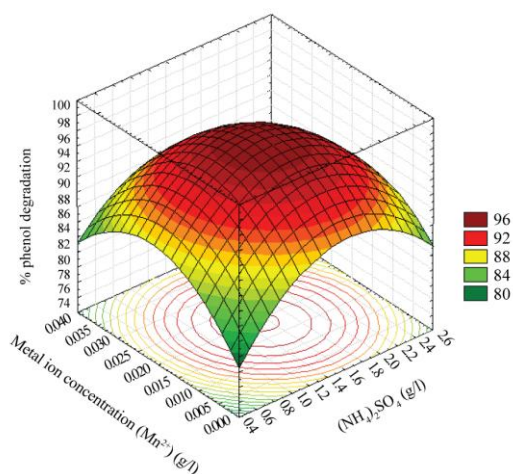




ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

**ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ
ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ**

**Δ.Π.Μ.Σ. «Μαθηματική Προτυποποίηση στις Σύγχρονες
Τεχνολογίες και την Οικονομία»**



**Μεταπτυχιακή Διπλωματική
Εργασία**

**ΜΕΛΕΤΗ
ΣΧΕΔΙΑΣΜΩΝ
ΑΠΟΚΡΙΤΙΚΩΝ
ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ**

ΟΡΦΑΝΙΔΟΥ ΜΑΡΙΑ

A.M.:09110029

(ΑΘΗΝΑ, ΙΑΝΟΥΑΡΙΟΣ, 2014)



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

**ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ
ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ**

**Δ.Π.Μ.Σ. «Μαθηματική Προτυποποίηση στις Σύγχρονες
Τεχνολογίες και την Οικονομία»**

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**ΜΕΛΕΤΗ ΣΧΕΔΙΑΣΜΩΝ ΑΠΟΚΡΙΤΙΚΩΝ
ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ**

ΟΡΦΑΝΙΔΟΥ ΜΑΡΙΑ

A.M.:09110029

Επιβλέπων:

ΚΟΥΚΟΥΒΙΝΟΣ ΧΡΗΣΤΟΣ

ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ Ε.Μ.Π.

(ΑΘΗΝΑ, ΙΑΝΟΥΑΡΙΟΣ, 2014)

Τριμελής εξεταστική επιτροπή:

Κουκουβίνος Χρήστος
Καθηγητής
Τομέας Μαθηματικών
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Σπηλιώτης Ιωάννης
Αναπληρωτής καθηγητής
Τομέας Μαθηματικών
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Βόντα Φιλία
Επίκουρος καθηγήτρια
Τομέας Μαθηματικών
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Copyright © Μ. Χ. Ορφανίδου, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Σ.Ε.Μ.Φ.Ε.
Ιανουάριος, 2014, Αθήνα

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξολοκλήρου ή τμήματος αυτής για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν στη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται στο συγγραφέα. Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν το συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευτεί ότι εκφράζουν τι επίσημες θέσεις του Ε.Μ.Π.

*Στον Χρίστο, την Ξένια και τον Παναγιώτη
για την αέναη υποστήριξή τους...*

Περίληψη

Στην παρούσα μεταπτυχιακή διπλωματική εργασία ο αναγνώστης δύναται να εξοικειωθεί με τις αρχές της Μεθοδολογίας Αποκριτικών Επιφανειών, καθώς και με βασικούς Σχεδιασμούς Αποκριτικών Επιφανειών. Η σημαντικότητα των εφαρμογών τους αναδύεται μέσα από επιστημονικές μελέτες και πειράματα της βιομηχανίας, της βιολογίας, της φυσικής, αλλά και της μηχανικής για της ανάπτυξη και ανάλυση νέων προϊόντων ή ακόμα και για τη βελτίωση ήδη υπαρχουσών μελετών. Είναι γεγονός ότι είναι ένα κομμάτι της επιστήμης των μαθηματικών το οποίο, λόγω των πρακτικών του εφαρμογών, συνεχίζει να εξελίσσεται και να εξελίσσει παράλληλα ακόμα και σήμερα. Στην εργασία αυτή, λοιπόν, αναπτύσσονται μερικοί εκ των αρχικών τέτοιων σχεδιασμών, αλλά και άλλοι βελτιωμένοι με νέες μεθόδους οι οποίοι ακολούθησαν.

Στο Πρώτο Κεφάλαιο εισάγονται οι βασικές έννοιες της Μεθοδολογίας Αποκριτικών Επιφανειών, περιγράφεται η φύση της και αναλύεται η σημαντικότητά της μέσα από μία ιστορική αναδρομή. Αναφέρονται, επίσης, οι συνηθέστερες ιδιότητες ενός στατιστικού σχεδιασμού και πώς αυτός βελτιστοποιείται. Ακολούθως, αναλύονται κάποιοι βασικοί σχεδιασμοί πρώτης και δεύτερης τάξης, αναφέρεται η ανάγκη του διαχωρισμού τους σε μπλοκ και ορίζεται τι είναι η αναλυτική τάξη ενός σχεδιασμού.

Στο Δεύτερο Κεφάλαιο περιγράφεται μια κλάση μη πλήρων παραγοντικών σχεδιασμών τριών επιπέδων, όπως αυτή αναπτύχθηκε από τους Box και Behnken το 1960, και αναλύεται η μέθοδος για τη δημιουργία τους. Επιπρόσθετα, συμπεριλαμβάνεται ένα πλήρες παράδειγμα, το οποίο εμπεριέχει ανάλυση και σχολιασμό των σχεδιασμών.

Ακολούθως, στο Τρίτο Κεφάλαιο αναλύονται οι μικροί Box-Behnken σχεδιασμοί. Εισάγονται επιπλέον έννοιες και περιγράφεται η κατασκευαστική μέθοδος των σχεδιασμών αυτών, η οποία ακολουθείται από τη σύγκριση αυτών με τους αρχικούς Box-Behnken σχεδιασμούς. Τέλος, περιγράφεται ένας διαφορετικός αλγόριθμος για την κατασκευή σχεδιασμών μεγαλύτερων διαστάσεων.

Εν συνεχεία, στο Τέταρτο Κεφάλαιο αναλύονται δύο μέθοδοι κατασκευής σχεδιασμών αποκριτικών επιφανειών από μη πλήρεις σχεδιασμούς κατά μπλοκ και περιγράφεται πώς αυτοί με συγκεκριμένες ιδιότητες μπορούν να βελτιωθούν. Επιπλέον, αναφέρονται νέες λύσεις για σχεδιασμούς που επιδέχονται ορθογώνιο μπλοκινγκ και ακολουθεί σύγκριση των αρχικών σχεδιασμών με τους βελτιωμένους.

Στο Πέμπτο Κεφάλαιο αναπτύσσεται η One-Step Μεθοδολογία Αποκριτικών Επιφανειών των Cheng και Wu. Η συζήτηση αφορά κάποιες αδυναμίες αυτής της προσέγγισης και ακολουθεί μία πρόταση των Edwards και Mee για τη διευθέτηση αυτών, η οποία περιλαμβάνει αναλυτική κατασκευή κλασματικών Box-Behnken σχεδιασμών και ένα αντίστοιχο παράδειγμα με συγκρίσεις.

Τέλος, στο Έκτο Κεφάλαιο περιγράφεται θεωρητικά, αλλά και μέσω ενός αναλυτικού πειράματος-παραδείγματος η κατασκευή αποκριτικών επιφανειών σε δύο στάδια με υψηλή αποδοτικότητα μέσω της μελέτης κριτηρίων βελτιστοποίησης. Ακολουθεί ένας αλγόριθμος κατασκευής και συγκρίσεις των σχεδιασμών οι οποίοι προκύπτουν.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα σε αυτό το σημείο να ευχαριστήσω θερμά τον Καθηγητή Χρήστο Κουκουβίνο, επιβλέπων αυτής της εργασίας, τόσο για την καθοδήγηση, τη βοήθειά του για την εκπόνηση αυτής της εργασίας, όσο και τη γνώση την οποία μου μεταλαμπάδευσε τα προηγούμενα χρόνια.

Επιπρόσθετα, θα ήθελα να ευχαριστήσω την Άννα Σκούντζου, διδακτορικό του Ε.Μ.Π., για την πρόθυμη ανταπόκρισή της στις απορίες μου και για τις πολύτιμες συζητήσεις.

Τέλος, θα ήθελα να εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου προς την οικογένειά μου για την αμέριστη συμπαράσταση και στήριξη που πάντα μου προσφέρουν.

Abstract

In the present master's thesis the reader is able to be familiarized with the principles of Response Surface Methodology, as well as with the basic Response Surface Designs. The significance of their applications emerge through scientific studies and experimentations of industry, biology, physics and engineering for the development and the analysis of new products or even the improvement of existing studies. It is a fact that they are a piece of science of mathematics that, due to its practical applications, it continues to evolve even today. In this thesis, therefore, develop some of the original designs, as well as some others improved with new methods which followed.

In the First Chapter, the basic notions of the Response Surface Methodology are presented, its nature is described and its significance is analyzed through a historical retrospect. Also, the most common properties of a statistical design and how it can be optimized are listed. Subsequently, some basic first and second order designs are analyzed, the need of blocking is indicated and the resolution of a design is defined.

In the Second Chapter, a class of three level incomplete factorial designs is described, as it developed by Box and Behnken in 1960 and the method for creating them is analyzed. In addition, a full example is included, which contains analysis and commentary on the designs.

Subsequently, in the Third Chapter, the small Box-Behnken designs are analyzed. Additional concepts are introduced and the constructing method of these designs is described, which is followed by their comparison with the original Box-Behnken designs. Finally, a different algorithm for the construction of designs of higher dimensions is described.

Consequently, in the Fourth Chapter, two methods of constructing response surface designs from incomplete block designs are analyzed and the how these with specific properties can be improved is described. Moreover, new solutions for designs with respect to the orthogonal blocking are reported and follows a comparison of the original designs with the improved.

In the Fifth Chapter, the One-Step Response Surface Methodology by Cheng and Wu is developed. The discussion is about some shortcomings of this approach and a suggestion by Edwards and Mee for the settlement of these follows, which includes detailed construction of fractional Box-Behnken designs and a corresponding example with comparisons.

Finally, in the Sixth Chapter, the construction of response surfaces in two stages with high efficiency through the study of optimization criteria is described, not only theoretically, but also through a detailed experiment-example. A construction algorithm and comparisons of the designs that arise follows.

All models are wrong, but some are useful.

George E. P. Box (1919-2013)

Reference: Box & Draper (1987),

Empirical model-building and response surfaces,

Wiley, p. 424.

Περιεχόμενα

Περίληψη	v
----------	---

Abstract	vii
----------	-----

1. Μεθοδολογία Αποκριτικών Επιφανειών

1.1. Εισαγωγή.....	1
1.2. Ιστορική αναδρομή.....	5
1.3. Η διαδοχική φύση της RSM.....	6
1.4. Συνήθεις ιδιότητες σχεδιασμών.....	8
1.5. Βελτιστοποίηση σχεδιασμού.....	8
1.6. Σχεδιασμοί για μοντέλα πρώτης και δεύτερης τάξης.....	10
1.6.1. Σχεδιασμοί πρώτης τάξης.....	10
1.6.2. Σχεδιασμοί δεύτερης τάξης.....	13
1.7. Ορθογώνιοι σχεδιασμοί δεύτερης τάξης κατά μπλοκ.....	16
1.8. Αναλυτική τάξη σχεδιασμού.....	17

2. Σχεδιασμοί Τριών Επιπέδων για τη Μελέτη Ποσοτικών Μεταβλητών

Περίληψη.....	19
2.1. Εισαγωγή.....	19
2.2. Μη πλήρη παραγοντικά για ποσοτικές μεταβλητές.....	20
2.3. Μέθοδος για τη δημιουργία των σχεδιασμών.....	22
2.4. Διαχωρισμός των σχεδιασμών σε μπλοκ.....	25
2.5. Εισαγωγή κεντρικών σημείων.....	30
2.6. Ανάλυση των σχεδιασμών.....	31
2.6.1. Υπολογισμός των εκτιμήσεων.....	31
2.6.2. Ανάλυση της διακύμανσης.....	35
2.6.3. Απαλοιφή των μπλοκ επιδράσεων.....	36
2.6.4. Διακυμάνσεις, συνδιακυμάνσεις και τυπικά σφάλματα.....	37
2.6.5. Σχολιασμός της Ανάλυσης.....	37

3. Μικροί Box-Behnken σχεδιασμοί

Περίληψη.....	39
3.1. Εισαγωγή.....	40
3.2. Εναλλακτική αντικατάσταση.....	41
3.3. Κατασκευή.....	43
3.4. Σύγκριση.....	45

3.5.	Ένας διαφορετικός αλγόριθμος για την κατασκευή σχεδιασμών μεγαλύτερων διαστάσεων.....	46
4.	Σχεδιασμοί Αποκριτικών Επιφανειών κατασκευασμένοι από Μη Πλήρεις Σχεδιασμούς κατά Μπλοκ	
	Περίληψη.....	49
4.1.	Εισαγωγή.....	49
4.2.	Μη πλήρεις σχεδιασμοί κατά μπλοκ.....	51
4.3.	Η μέθοδος Box-Behnken (Μέθοδος I).....	51
4.4.	Η γενικευμένη Box-Behnken μέθοδος (Μέθοδος II).....	52
4.5.	Νέοι SODs.....	56
4.6.	Ορθογώνιος χωρισμός σε μπλοκ των Box-Behnken σχεδιασμών.....	56
4.7.	Σύγκριση BB σχεδιασμών με τους νέους SODs.....	57
5.	Κλασματικοί Box-Behnken Σχεδιασμοί για One-Step Μεθοδολογία Αποκριτικών Επιφανειών	
	Περίληψη.....	61
5.1.	Εισαγωγή.....	61
5.2.	Υποσύνολα παραγοντικών σχεδιασμών τριών επιπέδων.....	62
5.3.	Κατασκευή κλασματικών Box-Behnken σχεδιασμών.....	64
5.4.	Ανάλυση των κλασματικών Box-Behnken σχεδιασμών.....	66
5.5.	Σύγκριση.....	68
6.	Κατασκευή Σχεδιασμών Αποκριτικών Επιφανειών σε δύο στάδια	
	Περίληψη.....	73
6.1.	Εισαγωγή.....	74
6.2.	Κατασκευή σε δύο στάδια.....	75
6.3.	Αλγόριθμος κατασκευής.....	78
6.4.	Συγκρίσεις.....	81
	Βιβλιογραφία	85

Κεφάλαιο 1

Μεθοδολογία Αποκριτικών Επιφανειών

(Response Surface Methodology)

1.1. Εισαγωγή

Η Μεθοδολογία Αποκριτικών Επιφανειών (Response Surface Methodology – RSM) είναι ένα σύνολο μαθηματικών και στατιστικών τεχνικών οι οποίες χρησιμοποιούνται στην ανάπτυξη επαρκών σχέσεων μεταξύ της απόκρισης (response) y και ενός συνόλου συναφών μεταβλητών ελέγχου (control variables) x_1, \dots, x_k . Γενικά, μια τέτοια σχέση είναι άγνωστη αλλά μπορεί να προσεγγιστεί από ένα μοντέλο χαμηλής τάξης της μορφής

$$y = f'(x)\beta + \varepsilon \quad (1.1)$$

όπου $x = (x_1, x_2, \dots, x_k)'$, $f(x)$ μια διανυσματική συνάρτηση με p στοιχεία τα οποία αποτελούνται από δυνάμεις και δυνάμεις διασταυρωτού γινομένου των x_1, x_2, \dots, x_k έως ένα βαθμό $d(\geq 1)$, β ένα διάνυσμα από p άγνωστους σταθερούς συντελεστές οι οποίοι καλούνται παράμετροι και ε ένα τυχαίο πειραματικό σφάλμα με μηδενικό μέσο.

Οι πιο εκτενείς εφαρμογές της RSM συναντούνται στη βιομηχανία και συγκεκριμένα σε περιπτώσεις όπου διάφορες μεταβλητές επηρεάζουν δυνητικά κάποια μέτρα απόδοσης ή ποιοτικά χαρακτηριστικά μιας διαδικασίας, της απόκρισης. Την τελευταία εικοσαετία πολλοί βιομηχανικοί οργανισμοί ενδιαφέρθηκαν για τη βελτίωση της ποιότητας, η οποία είναι πιο αποτελεσματική όταν εφαρμόζεται στα αρχικά στάδια της διαδικασίας. Το ρόλο-κλειδί σε κάτι τέτοιο έχουν οι στατιστικές μέθοδοι, συμπεριλαμβανομένων των *αποκριτικών επιφανειών* (response surfaces).

Ας πάρουμε για παράδειγμα ένα μηχανικό ο οποίος επιθυμεί να βρει τα επίπεδα της θερμοκρασίας (x_1) και της πίεσης (x_2) που μεγιστοποιούν το αποτέλεσμα (y) μιας διαδικασίας. Έχουμε λοιπόν μια συνάρτηση των επιπέδων της θερμοκρασίας και της πίεσης, έστω την

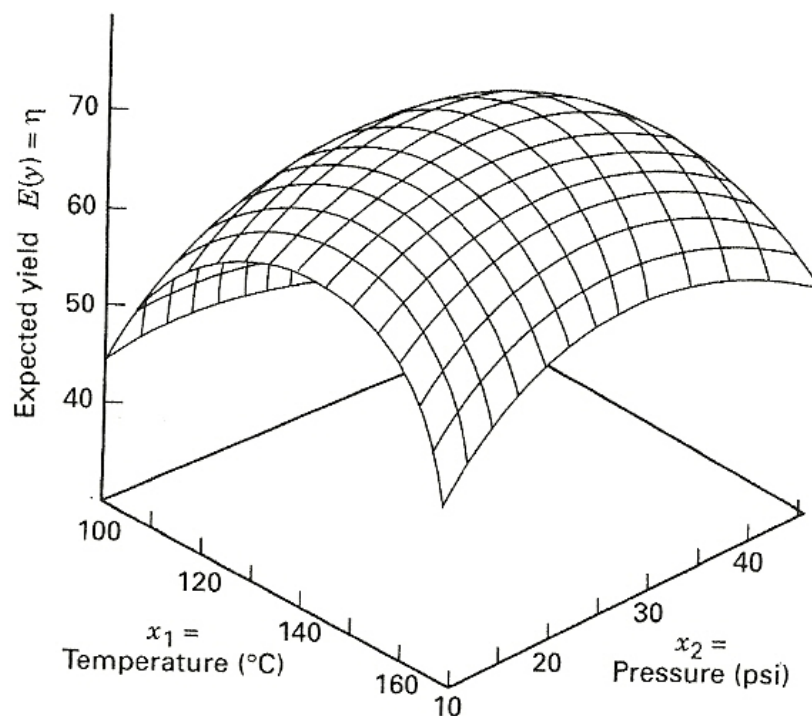
$$y = f(x_1, x_2) + \varepsilon . \quad (1.2)$$

Τότε η αναμενόμενη απόκριση

$$E(y) = f(x_1, x_2) = \eta \quad (1.3)$$

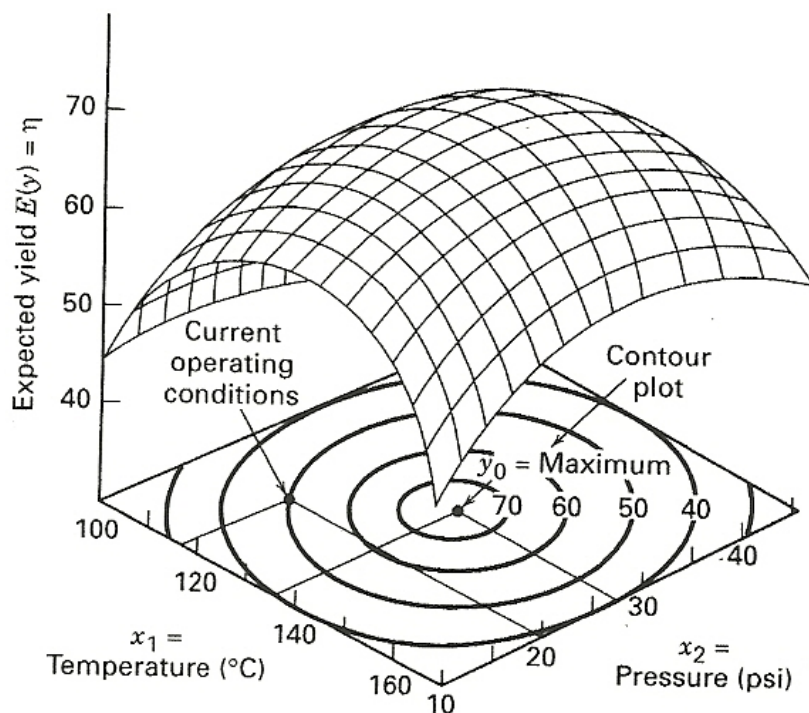
αποτελεί την αποκριτική επιφάνεια.

Γραφικά η αποκριτική επιφάνεια αποτελεί μία συμπαγή επιφάνεια στον τρισδιάστατο χώρο όπως στο παρακάτω σχεδιάγραμμα :



Σχήμα 1.1. Τρισδιάστατη αποκριτική επιφάνεια όπου η η σχεδιάζεται ως προς τα επίπεδα x_1 (θερμοκρασία) και x_2 (πίεση).

Το περίγραμμα της επιφάνειας σχεδιάζεται για λόγους ευκολίας:



Σχήμα 1.2. Διάγραμμα περίγραμμα (contour plot) .

Κάθε περίγραμμα αντιστοιχεί σε συγκεκριμένο ύψος της αποκριτικής επιφάνειας και είναι πολύ χρήσιμο στη μελέτη των επιπέδων x_1 και x_2 .

Συνήθως δύο σημαντικά μοντέλα χρησιμοποιούνται στην RSM.

Το μοντέλο πρώτης τάξης

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \varepsilon \quad (1.4)$$

και το μοντέλο δεύτερης τάξης

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \varepsilon . \quad (1.5)$$

Οι λόγοι για τους οποίους χρησιμοποιούμε μοντέλα τέτοια μορφής είναι οι εξής:

1. Για να δημιουργήσουμε μια σχέση, έστω και προσεγγιστική, μεταξύ της y και των x_1, \dots, x_k , η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να προβλέψουμε αποκρίσεις για δεδομένες συνθήκες των μεταβλητών ελέγχου.
2. Για να προσδιορίσουμε μέσω ελέγχου υποθέσεων τη σημαντικότητα των παραγόντων των οποίων τα επίπεδα αναπαριστούνται από τις x_1, \dots, x_k .
3. Για να προσδιορίσουμε τις βέλτιστες συνθήκες των x_1, \dots, x_k οι οποίες δίνουν μέγιστη (ή ελάχιστη) απόκριση πάνω σε συγκεκριμένη περιοχή ενδιαφέροντος.

Προκειμένου να επιτύχουμε τους πιο πάνω σκοπούς, θα πρέπει πρώτα να εκτελέσουμε μια σειρά από n πειράματα, σε καθένα από τα οποία η απόκριση y μετράται για καθορισμένες συνθήκες των μεταβλητών ελέγχου. Το σύνολο αυτών των συνθηκών αποτελεί ένα σχεδιασμό αποκριτικής επιφάνειας, ή απλά σχεδιασμό, ο οποίος αναπαρίσταται από ένα πίνακα D τάξης $n \times k$, τον πίνακα σχεδιασμού

$$D = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nk} \end{bmatrix} \quad (1.6)$$

όπου το x_{ui} υποδηλώνει την u -οστή συνθήκη σχεδιασμού της x_i ($i=1,2,\dots,k, u=1,2,\dots,n$). Κάθε σειρά του πίνακα αντιπροσωπεύει ένα σημείο, το σημείο σχεδιασμού, σε ένα k -διάστατο Ευκλείδειο χώρο.

Το μοντέλο τότε μπορεί να εκφραστεί σε μορφή πίνακα

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (1.7)$$

όπου $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)'$ το διάνυσμα των παρατηρήσεων, $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_n)'$ ο πίνακας των μεταβλητών ελέγχου, $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)'$ το διάνυσμα των σφαλμάτων και $\boldsymbol{\beta}$ το διάνυσμα των υπό εκτίμηση παραμέτρων. Υποθέτοντας ότι το $\boldsymbol{\varepsilon}$ έχει μηδενικό μέσο και ο πίνακας διακύμανσης – συνδιακύμανσης (variance – covariance) δίνεται από τον $\sigma^2 \mathbf{I}_n$, οι εκτιμήτριες ελαχίστων τετραγώνων του $\boldsymbol{\beta}$ είναι

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}'\mathbf{y}. \quad (1.8)$$

Ο πίνακας διακύμανσης – συνδιακύμανσης του $\hat{\beta}$ τότε θα είναι της μορφής

$$\begin{aligned}\text{Var}(\hat{\beta}) &= (X'X)^{-1}X'(\sigma^2I_n)X(X'X)^{-1} \\ &= \sigma^2(X'X)^{-1}.\end{aligned}\tag{1.9}$$

Γενικά, σε οποιοδήποτε σημείο x , σε μια πειραματική περιοχή R , η προβλεπόμενη απόκριση $\hat{y}(x)$ είναι

$$\hat{y}(x) = f'(x)\hat{\beta}, x \in R\tag{1.10}$$

και άρα η διασπορά της $\hat{y}(x)$ είναι της μορφής

$$\text{Var}[\hat{y}(x)] = \sigma^2 f'(x)(X'X)^{-1} f'(x).\tag{1.11}$$

1.2. Ιστορική αναδρομή

Η RSM είναι σημαντική στο σχεδιασμό, την ανάπτυξη και την ανάλυση νέων επιστημονικών μελετών και προϊόντων. Επίσης, είναι χρήσιμη για τη βελτίωση ήδη υπαρχουσών μελετών. Όπως έχουμε προαναφέρει, οι πιο κοινές εφαρμογές της είναι στη βιομηχανία, τη βιολογική και κλινική επιστήμη και στις επιστήμες της φυσικής και της μηχανικής. Αφού λοιπόν η RSM έχει εκτενείς εφαρμογές τον πραγματικό κόσμο, είναι σημαντικό να κάνουμε μια ιστορική αναδρομή στη δημιουργία της. Σύμφωνα με τους Hill και Hunter, η μέθοδος RSM εισήχθη από τους G.E.P. Box και K.B. Wilson το 1951. Οι Box και Wilson πρότειναν τη χρήση ενός πολυωνύμου πρώτου βαθμού για την προσέγγιση μίας μεταβλητής απόκρισης. Διαπίστωσαν ότι αυτό το μοντέλο είναι απλά μια προσέγγιση, όχι ακριβής, το οποίο όμως είναι εύκολο να εκτιμηθεί και να εφαρμοστεί, ακόμα και όταν δεν υπάρχουν πολλές πληροφορίες για τη διαδικασία.

