekcí 2.1.1. a 2.1.2.) nefungují. Nenadchnul mě popis lineární regrese v sekci 2.5, kde jsou převzaty výsledky z knihy [Zvára (2008) Regrese, Matfyzpress]. Autor zde několikrát opakuje předpoklad o plné hodnosti matice modelu, ale zároveň přebírá tvrzení formulovaná bez tohoto předpokladu (viz např. vzorec (2.4) nebo sekce 2.5.5); nejasná je pak například Věta 2.3 (která je sice přeznačená tak, že platí pouze za předpokladu plné hodnosti matice X , ale tento předpoklad už zde není zmíněn). Matoucí může být i překlep v hodnosti matice modelu na straně 24.

Přínos Za přínosné považuji praktické použití lineární regrese ve třetí kapitole, v práci by však mělo být navíc jasně řečeno, v jaké oblasti lze měnit nastavení zkoumaných parametrů. Pokud teoretické optimum (stacionární bod) leží mimo zkoumanou oblast, mohou být predikce založené na lineárním i kvadratickém modelu velice podobné — díky tomu pak ve třetí kapitole nemusí na chybném přidání nebo vypuštění některých kvadratických členů příliš záležet (a použití krokové regrese může být zbytečné).

Simulační studie ve čtvrté kapitole se zdá být správně provedená, ale podle mého názoru neřeší příliš zajímavou otázku: zajímavější by mohlo být prozkoumat například vliv chybné specifikace regresního modelu (jako důsledku automatické volby vysvětlujících proměnných) na výsledné predikované hodnoty a tím i na polohu nalezeného optimálního nastavení.

Nedostatky Podle mého názoru tedy předložená práce trpí především následujícími nedostatky:

1. Problém řešený ve třetí kapitole není dostatečně jasně zformulován; zejména chybí vymezení oblasti, ve které se hledá optimální nastavení.
2. Pochybné je znáhodnění experimentu a není jasné, jak se pracuje s bloky. Nulová rezidua (obrázek 3.16) svědčí o chybách při zpracování dat.
3. Domnívám se, že v některých modelech nebylo nutné měřit hodnoty v axiálních bodech (např. v sekci 3.1). Místo toho by stačilo použít jednoduchý test linearitu (založený pouze na faktorových a centrálních měřeních) a axiální měření případně doplnit až po zamítnutí linearitu.
4. Ve větší vzdálenosti od stacionárního bodu lze očekávat, že predikce získané lineárním a kvadratickým regresním modelem budou velice podobné. Použití krokové regrese zde není dostatečně zdůvodněno (není jasné, jak by se lišily výsledky získané bez použití krokové regrese).
5. Simulační studie ve čtvrté kapitole dochází ke správnému závěru, že použitý postup vede s velkou pravděpodobností k chybnému modelu. Autor však už nezkoumá, jaké jsou další důsledky tohoto postupu (např. pro predikované hodnoty a následnou volbu optimálního nastavení).

Shrnutí: Kromě praktických analýz ve třetí kapitole neřeší předložená práce žádnou zajímavou otázku; ani zde však není řešený problém dostatečně jasně zformulován. Použití krokové regrese není dostatečně zdůvodněno. Předložená práce neobsahuje žádné nové teoretické výsledky. Ve čtvrté kapitole se autor nevěnuje podstatě problému (tj. vlastnostem vyrovnaných hodnot a následné volbě optimálních nastavení).

ZÁVĚR: Vzhledem k výše uvedeným nedostatkům a zároveň absenci teoretických výsledků **nedoporučuji** předloženou práci k obhajobě.

Doc. RNDr. Zdeněk Hlávka, Ph.D.