Η απαρχή της RSM εκτιμάται με τη χρήση *Αποκριτικών Καμπυλών* (Myers, Khuri και Carter, 1989), σύμφωνα με την οποία ο *ορθογώνιος σχεδιασμός* οφείλεται στους Box και Wilson (1951) στην περίπτωση του μοντέλου πρώτης τάξης. Για τα μοντέλα δεύτερης τάξης, πολλοί επιστήμονες και μηχανικοί έχουν επαγγελματική γνώση των *κεντρικών σύνθετων σχεδιασμών* (Central composite designs – CCDs) και των *σχεδιασμών τριών επιπέδων* των Box και Behnken (1960) (Box- Behnken designs – BBDs).

Άλλη μία σημαντική συνεισφορά στην RSM ήρθε από τον Hartley (1959), ο οποίος έκανε μία προσπάθεια να



George E. P. Box
1919 2013

δημιουργήσει έναν πιο οικονομικό ή διαφορετικά έναν μικρό σύνθετο σχεδιασμό (small composite design – SCD). Για τους SCDs, υπάρχει εκτενής βιβλιογραφία όσον αφορά τα μοντέλα αποκριτικών επιφανειών, σε αντίθεση με τους κλασματικούς σχεδιασμούς 3 επιπέδων οι οποίοι αποτελούν ανοιχτό θέμα έρευνας.

Σύμφωνα με τους Myers, Khuri και Carter (1989), η σημαντική ανάπτυξη της θεωρίας βέλτιστων σχεδιασμών, στον τομέα των πειραματικών σχεδιασμών, προέκυψε μετά τον Δεύτερο Παγκόσμιο πόλεμο. Οι Elfving (1952, 1955, 1959), Chernoff (1953) και Kiefer (1958, 1959, 1960, 1962) ήταν μερικοί από τους αρκετούς που δημοσίευσαν τη δουλειά τους στη βελτιστότητα.

Ένα σημαντικό γεγονός είναι ότι ένα σύστημα, είτε περιέχει μέγιστο είτε ελάχιστο είτε τίποτα από τα δύο, εξακολουθεί να έχει ενδιαφέρον στη βιομηχανία. Έτσι, η RSM χρησιμοποιείται ακόμα περισσότερο με το πέρασμα των χρόνων. Επιπλέον, πιο πρόσφατα έχει δοθεί έμφαση, κυρίως από τον τομέα της χημείας, στην εύρεση περιοχών όπου υπάρχει βελτίωση στην απόκριση και όχι στην εύρεση της βέλτιστης απόκρισης. Μπορεί κανείς λοιπόν να συμπεράνει ότι η εφαρμογή και η ανάπτυξη της RSM θα συνεχίσει και μελλοντικά να βρίσκει εφαρμογές σε πολλούς διαφορετικούς τομείς.

1.3. Η διαδοχική φύση της RSM

Οι περισσότερες εφαρμογές της μεθοδολογίας αποκριτικών επιφανειών έχουν διαδοχική μορφή. Δηλαδή, αρχικά κάποιες ιδέες δημιουργούνται βάσει του ποιοι παράγοντες ή ποιες μεταβλητές είναι πιθανότερο να είναι σημαντικές στη μελέτη της αποκριτικής επιφάνειας. Αυτό συνήθως οδηγεί σε ένα πείραμα σχεδιασμένο να ερευνά αυτούς τους παράγοντες αφαιρώντας τους μη σημαντικούς. Τέτοιο είδος πειραματισμού καλείται *πείραμα διαλογής* (screening experiment). Ο σκοπός της διαλογής παραγόντων είναι να μειώσει τον αριθμό των υποψήφιων μεταβλητών που θα μπορούσαν να είναι σημαντικές στην επεξήγηση της απόκρισης, έτσι ώστε τα μεταγενέστερα πειράματα να είναι πιο αποδοτικά και να απαιτούν λιγότερες εκτελέσεις (runs).

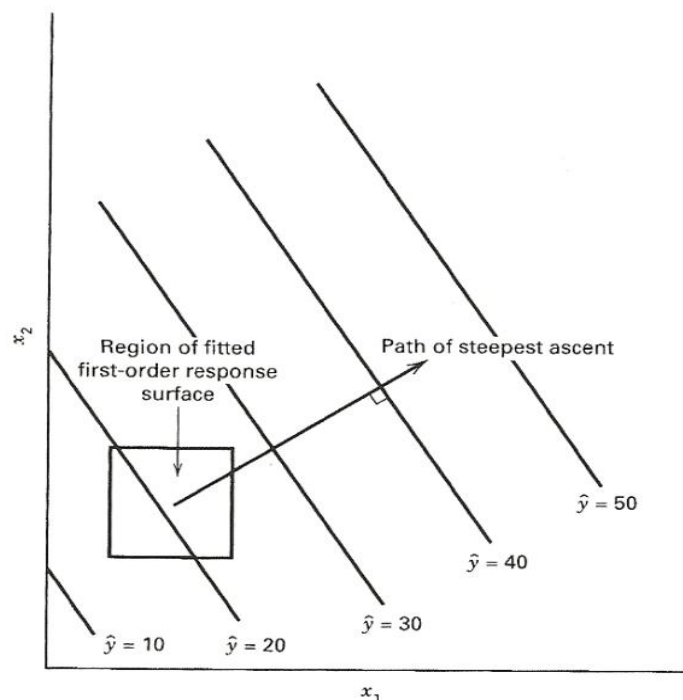
Ακολούθως, αφού προσδιοριστούν οι σημαντικές ανεξάρτητες μεταβλητές, ο πειραματιστής ενδεχομένως να επιθυμεί να προσδιορίσει αν η αρχική εκτίμηση των βέλτιστων συνθηκών λειτουργίας του συστήματος απέχει από το πραγματικό βέλτιστο. Σε τέτοιες περιπτώσεις, σκοπός του πειραματιστή είναι να μετακινηθεί άμεσα στη γενική περιοχή του βέλτιστου με τρόπο οικονομικό και αποδοτικό. Όταν βρίσκεται μακριά από το βέλτιστο, συνήθως υποθέτει ότι ένα μοντέλο πρώτης τάξης αποτελεί μια επαρκή προσέγγιση της αληθινής επιφάνειας σε μια μικρή περιοχή των x .

Η μέθοδος της πιο απότομης ανόδου (steepest ascent method) είναι μια διαδικασία κατά την οποία ο πειραματιστής μετακινείται ακολουθιακά κατά μήκος του

μονοπατιού της πιο απότομης ανόδου, δηλαδή στην κατεύθυνση της μέγιστης αύξησης της απόκρισης. Το μοντέλο πρώτης τάξης που προσαρμόζεται είναι

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i \quad (1.12)$$

και η αποκριτική επιφάνεια πρώτης τάξης, δηλαδή τα περιγράμματα του \hat{y} , είναι μια σειρά παράλληλων ευθειών όπως στο Σχήμα 1.3



Σχήμα 1.3. Αποκριτική επιφάνεια πρώτης τάξης και το μονοπάτι της πιο απότομης ανόδου

Η κατεύθυνση της πιο απότομης ανόδου είναι αυτή στην οποία το \hat{y} αυξάνει πιο γρήγορα και είναι παράλληλη στην κανονική της αποκριτικής επιφάνειας που προσαρμόζεται. Τα πειράματα εκτελούνται κατά μήκος του μονοπατιού της πιο απότομης ανόδου μέχρις ότου να μην παρατηρείται άλλη αύξηση στην απόκριση. Τότε, προσαρμόζοντας ένα νέο μοντέλο πρώτης τάξης και προσδιορίζοντας ένα νέο μονοπάτι, η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι την ανάκτηση του βέλτιστου. Το βέλτιστο επιτυγχάνεται όταν είναι πια αδύνατη η προσαρμογή του μοντέλου πρώτης τάξης.

1.4. Συνήθειες ιδιότητες σχεδιασμών

Η επιλογή του σχεδιασμού εξαρτάται από τις ιδιότητες που απαιτεί. Μερικές εξ αυτών είναι οι ακόλουθες :

Ορθογωνιότητα (Orthogonality)

Ένας σχεδιασμός D καλείται *ορθογώνιος* εάν ο πίνακας $X'X$ είναι διαγώνιος, όπου X ο πίνακας της εξίσωσης (1.7). Το πλεονέκτημα αυτής της προσέγγισης είναι ότι τα στοιχεία του $\hat{\beta}$ θα είναι ασυσχέτιστα. Αν το διάνυσμα σφάλματος ε της εξίσωσης (1.7) ακολουθεί κανονική κατανομή $N(0, \sigma^2 I_n)$, τότε αυτά τα στοιχεία θα είναι επίσης στοχαστικά ανεξάρτητα. Έτσι γίνεται ευκολότερος ο έλεγχος της σημαντικότητας των άγνωστων παραμέτρων του μοντέλου.

Περιστρεψιμότητα (Rotatability)

Η έννοια της περιστρεψιμότητας εισήχθη από τους Box και Hunter (1957). Ένας σχεδιασμός D καλείται *περιστρέψιμος* αν η διασπορά της εξίσωσης (1.11) είναι σταθερή σε όλα τα σημεία τα οποία ισαπέχουν από το κέντρο του σχεδιασμού, το οποίο μπορεί να επιλεγεί να είναι το σημείο της αρχής του συστήματος των k -διάστατων συντεταγμένων. Έτσι η $\text{Var}[\hat{y}(x)]$ είναι σταθερή σε όλα τα σημεία της επιφάνειας αν ο σχεδιασμός είναι περιστρέψιμος. Το πλεονέκτημα αυτής της ιδιότητας είναι ότι η προβλεπόμενη διασπορά παραμένει αναλλοίωτη υπό οποιαδήποτε περιστροφή των αξόνων συντεταγμένων.

1.5. Βελτιστοποίηση σχεδιασμού

Στη δεκαετία του 1980 διάφοροι μελετητές ασχολήθηκαν με την κατασκευή σχεδιασμών μέσω ηλεκτρονικού υπολογιστή. Αυτή την περίοδο η χρήση πειραματικών σχεδιασμών έγινε πολύ δημοφιλής γιατί απλά ήταν πιο εύκολο να βρει κανείς τον «κατάλληλο» σχεδιασμό. Υπήρξαν όμως και οι αρνητικές πτυχές αυτής της χρήσης: οι χρήστες δεν καταλάβαιναν τα κριτήρια που χρησιμοποιούνταν στην

κατασκευή του σχεδιασμού. Οι Kiefer και Wolfowitz (1959) τότε ανέπτυξαν τη *θεωρία βέλτιστων σχεδιασμών* (optimal design theory) η οποία αποτελείται από ό,τι είναι διαθέσιμο για την εκτίμηση και σύγκριση των RSM σχεδιασμών.

Βέλτιστοι σχεδιασμοί (optimal designs) είναι αυτοί που κατασκευάζονται βάσει ενός συγκεκριμένου κριτηρίου βελτιστοποίησης το οποίο αναφέρεται στο πόσο κοντά βρίσκεται η προβλεπόμενη τιμή της απόκρισης $\hat{y}(x)$ στον μέσο της $\mu(x)$ πάνω σε

μια περιοχή ενδιαφέροντος R . Τα κριτήρια που αφορούν στην ελαχιστοποίηση της διασποράς σε συνδυασμό με τις εκτιμήσεις των παραμέτρων του μοντέλου (1.1) καλούνται κριτήρια βελτιστοποίησης.

Το πιο επιφανές εξ αυτών είναι το κριτήριο της D -βελτιστότητας το οποίο μεγιστοποιεί την ορίζουσα του πίνακα $X'X$ και έτσι ελαχιστοποιείται το μέγεθος της περιοχής εμπιστοσύνης στο διάνυσμα β του μοντέλου (1.7). Δηλαδή, ένας D -optimal σχεδιασμός είναι εκείνος για τον οποίο η $|M| = |X'X| / N^p$ μεγιστοποιείται,

$$\max_{\xi} |M(\xi)| = |M(\xi^*)|. \quad (1.13)$$

Όπου p ο αριθμός των παραμέτρων στο μοντέλο, N το σύνολο των παρατηρήσεων και ξ ένας αυθαίρετος σχεδιασμός.

Έτσι, ορίζεται η D -αποδοτικότητα (D -efficiency) ενός D -βέλτιστου σχεδιασμού ξ^* ως

$$D_{eff} = \frac{|M(\xi)|}{|M(\xi^*)|}. \quad (1.14)$$

Η απόσταση D , όπως εξηγείται από τον Lucas (1976), «δίνει μια ένδειξη της πληροφορίας ανά σημείο για ένα σχεδιασμό» και άρα αποτελεί ένα μέτρο σύγκρισης μεταξύ διάφορων σχεδιασμών.

Ένα άλλο κριτήριο σχετικό με τη διασπορά είναι αυτό της G -βελτιστότητας το οποίο απαιτεί την ελαχιστοποίηση του μεγίστου της προβλεπόμενης διασποράς στην R της εξίσωσης (1.11). Αυτά τα κριτήρια έχουν ουσία όταν το προσαρμοσμένο (fitted) μοντέλο της εξίσωσης (1.1) αναπαριστά την πραγματική σχέση που συνδέει τη y με τις μεταβλητές ελέγχου της.

Ένας G -βέλτιστος σχεδιασμός ξ είναι αυτός για τον οποίο ισχύει

$$\min_{\xi} \left[\max_x v(x) \right], \quad (1.15)$$

όπου $v(x) = N \text{Var} \hat{y}(x) / \sigma^2$ η κλιμακωμένη διακύμανση πρόβλεψης.

Η G -αποδοτικότητα για ένα σχεδιασμό ξ ορίζεται ως

$$G_{eff} = \frac{P}{\max_x v(x)}. \quad (1.16)$$

Άλλα κριτήρια είναι αυτά της A - και της E -βελτιστότητας. Το πρώτο ασχολείται με μεμονωμένες διακυμάνσεις των συντελεστών παλινδρόμησης. Σε αντίθεση με την D -βελτιστότητα, δε χρησιμοποιεί συνδιακυμάνσεις. Ενώ το δεύτερο μεγιστοποιεί την ελάχιστη ιδιοτιμή του πίνακα πληροφορίας $X'X$.

1.6. Σχεδιασμοί για μοντέλα πρώτης και δεύτερης τάξης

Οι σχεδιασμοί για προσαρμογή μοντέλων πρώτης τάξης καλούνται *σχεδιασμοί πρώτης τάξης*, ενώ οι σχεδιασμοί για προσαρμογή μοντέλων δεύτερης τάξης καλούνται *σχεδιασμοί δεύτερης τάξης*.

1.6.1. Σχεδιασμοί πρώτης τάξης

Οι πιο κοινοί σχεδιασμοί πρώτης τάξης (first order designs) είναι οι 2^k παραγοντικοί (όπου k ο αριθμός των μεταβλητών ελέγχου) και οι Plackett-Burman.

- Ο 2^k παραγοντικός σχεδιασμός

Οι παραγοντικοί σχεδιασμοί χρησιμοποιούνται ευρέως σε πειράματα με διάφορους παράγοντες και στα οποία είναι αναγκαία η διερεύνηση των κοινών επιδράσεων και των αλληλεπιδράσεων.

Στον 2^k παραγοντικό σχεδιασμό, κάθε μεταβλητή ελέγχου μετράται σε δύο επίπεδα τα οποία μπορούν να κωδικοποιηθούν έτσι ώστε να παίρνουν τις τιμές -1 , 1 και τα οποία αναφέρονται στα λεγόμενα χαμηλά και υψηλά επίπεδα, αντίστοιχα, για κάθε μεταβλητή. Αυτός ο σχεδιασμός συνίσταται από όλους του πιθανούς συνδυασμούς τέτοιων επιπέδων για τους k παράγοντες. Έτσι, κάθε γραμμή του πίνακα σχεδιασμού D της εξίσωσης (1.6) αποτελείται από τα 1 και τα -1 και αναπαριστά ένα συγκεκριμένο συνδυασμό αγωγών (treatments). Σε αυτή την περίπτωση, ο αριθμός των πειραματικών εκτελέσεων n ισούται με τον 2^k δεδομένου ότι κανένα σημείο του σχεδιασμού δεν επαναλαμβάνεται περισσότερο από μια φορά.

Για παράδειγμα, σε ένα χημικό πείραμα, οι μεταβλητές ελέγχου είναι οι x_1 =η θερμοκρασία αλληλεπίδρασης η οποία μετράται στους 250, 300 ($^{\circ}C$), x_2 = η πίεση ορισμένη στα 10, 16 (psi) και x_3 = ο χρόνος της αλληλεπίδρασης ο οποίος παίρνεται στα 4, 8 (λεπτά). Η κωδικοποίηση ± 1 για τις x_1, x_2, x_3 επιτυγχάνεται μέσω του γραμμικού μετασχηματισμού,

$$x_1 = \frac{\text{θερμοκρασία} - 275}{25}$$

$$x_2 = \frac{\text{πίεση} - 13}{3}$$

$$x_3 = \frac{\text{χρόνος} - 6}{2}.$$

Ο αντίστοιχος 2^3 πίνακας σχεδιασμού (8×3) είναι της μορφής

$$D = \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (1.17)$$

Αν το k είναι μεγάλο ($k \geq 5$), ο 2^k σχεδιασμός απαιτεί μεγάλο αριθμό σημείων σχεδιασμού. Μια και ο αριθμός των άγνωστων παραμέτρων της εξίσωσης (1.4) είναι μόνο $k+1$, τα κλάσματα του 2^k μπορούν να θεωρηθούν κατάλληλα για την προσαρμογή ενός τέτοιου μοντέλου.

Για παράδειγμα, μπορούμε να υποθέσουμε έναν $\frac{1}{2}$ κλασματικό σχεδιασμό ο οποίος αποτελείται από το $\frac{1}{2}$ των σημείων του 2^k σχεδιασμού, τον 2^{k-1} σχεδιασμό ή έναν $\frac{1}{4}$ κλασματικό σχεδιασμό ο οποίος αποτελείται από το $\frac{1}{4}$ των σημείων του 2^k , τον 2^{k-2} .

Γενικά, ένα 2^{-m} -στο κλάσμα ενός 2^k σχεδιασμού αποτελείται από 2^{k-m} σημεία από έναν πλήρη 2^k σχεδιασμό, όπου το m είναι ένας θετικός ακέραιος για τον οποίο

ισχύει $2^{k-m} \geq k+1$ έτσι ώστε όλες οι $k+1$ παράμετροι του μοντέλου (1.4) να μπορούν να εκτιμηθούν.

Ας πάρουμε για παράδειγμα έναν 2^3 σχεδιασμό. Το $\frac{1}{2}$ κλάσμα του περιέχει $2^{3-1}=4$ συνδυασμούς αντί για 8 και καλείται 2^{3-1} σχεδιασμός. Ο πίνακας +, - για έναν 2^3 είναι

Πίνακας 1.1. +, - για ένα 2^3 σχεδιασμό.

factorial effects								
<i>treatment combination</i>	<i>I</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>AB</i>	<i>AC</i>	<i>BC</i>	<i>ABC</i>
<i>a</i>	+	+	-	-	-	-	+	+
<i>b</i>	+	-	+	-	-	+	-	+
<i>c</i>	+	-	-	+	+	-	-	+
<i>abc</i>	+	+	+	+	+	+	+	+
<i>ab</i>	+	+	+	-	+	-	-	-
<i>ac</i>	+	+	-	+	-	+	-	-
<i>bc</i>	+	-	+	+	-	-	+	-
(1)	+	-	-	-	+	+	+	-

Έστω ότι επιλέγουμε τους συνδυασμούς a, b, c και abc για το $\frac{1}{2}$ κλάσμα, δηλαδή αυτούς που έχουν «+» στην ABC στήλη. Έτσι ο ABC καλείται *γεννήτορας* ή λέξη του κλάσματος. Παρατηρούμε ότι η $I = ABC$ αποτελεί τη *σχέση ορισμού*. Γενικά, η σχέση ορισμού για ένα κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό είναι πάντα το σύνολο όλων των στηλών που ισούνται με τη στήλη I . Επίσης παρατηρούμε ότι οι τέσσερις πρώτες γραμμές της στήλης ABC είναι ακριβώς ίδιες με τη στήλη I , της στήλης A με της στήλης BC , της στήλης B με της στήλης AC , της στήλης C με της στήλης AB . Συνεπώς είναι αδύνατο να διαχωρίσουμε τις A και BC , τις B και AC και τις C και AB . Επομένως όταν εκτιμάμε τις A, B και C , ουσιαστικά εκτιμάμε τις $A+BC, B+AC, C+AB$, αντίστοιχα. Δύο ή περισσότερες επιδράσεις με την ιδιότητα αυτή καλούνται *ταυτόσημες* (aliases) επιδράσεις.

- *Ο Plackett-Burman σχεδιασμός*

Ο Plackett-Burman σχεδιασμός εισήχθη από τους Plackett και Burman (1946). Επιτρέπει δύο επίπεδα για κάθε μία από τις k μεταβλητές ελέγχου, όπως και ο 2^k σχεδιασμός, αλλά απαιτεί πολύ μικρότερο αριθμό πειραματικών εκτελέσεων, ειδικότερα όταν το k είναι μεγάλο. Είναι, λοιπόν, πιο «οικονομικός» από έναν 2^k σχεδιασμό. Ο αριθμός n των σημείων σχεδιασμού του ισούται με $k+1$, δηλαδή ίδιος

με τον αριθμό των παραμέτρων του μοντέλου (1.4). Υπό αυτή την εκτίμηση, ο σχεδιασμός καλείται *κορεσμένος* γιατί ο αριθμός των σημείων σχεδιασμού του είναι ίσος με τον αριθμό των παραμέτρων προς εκτίμηση στο μοντέλο. Επιπλέον, ο σχεδιασμός υπάρχει μόνο όταν το n είναι πολλαπλάσιο του 4. Άρα μπορεί να χρησιμοποιηθεί όταν ο αριθμός k των μεταβλητών ελέγχου ισούται με 3, 7, 11, 15, ...

Για να κατασκευάσουμε έναν Plackett-Burman σχεδιασμό σε k μεταβλητές, επιλέγεται πρωτίστως μία γραμμή της οποίας τα στοιχεία είναι ίσα με -1 ή 1 έτσι ώστε ο αριθμός των 1 να είναι $\frac{k+1}{2}$ και ο αριθμός των -1 να είναι $\frac{k-1}{2}$. Οι επόμενες $k-1$ γραμμές παράγονται από την πρώτη γραμμή μετακινώντας την κυκλικά μία θέση δεξιά για $k-1$ φορές. Τότε, μία γραμμή από αρνητικές μονάδες προστίθεται στο τέλος του σχεδιασμού.

Για παράδειγμα, για $k=7$, ο πίνακας σχεδιασμού D έχει οκτώ σημεία των οποίων οι συντεταγμένες είναι x_1, x_2, \dots, x_7 και είναι της μορφής

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (1.18)$$

1.6.2. Σχεδιασμοί δεύτερης τάξης

Ο αριθμός των παραμέτρων στο μοντέλο δεύτερης τάξης της εξίσωσης (1.5) είναι $p = 1 + 2k + \frac{1}{2}k(k-1)$. Έτσι, ο αριθμός των σημείων σε ένα τέτοιο σχεδιασμό πρέπει να είναι τουλάχιστον ίσος με p . Τα επίπεδα του σχεδιασμού συνήθως κωδικοποιούνται έτσι ώστε $\frac{1}{2} \sum_{u=1}^n x_{ui} = 0$ και $\frac{1}{n} \sum_{u=1}^n x_{ui}^2 = 1, i = 1, 2, \dots, k$, όπου n είναι ο αριθμός των πειραματικών εκτελέσεων και x_{ui} η u -οστή ρύθμιση της i -οστής μεταβλητής ελέγχου ($u = 1, 2, \dots, n$).

Οι σχεδιασμοί δεύτερης τάξης (second order designs) που συναντάμε συχνότερα είναι ο 3^k παραγοντικός, ο κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός και ο Box-Behnken σχεδιασμός.

- Ο 3^k παραγοντικός σχεδιασμός

Ο 3^k παραγοντικός σχεδιασμός χρησιμοποιείται συχνά από έναν πειραματιστή ο οποίος ενδιαφέρεται για την καμπυλότητα στη συνάρτηση απόκρισης. Αποτελείται από όλους τους συνδυασμούς των επιπέδων των k μεταβλητών ελέγχου οι οποίες έχουν τρία επίπεδα η κάθε μία. Αν τα επίπεδα ισαπέχουν, τότε μπορούν να κωδικοποιηθούν ως $-1, 0, 1$. Ο αριθμός των πειραματικών εκτελέσεων για αυτόν το σχεδιασμό είναι 3^k , ο οποίος μπορεί να είναι πολύ μεγάλος για μεγάλο k . Τα κλάσματα του 3^k μπορούν τότε να μειώσουν το κόστος των εκτελέσεων σε ένα πείραμα.

- Ο κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός

Ο κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός (Central Composite Design-CCD) εισήχθηκε από τους Box και Wilson (1951).

Αυτός ο σχεδιασμός είναι ενδεχομένων και ο δημοφιλέστερος. Συνίσταται από τα ακόλουθα τρία τμήματα :

1. Έναν πλήρη (ή ένα κλάσμα του) 2^k παραγοντικό σχεδιασμό του οποίου τα επίπεδα παραγόντων του είναι κωδικοποιημένα ως $-1, 1$. Αυτό καλείται παραγοντικό μέρος (factorial portion).
2. Ένα αξονικό μέρος το οποίο αποτελείται από 2^k σημεία διατεταγμένα έτσι ώστε δύο σημεία να επιλέγονται στον άξονα κάθε μεταβλητής ελέγχου απόστασης a από το κέντρο του σχεδιασμού.
3. n_0 κεντρικά σημεία.

Έτσι, ο συνολικός αριθμός των σημείων σχεδιασμού σε έναν CCD είναι $n = 2^k + 2k + n_0$.

Για παράδειγμα, ένας CCD για $k = 2, a = \sqrt{2}, n_0 = 2$ έχει τη μορφή

$$D = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & -1 \\ -1 & 1 \\ 1 & 1 \\ -\sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 \\ 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (1.18)$$

Παρατηρούμε ότι παίρνουμε έναν CCD αυξάνοντας ένα σχεδιασμό πρώτης τάξης, τον 2^k παραγοντικό, με επιπλέον πειραματικές εκτελέσεις, τα 2^k αξονικά σημεία, και τις n_0 επαναλήψεις κεντρικών σημείων. Άρα, αυτός ο σχεδιασμός αναπτύσσεται με τρόπο συνεπή με τη διαδοχική φύση μιας μελέτης αποκριτικής επιφάνειας, ξεκινώντας με ένα σχεδιασμό πρώτης τάξης για να προσαρμοστεί σε ένα μοντέλο πρώτης τάξης και στη συνέχεια προσθέτοντας σημεία για να προσαρμοστεί σε ένα μεγαλύτερο μοντέλο δεύτερης τάξης. Το μοντέλο πρώτης τάξης παρέχει σε πρώτη φάση πληροφορίες για το αποκριτικό σύστημα και τη σημαντικότητα των παραγόντων σε ένα δεδομένο πείραμα. Οι επιπλέον πειραματικές εκτελέσεις επιλέγονται για να δώσουν περισσότερες πληροφορίες που μπορούν να οδηγήσουν στον προσδιορισμό βέλτιστων λειτουργικών συνθηκών των μεταβλητών ελέγχου με τη χρήση του μοντέλου δεύτερης τάξης.

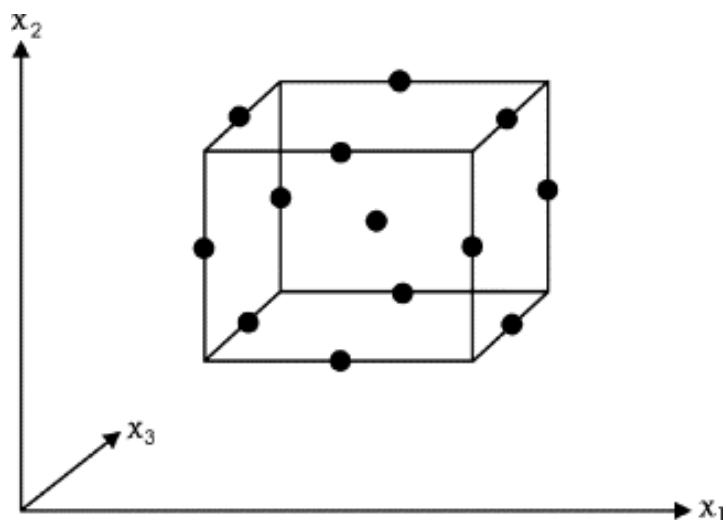
Οι τιμές του a (της αξονικής παραμέτρου) και του n_0 επιλέγονται κατά τρόπο ώστε ο CCD να αποκτήσει συγκεκριμένες επιθυμητές ιδιότητες.

Για παράδειγμα, επιλέγοντας $a = F^{1/4}$, όπου F ο αριθμός των σημείων στο παραγοντικό μέρος, παίρνουμε έναν περιστρέψιμο CCD. Μπορούμε τότε να επιλέξουμε την τιμή του n_0 έτσι ώστε ο CCD να είναι και ορθογώνιος.

- *Ο Box-Behnken σχεδιασμός*

Αυτός ο σχεδιασμός αναπτύχθηκε από τους Box και Behnken (1960). Παρέχει τρία επίπεδα για κάθε παράγοντα και συνίσταται από ένα συγκεκριμένο υποσύνολο των παραγοντικών συνδυασμών από τον 3^k παραγοντικό σχεδιασμό, δηλαδή δεν περιλαμβάνει έναν ενσωματωμένο παραγοντικό ή κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό. Σε αυτόν το σχεδιασμό οι συνδυασμοί των αγωγών βρίσκονται στα κέντρα των ακμών του χώρου διαδικασίας και στο κέντρο, δηλαδή είναι σφαιρικός. Ο BBD είναι περιστρέψιμος (ή σχεδόν περιστρέψιμος).

Ένας Box-Behnken σχεδιασμός για 3 παράγοντες



Σχήμα 1.4. BBD για 3 παράγοντες.

Η χρήση του Box-Behnken σχεδιασμού είναι διαδεδομένη στη βιομηχανική έρευνα γιατί είναι ένας οικονομικός σχεδιασμός και απαιτεί μόνο τρία επίπεδα για κάθε παράγοντα, τα οποία κωδικοποιούνται ως -1, 0, 1. Κάποιοι εξ αυτών είναι περιστρέψιμοι, αλλά γενικότερα αυτός ο σχεδιασμός δεν είναι πάντα περιστρέψιμος.

1.7. Ορθογώνιοι σχεδιασμοί δεύτερης τάξης κατά μπλοκ

Σε αρκετές περιπτώσεις στην RSM η μελέτη είναι πολύ μεγάλη για να επιτρέψει να γίνουν όλες οι εκτελέσεις υπό ομογενείς συνθήκες. Ως εκ τούτου, χρησιμοποιούμε σχεδιασμούς δεύτερης τάξης που διευκολύνονται με μπλοκινγκ (δηλαδή περιέχουν επιδράσεις κατά μπλοκ). Είναι σημαντικό η εκχώρηση των σημείων σχεδιασμού στα μπλοκ να γίνεται έτσι ώστε να ελαχιστοποιούνται οι επιπτώσεις στους συντελεστές του μοντέλου. Η ιδιότητα του πειραματικού σχεδιασμού που αναζητούμε είναι αυτή του ορθογώνιου μπλοκινγκ. Λέμε ότι ένας σχεδιασμός επιδέχεται ορθογώνιο μπλοκινγκ όταν οι επιδράσεις κατά μπλοκ στο μοντέλο είναι ορθογώνιες με τους συντελεστές του μοντέλου.

1.8. Αναλυτική τάξη σχεδιασμού

Ένας σχεδιασμός είναι *αναλυτικής τάξης* (resolution) R , αν καμία επίδραση p παραγόντων δεν είναι ταυτόσημη με άλλη επίδραση που περιέχει λιγότερους από $R - p$ παράγοντες.

- Σχεδιασμοί με resolution III: Σχεδιασμοί στους οποίους καμία κύρια επίδραση δεν είναι ταυτόσημη με άλλη κύρια επίδραση, αλλά με αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων και οι αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων μπορεί να είναι ταυτόσημες μεταξύ τους. Για παράδειγμα, ο 2^{3-1} σχεδιασμός με ορίζουσα σχέση $I = ABC$ (ή $I = -ABC$) είναι αναλυτικής τάξης III και συμβολίζεται 2_{III}^{3-1} .
- Σχεδιασμοί με resolution IV: Σχεδιασμοί στους οποίους καμία κύρια επίδραση δεν είναι ταυτόσημη με οποιαδήποτε άλλη επίδραση ή με οποιαδήποτε αλληλεπίδραση δύο παραγόντων, αλλά αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων είναι ταυτόσημες με άλλες αλληλεπιδράσεις δύο ή περισσοτέρων παραγόντων. Για παράδειγμα, ένας 2^{4-1} σχεδιασμός με ορίζουσα σχέση $I = ABCD$ είναι αναλυτικής τάξης IV και συμβολίζεται 2_{IV}^{4-1} .
- Σχεδιασμοί με resolution V: Σχεδιασμοί στους οποίους καμία κύρια επίδραση ή αλληλεπίδραση δύο παραγόντων δεν είναι ταυτόσημη με οποιαδήποτε άλλη κύρια επίδραση ή αλληλεπίδραση δύο παραγόντων, αλλά αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων είναι ταυτόσημες με αλληλεπιδράσεις τριών παραγόντων. Για παράδειγμα, ένας 2^{5-1} σχεδιασμός με ορίζουσα σχέση $I = ABCDE$ είναι αναλυτικής τάξης V και συμβολίζεται 2_V^{5-1} .

Συνήθως, είναι επιθυμητό να χρησιμοποιούνται κλασματικοί σχεδιασμοί με την υψηλότερη δυνατή αναλυτική τάξη, καθώς απαιτούνται λιγότεροι περιορισμοί στις υποθέσεις που αφορούν τις αμελητέες επιδράσεις ώστε να ερμηνευτούν με αξιοπιστία τα δεδομένα.

Κεφάλαιο 2

Σχεδιασμοί Τριών Επιπέδων για τη Μελέτη Ποσοτικών Μεταβλητών

Περίληψη:

Στο παρόν κεφάλαιο περιγράφεται μια κλάση μη πλήρων παραγοντικών σχεδιασμών τριών επιπέδων, χρήσιμη για την εκτίμηση των συντελεστών σε ένα βαθμωτό πολυώνυμο δευτέρου βαθμού, όπως αυτή αναπτύχθηκε από τους Box και Behnken το 1960. Οι σχεδιασμοί αυτοί πληρούν, ή σχεδόν πληρούν, το κριτήριο της περιστρεψιμότητας και στο μεγαλύτερο μέρος τους μπορούν να χωριστούν σε ορθογώνια μπλοκ. Επιπλέον, συμπεριλαμβάνεται ένα πλήρες παράδειγμα.

2.1. Εισαγωγή:

Μια κατηγορία μη πλήρων παραγοντικών ιδιαίτερου ενδιαφέροντος είναι αυτή των κλασματικών παραγοντικών (fractional factorials) του D.J.Finney. Εδώ ένα συγκεκριμένο σύνολο ιδιοτήτων χρησιμοποιείται για την επιλογή ενός $(1/p)^f$ κλάσματος του σχεδιασμού, το οποίο απαιτεί μόνο $p^{(k-f)}$ συνδυασμούς επιπέδων και καλείται $p^{(k-f)}$ παραγοντικό. Μια χρήσιμη και διαφορετική κατηγορία μη πλήρων παραγοντικών, στην οποία το επιλεγόμενο υποσύνολο δεν περιορίζεται να είναι ένα $(1/p)^f$ κλάσμα, οφείλεται στους Plackett και Burman.

Υπάρχουν άπειρες επιλογές για τα επίπεδα ποσοτικών μεταβλητών όπως η θερμοκρασία. Για να φτιάξουμε, λοιπόν, ένα σχεδιασμό ειδικά για ποσοτικές μεταβλητές, δεν υπάρχει ουσιαστική ανάγκη να περιοριστούμε σε πειραματικές συνθήκες για συνδυασμούς μερικών βασικών επιπέδων των συστατικών παραγόντων. Πολλοί χρήσιμοι σχεδιασμοί έχουν όντως επινοηθεί για τη μελέτη ποσοτικών μεταβλητών οι οποίοι δε χρησιμοποιούν την παραγοντική αρχή. Πάραυτα, υπάρχουν και συνήθεις περιπτώσεις στις οποίες παρόλο που οι μεταβλητές είναι ποσοτικές, για λόγους ευκολίας απαιτείται η χρήση μόνο μερικών επιπέδων για την κάθε μία.

Εδώ καταπιανόμαστε με μια συγκεκριμένη κατηγορία μη πλήρων παραγοντικών 3 επιπέδων ειδικά επιλεγμένων για τη μελέτη ποσοτικών μεταβλητών.

2.2. Μη πλήρη παραγοντικά για ποσοτικές μεταβλητές

Όταν ένας σχεδιασμός που περιλαμβάνει N εκτελέσεις χρησιμοποιείται για να υπολογιστούν ξεχωριστά L σταθερές, μπορεί να ορισθεί η αναλογία $R = N / L$ ως ο *συντελεστή πλεονάσματος* (redundancy factor) για το σχεδιασμό. Αυτός ο συντελεστής είναι αναγκαστικά μεγαλύτερος της μονάδας.

Υποθέτουμε σε ό,τι ακολουθεί ότι η λειτουργική σχέση μεταξύ της απόκρισης που μας ενδιαφέρει και των επιπέδων των k ποσοτικών πειραματικών μεταβλητών μπορεί να είναι βαθμωτή από ένα γενικό πολυώνυμο βαθμού d στα επίπεδα των μεταβλητών. Ένας σχεδιασμός κατάλληλος για να υπολογίσει ξεχωριστά τις $(k+d)!/k!d!$ σταθερές τέτοιου πολυωνύμου καλείται σχεδιασμός τάξης d . Ο υψηλότερος βαθμός πολυωνύμου που μπορεί να προσαρμοστεί στις παρατηρήσεις από ένα παραγοντικό p επιπέδων είναι $p-1$. Συνεπώς, όταν θεωρείται ως σχεδιασμός για την προσαρμογή ενός γενικού πολυωνύμου, ο p^k παραγοντικός είναι ένας σχεδιασμός της τάξης του $p-1$. Ο συντελεστής πλεονάσματος για ένα τέτοιο σχεδιασμό είναι ως εκ τούτου $p^k k! / (p-1)! (k+p-1)!$.

Όταν υπολογίζονται κατ' αυτόν τον τρόπο οι πλεονασματικοί παράγοντες για τους πλήρεις παραγοντικούς, είναι συνήθως μεγάλοι. Για παράδειγμα, ένας πρώτης τάξης σχεδιασμός, ο παραγοντικός 2 επιπέδων σε 5 παράγοντες. Χρειάζονται $2^5=32$ εκτελέσεις για να υπολογιστούν οι 6 σταθερές του πολυωνύμου πρώτου βαθμού. Άρα, έχει παράγοντα πλεονασμού $32/6=5.3$. Όμοια, ο δεύτερης τάξης σχεδιασμός, ο παραγοντικός 3 επιπέδων με 5 παράγοντες, ο οποίος απαιτεί $3^5=243$ εκτελέσεις για να υπολογίσει τις 21 σταθερές του πολυωνύμου 2^{ου} βαθμού, άρα έχει παράγοντα πλεονασμού $243/21=11.6$.

Σε περιπτώσεις στις οποίες η διακύμανση του πειραματικού σφάλματος δεν είναι τόσο μεγάλη ώστε να απαιτεί μεγάλο αριθμό παρατηρήσεων για τη λήψη της απαραίτητης ακρίβειας, είναι επιθυμητοί οι σχεδιασμοί με μικρό παράγοντα πλεονάσματος. Για παράδειγμα, αν $k = 3, 7, 11, 15, \dots, 4i-1$ οι διατάξεις 2 επιπέδων των Plackett-Burman παρέχουν σχεδιασμούς πρώτης τάξης που απαιτούν αντίστοιχα μόνο $4, 8, 12, 16, \dots, 4i$ εκτελέσεις, όπου i θετικός ακέραιος. Επομένως, υπάρχουν πρώτης τάξης σχεδιασμοί 2 επιπέδων πλεονάσματος 1. Οι σχεδιασμοί που έχουν αυτό το ελάχιστο πλεόνασμα σπάνια χρησιμοποιούνται στην πράξη γιατί δεν παρέχουν βαθμούς ελευθερίας στο υπόλοιπο (residual) και άρα δεν επιτρέπουν τη δυνατότητα μερικού ελέγχου της επάρκειας (adequacy) της υποτιθέμενης μορφής του μοντέλου. Άλλοι μη πλήρεις παραγοντικοί σχεδιασμοί 2 επιπέδων είναι διαθέσιμοι, παρόλο που

έχουν χαμηλούς παράγοντες πλεονάσματος (≤ 2) δεν παρουσιάζουν προβλήματα επάρκειας στα μοντέλα.

Για τα διαθέσιμα στο παρόν παραγοντικά 3 επιπέδων η κατάσταση είναι λιγότερο ικανοποιητική σε σχέση με αυτά των 2 επιπέδων. Για παράδειγμα, οι διάφορες ένα-ένα επαναλήψεις των 3^5 παραγοντικών οδηγούν σε ανεπιθύμητη συσχέτιση των εκτιμήσεων των συνδιακυμάνσεων και παρόλο που μπορεί να χρησιμοποιηθεί μία ένα-τρίτο επανάληψη του 3^5 παραγοντικού ως σχεδιασμός δεύτερης τάξης, έχει παράγοντα πλεονάσματος $81/21=3.9$ ο οποίος είναι υψηλός.

Κατά την ανάπτυξη της παρούσας κατηγορίας σχεδιασμών δε χρησιμοποιήθηκαν οι ιδιότητες του Finney, αλλά επιλέχθηκε άμεσα μέρος του 3^k παραγοντικού που επιτρέπει την εκτίμηση της αποδοτικότητας ενός βαθμωτού πολυωνύμου 2^{00} βαθμού. Συγκεκριμένα, οι Box και Behnken έφτιαξαν σχεδιασμούς δεύτερης τάξης με την ιδιότητα της περιστρεψιμότητας. Τα επίπεδα κωδικοποιήθηκαν έτσι ώστε οι 3 τιμές που παίρνει κάθε μία από τις μεταβλητές x_1, x_2, \dots, x_k να είναι -1, 0, 1 και το προσαρμοσμένο 2^{00} βαθμού πολυώνυμο με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων είναι

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} x_i x_j$$

Υπενθυμίζουμε ότι ένας περιστρέψιμος σχεδιασμός 2^{16} τάξης είναι αυτός του οποίου η διακύμανση του \hat{y} είναι σταθερή σε όλα τα σημεία ίσης απόστασης από το κέντρο του σχεδιασμού, δηλαδή για αυτά για τα οποία $\rho = \left(\sum_i x_i^2\right)^{1/2}$

είναι σταθερά. Μέσα από την κλάση των περιστρέψιμων σχεδιασμών επιλέχθηκαν αυτοί για τους οποίους η διακύμανση του \hat{y} συναρτήσει του ρ είναι σταθερή στην περιοχή του k -χώρου που καλύπτει ο σχεδιασμός.

Η απαίτηση της περιστρεψιμότητας εισάγεται προκειμένου να εξασφαλισθεί μια συμμετρική παραγωγή πληροφοριών στο χώρο των μεταβλητών ορισμένων με τρόπο ο οποίος προς στιγμή θεωρείται καταλληλότερος από τον πειραματιστή. Γενικότερα, ένας σχεδιασμός δε χρειάζεται πάντα να είναι περιστρέψιμος. Για συγκεκριμένες τιμές του k , αποδεικνύεται ότι μέσα στην κλάση των σχεδιασμών την οποία θεωρούμε, η περιστρεψιμότητα μπορεί να επιτευχθεί ακριβώς, σε άλλες όμως περιπτώσεις δεν είναι δυνατή η επίτευξή της. Οι Box-Behnken χαλάρωσαν ως ένα βαθμό τις απαιτήσεις. Όλοι οι σχεδιασμοί που συζητάμε έχουν υψηλό βαθμό ορθογωνιότητας. Συγκεκριμένα, μόνο ο σταθερός όρος b_0 και οι τετραγωνικές εκτιμήσεις b_i είναι συσχετισμένες η μία με την άλλη.

2.3. Μέθοδος για τη δημιουργία των σχεδιασμών

Οι σχεδιασμοί σχηματίζονται συνδυάζοντας παραγοντικούς σχεδιασμούς 2 επιπέδων με μη πλήρεις σχεδιασμούς κατά μπλοκ με ένα συγκεκριμένο τρόπο. Ας το δούμε καλύτερα σε ένα παράδειγμα. Στον Πίνακα 2.1 φαίνεται ένας ισορροπημένος μη πλήρης σχεδιασμός κατά μπλοκ για τον έλεγχο $k=4$ αγωγών σε $b=6$ μπλοκ μεγέθους $s=2$.

Πίνακας 2.1. Ένας ισορροπημένος μη πλήρης σχεδιασμός κατά μπλοκ για τέσσερις αγωγές σε έξι μπλοκ.

x_1	x_2	x_3	x_4
*	*		
		*	*
<hr/>			
*			*
	*	*	
<hr/>			
	*		*
*		*	

*Σχεδιασμοί για τους οποίους δεν υπάρχει συσχέτιση μεταξύ όλων ή υποσυνόλου των τετραγωνικών συντελεστών.

Πίνακας 2.2. Ένας 2^2 παραγοντικός σχεδιασμός.

x_i	x_j
-1	-1
1	-1
-1	1
1	1

Αν αυτός ο σχεδιασμός είχε χρησιμοποιηθεί κατά τον συνήθη τρόπο, οι αγωγές 1 και 2, οι οποίες συμβολίζονται με x_1 και x_2 αντίστοιχα, θα δοκιμάζονταν στο πρώτο μπλοκ, οι αγωγές 3 και 4 στο δεύτερο και ούτω καθεξής.

Μία βάση για έναν σχεδιασμό 3 επιπέδων σε 4 μεταβλητές επιτυγχάνεται με το συνδυασμό αυτού του μη πλήρους σχεδιασμού κατά μπλοκ με τον 2^2 παραγοντικό του Πίνακα 2.2. Οι δύο αστερίσκοι σε κάθε γραμμή του μη πλήρους σχεδιασμού κατά μπλοκ αντικαθίστανται από τις $s=2$ στήλες του 2^2 σχεδιασμού 2 επιπέδων. Όπου δεν εμφανίζεται αστερίσκος, εισάγεται μια μηδενική στήλη. Ο σχεδιασμός ολοκληρώνεται με την προσθήκη ενός αριθμού κεντρικών σημείων (0, 0, 0, 0), περίπου τρία είναι τα επιθυμητά. Ο προκύπτων σχεδιασμός φαίνεται στον Πίνακα 2.3. Όπως αναλύουμε αργότερα, αυτός ο σχεδιασμός μπορεί στην πραγματικότητα να εκτελεστεί σε τρία ορθογώνια μπλοκ, τα οποία υποδεικνύονται από διακεκομμένες γραμμές στον πίνακα.

Ο ληφθέν σχεδιασμός είναι ένας περιστρέψιμος σχεδιασμός δεύτερης τάξης κατάλληλος για μελέτη 4 μεταβλητών σε 27 εκτελέσεις και μπορεί να γίνει χωριστεί σε μπλοκ σε 3 σύνολα των 9 εκτελέσεων. Ωστόσο, δεν αποτελεί γενική αλήθεια ότι η παρούσα κλάση σχεδιασμών μπορεί να δημιουργηθεί από τους κεντρικούς σύνθετους σχεδιασμούς με περιστρεψιμότητα.

Πίνακας 2.3. Ένας μη πλήρης 3^4 παραγοντικός σχεδιασμός σε 3 μπλοκ των 9 πειραματικών εκτελέσεων.

x_1	x_2	x_3	x_4	
-1	-1	0	0	$b = 3$ μπλοκ
1	-1	0	0	
-1	1	0	0	
1	1	0	0	
0	0	-1	-1	
0	0	1	-1	
0	0	-1	1	
0	0	1	1	
0	0	0	0	
-1	0	0	-1	
1	0	0	-1	
-1	0	0	1	
1	0	0	1	
0	-1	-1	0	
0	1	-1	0	
0	-1	1	0	
0	1	1	0	
0	0	0	0	
0	-1	0	-1	
0	1	0	-1	
0	-1	0	1	
0	1	0	1	
-1	0	-1	0	
1	0	-1	0	
-1	0	1	0	
1	0	1	0	
0	0	0	0	

Στον Πίνακα 2.4 δίνεται ένας αριθμός σχεδιασμών της υπό μελέτη κλάσης, κατάλληλος για τη διερεύνηση 3, 4, 5, 6, 7, 9, 10, 11, 12 και 16 μεταβλητών. Σε αυτόν τον πίνακα, εκτός και αν επισημαίνεται διαφορετικά, ο συμβολισμός $(\pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1)$ επισημαίνει ότι όλοι οι συνδυασμοί των συν και μείον επιπέδων θα εκτελεστούν. Όταν είναι διαθέσιμος ένας κλασματικός παραγοντικός ο οποίος δεν

αναμιγνύει κύριες επιδράσεις και αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων μεταξύ τους, τότε μπορεί να χρησιμοποιηθεί αντί ενός πλήρους παραγοντικού (full factorial). Για παράδειγμα, στο σχεδιασμό No.8, το s ισούται με 5 και όπως επισημάνεται στον πίνακα, αντί να χρησιμοποιηθεί ένα 2^5 πλήρες παραγοντικό, το επιθυμητό αποτέλεσμα μπορεί να επιτευχθεί με μία μισή-επανάληψη.

2.4. Διαχωρισμός των σχεδιασμών σε μπλοκ

Όταν το διαθέσιμο πειραματικό υλικό για όλες τις πειραματικές εκτελέσεις είναι ανεπαρκές, τότε καθίσταται επιθυμητό η εκτέλεση να γίνεται κατά μπλοκ. Όπου είναι δυνατό, προτιμάται το ορθογώνιο μπλοκινγκ, για να διευθετηθεί ότι οι μπλοκ αντιθέσεις είναι ασυσχέτιστες με όλες τις εκτιμήσεις των συντελεστών του πολυωνύμου. Όταν επιτευχθεί αυτό, η ανάλυση μπορεί να διεξαχθεί σχεδόν όμοια με τον τρόπο όπου δεν υπάρχουν μπλοκ διαφορές. Η μόνη απαραίτητη τροποποίηση είναι ότι στον πίνακα ανάλυσης διακύμανσης τα αθροίσματα των τετραγώνων που συνδέονται με μπλοκ διαφορές πρέπει να αφαιρούνται από το υπόλοιπο άθροισμα τετραγώνων. Με την παραδοχή ότι το μοντέλο είναι κατάλληλο, το προσαρμοσμένο υπόλοιπο άθροισμα τετραγώνων (residual sum of squares) μπορεί τότε να χρησιμοποιηθεί στην εκτίμηση της εντός των μπλοκ διακύμανσης και επομένως και τα τυπικά σφάλματα των συντελεστών (standard errors of coefficients).

Εφαρμόζοντας τα πιο πάνω στο παρόν πρόβλημα, παρατηρεί κανείς ότι:

1. Όπου παρατηρούνται “σύνολα επαναλήψεων” στην παραγωγή ενός μη πλήρους σχεδιασμού κατά μπλοκ, αυτά αποτελούν μια βάση για το ορθογώνιο μπλοκινγκ. Αυτά τα σύνολα είναι υποσύνολα στα οποία κάθε ποικιλία δοκιμάζεται τον ίδιο αριθμό φορών.
2. Όπου οι συστατικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί μπορούν να χωρισθούν σε μπλοκ στα οποία μόνο αλληλεπιδράσεις πέραν των δύο παραγόντων αναμιγνύονται, αυτές μπορούν να αποτελέσουν μια βάση για ορθογώνιο μπλοκινγκ.

Έχουμε ήδη δει ένα παράδειγμα της πρώτης μεθόδου μπλοκινγκ στην ενότητα (2.3) αυτού του κεφαλαίου. Στον Πίνακα 2.4 οι διακεκομμένες γραμμές δείχνουν τα κατάλληλα τμήματα σε σύνολα επαναλήψεων. Χρησιμοποιώντας αυτά τα τμήματα ο σχεδιασμός No.2 μπορεί να χωριστεί σε τρία μπλοκ, ο σχεδιασμός No.3 σε δύο μπλοκ, ο σχεδιασμός No.6 σε πέντε μπλοκ και ο σχεδιασμός No.10 σε έξι μπλοκ. Τα κεντρικά σημεία πρέπει να κατανέμονται εξίσου μεταξύ μπλοκ για να διατηρείται η ορθογωνιότητα.

Η δεύτερη μέθοδος μπορεί να απεικονιστεί με το σχεδιασμό No.4, για τον οποίο η πρώτη μέθοδος δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί.

Πίνακας 2.4. Μερικοί χρήσιμοι σχεδιασμοί 3 επιπέδων.

Design Number	Number of Factors(k)	Design Matrix	No. of Points	Blocking and Association Schemes
1	3	$\begin{bmatrix} \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ \pm 1 & 0 & \pm 1 \\ 0 & \pm 1 & \pm 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\left. \begin{array}{l} 12 \\ 3 \\ \hline N = 15 \end{array} \right\}$	No orthogonal blocking BIB (one associate class)
2	4	$\begin{bmatrix} \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 \\ 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & \pm 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\left. \begin{array}{l} 8 \\ 1 \\ \hline 8 \\ 1 \\ \hline 8 \\ 1 \\ \hline N = 27 \end{array} \right\}$	3 blocks of 9 BIB (one associate class)
3	5	$\begin{bmatrix} \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 & 0 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 \\ 0 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\left. \begin{array}{l} 20 \\ 3 \\ \hline 20 \\ 3 \\ \hline N = 46 \end{array} \right\}$	2 blocks of 23 BIB (one associate class)

Πίνακας 2.4 (συνέχεια)

4	6	$\begin{bmatrix} \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	<p>2 blocks of 27. First Associates: (1, 4); (2, 5); (3, 6).</p>
5	7	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 \\ \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 \\ \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	<p>2 blocks of 31. BIB (one associate class).</p>
6	9	$\begin{bmatrix} \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline \pm 1 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 \\ 0 & 0 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	<p>(a) 5 blocks of 26. (b) 10 blocks of 13. First Associates: (1, 4); (1, 7); (4, 7); (2, 5); (2, 8); (5, 8); (3, 6); (3, 9); (6, 9).</p>

Πίνακας 2.4 (συνέχεια)

Design Number	Number of Factors(k)	Design Matrix	No. of Points	Blocking and Association Schemes
7	10	$\begin{bmatrix} 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 \\ \pm 1 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	<p>160</p> <p>$N = 170$</p>	<p>2 blocks of 85.</p> <p>Second Associates: (1, 8); (1, 9); (1, 10); (2, 6); (2, 7); (2, 10); (3, 5); (3, 7); (3, 9); (4, 5); (4, 6); (4, 8); (5, 10); (6, 9); (7, 8).</p>
8	11	$\begin{bmatrix} 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 \end{bmatrix}$	<p>176</p> <p>$N = 188$</p>	<p>Use 2^{r-1} fractionated on x_1, x_2, x_3, x_4.</p> <p>No orthogonal blocking.</p> <p>BIB (one associate class)</p>
9	12	$\begin{bmatrix} \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 \end{bmatrix}$	<p>192</p> <p>$N = 204$</p>	<p>2 blocks of 102.</p> <p>First Associates: (1, 7); (2, 8); (3, 9); (4, 10); (5, 11); (6, 12).</p>

Η βάση για το σχεδιασμό αποτελείται από 48 εκτελέσεις που δημιουργούνται από έξι 2^3 παραγοντικούς σχεδιασμούς. Αν εκτελούσαμε έναν 2^3 παραγοντικό σχεδιασμό, θα μπορούσε να πραγματοποιηθεί σε δύο σύνολα των τεσσάρων δοκιμών, συγχέοντας την 3-παραγόντων αλληλεπίδραση με μπλοκ. Δοκιμές με επίπεδα (1, 1, 1), (1, -1, -1), (-1, -1, 1), (-1, 1, -1) θα συμπεριλαμβάνονταν σε ένα σετ (θετικό σετ) και δοκιμές με επίπεδα (-1, -1, -1), (-1, 1, 1), (1, -1, 1), (1, 1, -1) στο άλλο (αρνητικό σετ). Η πλήρης ομάδα των 48 δοκιμών μπορεί να χωριστεί σε δύο ορθογώνια μπλοκ των 24 αποδίδοντας ένα σύνολο (είτε θετικό είτε αρνητικό) από κάθε ένα από τους 2^3 παραγοντικούς σχεδιασμούς σε ένα μπλοκ και το υπόλοιπο στο άλλο.

Αυτή η μέθοδος χρησιμοποιείται όπου το μέγεθος του μπλοκ $s > 2$ και εφαρμόζεται στους σχεδιασμούς 4, 5, 6, 7, 9 και 10 του Πίνακα 2.4. Στους σχεδιασμούς 7, 9 και 10 το βασικό παραγοντικό είναι ένας 2^4 σχεδιασμός. Αυτό χωρίζεται σε δύο σύνολα με τέτοιο τρόπο ώστε να αναμιγνύονται οι 4 παραγόντων αλληλεπιδράσεις, δηλαδή εκτελέσεις με επίπεδα των οποίων το γινόμενο είναι θετικό κατανέμονται σε μια ομάδα, ενώ οι υπόλοιπες σε άλλη.

Σε μερικές περιπτώσεις, και οι δύο μέθοδοι μπορούν να χρησιμοποιηθούν ταυτόχρονα. Έτσι, στον σχεδιασμό 6 ο βασικός μη πλήρης σχεδιασμός κατά μπλοκ περιέχει πέντε “επαναλήψεις” οι οποίες ξεχωρίζουν από τις διακεκομμένες γραμμές στον πίνακα, παρέχοντας μια βάση για τη δημιουργία πέντε μπλοκ των 24 εκτελέσεων. Κάθε ένα από αυτά τα μπλοκ μπορεί τώρα να χωριστεί σε δύο κατανέμοντας τα θετικά σύνολα των συνιστών σχεδιασμών σε ένα μπλοκ και τα αρνητικά σύνολα σε άλλο. Εν τέλει, εξασφαλίζεται μία διευθέτηση για την παραγωγή δέκα μπλοκ των δώδεκα εκτελέσεων. Όμοια διαδικασία μπορεί να εφαρμοσθεί και για μπλοκινγκ του σχεδιασμού No.10.

Καθώς το ορθογώνιο μπλοκινγκ είναι επιθυμητό, δεδομένου ότι ελαχιστοποιεί τη διακύμανση των εκτιμήσεων των συντελεστών παλινδρόμησης, μπορεί να χρησιμοποιηθεί μη-ορθογώνιο μπλοκινγκ, χωρίς ιδιαίτερη απώλεια ακρίβειας, σε μπλοκ μικρότερου μεγέθους από τα πιο πάνω.

2.5. Εισαγωγή κεντρικών σημείων

Επιπρόσθετα των επαναλήψεων που δημιουργούνται άμεσα από τον 2^s παραγοντικό σχεδιασμό, είναι απαραίτητο να συμπεριληφθούν n_0 κεντρικά σημεία, έτσι ώστε να αποφύγουμε ο πίνακας ροπών να είναι ιδιάζων (singular). Ο αριθμός των κεντρικών σημείων επηρεάζει το “προφίλ” της διακύμανση, δηλαδή τη διακύμανση του y θεωρούμενη ως τη συνάρτηση της απόστασης $\rho = \sqrt{\sum x_i^2}$ από το κέντρο του σχεδιασμού. Ο ακριβής αριθμός των κεντρικών σημείων δεν είναι σημαντικός. Οι αριθμοί που δίνονται στον πίνακα επιλέγονται έτσι ώστε το “προφίλ” της διακύμανσης να είναι εύλογα ομοιόμορφο πάνω στην περιοχή του πειραματικού σχεδιασμού και έτσι ώστε να υπάρχει ίσος αριθμός κεντρικών σημείων σε κάθε μπλοκ.

2.6. Ανάλυση των σχεδιασμών

2.6.1. Υπολογισμός των εκτιμήσεων

Για τον υπολογισμό των εκτιμήσεων b_0, b_i, b_{ij}, b_{ii} είναι πρώτα απαραίτητο να σημειωθούν τα επίπεδα για κάθε μεταβλητή του σχεδιασμού και στη συνέχεια να προστεθούν επιπλέον στήλες αντίστοιχα στις $x_1^2, x_2^2, \dots, x_k^2, x_1x_2, x_1x_3, \dots, x_{k-1}x_k$. Αυτό γίνεται στον Πίνακα 2.6 για το σχεδιασμό 2 όπου επίσης φαίνεται ένα σύνολο τυπικών δεδομένων για απεικόνιση.

Πίνακας 2α. Εκτιμήσεις των συντελεστών παλινδρόμησης και οι διακυμάνσεις τους.

$$b_0 = \bar{y}_0$$

$$b_i = A \{iy\}$$

$$b_{ii} = B \{i^2y\} + C_1 \sum_i^{n_1} \{j^2y\} + C_2 \sum_l^{n_2} \{l^2y\} - (\bar{y}_0 / s)$$

όπου τα $\sum_i^{n_1}$ και $\sum_l^{n_2}$ αναφέρονται στο άθροισμα πάνω στις πρώτες και δεύτερες associates του i . (i συνδεόμενα: ζεύγη αγωγών που εμφανίζονται μαζί λ_i φορές)

$$b_{ij} = D_1 \{ijy\} \quad i, j \text{ πρώτες associates}$$

$$b_{ij} = D_2 \{ijy\} \quad i, j \text{ δεύτερες associates}$$

$$V(b_0) = \frac{1}{n_0} \sigma^2$$

$$V(b_i) = A \sigma^2$$

$$V(b_{ii}) = \left[B + 1 / s^2 n_0 \right] \sigma^2$$

$$V(b_{ij}) = D_1 \sigma^2 \quad i, j \text{ πρώτες associates}$$

$$= D_2 \sigma^2 \quad i, j \text{ δεύτερες associates}$$

$$Cov(b_0 b_{ii}) = -\frac{1}{s^2 n_0} \sigma^2$$

$$Cov(b_{ii} b_{jj}) = \left[C_1 + \frac{1}{s^2 n_0} \right] \sigma^2 \quad i, j \text{ πρώτες associates}$$

$$= \left[C_2 + \frac{1}{s^2 n_0} \right] \sigma^2 \quad i, j \text{ δεύτερες associates}$$

Υπολογίζεται στη συνέχεια το άθροισμα των γινομένων από τις ενδείξεις στις στήλες με τις παρατηρήσεις y . Επιπλέον, φαίνεται και η μέση τιμή των παρατηρήσεων στα κεντρικά σημεία y_0 . Στη συνέχεια, οι υπολογισμένες ποσότητες

αντικαθίστανται στους τύπους που αναφέρονται στον Πίνακα 2α παρέχοντας τις απαιτούμενες εκτιμήσεις χρησιμοποιώντας τις σταθερές του Πίνακα 2c.

Σημείωση: Χρησιμοποιούνται οι ακόλουθοι τύποι:

$$\{iy\} = \sum_{u=1}^N x_{iu} y_u$$

$$\{i iy\} = \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 y_u$$

$$\{ijy\} = \sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju} y_u$$

Το γενικό σύνολο μπορεί να θεωρηθεί ως το άθροισμα των γινομένων μεταξύ y και μιας ψευδομεταβλητής x_0 η οποία παίρνει πάντα την τιμή 1 έτσι ώστε

$$\{0y\} = \sum_{u=1}^N y_u$$

Πίνακας 2b. Τύποι για την ανάλυση της διακύμανσης.

Διόρθωση λόγω του μέσου: $\{0y\}^2 / N$

Άθροισμα τετραγώνων λόγω των γραμμικών όρων: $A \sum_{i=1}^k \{iy\}^2$

Άθροισμα τετραγώνων λόγω των όρων δευτέρου βαθμού:

(a) Λόγω των όρων αλληλεπίδρασης: $D_1 \sum_{i<j}^{n_1} \{ijy\}^2 + D_2 \sum_{i<j}^{n_2} \{ijy\}^2$

(b) Λόγω των τετραγωνικών όρων: $b_0 \{0y\} + \sum_{i=1}^k b_i \{i iy\} - \{0y\}^2 / N$

Συνολικό άθροισμα τετραγώνων μετά τη διόρθωση για τον μέσο: $\sum_{u=1}^N y_u^2 - \{0y\}^2 / N$

Στο παρόν παράδειγμα τα αθροίσματα των γινομένων είναι:

$$\bar{y}_0 = 90.6$$

$$\{0y\} = 2319.4$$

$$\{1y\} = 23.2$$

$$\{11y\} = 1033.6$$

$$\{12y\} = -6.7$$

$$\{13y\} = -15.3$$

$$\{14y\} = 3.8$$

$$\{2y\} = -23.5$$

$$\{22y\} = 1010.3$$

$$\{23y\} = -6.7$$

$$\{24y\} = -10.5$$

$$\{3y\} = 13.6$$

$$\{33y\} = 1027.0$$

$$\{34y\} = -17.0$$

$$\{4y\} = -44.1$$

$$\{44y\} = 1024.3$$

Πίνακας 2c. Σταθερές για τους σχεδιασμούς του Πίνακα 2.4.

Σχεδιασμός	A	B	C ₁	C ₂	D ₁	D ₂	s	n ₀	Παραγ.πλεονασμού
1	1/8	1/4	-1/16	0	1/4	0	2	3	1.2
2	1/12	1/8	-1/48	0	1/4	0	2	3	1.6
3	1/16	1/12	-1/96	0	1/4	0	2	6	1.9
4	1/24	17/216	-10/216	-1/216	1/16	1/8	3	6	1.7
5	1/24	1/16	-1/144	0	1/8	0	3	6	1.6
6	1/40	1/30	-1/120	-1/720	1/16	1/8	3	10	2.2
7	1/64	17/512	1/512	-7/512	1/16	1/32	4	10	2.4
8	1/80	1/48	-1/600	0	1/32	0	5	12	2.3
9	1/64	23/1024	-9/1024	-1/1024	1/32	1/16	4	12	2.1
10	1/96	41/3072	-7/3072	-1/3072	1/32	1/16	4	12	2.5

Πίνακας 2.6. Υπόδειγμα υπολογισμού για το σχεδιασμό τεσσάρων παραγόντων (No. 2).

x_1	x_2	x_3	x_4	x_1^2	x_2^2	x_3^2	x_4^2	x_1x_2	x_1x_3	x_1x_4	x_2x_3	x_2x_4	x_3x_4	y
-1	-1	0	0	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0	84.7
1	-1	0	0	1	1	0	0	-1	0	0	0	0	0	93.3
-1	1	0	0	1	1	0	0	-1	0	0	0	0	0	84.2
1	1	0	0	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0	86.1
0	0	-1	-1	0	0	1	1	0	0	0	0	0	1	85.7
0	0	1	-1	0	0	1	1	0	0	0	0	0	-1	96.4
0	0	-1	1	0	0	1	1	0	0	0	0	0	-1	88.1
0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	0	0	0	1	81.8
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	93.8
-1	0	0	-1	1	0	0	1	0	0	1	0	0	0	89.4
1	0	0	-1	1	0	0	1	0	0	-1	0	0	0	88.7
-1	0	0	1	1	0	0	1	0	0	-1	0	0	0	77.8
1	0	0	1	1	0	0	1	0	0	1	0	0	0	80.9
0	-1	-1	0	0	1	1	0	0	0	0	1	0	0	80.9
0	1	-1	0	0	1	1	0	0	0	0	-1	0	0	79.8
0	-1	1	0	0	1	1	0	0	0	0	-1	0	0	86.8
0	1	1	0	0	1	1	0	0	0	0	1	0	0	79.0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	87.3
0	-1	0	-1	0	1	0	1	0	0	0	0	1	0	86.1
0	1	0	-1	0	1	0	1	0	0	0	0	-1	0	87.9
0	-1	0	1	0	1	0	1	0	0	0	0	-1	0	85.1
0	1	0	1	0	1	0	1	0	0	0	0	1	0	76.4
-1	0	-1	0	1	0	1	0	0	1	0	0	0	0	79.7
1	0	-1	0	1	0	1	0	0	-1	0	0	0	0	92.5
-1	0	1	0	1	0	1	0	0	-1	0	0	0	0	89.4
1	0	1	0	1	0	1	0	0	1	0	0	0	0	86.9
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	90.7

και από τον Πίνακα 2c για τον σχεδιασμό No.2 έχουμε

$$A = 1/12, B = 1/8, C_1 = -1/48, D_1 = 1/4, s = 2, n_0 = 3$$

Εφαρμόζοντας τον τύπο του Πίνακα 2α,

$$\begin{aligned}
 b_0 &= 90.6 \\
 b_2 &= -1.96 & b_1 &= 1.93 & b_{11} &= -1.42 \\
 b_3 &= 1.13 & b_{22} &= -4.33 & b_{13} &= -3.83 \\
 b_4 &= -3.68 & b_{33} &= -2.24 & b_{14} &= 0.95 & b_{12} &= -1.68 \\
 b_{24} &= -2.63 & b_{44} &= -2.58 & b_{23} &= -1.68 \\
 b_{34} &= -4.25
 \end{aligned}$$

Για παράδειγμα:

$$\begin{aligned}
 b_1 &= \frac{1}{12}(23.2) = 1.930 \\
 b_{11} &= \frac{1}{8}(1033.6) - \frac{1}{48}(4095.2) - \frac{90.6}{2} = -1.416 \\
 b_{12} &= \frac{1}{4}(-6.7) = -1.675
 \end{aligned}$$

2.6.2. Ανάλυση της διακύμανσης

Ο Πίνακας Ανάλυσης Διασποράς (ANOVA) εύκολα υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τις σχέσεις του Πίνακα 2b ως εξής:

	s.s.	d.f.	m.s.
Λόγω γραμμικών όρων	268.36	4	67.09
Λόγω όρων δεύτερης τάξης	294.92	10	29.49
Υπόλοιπο	126.71	12	10.56
Σύνολο αφού αφαιρεθεί ο μέσος	689.99	26	

Οι παρατηρήσεις που σημειώθηκαν στο κεντρικό σημείο ήταν 93.8, 87.3 και 90.7. Αν δε γινόταν μπλόκινγκ για το σχεδιασμό (δηλαδή αν οι εκτελέσεις γίνονταν εξ ολοκλήρου σε τυχαία σειρά) αυτές οι εκτελέσεις στο κεντρικό σημείο θα παρείχαν δύο βαθμούς ελευθερίας για τον υπολογισμό της διακύμανσης του σφάλματος. Το άθροισμα τετραγώνων για αποκλίσεις από τον μέσο τους θα ήταν 21.16 και το άθροισμα τετραγώνων για το υπόλοιπο θα μπορούσε να χωριστεί σε δύο μέρη, ως εξής

	s.s.	d.f.	m.s.	
Υπόλοιπο	{ Επαναλαμβανόμενα κεντρικά σημεία	21.16	2	10.58
	{ Υπολοιπόμενο	105.57	10	10.58
		<u>126.71</u>	<u>12</u>	

για να αποτελέσει μια βάση για τον ενδεχόμενο έλεγχο καλής προσαρμογής για το μοντέλο. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα, δεδομένου ότι το άθροισμα τετραγώνων του σφάλματος θα είχε μόνο δύο βαθμούς ελευθερίας, ένας τέτοιος έλεγχος θα παρείχε μόνο την ένδειξη ότι το άθροισμα τετραγώνων του υπολοίπου ήταν ή δεν ήταν σωστής τάξης μεγέθους.

2.6.3. Απαλοιφή των μπλοκ επιδράσεων

Ο σχεδιασμός που παρουσιάζεται βασικά πραγματοποιήθηκε σε τρία μπλοκ των εννέα παρατηρήσεων. Αφού το μπλοκινγκ είναι ορθογώνιο, η απαλοιφή των μπλοκ επιδράσεων θα επηρεάσει μόνο το άθροισμα τετραγώνων των υπολοίπων (residual sum of squares). Οι μέσοι των μπλοκ $\bar{y}_1, \bar{y}_2, \bar{y}_3$ είναι αντίστοιχα 749.1/9, 750.6/9, 774.7/9 και το άθροισμα τετραγώνων που συνδέεται με μπλοκ είναι

$$\frac{(749.1)^2 + (750.6)^2 + (774.7)^2}{9} - \frac{(2319.4)^2}{27} = 105.53$$

Τώρα, δεν μπορούν να απομονωθούν οι δύο βαθμούς ελευθερίας για τις διαφορές μεταξύ των κεντρικών σημείων και ο πίνακας ANOVA είναι ο εξής:

	s.s.	d.f.	m.s.	
Λόγω γραμμικών όρων	268.36	4	67.09	
Λόγω όρων δεύτερης τάξης	294.92	10	29.492	
Υπόλοιπο	126.71	21.18	10	2.118
Μπλοκ		105.53	2	52.765
Σύνολο αφού αφαιρεθεί ο μέσος όρος	689.99			

Φαίνεται ότι σε αυτό το παράδειγμα ένα μεγάλο μέρος της διασποράς υπολοίπων αντιπροσωπεύεται από τα μπλοκ. Υποθέτοντας ότι το μοντέλο είναι επαρκές, το μέσο άθροισμα τετραγώνων (σφάλματος) το οποίο είναι 2.118 παρέχει μια εκτίμηση \hat{S}^2 της S^2 . Συνεπώς, αυτή η εκτίμηση χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των τυπικών σφαλμάτων των συντελεστών διακύμανσης. Αν μπορούν να γίνουν επιπλέον εκτελέσεις στο κεντρικό σημείο, τότε θα πρέπει να κατανέμεται ίσος αριθμός από αυτές σε κάθε μπλοκ. Οι ομαδοποιημένες διακυμάνσεις για τις επαναλήψεις στο κεντρικό σημείο εντός κάθε μπλοκ, θα παρείχαν τότε μια εκτίμηση σφάλματος κατάλληλη για έλεγχο της επάρκειας του μοντέλου.

2.6.4. Διακυμάνσεις, συνδιακυμάνσεις και τυπικά σφάλματα

Οι διακυμάνσεις και οι συνδιακυμάνσεις των διαφόρων εκτιμήσεων παράγονται από τους τύπους του Πίνακα 2α, με μια κατάλληλη εκτίμηση \hat{S}^2 της πειραματικής διακύμανσης σφάλματος S^2 . Στο παρόν παράδειγμα χρησιμοποιείται η εκτίμηση $\hat{S}^2=2.118$. Παίρνοντας τετραγωνικές ρίζες των εκτιμημένων διακυμάνσεων, λαμβάνονται οι ακόλουθες τιμές των τυπικών σφαλμάτων για τις εκτιμήσεις:

$$S.E.(b_0) = \sqrt{\frac{2.118}{3}} = 0.84$$

$$S.E.(b_i) = \sqrt{\frac{2.118}{12}} = 0.42$$

$$S.E.(b_{ii}) = \sqrt{2.118 \cdot \frac{5}{24}} = 0.66$$

$$S.E.(b_{ij}) = \sqrt{\frac{2.118}{4}} = 0.73$$

2.6.5. Σχολιασμός της Ανάλυσης

Ο τύπος της ανάλυσης που εφαρμόζεται πιο πάνω είναι κατάλληλος για τους σχεδιασμούς 1, 2, 3, 5 και 8. Η ανάλυση των σχεδιασμών 4, 6, 7, 9 και 10 είναι ελαφρώς πιο περίπλοκη. Οι εκτιμήσεις της b_0 , του σταθερού όρου και των γραμμικών όρων b_i λαμβάνονται ακριβώς όπως και πριν. Ωστόσο, ο πολλαπλασιαστής D για τον υπολογισμό των αλληλεπιδράσεων παίρνει δύο τιμές για αυτούς τους σχεδιασμούς. Ο πολλαπλασιαστής D_1 είναι κατάλληλος για τους συνδυασμούς μεταβλητών οι οποίοι αναφέρονται ως πρώτες associates στον Πίνακα 2.4 και ο D_2 για αυτούς τους συνδυασμούς που αναφέρονται ως δεύτερες associates. Στον Πίνακα 2.4 αναφέρονται συνδυασμοί που ανήκουν σε μόνο μία από τις associate κλάσεις. Όλοι οι υπόλοιποι ανήκουν στην άλλη associate κλάση. Για παράδειγμα, στον σχεδιασμό No.4 οι αλληλεπιδράσεις 1 4, 2 5 και 3 6 είναι μεταξύ των πρώτων associates και παίρνουν τον πολλαπλασιαστή D_1 . Για τον σχεδιασμό No.7, ωστόσο, είναι πιο οικονομικό σε χώρο να πάρει κανείς τις δεύτερες associates οι οποίες παίρνουν τον πολλαπλασιαστή D_2 . Στον υπολογισμό της εκτίμησης της b_{ii} (Πίνακας

2α), ο C_1 είναι ο πολλαπλασιαστής του $\sum_j^{n_1} \{j j y\}$ στο οποίο τα j είναι οι πρώτες

associates του i , ενώ ο C_2 είναι ο πολλαπλασιαστής του $\sum_l^{n_2} \{l l y\}$ στο οποίο τα l είναι

οι δεύτερες associates του i .

Κεφάλαιο 3

Μικροί Box-Behnken Σχεδιασμοί

Περίληψη:

Ο Box-Behnken σχεδιασμός είναι ένας δημοφιλής σχεδιασμός αποκριτικών επιφανειών. Δημιουργήθηκε, λοιπόν, η ανάγκη κατασκευής τέτοιων σχεδιασμών με μικρότερο αριθμό εκτελέσεων για λόγους οικονομίας. Εδώ αναλύουμε αυτήν ακριβώς τη διαδικασία.

Ένας κλασικός Box-Behnken σχεδιασμός κατασκευάζεται με συνδυασμό παραγοντικών σχεδιασμών δύο επιπέδων και *μη πλήρεις σχεδιασμούς κατά μπλοκ* (incomplete block designs).

Από την άλλη, οι μικροί Box-Behnken σχεδιασμοί χρησιμοποιούν *ισορροπημένους μη πλήρεις σχεδιασμούς κατά μπλοκ* (balanced incomplete block designs – BIBDs) (ή μερικώς BIBDs) και αντικαθιστούν τις αγωγές μερικώς με 2_{III}^{3-1} σχεδιασμούς και μερικώς με πλήρεις παραγοντικούς σχεδιασμούς. Οι νέοι αυτοί σχεδιασμοί μπορούν να προσαρμοστούν σε ένα μοντέλο δεύτερης τάξης δίνοντας μεγάλες αποδοτικότητες, ενώ το απαιτούμενο μέγεθος εκτελέσεών τους είναι πολύ μικρότερο σε σχέση με το αντίστοιχο των κλασικών BBDs. Επίσης, η ιδιότητα της ορθογωνιότητας διατηρείται και στους νέους BBDs.

Τέλος, η ταξινόμηση των παραμέτρων γίνεται σε ομάδες και εισάγεται ο Group Moment Matrix (GMM) για την εκτίμηση των παραμέτρων σε κάθε ομάδα. Αυτό μας επιτρέπει να μειώσουμε σημαντικά τα υπολογιστικά κόστη στην κατασκευή των σχεδιασμών.

3.1. Εισαγωγή

Έστω k παράγοντες, x_1, x_2, \dots, x_k , υπό μελέτη για τον καθορισμό των επιδράσεων τους σε μια μεταβλητή απόκριση y . Ξεκινάμε με το μοντέλο πρώτης τάξης $y_t = \beta_0 + \beta_1 x_{1t} + \dots + \beta_k x_{kt} + \varepsilon_t$, όπου $t = 1, \dots, n$, n ο αριθμός των εκτελέσεων και ε_t ο όρος σφάλματος στην t -οστή εκτέλεση με μηδενικό μέσο και διακύμανση σ^2 . Εάν παρουσιάζει έλλειψη προσαρμογής (lack-of-fit), μπορούμε να προσθέσουμε επιπλέον εκτελέσεις για να μπορέσουμε να προσαρμόσουμε το μοντέλο δεύτερης τάξης

$$y_t = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_{it} + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_{it}^2 + \sum_{i=1}^k \sum_{j>i}^k \beta_{ij} x_{it} x_{jt} + \varepsilon_t \quad (3.1)$$

Θα εκτιμήσουμε συνολικά $(k+2)(k+1)/2$ παραμέτρους, συμπεριλαμβανομένων ενός σταθερού όρου, k όρους πρώτης τάξης, k τετραγωνικούς όρους και $k(k+1)/2$ όρους αλληλεπίδρασης.

- Ροπές σχεδιασμού (Design Moments)

Έστω ο πίνακας σχεδιασμού

$$D = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{21} & \dots & x_{k1} \\ x_{12} & x_{22} & \dots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1n} & x_{2n} & \dots & x_{kn} \end{bmatrix}$$

Λέμε ότι οι ροπές σχεδιασμού είναι

$$[i] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}$$

$$[ii] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^2$$

$$[ij] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju} \quad \text{κλπ.}$$

$$[iii] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^3$$

$$[iijj] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 x_{ju}^2$$

όπου N ο αριθμός των σημείων και x_{iu} το στοιχείο του πίνακα D στη θέση iu

Οι ροπές βοηθούν στο να χαρακτηρίσουμε τη γεωμετρία του σχεδιασμού και απλοποιούν την ιδιότητα της ορθογωνιότητας στους σχεδιασμούς πρώτης τάξης.

Ο πίνακας $\mathbf{N}^{-1}(\mathbf{X}'\mathbf{X})$ καλείται *πίνακας ροπών σχεδιασμού*.

- Ισορροπημένοι μη πλήρεις σχεδιασμοί κατά μπλοκ (BIBDs)

Ένας πλήρης σχεδιασμός αποτελείται από b μπλοκ που το κάθε ένα περιέχει όλα τα v σύμβολα ($k = v \Leftrightarrow r = b$). Ένας τέτοιος σχεδιασμός δεν έχει κατασκευαστικό ενδιαφέρον. Αντίθετα, για ένα μη πλήρη σχεδιασμό ισχύει $k < v$.

Ο αριθμός των μπλοκ που περιέχουν τα σύμβολα x, y είναι συνάρτηση των x, y και λ_{xy} η συνδυαστότητά τους (covalency). Αν η λ_{xy} είναι σταθερή για κάθε ζεύγος x, y , τότε συμβολίζεται με λ και ο σχεδιασμός είναι *ισορροπημένος*. Δηλαδή, αν η λ είναι σταθερή, ο σχεδιασμός μένει αμετάβλητος αν εφαρμόσουμε αυτομορφισμό στα στοιχεία (δηλαδή αν τα αριθμήσουμε ξανά).

Ένας BIB σχεδιασμός είναι ο σχηματισμός b μπλοκ ανά v διακριτές αγωγές, έτσι ώστε κάθε μπλοκ να περιέχει ακριβώς k αγωγές, κάθε αγωγή να ανήκει σε ακριβώς r μπλοκ και κάθε ζεύγος αγωγών να ανήκει ακριβώς σε λ μπλοκ.

Συμβολίζεται ως (v, b, r, k, λ) .

3.2. Εναλλακτική αντικατάσταση

Όπως έχουμε προαναφέρει, ο Box-Behnken σχεδιασμός συνδυάζει παραγοντικούς σχεδιασμούς δύο επιπέδων με μη πλήρεις σχεδιασμούς σε μπλοκ. Για κάτι τέτοιο ακολουθείται συγκεκριμένη διαδικασία.

Για παράδειγμα, έστω ένας μη πλήρης σχεδιασμός σε μπλοκ με έξι αγωγές και έξι μπλοκ δίνεται από τον

$$\begin{bmatrix} * & * & 0 & * & 0 & 0 \\ 0 & * & * & 0 & * & 0 \\ 0 & 0 & * & * & 0 & * \\ * & 0 & 0 & * & * & 0 \\ 0 & * & 0 & 0 & * & * \\ * & 0 & * & 0 & 0 & * \end{bmatrix}. \quad (3.2)$$

Θεωρούμε ότι οι έξι στήλες αποτελούν τους έξι παράγοντες εισόδου, x_1, x_2, \dots, x_6 μιας μελέτης αποκριτικής επιφάνειας. Αντικαθιστούμε τους τρεις αστερίσκους σε κάθε μπλοκ με έναν 2^3 πλήρη σχεδιασμό και εισάγουμε μια μηδενική στήλη όπου δεν εμφανίζεται αστερίσκος.

Επαναλαμβάνουμε αυτή τη διαδικασία για κάθε μπλοκ και προσθέτοντας μερικά κεντρικά σημεία παίρνουμε τον ακόλουθο Box-Behnken σχεδιασμό για $k=6$ παράγοντες

$$\begin{bmatrix} \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

Ο τελικός σχεδιασμός θα έχει 48 εκτελέσεις συν τα κεντρικά σημεία.

Σημείωση: το $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ υποδηλώνει όλους τους 2^3 σχεδιασμούς στα συν και πλην επίπεδα.

Οι Box και Behnken (1958) αντικατέστησαν τις αγωγές σε κάθε μπλοκ με τον ίδιο σχεδιασμό (2^2 ή 2^3). Διατηρώντας την BIBD (ή PBIBD) δομή αμετάβλητη, το μέγεθος των εκτελέσεων του τελικού σχεδιασμού θα μπορούσε να είναι μικρότερο αν χρησιμοποιούνταν εναλλακτικοί σχεδιασμοί.

Για παράδειγμα, ας υποθέσουμε τον πιο πάνω σχεδιασμό για $k=6$.

Αρχικά χωρίζουμε τα έξι μπλοκ (3.2) σε δύο μέρη. Έστω ότι τα πρώτα δύο μπλοκ αποτελούν το μέρος I και τα υπόλοιπα τα μέρος II. Οι τρεις αγωγές σε κάθε μπλοκ του μέρους I αντικαθιστούνται από έναν 2^3 σχεδιασμό, ενώ οι αγωγές σε κάθε μπλοκ του μέρους II αντικαθιστούνται από έναν 2_{III}^{3-1} σχεδιασμό.

$$\left[\begin{array}{cccccc} \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 \end{array} \right] \frac{2^3}{2_{\text{III}}^{3-1}}$$

Στο μέρος I, το $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ υποδηλώνει όλους του 2^3 σχεδιασμούς των συν και πλην

επιπέδων, ενώ στο μέρος II, το $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ είναι η συντομία του $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$, ενός

2_{III}^{3-1} σχεδιασμού. Ο νέος σχεδιασμός θα έχει 32 εκτελέσεις συν τα κεντρικά σημεία, σε αντίθεση με τις 48 εκτελέσεις του αρχικού Box-Behnken σχεδιασμού.

3.3. Κατασκευή

Η κατασκευαστική μέθοδος συμπεριλαμβάνει τα εξής βήματα:

Βήμα 1 : (Κατασκευή σχεδιασμών κατά μπλοκ)

Οι μη πλήρεις σχεδιασμοί κατά μπλοκ πρέπει να έχουν τις ακόλουθες ιδιότητες:

- (i) Κάθε μπλοκ να περιέχει το πολύ τρεις αγωγές,
- (ii) Τα ζεύγη αγωγών πρέπει να συμπίπτουν σε κάποιο μπλοκ, αλλά όσο το δυνατό λιγότερες φορές.

Βήμα 2 : (Αντικατάσταση αγωγών)

Χρησιμοποιούμε κατάλληλο παραγοντικό σχεδιασμό για να αντικαταστήσουμε τις αγωγές σε κάθε μπλοκ. Αν το μέγεθος του μπλοκ είναι δύο, τότε χρησιμοποιούμε ένα 2^2 σχεδιασμό. Αν το μέγεθος του μπλοκ είναι τρία, τότε χρησιμοποιούμε είτε 2^3 είτε 2_{III}^{3-1} σχεδιασμό.

Βήμα 3 : (Πρόσθεση κεντρικών σημείων)

Αν το επιθυμούμε μπορούμε να προσθέσουμε μερικά κεντρικά σημεία για να εκτιμήσουμε το συνολικό μέσο.

Για κάθε BIBD (ή PBIBD) που επιλέγουμε στο Βήμα 1, έστω b_0 είναι ο αριθμός των μπλοκ με τρεις αγωγές και b_1 είναι ο αριθμός των μπλοκ στα οποία οι αγωγές αντικαθιστούνται από ένα 2^3 σχεδιασμό. Τότε οι αγωγές στα υπόλοιπα $b_0 - b_1$ μπλοκ αντικαθιστούνται από ένα 2_{III}^{3-1} σχεδιασμό. Ο συνολικός αριθμός των εκτελέσεων είναι $4(b_0 - b_1) + 8b_1$. Ο συνολικός αριθμός των παραμέτρων στο μοντέλο δεύτερης τάξης είναι $(k + 2)(k + 1) / 2 - 1$ (εξαιρουμένου του σταθερού όρου). Η ανισότητα

$$4(b_0 - b_1) + 8b_1 \geq \frac{(k + 2)(k + 1)}{2} - 1 \quad (3.4)$$

ισχύει αν ο μικρός Box-Behnken σχεδιασμός μπορεί να εκτιμήσει όλες τις παραμέτρους σε αυτό το μοντέλο (εξαιρουμένου του σταθερού όρου). Το $b^* = [(k + 2)(k + 1) / 2 - 1] / 4 - b_0$ υποδηλώνει το μικρότερο ακέραιο b_1 που ικανοποιεί την (3.4).

Αναλυτικότερα η μέθοδος αντικατάστασης του Βήματος 2 με ένα σκίτσο αλγορίθμου:

Βήμα 2a: Για τα σταθερά b^* μπλοκ, υπολογίζουμε την D -αποδοτικότητα (D -eff) του πίνακα ροπών (moment matrix) $M = Z'Z/n$, όπου Z ο πίνακας του μοντέλου εξαιρουμένης της μοναδιαίας στήλης. Για τη σύγκριση, ορίζουμε την D -eff ως $(\|\hat{Z}'\hat{Z}\|)^{1/p} / n \times 100\%$, όπου \hat{Z} ο Z πίνακας διορθωμένος με τη μέθοδο Nguyen and Borzkowski (2007). Αν ο πίνακας είναι μη ιδιάζων (αντιστρέψιμος), προχωράμε στο Βήμα 2b. Διαφορετικά, επιλέγουμε νέα μη ισόμορφα b^* μπλοκ και επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία (δύο διαφορετικά b^* μπλοκ καλούνται ισόμορφα αν οι πίνακες ροπών τους είναι όμοιοι). Αν δεν υπάρχει μη ιδιάζων πίνακας ροπών, αφού εξετάσουμε αρκετά ανάμεσα σε όλα τα μη ισόμορφα b^* μπλοκ, προχωράμε στο Βήμα 2c.

Βήμα 2b : Αν ο πίνακας ροπών είναι μη ιδιάζων, ψάχνουμε όλα τα μη ισόμορφα b^* μπλοκ για να ανανεώσουμε το σύστημα των μπλοκ το οποίο μεγιστοποιεί την D -eff. Ο αλγόριθμος σταματάει όταν συγκριθούν όλα τα μη ισόμορφα b^* μπλοκ.

Βήμα 2c : Αν $b^* < b_0$, ανανεώνουμε το b^* σε $b^* + 1$. Επιλέγουμε τα πρώτα b^* μπλοκ και επιστρέφουμε στο Βήμα 2a. Αν $b^* = b_0$, τότε επιλέγουμε όλα τα μπλοκ και σταματάμε τον αλγόριθμο.

Τελικά, θα επιλεγούν b^* μπλοκ για να αντικατασταθούν από ένα 2^3 σχεδιασμό και τα υπόλοιπα θα αντικατασταθούν από ένα 2_{III}^{3-1} σχεδιασμό. Όταν $b^* = b_0$, έχουμε ως αποτέλεσμα τον αρχικό Box-Behnken σχεδιασμό, ο οποίος εξασφαλίζει ότι όλες οι παραμέτροι του μοντέλου (3.1) μπορούν να εκτιμηθούν με υψηλή αποδοτικότητα, ενώ ο αριθμός των εκτελέσεων έχει μειωθεί.

Οι ιδιότητες ορθογωνιότητας διατηρούνται και οι πίνακες ροπών των νέων σχεδιασμών έχουν τις εξής τρεις ιδιότητες:

1. $[i] = 0$ και $[ij] = 0$ για $i \neq j$.
2. $[ijk] = 4$ για τη θέση όπου ο “*” εμφανίζεται στα i, j, k παράλληλα στο μέρος II, διαφορετικά $[ijk] = 0$ για $i \neq j \neq k$, $[iij] = 0$ για $i \neq j$, $[iii] = 0$.
3. $[ijkl] = 0$ για $i \neq j \neq k \neq l$, $[iijk] = 0$ για $i \neq j \neq k$, $[iiij] = 0$ για $i \neq j$.

$$\text{όπου } [i] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ii}, [ij] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ii} x_{ji}, [iij] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ii}^2 x_{ji} \text{ κ.ο.κ.}$$

3.4. Σύγκριση

Ακολούθως, συγκρίνουμε τους νέους small Box-Behnken designs (SBBDs) με τους αρχικούς Box-Behnken designs (BBDs) βάσει του συνολικού αριθμού εκτελέσεων και την D -αποδοτικότητα.

Πίνακας 3.1. Συνολικά σημεία (εξαιρουμένων των κεντρικών σημείων) και σύγκριση D -αποδοτικότητων.

Αριθμός παραγόντων k	Αριθμός παραμέτρων $p = \frac{(k+2)(k+1)}{2} - 1$	Συνολικά σημεία n	D -efficiency			
			<i>BBD</i>	<i>SBBB</i>	<i>BBD</i>	<i>SBBB</i>
3	9	12	12	96.29	96.29	
4	14	24	16	98.70	82.34	
5	20	40	24	97.16	70.29	
6	27	48	32	92.72	77.21	
7	35	56	40	98.07	82.85	
8	44	192	56	95.94	82.14	
9	54	120	60	93.09	79.91	
10	64	160	76	91.54	70.77	
11	77	176	96	97.62	82.34	

Παρατηρούμε τα εξής:

1. (Μέγεθος εκτελέσεων). Το μέγεθος εκτελέσεων των SBBBs είναι ξεκάθαρα μικρότερο από αυτό των αρχικών BBDs, ειδικότερα για μεγαλύτερο k . Για παράδειγμα, όταν $k = 8$, το μέγεθος εκτελέσεων του SBBB είναι περίπου το 25% (56 vs. 192) του αντίστοιχου BBD.
2. (Αποδοτικότητα). Οι SBBBs ακόμα και με λίγες εκτελέσεις, εξακολουθούν να έχουν υψηλές D -αποδοτικότητες, παρόλο που είναι μικρότερες αυτών των αντίστοιχων BBDs. Δηλαδή, όλες οι D -αποδοτικότητές τους είναι πέραν του 70%.

3.5. Ένας διαφορετικός αλγόριθμος για την κατασκευή σχεδιασμών μεγαλύτερων διαστάσεων

Αρχικά, για να προσαρμοστεί το μοντέλο δεύτερης τάξης, πρέπει να υπολογίσουμε τον αντίστροφο του πίνακα ροπών. Καθώς το k αυξάνει, ο υπολογισμός αυτός γίνεται ακόμα πιο περίπλοκος. Για παράδειγμα, όταν $k = 9$ ο πίνακας ροπών είναι ένας 54×54 πίνακας, οπότε ο υπολογισμός του αντίστροφού του δεν είναι εύκολος. Ο μικρός Box-Behnken σχεδιασμός έχει μια καλή ιδιότητα: Θα μπορούσαμε να μειώσουμε όλη αυτή την προσπάθεια υπολογισμού ταξινομώντας τις παραμέτρους σε ομάδες. Για παράδειγμα, για $k = 9$, ομαδοποιώντας καταλλήλως τις παραμέτρους, μένει να υπολογίσουμε τον αντίστροφο ενός 4×4 πίνακα και άλλον ένα 9×9 πίνακα.

Θα δούμε, λοιπόν, ένα διαφορετικό αλγόριθμο για τη μείωση αυτών των υπολογισμών με βάση την ομαδοποίηση των παραμέτρων.

Σύμφωνα με τη δομή του πίνακα σχεδιασμού X , μπορούμε να ταξινομήσουμε τις παραμέτρους σε ομάδες, κάθε μια από τις οποίες μπορεί να υπολογιστεί ανεξάρτητα. Παίρνουμε πάλι για παράδειγμα το $k=9$, τότε

$$X = \begin{bmatrix} \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 \\ \hline \pm 1 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 \\ 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pm 1 \\ 0 & 0 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_{11} \\ X_{12} \\ X_{13} \\ \hline X_{21} \\ X_{22} \\ X_{23} \\ X_{24} \\ X_{25} \\ X_{26} \\ X_{27} \\ X_{28} \\ X_{29} \end{bmatrix}$$

όπου $X_{11}, X_{12}, X_{13}, X_{21}, X_{22}, X_{23}, X_{24}, X_{25}, X_{26}, X_{27}, X_{28}$ και X_{29} όλα τα μπλοκ του X . Σημειώνουμε ότι κάθε ένα από τα X_{11}, X_{12} και X_{13} αντικαθιστάται από ένα 2^3 πλήρη σχεδιασμό και άρα όλες οι κύριες επιδράσεις και αλληλεπιδράσεις είναι ορθογώνιες σε κάθε μπλοκ. Παράλληλα, κάθε ένα από τα $X_{21}, X_{22}, X_{23}, X_{24}, X_{25}, X_{26}, X_{27}, X_{28}$ και X_{29} αντικαθιστάται από ένα 2_{III}^{3-1} σχεδιασμό και άρα οι κύριες επιδράσεις και οι αλληλεπιδράσεις είναι ταυτόσημες σε κάθε μπλοκ αυτού του μέρους.

Για παράδειγμα, στο μπλοκ X_{21} , η 1^η, η 2^η και η 3^η στήλη είναι " ± 1 ", το οποίο οδηγεί στις ταυτόσημες των β_1 και β_{23} , όπου το β_i είναι η κύρια επίδραση του παράγοντα X_i , ενώ το β_{ij} είναι η αλληλεπίδραση μεταξύ των παραγόντων X_i και X_j . Ως εκ τούτου, βάζουμε τις β_1 και β_{23} σε μια ομάδα, η οποία καλείται Ομάδα 1. Δεδομένου ότι καμία παράμετρος της Ομάδας 1 δεν είναι ταυτόσημη με καμία άλλη στο υπόλοιπο μπλοκ του μέρους II, όλες οι παράμετροι ($\beta_1, \beta_{23}, \beta_{59}, \beta_{68}$) αποτελούν την Ομάδα 1, με τον Group Moment Matrix (GMM) να είναι ο

$$G_1 = \begin{bmatrix} [11] & [123] & [159] & [168] \\ [123] & [2233] & [2359] & [2368] \\ [159] & [2359] & [5599] & [5689] \\ [168] & [2368] & [5689] & [6688] \end{bmatrix} = \frac{1}{15} \begin{bmatrix} 5 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Όμοια, μπορούμε να πάρουμε τις ακόλουθες έξι ομάδες: $(\beta_2, \beta_{13}, \beta_{49}, \beta_{67})$, $(\beta_3, \beta_{12}, \beta_{48}, \beta_{57})$, $(\beta_4, \beta_{56}, \beta_{29}, \beta_{38})$, $(\beta_5, \beta_{46}, \beta_{19}, \beta_{37})$, $(\beta_6, \beta_{45}, \beta_{27}, \beta_{18})$, $(\beta_7, \beta_{89}, \beta_{26}, \beta_{35})$, $(\beta_8, \beta_{79}, \beta_{34}, \beta_{16})$, $(\beta_9, \beta_{78}, \beta_{15}, \beta_{24})$. Κάθε μια από αυτές έχει τον ίδιο GMM G_1 όπως η Ομάδα 1.

Η πλήρης ομάδα που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των τετραγωνικών όρων είναι η $(\beta_{11}, \beta_{22}, \beta_{33}, \beta_{44}, \beta_{55}, \beta_{66}, \beta_{77}, \beta_{88}, \beta_{99})$ με GMM τον

$$G_2 = \begin{bmatrix} [1111] & [1122] & [1133] & [1144] & [1155] & [1166] & [1177] & [1188] & [1199] \\ [1122] & [2222] & [2233] & [2244] & [2255] & [2266] & [2277] & [2288] & [2299] \\ [1133] & [2233] & [3333] & [3344] & [3355] & [3366] & [3377] & [3388] & [3399] \\ [1144] & [2244] & [3344] & [4444] & [4455] & [4466] & [4477] & [4488] & [4499] \\ [1155] & [2255] & [3355] & [4455] & [5555] & [5566] & [5577] & [5588] & [5599] \\ [1166] & [2266] & [3366] & [4466] & [5566] & [6666] & [6677] & [6688] & [6699] \\ [1177] & [2277] & [3377] & [4477] & [5577] & [6677] & [7777] & [7788] & [7799] \\ [1188] & [2288] & [3388] & [4488] & [5588] & [6688] & [7788] & [8888] & [9988] \\ [1199] & [2299] & [3399] & [4499] & [5599] & [6699] & [7799] & [8899] & [9999] \end{bmatrix}$$

Τέλος, κάθε μια από τις υπόλοιπες παραμέτρους αποτελούν μια μοναδική ομάδα, όπως η β_{14} η ίδια. Σημειώνουμε ότι ο πίνακας ροπών M για τέτοιο σχεδιασμό μπορεί να γραφτεί και ως

$$M = \text{diag} \left(\underbrace{G_1, \dots, G_1}_9, G_2, c_1, \dots, c_9 \right),$$

όπου η διαγώνιος υποδηλώνει έναν διαγώνιο μπλοκ πίνακα και οι c_i είναι σταθερές που αντιστοιχούν στις μοναδικές ομάδες. Έτσι, μένει να υπολογίσουμε τους αντίστροφους των G_1 (έναν 4×4 πίνακα) και G_2 (έναν 9×9 πίνακα) για να προσαρμόσουμε το μοντέλο.

Κεφάλαιο 4

Σχεδιασμοί Αποκριτικών Επιφανειών κατασκευασμένοι από Μη Πλήρεις Σχεδιασμούς κατά Μπλοκ

Περίληψη:

Οι Box και Behnken εισήγαγαν μια κλάση σχεδιασμών δεύτερης τάξης 3 επιπέδων (3-level second order designs - SODs) για την προσαρμογή του μοντέλου αποκριτικής επιφάνειας δεύτερης τάξης (second order response surface model). Οι Nguyen και Borkowski στο άρθρο “New 3-level response surface designs constructed from incomplete block designs” παρουσιάζουν κάποιους εξ αυτών οι οποίοι κατασκευάζονται είτε από ισορροπημένους μη πλήρεις σχεδιασμούς κατά μπλοκ (balanced incomplete block designs - BIBDs), είτε από μερικώς ισορροπημένους μη πλήρεις σχεδιασμούς κατά μπλοκ (partially balanced incomplete block designs - PBIBDs). Δείχνουν ότι οι Box-Behnken σχεδιασμοί (BBDs) που κατασκευάζονται από PBIBDs μπορούν να βελτιωθούν βάσει της περιστρεψιμότητας και των D - και G -αποδοτικότητων. Επιπλέον, αναφέρονται νέες λύσεις για σχεδιασμούς που επιδέχονται ορθογώνιο μπλοκινγκ.

4.1. Εισαγωγή

Οι Box-Behnken σχεδιασμοί είναι 3-επιπέδων δεύτερης τάξης σχεδιασμοί για την προσαρμογή ενός μοντέλου αποκριτικών επιφανειών δεύτερης τάξης

$$y = X\beta + \varepsilon \quad (4.1)$$

για m παράγοντες x_1, \dots, x_m σε n εκτελέσεις όπου y το $n \times 1$ αποκριτικό διάνυσμα, X ένας $n \times p$ πίνακας με n $1 \times p$ διανύσματα σειράς $x = (1, x_1, \dots, x_m, x_1x_2, \dots, x_{m-1}x_m, x_1^2, \dots, x_m^2)$, β ένα $p \times 1$ διάνυσμα παραμέτρων προς εκτίμηση και ε ένα $n \times 1$ διάνυσμα σφαλμάτων με μηδενικό μέσο και πίνακα συνδιακύμανση $I_n \sigma^2$. Οι BB σχεδιασμοί συναντώνται με 3-12 και 16 παράγοντες.

Είναι *σφαιρικοί* σχεδιασμοί αφού όλα τα σημεία τους είναι είτε πάνω σε σφαίρα ή στο κέντρο μιας σφαίρας. Αυτοί οι σχεδιασμοί χρησιμοποιούνται όπου δε μας απασχολεί πολύ η πρόβλεψη αποκρίσεων στα άκρα, π.χ. στις γωνίες ενός κύβου. Οι BBDs είναι είτε περιστρέψιμοι (για αυτούς με 4 και 7 παράγοντες) είτε σχεδόν περιστρέψιμοι. Όλοι οι BB σχεδιασμοί πέραν αυτών με 3 και 11 παράγοντες μπορούν να χωριστούν σε ορθογώνια μπλοκ. Για έναν ορθογώνιο κατά μπλοκ σχεδιασμό, η συμπερίληψη των μπλοκ δεν επηρεάζει τους εκτιμώμενους συντελεστές παλινδρόμησης του μοντέλου δεύτερης τάξης (4.1) και ως εκ τούτου το κυρίως αποτέλεσμα του μπλόκινγκ είναι η ενδεχόμενη μείωση του μεγέθους του πειραματικού σφάλματος.

Ένας εναλλακτικός ορισμός για την περιστρεψιμότητα ενός σχεδιασμού είναι ο εξής: Περιστρέψιμος καλείται ο m -διάστατος σχεδιασμός εάν η προβλεπόμενη διακύμανση στο σημείο (x_1, \dots, x_m) είναι μια συνάρτηση της μορφής $\rho^2 = \sum_{i=1}^m x_i^2$.

Δηλαδή, οι διακυμάνσεις είναι ίσες για όλα τα σημεία που ισαπέχουν από την περιοχή του κέντρου του σχεδιασμού. Άρα η περιστρεψιμότητα είναι μια επιθυμητή ιδιότητα για κάθε πειραματικό σχεδιασμό.

Οι ακόλουθες συνθήκες είναι απαραίτητες για έναν σχεδιασμό S , n σημείων, έτσι ώστε να είναι περιστρέψιμος:

$$\sum x_i = 0, \sum x_i^3 = 0, \sum x_i x_j = 0, \sum x_i x_j^2 = 0, \sum x_i x_j^3 = 0, \sum x_i x_j x_k = 0, \sum x_i x_j x_k^2 = 0,$$

$$\sum x_i x_j x_k x_l = 0 \text{ για } i \neq j \neq k \neq l \quad (\text{i})$$

$$\sum x_i^2 = \text{σταθ.} \quad (\text{ii})$$

$$\sum x_i^4 = \text{σταθ.} \quad (\text{iii})$$

$$\sum x_i^4 / \sum x_i^2 x_j^2 = 3 \text{ για } i \neq j \quad (\text{iv})$$

Τα αθροίσματα στις (i)-(iv) ισχύουν για τα n σημεία του σχεδιασμού. Οι Box και Behnken (1960) χρησιμοποίησαν τον όρο *σχεδόν περιστρέψιμος* (near-rotatable) για μια κλάση σχεδιασμών που ικανοποιούν τις συνθήκες (i)-(iii), ενώ για την (iv) ισχύει

$$\sum x_i^4 / \sum x_i^2 x_j^2 \approx 3$$

Εδώ χρησιμοποιείται το *μέτρο περιστρεψιμότητας* (rotatability measure) Q^* το οποίο έδωσαν οι Draper και Pukelsheim (1990) ως ένα μέτρο του πόσο κοντά είναι ένας σχεδιασμός στο να είναι περιστρέψιμος.

4.2. Μη πλήρεις σχεδιασμοί κατά μπλοκ

Υπάρχει μια σχέση μεταξύ ορισμένων συνδυαστικών δομών και των IBDs. Οι Box και Behnken (1958, 1960) ερεύνησαν αυτή τη σχέση για να κατασκευάσουν SODs 3-επιπέδων, ενώ ο Nguyen (1996) ερεύνησε αυτή τη σχέση για να κατασκευάσει βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς. Οι BB σχεδιασμοί είναι κατασκευασμένοι από BIBDs (balanced incomplete block designs) ή PBIBDs (partially BIBDs).

- Βασικές έννοιες:

Ένας δυαδικός (binary) IBD μεγέθους (v, k, r) είναι μια διάταξη από v αγωγές σε $b = vr/k$ μπλοκ μεγέθους $k < v$ τέτοια ώστε κάθε αγωγή να γίνεται σε r μπλοκ και καμία να μην εμφανίζεται περισσότερο από μια φορά σε κάθε μπλοκ.

Ένας IBD λέγεται ότι είναι r/s -διαχωρίσιμος (resolvable) αν μπορεί να χωριστεί σε s σύνολα επαναλήψεων (από μπλοκ), καθένα από τα οποία είναι ένας IBD μεγέθους $(v, k, r/s)$. Ένας I -διαχωρίσιμος IBD είναι ένας διαχωρίσιμος IBD.

Κάθε IBD συνδέεται με τον πίνακα συμπτώσεών του (concurrency matrix) $NN' = \{\lambda_{ij}\}$ με $\lambda_{ii} = r, (i = 1, \dots, v), \lambda_{ij} (i \neq j)$ ο αριθμός των μπλοκ στα οποία και τα i και τα j εμφανίζονται (στην περίπτωση των δυαδικών σχεδιασμών, το (i, j) αντιστοιχεί στον αριθμό των μπλοκ που περιέχουν τα σημεία i και j). Επειδή το $\sum \lambda_{ij}$ είναι σταθερά $(= vkr)$, το $\sum \lambda_{ij}^2$ ελαχιστοποιείται αν τα λ_{ij} διαφέρουν το πολύ κατά 1. Σχεδιασμοί με αυτή την ιδιότητα καλούνται regular graph designs (RGDs) (John and Mitchell-1977), οι οποίοι είκασαν ότι οι D -, A - και E -βέλτιστοι σχεδιασμοί είναι επίσης RGDs. Έτσι, οι RGDs περιέχουν BIBDs των οποίων τα λ_{ij} δε διαφέρουν και όλους τους PBIBDs των οποίων τα λ_{ij} διαφέρουν κατά 1. Ο RGD είναι μια σημαντική κλάση των IBDs όχι μόνο γιατί εικάστηκε πως βέλτιστοι IBDs είναι RGDs, αλλά επίσης γιατί οι περισσότεροι IBDs που χρησιμοποιούνται από ερευνητές στην πράξη είναι σαν αυτούς των Box και Behnken και που είναι στην πραγματικότητα RGDs.

4.3. Η μέθοδος Box-Behnken (Μέθοδος I)

Με εξαίρεση τον BB σχεδιασμό για 11 παράγοντες, όλοι οι BB σχεδιασμοί σχηματίζονται με την υπέρθεση παραγοντικών 2 επιπέδων σε αγωγές σε κάθε μπλοκ

ενός BIBD ή ενός PBIBD. Ο BB σχεδιασμός για 11 παράγοντες χρησιμοποιεί ένα $\frac{1}{2}$ κλάσμα ενός 2^5 παραγοντικού. Για παράδειγμα, ο BBD για 6 παράγοντες κατασκευάστηκε με υπέρθεση ενός 2^3 παραγοντικού στις αντίστοιχες αγωγές (0, 1, 2, 3, 4, 5) των μπλοκ του ακόλουθου PBIBD μεγέθους (6, 3, 3): (0 1 3), (1 2 4), (2 3 5), (3 4 0), (4 5 1), (5 0 2). Ο πίνακας συμπτώσεων NN' αυτού του PBIBD έχει 3 στη διαγώνιο και είτε 1 είτε 2 μη-διαγώνια στοιχεία. Ο προκύπτων BBD για 6 παράγοντες (χωρίς κεντρικά σημεία) είναι ο εξής:

$$\begin{array}{cccccc} \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 \end{array}$$

όπου το 0 αντιπροσωπεύει ένα διάνυσμα-στήλη από οκτώ 0 και τα $(\pm 1 \pm 1 \pm 1)$ αντιπροσωπεύουν τα οκτώ σημεία σε έναν 2^3 παραγοντικό σχεδιασμό. Εύκολα επαληθεύεται ότι αυτός ο SOD είναι σχεδόν περιστρέψιμος με $\sum x_i^2 x_j^2 = 2^3 \lambda_{ij}$

όπου τα λ_{ij} είναι τα στοιχεία του (4.2). Έτσι, $\sum x_i^4 = 24$ για $\lambda_{ij} = r = 3$ και $\sum x_i^2 x_j^2 = 8$ και 16 για $\lambda_{ij} = 1$ και 2, αντίστοιχα, το οποίο με τη σειρά του αποδίδει $\sum x_i^4 / \sum x_i^2 x_j^2 = r / \lambda_{ij} = 3$ και $\frac{3}{2}$. Το μέτρο περιστρεψιμότητας Q^* αυτού του BBD είναι 0.9905. Ωστόσο, οι BBDs για 4 και 7 παράγοντες είναι περιστρέψιμοι (π.χ. $Q^* = 1$), μια και κατασκευάζονται από έναν BIBD με $r / \lambda = 3$.

4.4. Η γενικευμένη Box-Behnken μέθοδος (Μέθοδος II)

Η μέθοδος της χρήσης ενός IBD* μεγέθους (v, k, r) για την κατασκευή ενός SOD v -παραγόντων, αναφέρεται ως γενικευμένη Box-Behnken μέθοδος ή Μέθοδος II.

Ο BBD 6 παραγόντων που προείδαμε μπορεί επίσης να γραφτεί και ως

-1	±1	0	±1	0	0
0	-1	±1	0	±1	0
0	0	-1	±1	0	±1
-1	0	0	±1	±1	0
0	-1	0	0	±1	±1
-1	0	±1	0	0	±1
1	±1	0	±1	0	0
0	1	±1	0	±1	0
0	0	1	±1	0	±1
1	0	0	±1	±1	0
0	1	0	0	±1	±1
1	0	±1	0	0	±1

όπου τα -1, 0, 1 εκπροσωπούν διανύσματα-στήλες τεσσάρων -1, 0, 1, αντίστοιχα, και τα (±1±1) εκπροσωπούν ένα 2^2 παραγοντικό. Από αυτή την παρατήρηση, μπορούμε επίσης να πούμε ότι ο άνωθεν BB σχεδιασμός κατασκευάστηκε από τον ακόλουθο $\frac{6}{2}$ - διαχωρίσιμο IBD μεγέθους (6, 3, 6): (0 1 3), (1 2 4), (2 3 5), (3 4 0), (4 5 1), (5 0 2); (0 1 3), (1 2 4), (2 3 5), (3 4 0), (4 5 1), (5 0 2) όπου η πρώτη αγωγή στο πρώτο σύνολο επαναλήψεων (μπλοκ 1-6) ανταποκρίνεται σε ένα διάνυσμα-στήλη τεσσάρων -1 και η πρώτη αγωγή στο δεύτερο σύνολο επαναλήψεων (μπλοκ 7-12) σε ένα 2^2 παραγοντικό.

Αυτός ο IBD 6 παραγόντων ανήκει σε μια κλάση η οποία υποδηλώνεται ως IBD*. Ορίζουμε ως IBD* ή RGD* έναν $r/2$ -διαχωρίσιμο IBD ή RGD με την ιδιότητα ότι ο αριθμός των φορών που η πρώτη αγωγή i σε ένα μπλοκ (ή περισσότερα) συμπίπτει με υπολειπόμενες αγωγές στο ίδιο μπλοκ(ς) των δύο συνόλων επαναλήψεων είναι ίσος. Για παράδειγμα, στον αναφερόμενο IBD*, μπορούμε να δούμε ότι ο αριθμός των φορών όπου η αγωγή 0 συμπίπτει με την αγωγή 3 στα μπλοκ 1-6 είναι ίσος με τον αριθμό των φορών όπου το 0 συμπίπτει με το 3 στα μπλοκ 7-12. Αν αυτή η ιδιότητα δεν ικανοποιείται, η συνθήκη (i) για την περιστρεψιμότητα δε θα ικανοποιείται αφού για κάποια αθροίσματα θα ισχύει

$$\sum x_i x_j^2 \neq 0.$$

Ένας IBD* μεγέθους (v, k, r) μπορεί πάντα να σχηματιστεί από δύο αντίγραφα ενός IBD μεγέθους $(v, k, r/2)$. Ωστόσο, αυτός δεν είναι ο καλύτερος τρόπος κατασκευής ενός IBD* εκτός και αν ο αρχικός IBD είναι ένας BIBD. Για παράδειγμα, ο πιο πάνω IBD* που περιέχει δύο αντίγραφα του RGD μεγέθους (6, 3, 3) δεν είναι RGD. Ο πίνακας συμπτώσεων NN' είναι

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 & 2 & 4 & 2 & 2 \\ 2 & 6 & 2 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & 2 & 6 & 2 & 2 & 4 \\ 4 & 2 & 2 & 6 & 2 & 2 \\ 2 & 4 & 2 & 2 & 6 & 2 \\ 2 & 2 & 4 & 2 & 6 & 6 \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Τώρα, αν υποθέσουμε το ακόλουθο RGD*: (1 0 3), (1 4 2), (3 2 5), (3 0 4), (5 4 1), (5 2 0); (1 0 2), (1 4 3), (3 2 4), (3 0 5), (5 4 0), (5 2 1). Ο πίνακας συμπτώσεων NN' είναι

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 & 2 & 3 & 2 & 3 \\ 2 & 6 & 3 & 2 & 3 & 2 \\ 2 & 3 & 6 & 2 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 2 & 6 & 3 & 2 \\ 2 & 3 & 2 & 3 & 6 & 2 \\ 3 & 2 & 3 & 2 & 2 & 6 \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Ο SOD 6 παραγόντων που κατασκευάζεται από αυτό τον RGD* είναι ο σχεδιασμός D636. Από αυτόν τον RGD* κατασκευάζεται ένας SOD 6 παραγόντων, σχεδόν-περιστρέψιμος με $\sum x_i^2 x_j^2 = 2^2 \lambda_{ij}$ όπου λ_{ij} τα στοιχεία του πίνακα ο οποίος είναι αναρτημένος στην ιστοσελίδα <http://www.math.montana.edu/~jobo/bbd>. Άρα, $\sum x_i^4 = 24$ για $\lambda_{ii} = r = 6$ και $\sum x_i^2 x_j^2 = 8$ και 12 για $\lambda_{ij} = 2$ και 3 δίνουν $\sum x_i^4 / \sum x_i^2 x_j^2 = r / \lambda_{ij} = 3$ και 2, αντίστοιχα. Το μέτρο περιστρεψιμότητας Q^* αυτού του SOD είναι 0.9959, άρα μεγαλύτερο του 0.9905 του αντίστοιχου BBD.

Η Μέθοδος II αποτελείται από τα ακόλουθα βήματα:

1. Κατασκευάζουμε ένα ($r/2$ -διαχωρίσιμο) IBD* μεγέθους (v, k, r) .
2. Υπερθέτουμε ένα διάνυσμα-στήλη με 2^{k-1} στοιχεία του -1 πάνω στην πρώτη αγωγή στο μπλοκ του πρώτου συνόλου επαναλήψεων και ένα διάνυσμα-στήλη με 2^{k-1} στοιχεία του 1 πάνω στην πρώτη αγωγή στο μπλοκ του δεύτερου συνόλου επαναλήψεων.
3. Υπερθέτουμε ένα 2^{k-1} παραγοντικό πάνω στις υπολειπόμενες αγωγές σε κάθε μπλοκ.
4. Υπερθέτουμε ένα διάνυσμα-στήλη με 2^{k-1} στοιχεία του 0 πάνω στις ελλειπείς αγωγές σε κάθε μπλοκ.

Ως επιπλέον παράδειγμα, ο σχεδιασμός D736 είναι ένας SOD 7-παραγόντων κατασκευασμένος με τη Μέθοδο II από έναν BIBD* μεγέθους (7, 3, 6): (0 2 4), (0 1 3), (0 5 6), (1 2 5), (1 4 6), (2 3 6), (3 4 5); (0 2 5), (0 1 3), (0 4 6), (1 2 4), (1 5 6), (2 3 6), (3 4 5). Όπως και οι BBDs, όλοι οι SODs κατασκευασμένοι με τη Μέθοδο II είναι είτε περιστρέψιμοι είτε σχεδόν-περιστρέψιμοι. Είναι επίσης σφαιρικοί.

• Παρατηρήσεις

1. Ένας SOD 3-επιπέδων κατασκευασμένος από ένα IBD μεγέθους (v, k, r) χρησιμοποιώντας τη Μέθοδο I έχει $2^k b$ εκτελέσεις έτσι ώστε $\sum x_i^2 = \sum x_i^4 = 2^k r$ και $\sum x_i^2 x_j^2 = 2^k \lambda_{ij}$. Ένας SOD 3-επιπέδων κατασκευασμένος από ένα IBD* μεγέθους (v, k, r) χρησιμοποιώντας τη Μέθοδο II έχει $2^{k-1} b$ εκτελέσεις έτσι ώστε $\sum x_i^2 = \sum x_i^4 = 2^{k-1} r$ και $\sum x_i^2 x_j^2 = 2^{k-1} \lambda_{ij}$. Τα μη διαγώνια στοιχεία του NN' των IBDs που χρησιμοποιούνται σε συνδυασμό, είτε με τη μια μέθοδο είτε με την άλλη θα είναι μη μηδενικά. Διαφορετικά, συγκεκριμένα αθροίσματα $\sum x_i^2 x_j^2$ θα είναι 0 και ο $X'X$ πίνακας του παραγόμενου SOD θα είναι ιδιάζων. Επειδή η $(X'X)^{-1}$ είναι συνάρτηση της $(NN')^{-1}$, η επιπλέον συνθήκη $|NN'| \neq 0$ για αυτούς τους IBDs είναι απαραίτητη. Για παράδειγμα, το ακόλουθο RGD* μεγέθους (8, 4, 6): (2 0 7 4), (5 4 3 6), (5 7 1 0), (2 6 1 5), (3 4 1 2), (3 7 0 6); (3 0 4 1), (5 6 4 0), (2 6 1 0), (2 7 5 4), (3 2 7 6), (5 3 7 1) αποτυγχάνει να κατασκευάσει έναν SOD 8-παραγόντων αφού $|NN'| = 0$.
2. Ο πίνακας συμπτώσεων ενός IBD που φτιάχνεται από δύο αντίγραφα ενός άλλου IBD με πίνακα συμπτώσεων NN' είναι $2NN'$. Αυτό σημαίνει ότι παρόλο που ένας IBD δημιουργείται από δύο αντίγραφα ενός BIBD είναι επίσης ένας BIBD. Ενώ ένας IBD φτιαγμένος από δύο αντίγραφα ενός RGD με δύο διακριτούς πίνακες συμπτώσεων δεν είναι απαραίτητα ένας RGD. Αυτό εξηγεί γιατί μπορούμε να βελτιώσουμε και τους επτά BB σχεδιασμούς φτιαγμένους από PBIBDs.
3. RGD*s συγκεκριμένου μεγέθους δεν είναι πάντα διαθέσιμοι. Δεν έχουν βρεθεί RGD*s μεγέθους (5, 3, 6), (9, 4, 8), (14, 4, 8) και (15, 4, 8).

4.5. Νέοι SODs

Η παραγωγή κάθε νέου SOD αποτελείται από τρεις αριθμούς οι οποίοι αντιστοιχούν στις τρεις παραμέτρους του παράγων IBD* μεγέθους (v, k, r) . Οι νέοι SODs χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες: (i) Αυτούς που παίρνουμε από BIBDs, (ii) αυτούς που παίρνουμε από IBDs* με μέγεθος μπλοκ 3, και (iii) αυτούς που παίρνουμε από IBDs* με μέγεθος μπλοκ 4.

Ένας $k \times k$ ισορροπημένος lattice σχεδιασμός είναι ένας διαχωρίσιμος BIBD μεγέθους $(k^2, k, k+1)$ με $\lambda=1$. Οι νέοι SODs για k^2 παράγοντες μπορούν να κατασκευαστούν από ένα $k \times k$ ισορροπημένο lattice όπου $k=3, 4, 5, 7$ και 9 με τη Μέθοδο I. Για παράδειγμα, με τη Μέθοδο I παίρνουμε έναν SOD 9 παραγόντων (D934) από ένα $k \times k$ ισορροπημένο lattice όπου $k=3$.

Η Μέθοδος II χρησιμοποιεί IBD*s με μέγεθος μπλοκ 3 για να παράξει νέους SODs 5, 6, 7 και 8 παραγόντων (D536, D636, D736 και D8312 αντίστοιχα).

4.6. Ορθογώνιος χωρισμός σε μπλοκ των Box-Behnken σχεδιασμών

Οι απαιτήσεις για ορθογώνιο μπλοκινγκ πειραματικών σχεδιασμών δόθηκαν από τους Box και Hunter (1957) και Nguyen (2001). Οι Box και Behnken (1960) κατέγραψαν περιπτώσεις όπου το ορθογώνιο μπλόκινγκ είναι εφικτό για SODs κατασκευασμένους με τη Μέθοδο I:

- (i) Όπου υπάρχουν σύνολα επαναλήψεων στον παράγων IBD. Σε αυτή την κατηγορία ανήκουν και οι SODs που κατασκευάζονται από $k \times k$ ισορροπημένα lattices. Για παράδειγμα, κάθε επανάληψη του 2×2 ισορροπημένου lattice $(0\ 1), (2\ 3); (0\ 3), (1\ 2); (0\ 2), (1\ 3)$ το οποίο χρησιμοποιήθηκε για την κατασκευή του BBD 4 παραγόντων, αποτελεί ένα ορθογώνιο μπλοκ.
- (ii) Όπου το παράγων 2^3 ή 2^4 παραγοντικό μπορεί να χωριστεί σε δύο ορθογώνια μπλοκ με αναδιάταξη της αλληλεπίδρασης με την υψηλότερη τάξη.
- (iii) Όπου εφαρμόζονται μαζί οι (i) και (ii). Για παράδειγμα, το 3×3 ισορροπημένο lattice που χρησιμοποιήθηκε στην κατασκευή του D934 έχει τέσσερις επαναλήψεις. Κάθε επανάληψη μπορεί να χωριστεί σε δύο ορθογώνια μπλοκ. Έτσι, αυτός ο SOD μπορεί να χωριστεί σε οκτώ ορθογώνια μπλοκ.

Τα πιο πάνω μπορούν να εφαρμοστούν σε όλους τους SODs κατασκευασμένους με τη Μέθοδο I (π.χ. D934), αλλά όχι σε αυτούς που κατασκευάζονται από έναν IBD* με μέγεθος μπλοκ 3 με τη Μέθοδο II (π.χ. D536, D636, D736, D8312).

Ο σχεδιασμός D636 χωρίς κεντρικά σημεία σε δύο ορθογώνια μπλοκ των 24 σημείων (τοποθετημένα κάθετα) είναι ο εξής:

0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	1	1	1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1
0	0	0	0	-1	1	-1	-1	-1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	-1	-1
-1	-1	-1	-1	0	0	0	0	1	1	-1	1	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	-1	1
1	1	-1	-1	0	0	-1	1	0	0	0	0	0	0	-1	-1	1	1	0	0	-1	1	0	0
0	0	-1	1	-1	-1	1	1	0	0	1	1	-1	-1	0	0	-1	1	0	0	0	0	0	0
1	1	0	0	1	1	0	0	-1	-1	0	0	-1	-1	1	-1	0	0	1	1	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1
0	0	0	0	-1	1	-1	-1	-1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	-1	-1
1	1	1	1	0	0	0	0	-1	-1	-1	1	0	0	0	0	0	0	-1	-1	0	0	-1	1
1	1	-1	-1	0	0	-1	1	0	0	0	0	0	0	-1	-1	1	1	0	0	-1	1	0	0
0	0	-1	1	1	1	-1	-1	0	0	-1	-1	1	1	0	0	-1	1	0	0	0	0	0	0
1	-1	0	0	1	1	0	0	-1	-1	0	0	-1	-1	1	-1	0	0	1	1	0	0	0	0

4.7. Σύγκριση BB σχεδιασμών με τους νέους SODs

Στον Πίνακα 4.1 βλέπουμε τη σύγκριση των BB σχεδιασμών με τους νέους SODs σε μια σφαίρα ακτίνας 1 ως προς τα παρακάτω κριτήρια αξιολόγησης:

- (i) Q^* είναι το μέτρο περιστρεψιμότητας. Το Q^* είναι μια R^2 statistic για την παλινδρόμηση των ροπών δεύτερης και τέταρτης τάξης του πίνακα ροπών $M = X'X/n$ ενός υποθετικού περιστρέψιμου SOD. Έτσι, αν ένας SOD είναι περιστρέψιμος, τότε το $Q^* = 1$. Ενώ αν ένας SOD είναι σχεδόν περιστρέψιμος, τότε το Q^* θα είναι κοντά στο 1. Η υπολογισμός του Q^* έχει προσδιοριστεί από τους Draper και Pukelsheim (1990) και μένει αναλλοίωτο όταν προστίθενται κεντρικά σημεία.
- (ii) $|M|$, όπου M ο πίνακας ροπών και η σχετική D -efficiency $D\text{-eff} = 100(|M|^{1/p})/n$, όπου p είναι ο αριθμός των παραμέτρων του μοντέλου.
- (iii) G -efficiency $G\text{-eff} = 100 p/d_{\max}$, όπου d η κλιμακωμένη προβλεπόμενη διασπορά στο σημείο (x_1, \dots, x_m) και η οποία υπολογίζεται ως $d = x'M^{-1}x$. Σημειώνουμε ότι η μη κλιμακωμένη προβλεπόμενη διασπορά στο σημείο x είναι $d\sigma^2/n$. Η d_{\max} δεν υπολογίζεται σε όλο το χώρο σχεδιασμού \mathcal{X} , αλλά πάνω στην ένωση δύο συνόλων $A \cup B$, όπου A είναι ένα σύνολο 3^m σημείων (x_1, \dots, x_m) τέτοιων ώστε $x_i = 0, \pm 1/\sqrt{m}$

για $i=1,\dots,m$ και B είναι το σύνολο των σημείων (x_1,\dots,x_m) στην επιφάνεια της m -διάστατης σφαίρας τέτοιας ώστε i συντεταγμένες να είναι 0 και οι υπόλοιπες $m-i$ συντεταγμένες να είναι $\pm 1/\sqrt{m-i}$. Αυτό γίνεται για να επιτευχθεί ένας βέλτιστος σχεδιασμός αφού έχουμε μια σφαίρα και όχι έναν υπερκύβο όπου θα ήταν αρκετό να λάβουμε υπ' όψιν μας τα παραγοντικά σημεία.

- (iv) APV = the average scaled prediction variance. Η APV είναι η μέση d πάνω σε όλα τα σημεία της μοναδιαίας σφαίρας και ο προσδιορισμός της οφείλεται στις εκτιμήσεις του Borkowski (1995, 2003).

Πίνακας 4.1. Σύγκριση BBDs και νέων SODs.

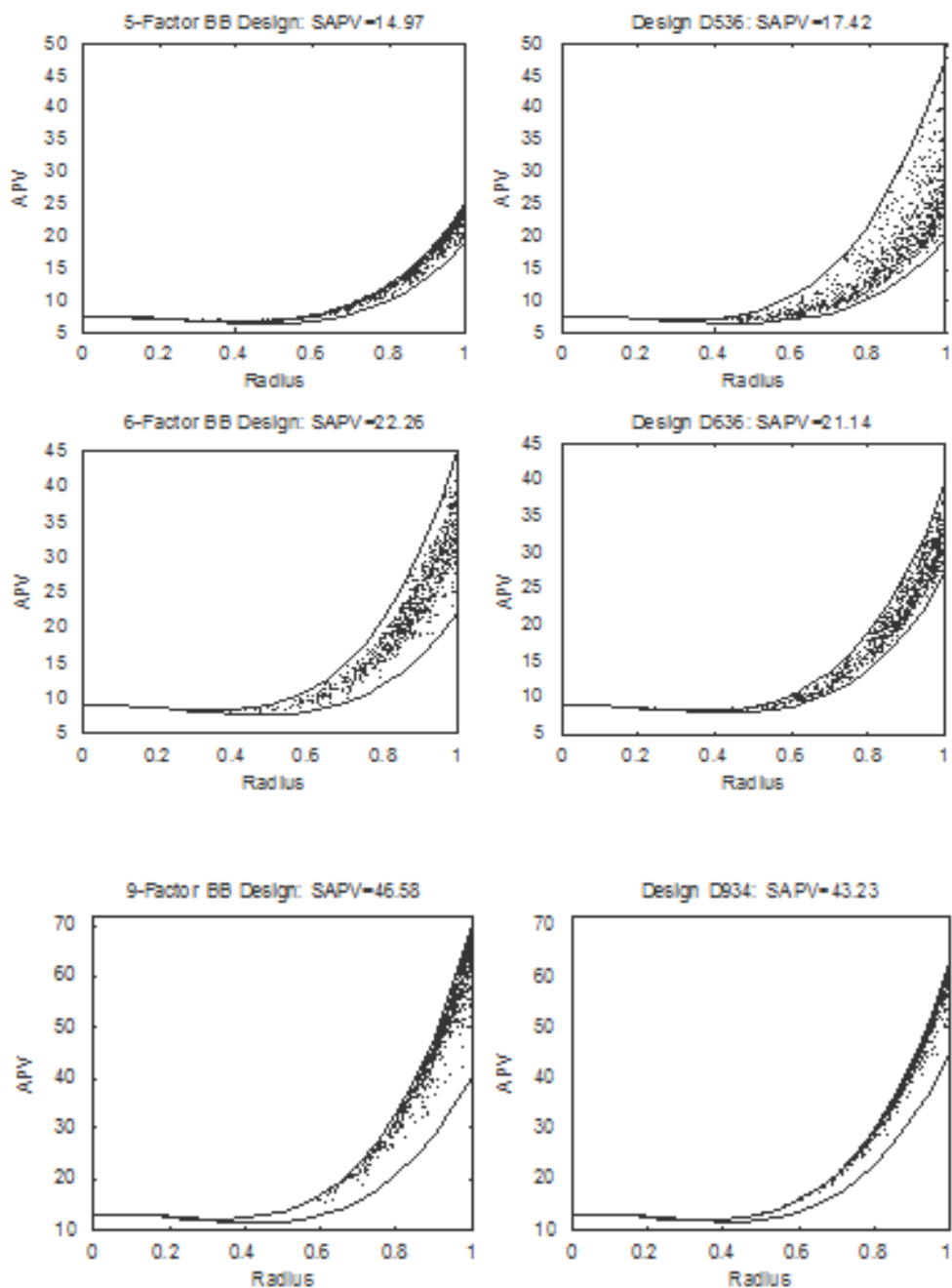
m	p	Σχεδιασμός	(v, k, r)	r / λ_{ij}	$n + n_0$	Q^*	$ M $	D -eff	G -eff	APV
5	21	<i>BB</i>	(5, 2, 4)	4(10)	40+6	0.9974	1.54E-27	77.30	83.00	14.97
		<i>D536</i>	(5, 3, 6)	3(2)2(6) $\frac{3}{2}$ (2)	40+6	0.9911	4.68E-28	73.04	43.48	17.60
6	28	<i>BB</i>	(6, 3, 3)	3(12) $\frac{3}{2}$ (3)	48+6	0.9905	2.67E-41	76.73	62.22	22.46
		<i>D636</i>	(6, 3, 6)	3(9)2(6)	48+6	0.9959	5.95E-41	78.95	70.71	21.27
7	36	<i>BB</i>	(7, 3, 3)	3(21)	56+6	1.0000	7.98E-57	83.88	92.90	26.59
		<i>D736</i>	(7, 3, 6)	3(21)	56+6	1.0000	7.98E-57	83.23	92.90	26.59
8	45	<i>BB</i>	(8, 3, 9)	$\frac{9}{2}$ (12)3(16)	192+16	0.9974	2.07E-76	83.88	71.01	35.27
		<i>D8312</i>	(8, 3, 12)	4(16)3(12)	128+8	0.9983	5.64E-76	85.76	91.08	34.18
9	55	<i>BB</i>	(9, 3, 5)	5(27) $\frac{5}{2}$ (9)	120+10	0.9924	7.25E-100	82.24	78.11	46.44
		<i>D934</i>	(9, 3, 4)	4(36)	96+8	0.9985	6.50E-99	85.59	87.53	43.27

Ενώ όλες οι τιμές Q^* του Πίνακα 4.1 φαίνεται να είναι πολύ κοντά στο 1, είναι δύσκολο να δούμε κάποια βελτίωση στο σχεδιασμό αυξάνοντας το Q^* , παραδείγματος χάριν, από 0.9905 σε 0.9959.

Η Εικόνα 4.1 μας δείχνει γραφικά τη μεταβλητότητα της κλιμακωμένης προβλεπόμενης διασποράς κάποιων BBDs και νέων SODs. Κάθε γράφημα είναι ένα σχεδιάγραμμα των ακτινών 2000 τυχαίων σημείων στην m -διάστατη μοναδιαία σφαίρα έναντι των κλιμακωμένων προβλεπόμενων διασπορών. Επίσης, παρατηρούμε τις μέσες προβλεπόμενες διασπορές του δείγματος από αυτά τα 2000 σημεία (sample average prediction variances – SAPVs). Αυτή η μέθοδος Monte Carlo εισήχθη από τον Borkowski (2003) για την ακριβή εκτίμηση των APV τιμών για σχεδιασμούς αποκριτικών επιφανειών στον υπερκύβο. Όπως ήταν αναμενόμενο, οι τιμές SAPVs είναι πολύ κοντά στις αντίστοιχες APV τιμές του Πίνακα 4.1.

Η μέθοδος Monte Carlo είναι επίσης χρήσιμη για τη γραφική μελέτη της περιστρεψιμότητας ενός σχεδιασμού. Συγκεκριμένα, το γράφημα ενός πιο

περιστρέψιμου σχεδιασμού θα είναι λιγότερο άστατο από το αντίστοιχο ενός λιγότερο περιστρέψιμου σχεδιασμού. Κανονικά, το γράφημα ενός περιστρέψιμου σχεδιασμού είναι απλώς μια καμπύλη, αφού η προβλεπόμενη διασπορά είναι σταθερή για κάθε ακτίνα. Τα σχεδιαγράμματα της Εικόνας 4.1 αποτελούν τα variance dispersion graphs (VDGs) για τις ελάχιστες και μέγιστες scaled προβλεπόμενες διασπορές σε συνδυασμό με κάθε τιμή ακτίνας. Έτσι, τα VDGs παρέχουν άνω και κάτω όρια για τη μεταβλητότητα των κλιμακωμένων προβλεπόμενων διακυμάνσεων.



Εικόνα 4.1. Γραφήματα που απεικονίζουν το ελάχιστο, το μέγιστο και τη μεταβλητότητα των διακυμάνσεων πρόβλεψης κάποιων BBDs και SODs.

Μπορούμε να δούμε από την Εικόνα 4.1, καθώς και από τον Πίνακα 4.1, ότι οι D636 και D934 είναι καλύτεροι από τους αντίστοιχους BB σχεδιασμούς (οι οποίοι κατασκευάστηκαν από τους PBIBDs) βάσει της περιστρεψιμότητας, των APV τιμών, της D -αποδοτικότητας και της G -αποδοτικότητας.

Από τον Πίνακα 4.1, παρατηρούμε επίσης ότι η Q^* τιμή του SOD που παράγεται είναι κοντά στο 1 αν οι r/λ_{ij} τιμές του IBD που παράγει είναι κοντά στο 3 και γίνεται 1 αν όλες οι r/λ_{ij} τιμές γίνονται 3, όπως στην περίπτωση των BB 7 παραγόντων και D736. Οι SODs που παράγονται από IBDs υψηλής r/λ_{ij} τιμής (δηλαδή όταν το k είναι μικρό σε σχέση με το v), όπως ο BB σχεδιασμός 5 παραγόντων και ο D934, θα πρέπει να χρησιμοποιούνται με προσοχή. Ο ακόλουθος πίνακας μας δίνει την κατανομή των επιπέδων των παραγόντων για κάθε ζεύγος παραγόντων για αυτούς τους σχεδιασμούς.

BBD (5 παράγοντες)

επίπεδο	-1	0	1
-1	1	6	1
0	6	18	6
1	1	6	1

D934 (9 παράγοντες)

επίπεδο	-1	0	1
-1	2	12	2
0	12	48	12
1	2	12	2

Αυτές οι κατανομές είναι άνισες κατά πολύ λόγω του υψηλού ποσοστού από 0 για κάθε παράγοντα. Ως εκ τούτου, η χρήση τέτοιων σχεδιασμών προτείνεται σε πειραματιστές για τους οποίους η μελέτη των αλληλεπιδράσεων των παραγόντων είναι αμελητέας σημασίας.

Κεφάλαιο 5

Κλασματικοί Box-Behnken Σχεδιασμοί για One-Step Μεθοδολογία Αποκριτικών Επιφανειών

Περίληψη:

Σε αντίθεση με τη συνήθη διαδοχική φύση της μεθοδολογίας αποκριτικών επιφανειών (RSM), πρόσφατες έρευνες και άρθρα προτείνουν όπως η μελέτη (screening) και η διερεύνηση μιας αποκριτικής επιφάνειας να γίνεται με τη χρήση ενός σχεδιασμού τριών επιπέδων. Αυτή η προσέγγιση είναι γνωστή ως «one-step RSM». Εδώ συζητάμε δύο αδυναμίες των one-step RSM σχεδιασμών. Ακολούθως, προτείνεται από τους Edwards και Mee (στο αντίστοιχο άρθρο) μια κλάση RSDs τριών επιπέδων οι οποίοι κατασκευάζονται από υποσύνολα των Box-Behnken σχεδιασμών και η οποία διευθύνει αυτές τις αδυναμίες και βοηθά τον χρήστη στο θέμα της σημαντικότητας των παραγόντων.

5.1. Εισαγωγή

Οι Cheng και Wu (2001) (γνωστοί ως CW) εισάγουν μια καινοφανή μέθοδο για τη διερεύνηση μιας αποκριτικής επιφάνειας χρησιμοποιώντας ένα λιτό και οικονομικό πείραμα. Αυτό αντιτίθεται με τη συνήθη αντιμετώπιση στην RSM στην οποία χρησιμοποιείται μια διαδοχική πειραματική διαδικασία (πείραμα screening και ακολούθως μέθοδος της πιο απότομης ανόδου). Οι CW προτείνουν τη χρήση *ορθογώνιων σχηματισμών* (Orthogonal Arrays – OAs) τριών επιπέδων για τη διαλογή ενός μεγάλου αριθμού (T) παραγόντων και ακολούθως την προβολή (project) από το χώρο του μεγαλύτερου παράγοντα σε μικρότερο χώρο σε t παράγοντες ($t < T$) για να γίνει η διερεύνηση της αποκριτικής επιφάνειας χρησιμοποιώντας ξανά τον αρχικό σχεδιασμό.

Υποθέτουμε ότι οι παράγοντες είναι ποσοτικοί και ορίζονται ως x_1, x_2, \dots, x_t και ότι το $x_{j,i}$ ορίζει το επίπεδο του j -οστού παράγοντα για την i -οστή εκτέλεση. Το μοντέλο δεύτερης τάξης δίνεται από την

$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^t \beta_j x_{j,i} + \sum_{j=1}^t \beta_{jj} x_{j,i}^2 + \sum_{j < k}^t \beta_{jk} x_{j,i} x_{k,i} + \varepsilon_i, i = 1, 2, \dots, n \quad (5.1)$$

όπου β_j οι γραμμικές κύριες επιδράσεις, β_{jj} οι τετραγωνικές κύριες επιδράσεις, β_{jk} οι γραμμικές \times γραμμικές αλληλεπιδράσεις και $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$.

Στο πρώτο βήμα της CW μεθόδου, η επιλογή των παραγόντων γίνεται για να προσδιοριστεί ποιοι από τους πολλούς παράγοντες είναι ενεργοί. Αυτό το βήμα συνήθως περιέχει μια ανάλυση κύριων επιδράσεων μόνο (main-effects-only analysis). Το μειονέκτημα εδώ είναι ότι μπορεί να παραληφθούν σημαντικές αλληλεπιδράσεις και μπορεί να οδηγηθούμε σε μια ατελή αποκριτική επιφάνεια.

Το βήμα-κλειδί της CW μεθόδου είναι η προβολή. Για να είναι επιτυχής, θα πρέπει κανείς

(α) να αφαιρέσει μόνο παράγοντες που δεν έχουν επίδραση και

(β) να μπορεί να εκτιμήσει ένα χρήσιμο μοντέλο στους υπολειπόμενους παράγοντες.

Για να μπορεί η αποκριτική επιφάνεια να διερευνηθεί επαρκώς στους παράγοντες που προβάλλονται, ο σχεδιασμός που προβάλλεται πρέπει να είναι δεύτερης τάξης. Τέτοιοι σχεδιασμοί καλούνται *eligible*, διαφορετικά *ineligible*. Το δεύτερο μειονέκτημα, λοιπόν, της μεθόδου αυτής είναι η πιθανότητα η προβολή για ένα επιθυμητό σύνολο παραγόντων να είναι *ineligible*.

Για την αντιμετώπιση αυτών των μειονεκτημάτων, εδώ προτείνονται κάποιοι σχεδιασμοί αποκριτικών επιφανειών τριών επιπέδων παίρνοντας υποσύνολα από τους Box-Behnken σχεδιασμούς. Ο σκοπός της one-step RSM είναι να παρέχει στον πειραματιστή τη δυνατότητα να διερευνήσει την παρουσία αλληλεπιδράσεων και άρα να είναι πιο ορθή η επιλογή του όσον αφορά τους ενεργούς παράγοντες σε λιγότερες εκτελέσεις σε σχέση με έναν κλασικό σχεδιασμό αποκριτικής επιφάνειας (π.χ. κεντρικοί σύνθετοι και Box-Behnken σχεδιασμοί).

5.2. Υποσύνολα παραγοντικών σχεδιασμών τριών επιπέδων

Ο Mee (2007) είχε προτείνει ένα τρόπο για το πώς μπορούν να χρησιμοποιηθούν αλγόριθμοι βέλτιστων σχεδιασμών στην κατασκευή σχεδιασμών αποκριτικών σχεδιασμών τριών επιπέδων για σφαιρικές περιοχές. Συγκεκριμένα, οι D -βέλτιστοι σχεδιασμοί κατασκευάζονται για διάφορα μεγέθη εκτελέσεων χρησιμοποιώντας ένα υποψήφιο σύνολο εκτελέσεων από μία συγκεκριμένη τροχιά σημείων ίσης απόστασης από το κέντρο του σχεδιασμού. Αυτό αντιτίθεται στην ιδέα της χρήσης ενός πλήρους 3^T παραγοντικού ως υποψήφιο. Για T παράγοντες, η k -οστή τροχιά

$(k=0,1,\dots,T)$ περιέχει $\binom{T}{k}2^k$ σημεία με k παράγοντες στα ± 1 και τους υπολειπόμενους παράγοντες στο 0.

Βάσει της πρότασης του Mee, εδώ οι σχεδιασμοί τριών παραγόντων που προτείνονται αποτελούνται από σημεία που παίρνονται από μία τροχιά. Δηλαδή, χρησιμοποιούνται σχεδιασμοί μη πλήρων υποσυνόλων (incomplete subset designs) των Box-Behnken σχεδιασμών (BBDs), οι οποίοι περιλαμβάνουν σημεία στο κέντρο και από μία τροχιά S_k για κάποιο $k \in [2, T-1]$.

Για 3-5 παράγοντες, οι BBDs έχουν την μορφή $c_0S_0 + S_2$, όπου c_k είναι ο αριθμός των επαναλήψεων των σημείων στην S_k . Ενώ για 6 ή περισσότερους παράγοντες, αυτοί οι σχεδιασμοί περιέχουν μόνο ένα υποσύνολο σημείων από την S_k , όπου $k \geq 3$, και είναι συνήθως πολύ μεγάλοι για πρακτική χρήση. Δηλαδή, για 5 ή περισσότερους παράγοντες, οι BBDs έχουν πολύ περισσότερες εκτελέσεις από ότι χρειάζεται για την προσαρμογή ενός μοντέλου δεύτερης τάξης (π.χ. ένας BBD σε 5 παράγοντες απαιτεί $n > 40$ εκτελέσεις για να εκτιμήσει $p = 21$ παραμέτρους).

Άρα, είναι πιο πρακτική η χρήση των κλασματικών (fractional) Box-Behnken σχεδιασμών (FBBDs). Τέτοιοι σχεδιασμοί κατασκευάζονται από υποσύνολα των παραγοντικών σχεδιασμών δύο επιπέδων που συνθέτουν ένα BBD. Για ένα μέγεθος εκτελέσεων μεγαλύτερο από τον αριθμό των παραμέτρων $p = \binom{T+2}{2}$ για ένα μοντέλο δεύτερης τάξης σε T παράγοντες, οι FBBDs μπορούν να εκτιμήσουν το πλήρες μοντέλο.

Επιπλέον, για μέγεθος εκτελέσεων $\binom{T+1}{2} \leq n < \binom{T+2}{2}$, υπάρχει δυνατότητα να κατασκευαστούν eligible FBBDs για κάθε προβολή για $T-1$ (ή λιγότερους) παράγοντες.

5.3. Κατασκευή κλασματικών Box-Behnken σχεδιασμών

Ας πάρουμε για παράδειγμα ένα BBD 6 παραγόντων. Η δομή του είναι η εξής:

Πίνακας 5.1. Box-Behnken σχεδιασμός για $k=6$.

A	B	C	D	E	F
± 1	± 1	0	± 1	0	0
0	± 1	± 1	0	± 1	0
0	0	± 1	± 1	0	± 1
± 1	0	0	± 1	± 1	0
0	± 1	0	0	± 1	± 1
± 1	0	± 1	0	0	± 1
0	0	0	0	0	0

Αν πάρουμε έξι κλάσματα 2^{3-1} με resolution III και όχι τα έξι 2^3 , τότε χρησιμοποιούμε μόνο 24 σημεία από μια S_3 . Προσθέτοντας c_0 εκτελέσεις στο κέντρο, τότε παίρνουμε ένα

1/2BB6 σχεδιασμό $[(1/2S_3^{III}) + c_0S_0, 6 \times 2_{III}^{3-1}]$ 28 παραμέτρων και αριθμό εκτελέσεων $24 + c_0$.

Στον Πίνακα 5.2 βλέπουμε τους 25 συνδυασμούς αγωγών για αυτόν το σχεδιασμό με πραγματικά πειραματικά δεδομένα (Alvarez et al. 1988, με υπόδειξη ότι οι γραμμικές και τετραγωνικές κύριες επιδράσεις των παραγόντων D και E και η αλληλεπίδραση DE είναι ενεργές).

Πίνακας 5.2. (1/2)BB6 σχεδιασμός και απόκριση για τα δεδομένα του παραδείγματος “very-large-scale-integrated-VLSI”.

<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>y</i>
1	1	0	-1	0	0	107.80
1	-1	0	1	0	0	44.46
-1	1	0	1	0	0	45.01
-1	-1	0	-1	0	0	109.32
0	1	1	0	-1	0	84.08
0	1	-1	0	1	0	65.36
0	-1	1	0	1	0	66.25
0	-1	-1	0	-1	0	83.58
0	0	1	1	0	-1	45.30
0	0	1	-1	0	1	112.40
0	0	-1	1	0	1	45.51
0	0	-1	-1	0	-1	107.15
1	0	0	1	-1	0	58.84
1	0	0	-1	1	0	117.76
-1	0	0	1	1	0	45.31
-1	0	0	-1	-1	0	153.08
0	1	0	0	1	-1	65.05
0	1	0	0	-1	1	89.93
0	-1	0	0	1	1	65.25
0	-1	0	0	-1	-1	79.98
1	0	1	0	0	-1	64.12
1	0	-1	0	0	1	64.03
-1	0	1	0	0	1	65.19
-1	0	-1	0	0	-1	63.40
0	0	0	0	0	0	63.07

5.4. Ανάλυση των κλασματικών Box-Behnken σχεδιασμών

Η ανάλυση γίνεται με *προς τα πίσω απαλοιφή* (backward elimination) και προσαρμόζοντας μοντέλα δεύτερης τάξης σε κάθε μία από τις προβολές $T-1$ παραγόντων. Αυτή η προσέγγιση είναι ειδικότερα εφαρμόσιμη στους FBBDs οι οποίοι δεν μπορούν να εκτιμήσουν το πλήρες μοντέλο δεύτερης τάξης [όπως είναι και το (1/2)BB6].

Σκοπός της στρατηγικής αυτής είναι να προσδιορίσουμε τους σημαντικούς παράγοντες και ακολούθως να προσαρμόσουμε ένα μοντέλο δεύτερης τάξης στους παράγοντες αυτούς.

Τα βήματα του αλγορίθμου έχουν ως ακολούθως :

1. Εκτελούμε μία προς τα πίσω απαλοιφή για να φτάσουμε στο δοκιμαστικό μοντέλο δεύτερης τάξης.
 - a) Υποθέτοντας ότι τουλάχιστον ένας παράγοντας μπορεί να παραλειφθεί από το μοντέλο δεύτερης τάξης που περιέχει όλους τους T παράγοντες, υπολογίζουμε τη ρίζα του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (root mean square error – RMSE) για κάθε μοντέλο δεύτερης τάξης $T-1$ παραγόντων και επιλέγουμε αυτό με το μικρότερο RMSE.
 - b) Για το μοντέλο δεύτερης τάξης στους υπολειπόμενους $t=T-1$ παράγοντες, με δείκτες $\{j_1, j_2, \dots, j_t\}$, έστω το F_{j_i} να υποδηλώνει την F -statistic για τον έλεγχο της μηδενικής υπόθεσης ότι όλες οι $t+1$ παράμετροι που περιέχουν τον παράγοντα j_i είναι αμελητέες. Αν το ελάχιστο F_{j_i} είναι μικρότερο από κάποιο προκαθορισμένο όριο (ή όμοια, αν η αντίστοιχη p -τιμή είναι μεγαλύτερη από κάποιο a), τότε ο παράγοντας j_i αφαιρείται.
 - c) Συνεχίζουμε τη διαδικασία για τους υπόλοιπους $T-2, T-3$, κλπ παράγοντες μέχρι να μην μπορούν να αφαιρεθούν επιπλέον παράγοντες.
2. Για να εξακριβώσουμε αν υπάρχουν άλλες λογικές ερμηνείες για τα δεδομένα πέραν αυτών που παρέχονται από την προς τα πίσω απαλοιφή, εκτελούμε επιπλέον τα επόμενα :
 - a) Για κάθε T προβολές σε $T-1$ παράγοντες, υπολογίζουμε τους συντελεστές του μοντέλου δεύτερης τάξης.
 - b) Παίρνοντας ότι το σφάλμα του μοντέλου είναι ένα τυχαίο σφάλμα, φτιάχνουμε μια t -statistics του Student για τους συντελεστές σε κάθε ένα από τα μοντέλα δεύτερης τάξης $T-1$ παραγόντων για διευκρίνιση της σημαντικότητας.

- c) Κατασκευάζουμε ένα σχεδιάγραμμα (plot) των εκτιμήσεων των γραμμικών κύριων επιδράσεων. Παράγοντες με σταθερή εκτίμηση μακριά από το μηδέν υποδεικνύουν μια ενεργή κύρια επίδραση που είναι εν μέρει ταυτόσημη με ανενεργές αλληλεπιδράσεις. Διαφορετικά, οι παράγοντες με μη σταθερές εκτιμήσεις υποδεικνύουν ενεργές επιδράσεις και/ή αλληλεπιδράσεις.
3. Προσαρμόζουμε το μοντέλο δεύτερης τάξης στους παράγοντες που προσδιορίστηκαν στα βήματα 1 και 2.
- Ανάλυση παραδείγματος

Στον Πίνακα 5.3 βλέπουμε την προς τα πίσω απαλοιφή των δεδομένων του Πίνακα 5.2 με $\alpha=0.05$.

Πίνακας 5.3. Προς τα πίσω απαλοιφή για VLSI FBBD.

Βήμα	Παράγοντας	F	p – τιμή
1	C	–	–
2	F	1.335	0.407
3	B	3.176	0.057
4	A	9.491	0.001

Παρατηρούμε ότι το μοντέλο δεύτερης τάξης πέντε παραγόντων που παραλείπει τη C έχει το μικρότερο $RMSE(1.1871)$. Άρα, η C είναι ο πρώτος παράγοντας του επιλέγεται για αφαίρεση. Ο όπισθεν αποκλεισμός αφαιρεί επίσης τις F και B αλλά όχι την A ή άλλον παράγοντα. Επίσης, ελέγχοντας τις εκτιμήσεις επιβεβαιώνεται το ίδιο σύνολο ενεργών παραγόντων αφού οι D, E, D^2, E^2, DE και AE είναι οι μόνοι όροι με στατιστικά σημαντικές εκτιμήσεις. Ένα προσαρμοσμένο μοντέλο δεύτερης τάξης στις A, D και E έχει

$$RMSE=2.694 \text{ και } R^2=0.994.$$

Τα αποτελέσματα είναι ίδια με τα αυτά της Alvarez et al. (1988), μόνο που εδώ χρειαστήκαμε τις μισές εκτελέσεις (25 και όχι 50).

Άρα, οι πειραματιστές θα μπορούσαν να χρησιμοποιήσουν τους πιο οικονομικούς FBBDs, οι οποίοι, επιπλέον, μπορούν να κατασκευαστούν εύκολα (έχουν μια απλή κατασκευή) και ακολουθούν μια απλή μέθοδο ανάλυσης.

5.5. Σύγκριση

Για σφαιρικές περιοχές, οι D -αποδοτικότητες υπολογίζονται ως

$$D\text{-eff} = \left[\frac{|\mathbf{X}'\mathbf{X}/n|}{D_\infty} \right]^{1/p},$$

όπου $p = \binom{t+2}{2}$, \mathbf{X} ο πίνακας ενός μοντέλου δεύτερης τάξης και

$$D_\infty = 2^t (t+1)^{-p} (t+2)^{-t(t+2)} (t+3)^{p-1}$$

(Hardin και Sloane (1993)).

Υποθέτουμε ότι ο πίνακας σχεδιασμού \mathbf{D} με T παράγοντες περιορίζεται στη μοναδιαία υπερσφαίρα (δηλαδή τα διαγώνια στοιχεία του $\mathbf{D}\mathbf{D}' \leq 1$).

Μπορούμε τώρα να συγκρίνουμε τους FBBDs με τους D -βέλτιστους σχεδιασμούς τριών επιπέδων βάσει του αριθμού των eligible προβολών και τη μέση D -αποδοτικότητα (\bar{D}) για αυτές τις προβολές.

Οι D -αποδοτικότητες που υπολογίστηκαν για κάποιους FBBDs με $c_0 = 1$ φαίνονται στον Πίνακα 5.4 που ακολουθεί.

Πίνακας 5.4. eligible προβολές και μέσες D -αποδοτικότητες για FBD και D -βέλτιστους σχεδιασμούς.

T	Run Size (n)	Projection (t)	Number of Projections	Number of Eligible Projections	\bar{D}_{FBD}	\bar{D}_{opt}
4	19	2	6	6	0.532	0.533
		3	4	4	0.688	0.688
		4	1	1	0.879	0.890
5	21	3	10	10	0.527	0.560
		4	5	5	0.634	0.643
		5	1	1	0.749	0.828
6	25	3	20	20	0.419	—
		4	15	15	0.521	—
		5	6	6	0.616	—
		6	1	0	—	—
6	37	3	20	20	0.420	0.434
		4	15	15	0.541	0.572
		5	6	6	0.689	0.742
		6	1	1	0.858	0.937
7	29	3	35	35	0.375	—
		4	35	35	0.467	—
		5	21	21	0.563	—
		6	7	7	0.639	—
		7	1	0	—	—
7	43	3	35	35	0.367	0.376
		4	35	35	0.465	0.482
		5	21	21	0.586	0.614
		6	7	7	0.720	0.767
		7	1	1	0.867	0.938
9	49	3	84	84	0.294	—
		4	126	126	0.359	—
		5	126	126	0.436	—
		6	84	84	0.519	—
		7	36	36	0.599	—
		8	9	9	0.655	—
		9	1	0	—	—
9 [3/4BB9]	73	3	84	84	0.289	0.292
		4	126	126	0.355	0.361
		5	126	126	0.438	0.448
		6	84	84	0.535	0.550
		7	36	36	0.643	0.667
		8	9	9	0.761	0.795
9	1	1	0.884	0.930		

Πίνακας 5.4 (συνέχεια)

T	Run Size (n)	Projection (t)	Number of Projections	Number of Eligible Projections	\bar{D}_{FBBD}	\bar{D}_{opt}		
9 [1/2BB9.2]	73	3	84	84	0.259	0.292		
		4	126	126	0.323	0.361		
		5	126	126	0.402	0.448		
		6	84	84	0.490	0.550		
		7	36	36	0.585	0.667		
		8	9	9	0.685	0.795		
		9	1	1	0.789	0.930		
10	81	3	120	120	0.234	0.258		
		4	210	210	0.289	0.314		
		5	252	252	0.359	0.384		
		6	210	210	0.439	0.468		
		7	120	120	0.529	0.564		
		8	45	45	0.627	0.670		
		9	10	10	0.731	0.786		
		10	1	1	0.837	0.906		
11	89	3	165	165	0.214	0.231		
		4	330	330	0.262	0.275		
		5	462	462	0.323	0.332		
		6	462	462	0.393	0.402		
		7	330	330	0.473	0.480		
		8	165	165	0.561	0.566		
		9	55	55	0.655	0.662		
		10	11	11	0.754	0.764		
		11	1	1	0.855	0.870		
12	97	3	220	220	0.197	0.197(?)		
		4	495	495	0.239	0.239(?)		
		5	792	792	0.292	0.292(?)		
		6	924	924	0.354	0.354(?)		
		7	792	792	0.424	0.424(?)		
		8	495	495	0.501	0.501(?)		
		9	220	220	0.584	0.584(?)		
		10	66	66	0.670	0.670(?)		
		11	12	12	0.759	0.759(?)		
		12	1	1	0.847	0.847(?)		
				12	1	1	0.847	0.847(?)
		13	105	3	286	286	0.183	0.183(?)
4	715			715	0.220	0.220(?)		
5	1287			1287	0.267	0.267(?)		
6	1716			1716	0.322	0.322(?)		
7	1716			1716	0.385	0.385(?)		
8	1287			1287	0.454	0.454(?)		
9	715			715	0.528	0.528(?)		
10	286			286	0.606	0.606(?)		
11	78			78	0.685	0.685(?)		
12	13			13	0.763	0.763(?)		
13	1			1	0.835	0.835(?)		
				13	1	1	0.835	0.835(?)

Για να βρεθούν βέλτιστοι σχεδιασμοί βάσει μιας συγκεκριμένης τροχιάς, εφαρμόστηκε ο τροποποιημένος αλγόριθμος του Federon χρησιμοποιώντας τη διαδικασία OPTEX της SAS με 1000 ή περισσότερα τυχαία σημεία εκκίνησης.

Για $T=12, 13$ δεν εντοπίστηκε κανένας D -βέλτιστος σχεδιασμός με υψηλότερη D -αποδοτικότητα από αυτή των FBBDs. Παρόλο που ενδέχεται στο μέλλον να ανακαλυφθούν τέτοιοι σχεδιασμοί, μέχρι σήμερα το αποτέλεσμα αυτό ευνοεί τους FBBDs.

Όπως ήταν αναμενόμενο, οι D -βέλτιστοι σχεδιασμοί έχουν όμοιες ή υψηλότερες αποδοτικότητες σε σχέση με τους FBBDs. Παρόλα αυτά όμως, οι FBBDs είναι πιο διαισθητικοί σχεδιασμοί αφού έχουν πιο απλή κατασκευή για την οποία δεν απαιτείται χρήση λογισμικού.

Κεφάλαιο 6

Κατασκευή Σχεδιασμών Αποκριτικών Επιφανειών σε δύο στάδια

Περίληψη:

Έστω η συνήθης κατάσταση σε πολλές εφαρμογές αποκριτικών επιφανειών. Στο πρώτο στάδιο, διεξάχθηκε ένας σχεδιασμός 2 επιπέδων με κεντρικά σημεία και η ανάλυση έδειξε ότι η καμπυλότητα (curvature) της αποκριτικής επιφάνειας είναι σημαντική. Σε τέτοια περίπτωση, προχωράμε σε ένα δεύτερο στάδιο πειραμάτων ούτως ώστε το μοντέλο δεύτερης τάξης να είναι προσαρμόσιμο. Σκοπός είναι η κατασκευή σχεδιασμών αποκριτικών επιφανειών σε δύο στάδια με υψηλή αποδοτικότητα.

Η προσοχή μας εστιάζεται στον σχεδιασμό ενός πειράματος για το δεύτερο στάδιο. Μελετάται η καταλληλότητα του κριτηρίου της D -βελτιστότητας για σχεδιασμό πειραμάτων δευτέρου σταδίου και ακολούθως εισάγεται ένα νέο κριτήριο, αυτό της C -βελτιστότητας, για να βρεθούν τα σημεία σχεδιασμού στο δεύτερο στάδιο, δεδομένου ότι αυτά δίνονται στο πρώτο στάδιο.

Το κριτήριο της C -βελτιστότητας είναι ένα σταθμισμένο άθροισμα μέτρων αποδοτικότητας από τέσσερα υποσύνολα παραμέτρων ενός μοντέλου δεύτερης τάξης. Επιλέγοντας κατάλληλα βάρη (weights), μπορεί κανείς να κατασκευάσει σχεδιασμούς αποκριτικών επιφανειών σε δύο στάδια με εξίσου υψηλές αποδοτικότητες εκτιμήσεων (estimation efficiencies) για όλες τις παραμέτρους.

Τέλος, ακολουθεί ένας αλγόριθμος κατασκευής. Τα πλεονεκτήματα των νέων σχεδιασμών αποδεικνύονται μέσω σύγκρισης αυτών με υπάρχοντες σχεδιασμούς.

6.1. Εισαγωγή

Μια φαρμακευτική εταιρία θέλει να εντοπίσει τις καλύτερες συνθήκες παραγωγής για να αυξήσει την παραγωγικότητα πενικιλίνης. Η ποσότητα-στόχος (response variable) είναι η παραγωγή πενικιλίνης μετρημένη σε χιλιόγραμμα ανά ώρα. Θεωρούμε τέσσερις μεταβλητές (χρόνος ζύμωσης, θερμοκρασία ζύμωσης, ποσοστό αμύλου του προϊόντος και ταχύτητα ανακατέματος) οι οποίες επηρεάζουν την παραγωγή κατά τρόπο περίπλοκο. Για παράδειγμα, υψηλή θερμοκρασία ζύμωσης και υψηλό ποσοστό αμύλου επιταχύνουν την παραγωγή μούχλας η οποία εκκρίνει πενικιλίνη. Ωστόσο, η θερμοκρασία και το ποσοστό αμύλου πρέπει να ελέγχονται για να κρατούν την πυκνότητα της μούχλας σε ένα ικανοποιητικό επίπεδο. Η αύξηση του χρόνου ζύμωσης σίγουρα οδηγεί στη αύξηση της ολικής ποσότητας παραγωγής μούχλας, αλλά όταν η παραγωγή επιθυμείται ανά ώρα είναι μειωμένος, μια και η δυνατότητα της μούχλας για έκκριση πενικιλίνης μειώνεται μετά από κάποια ώρα.

Μια και το πείραμα είναι χρονοβόρο και ακριβό, ο μηχανικός σκέφτηκε να το προσεγγίσει σε δύο στάδια με συνολικά το πολύ 20 εκτελέσεις (runs). Στο πρώτο στάδιο, χρησιμοποίησε τον 2^{4-1}_{IV} παραγοντικό σχεδιασμό 6 εκτελέσεων, μαζί με τέσσερα επαναλήψεις του κεντρικού σημείου, π.χ. το σημείο με όλες τις μεταβλητές σε μεσαίο επίπεδο. Μετά το πρώτο στάδιο των 12 εκτελέσεων και οι τέσσερις μεταβλητές βρέθηκαν σημαντικές, όπως επίσης και η καμπυλότητα της αποκριτικής επιφάνειας.

Ο μηχανικός τότε αποφάσισε να κάνει οκτώ ακόμα εκτελέσεις στο δεύτερο στάδιο του πειράματος για να προσαρμόσει ένα μοντέλο δεύτερης τάξης

$$E(y) = \beta_0 + \sum_i \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_i \beta_{ii} x_i^2 \quad (6.1)$$

όπου $E(y)$ η μέση τιμή της μεταβλητής απόκρισης y , x_i οι μεταβλητές συνθηκών παραγωγής και b οι παράμετροι προς υπολογισμό.

Το πρόβλημα ήταν το εξής: πώς μπορεί κανείς να σχεδιάσει τις επιπλέον οκτώ εκτελέσεις. Αρχικά σκέφτηκε να χρησιμοποιήσει τα οκτώ “face points”, δηλαδή τα σημεία με μια μεταβλητή σε χαμηλό ή υψηλό επίπεδο και οι υπόλοιπες σε μεσαίο επίπεδο. Όμως μετά από μια επαλήθευση, είδε ότι οι παράμετροι για τους όρους διασταυρωτού γινομένου στο μοντέλο δε θα ήταν αναγνωρίσιμοι σε τέτοιους σχεδιασμούς, κάτι το οποίο θα ήταν επιθυμητό.

Επιπλέον, αφού το πείραμα πραγματοποιείται σε δύο στάδια, οι πειραματικές εκτελέσεις μπορούν μόνο να είναι τυχαίες σε κάθε στάδιο. Άρα, θα πρέπει να εισάγει ένα παράγοντα μπλοκινγκ z ($z=1$ όταν η εκτέλεση είναι στο πρώτο στάδιο, και $z=0$ όταν η εκτέλεση είναι στο δεύτερο στάδιο) στο μοντέλο δεύτερης τάξης. Έτσι το μοντέλο γίνεται

$$E(y) = \beta_0 + \sum_i \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_i \beta_{ii} x_i^2 + \gamma z \quad . \quad (6.2)$$

Με ένα τέτοιο μοντέλο, επιτυγχάνουμε τον ιδανικό σχεδιασμό για το δεύτερο στάδιο, δεδομένων των σημείων σχεδιασμού στο πρώτο στάδιο (τυπικά ένας κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός 2 επιπέδων με κεντρικά σημεία). Υπάρχουν δύο αρχές που πρέπει να λάβουμε υπ' όψιν: την ικανότητα αναγνώρισης του μοντέλου και την εκτιμητική ικανότητα.

6.2. Κατασκευή σε δύο στάδια

Μια σημαντική ανησυχία στην κατασκευή πειραματικών σχεδιασμών είναι το τι θα αποφασίσουμε τελικά να επιλέξουμε μεταξύ της εκτιμητικής ικανότητας και της οικονομίας στον αριθμό των εκτελέσεων. Το μέγεθος των εκτελέσεων τυπικά είναι περιορισμένο για πραγματικούς λόγους, όπως ο προϋπολογισμός του χρόνου. Για ένα δεδομένο μέγεθος εκτελέσεων, ο ιδανικός σχεδιασμός μπορεί να κατασκευαστεί με μεγιστοποίηση ορισμένων κριτηρίων βελτιστοποίησης. Εδώ συζητάμε το πρόβλημα της κατασκευής σχεδιασμών δύο σταδίων για την ανάλυση μιας αποκριτικής επιφάνειας δεύτερης τάξης, βασιζόμενοι στις ακόλουθες πρακτικές θεωρήσεις:

- (i) Στο πρώτο στάδιο, χρησιμοποιείται ένα κλασματικό παραγοντικό δύο επιπέδων με N_1 σημεία, σε συνδυασμό με N_0 επαναλήψεις κεντρικών σημείων.
- (ii) Δεδομένων των $N_1 + N_0$ σημείων στο πρώτο στάδιο, επιλέγονται N_2 σημεία σχεδιασμού στο δεύτερο στάδιο, για προσαρμογή ενός μοντέλου δεύτερης τάξης. Αυτά τα N_2 σημεία για το δεύτερο στάδιο επιλέγονται για την επίτευξη της υψηλότερης αποδοτικότητας εκτίμησης βάσει ορισμένου κριτηρίου.

Υποθέτουμε ότι y είναι η μεταβλητή απόκρισης, x_1, \dots, x_k είναι συνεχείς μεταβλητές που θεωρούνται ότι επηρεάζουν την απόκριση, και η κυβική πειραματική περιοχή σταθεροποιείται στο $[-1, 1]^k$. Το μοντέλο δεύτερης τάξης (6.1) έχει συνολικά $p = (k+2)(k+1)/2$ παραμέτρους. Αλλά δεδομένου ότι οι πειραματικές εκτελέσεις δεν μπορούν να αναπτυχθούν σε εντελώς τυχαία σειρά σε ένα πείραμα δύο σταδίων, το μοντέλο (6.1) θα πρέπει να αντικατασταθεί από το μοντέλο (6.2), το οποίο περιλαμβάνει μια παράμετρο μπλοκινγκ. Το εμπειρικό μοντέλο για το μοντέλο (6.2) μπορεί να γραφτεί σε μορφή ενός τυπικού πίνακα-διάνυσμα:

$$E(Y) = X\beta,$$

όπου Y είναι ένα N -διάνυσμα των παρατηρημένων αποκρίσεων, β είναι το $(p+1)$ -διάνυσμα παραμέτρων, X είναι ο $N \times (p+1)$ πίνακας μοντέλου με κάθε σειρά να αντιπροσωπεύει μια εκτέλεση. Οι εκτιμήτριες ελαχίστων τετραγώνων είναι $\hat{\beta} = (X'X)^{-1} X'Y$ με πίνακα διακύμανσης- συνδιακύμανσης ανάλογο του $(X'X)^{-1}$.

Το πιο γνωστό και δημοφιλές κριτήριο σχεδιασμού είναι ίσως η D -αποδοτικότητα, η οποία ορίζεται ως $D = |X'X|^{1/(p+1)} / N$ (όσο μεγαλύτερη, τόσο καλύτερα). Μια έμμεση παραδοχή για αυτό το κριτήριο είναι ότι όλες οι παράμετροι είναι εξίσου σημαντικές. Όπως θα δούμε πιο κάτω, αυτό μπορεί να μη δημιουργεί τις κατάλληλες συνθήκες για ένα σχεδιασμό δύο σταδίων. Όταν χρησιμοποιούμε το D -κριτήριο στην κατασκευή σχεδιασμών αποκριτικών επιφανειών δύο σταδίων, οι αποδοτικότητες των εκτιμήσεων των παραμέτρων συχνά είναι άνισα κατανομημένες, δηλαδή οι παράμετροι μπορούν να εκτιμηθούν με πολύ διαφορετικές αποδοτικότητες. Να σημειώσουμε ότι διαφορετικά σύνολα παραμέτρων επηρεάζουν την αποκριτική επιφάνεια σε διαφορετικές πτυχές: για παράδειγμα, παράμετροι γραμμικών όρων καθορίζουν το κέντρο της, παράμετροι τετραγωνικών όρων καθορίζουν το σχήμα της, κλπ. Άρα, οποιοδήποτε σύνολο παραμέτρων με χαμηλές αποδοτικότητες εκτιμήσεων θα νοθεύσει κατά πολύ μια πτυχή της αποκριτικής επιφάνειας.

Επιπλέον, στην κατασκευή σχεδιασμών αποκριτικών επιφανειών δύο σταδίων, η αποδοτικότητα εκτίμησης μπορεί να απαιτείται για κάποια ιδιαίτερα σύνολα παραμέτρων. Για παράδειγμα, όταν στο πρώτο στάδιο χρησιμοποιείται ένα 2_V^{k-m} κλασματικό παραγοντικό ή ένα 2^k πλήρες παραγοντικό (full factorial), όλες οι παράμετροι που σχετίζονται με τους γραμμικούς και τους όρους διασταυρωτού γινομένου μπορούν να εκτιμηθούν με επαρκώς υψηλή αποδοτικότητα. Άρα, τα σημεία στο δεύτερο στάδιο πρέπει να επιλεγθούν έτσι ώστε οι παράμετροι που σχετίζονται με τους τετραγωνικούς όρους να μπορούν να εκτιμηθούν όσο το δυνατό με περισσότερη ακρίβεια.

Για να ξεπεράσουμε αυτά τα προβλήματα, εδώ προτείνεται ένα νέο κριτήριο το οποίο καλείται C -αποδοτικότητα. Για να οριστεί η C -αποδοτικότητα, χωρίζονται οι παράμετροι του μοντέλου (6.2) σε πέντε ομάδες. Η ομάδα I περιέχει τον σταθερό όρο β_0 , η ομάδα L περιέχει τις k γραμμικές παραμέτρους ($\beta_i, i = 1, \dots, k$), η ομάδα B περιέχει τις $k(k-1)/2$ διγραμμικές παραμέτρους ($b_{ij}, 1 \leq i < j \leq k$), η ομάδα Q περιέχει τις k καθαρά τετραγωνικές παραμέτρους ($\beta_i, i = 1, \dots, k$), και η ομάδα b περιέχει την παράμετρο μπλοκινγκ λ , η οποία είναι παράμετρος ενόχλησης. Ο πίνακας μοντέλου X επίσης χωρίζεται όμοια σε X_I, X_L, X_B, X_Q και X_b . Ορίζουμε

$$D_j = N^{-1} |X_j' X_j - X_j' X_{-j} (X_{-j}' X_{-j})^{-1} X_{-j}' X_j|^{1/k_j}, \quad j = I, L, B, Q \quad (6.3)$$

όπου X_{-j} είναι ο συμπληρωματικός υπο-πίνακας του X_j στον X , k_j είναι ο αριθμός των στηλών στον X_j . Η D_j μετράει την αποδοτικότητα εκτίμησης των παραμέτρων στην ομάδα j για $j = I, L, B, Q$. Η C -αποδοτικότητα τότε ορίζεται ως

$$C = D_I^{w_I} D_L^{w_L} D_B^{w_B} D_Q^{w_Q} \quad (6.4)$$

όπου w_I, w_L, w_B, w_Q τα μη αρνητικά βάρη και $w_I + w_L + w_B + w_Q = 1$. Στον ορισμό της C , τα βάρη αντιπροσωπεύουν τη σημαντικότητα των συνόλων των παραμέτρων, δηλαδή τα σημαντικότερα σύνολα έχουν μεγαλύτερα βάρη. Για διαφορετικά σημεία στο πρώτο στάδιο, μπορεί κανείς να καθορίσει διαφορετικά βάρη στη C .

Τα βάρη θα πρέπει να ικανοποιούν τις ακόλουθες προδιαγραφές :

- (i) Μεταξύ των τεσσάρων συνόλων των παραμέτρων, το σύνολο I είναι συνήθως λιγότερο σημαντικό σε σχέση με τα υπόλοιπα τρία και ως εκ τούτου συνίσταται το βάρος $w_I = 0$. Ωστόσο, αν ο πειραματιστής θεωρήσει ότι ο σταθερός όρος του είναι εξίσου σημαντικός όσο οι άλλες παράμετροι, τότε μπορεί να χρησιμοποιηθεί θετικό βάρος $w_I > 0$.
- (ii) Εφόσον οι καθαρά τετραγωνικές παράμετροι δεν μπορούν να εκτιμηθούν καθόλου στο πρώτο στάδιο, είναι το πιο σημαντικό, να αυξήσουμε την αποδοτικότητα της εκτίμησης του συνόλου παραμέτρων Q . Άρα, συνίσταται το σύνολο να έχει το μεγαλύτερο βάρος w_Q .
- (iii) Όταν ο σχεδιασμός στο πρώτο στάδιο είναι ένας resolution III κλασματικός παραγοντικός (2_{III}^{k-m}) σχεδιασμός δύο επιπέδων, κάποιες γραμμικές παράμετροι συγχέονται με διγραμμικές παραμέτρους στο πρώτο στάδιο. Τότε συνίστανται στο σύνολο $w_I = 0, w_L = w_B = 1/4$ και $w_Q = 1/2$.
- (iv) Όταν ο σχεδιασμός στο πρώτο στάδιο είναι ένας resolution IV κλασματικός παραγοντικός (2_{IV}^{k-m}) σχεδιασμός δύο επιπέδων, κάποιες διγραμμικές παράμετροι συγχέονται μεταξύ τους στο πρώτο στάδιο. Τότε συνίστανται στο σύνολο $w_I = w_L = 0, w_B = 1/3$ και $w_Q = 2/3$.
- (v) Τέλος, όταν ο σχεδιασμός στο πρώτο στάδιο είναι ένας resolution V κλασματικός παραγοντικός δύο επιπέδων (2_V^{k-m}) σχεδιασμός ή ο 2^k πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός, όλες οι γραμμικές και διγραμμικές παράμετροι μπορούν να εκτιμηθούν στο πρώτο στάδιο. Τότε συνίστανται $w_I = w_L = w_B = 0$ και $w_Q = 1$.

Δεδομένου ενός συνόλου με $N_1 + N_0$ σημεία στο πρώτο στάδιο και ενός συνόλου βαρών, w_I, w_L, w_B, w_Q , η C τιμή μεγιστοποιείται επιλέγοντας N_2 σημεία στο δεύτερο στάδιο.

6.3. Αλγόριθμος κατασκευής

Πολλοί αλγόριθμοι έχουν προταθεί στη βιβλιογραφία για την κατασκευή σχεδιασμών βελτιώνοντας επαναληπτικά ένα προκαθορισμένο κριτήριο. Βασικά, αυτοί οι αλγόριθμοι είτε ανταλλάσσουν σειρές (row-wise exchange algorithm) είτε στήλες (column-wise exchange algorithm). Εδώ μια σειρά αντιπροσωπεύει ένα σημείο (εκτέλεση) και μια στήλη αντιπροσωπεύει τις συντεταγμένες μιας μεταβλητής στον σχεδιασμό. Έστω d να υποδηλώνει ένα σχεδιασμό με k μεταβλητές και N εκτελέσεις, προερχόμενες μετά από ένα βήμα στην υπολογιστική διαδικασία. Ένας row-wise exchange αλγόριθμος βελτιώνει το d στο επόμενο βήμα ανταλλάσσοντας μια ή περισσότερες σειρές, ενώ ένας column-wise exchange αλγόριθμος ανταλλάσσοντας μια ή περισσότερες στήλες. Οι row-wise exchange αλγόριθμοι εισήχθησαν σε βιβλιογραφίες του Fedorov, των Cook και Nachtsheim και των Johnson και Nachtsheim.

Στην κατασκευή των RSDs δύο σταδίων, δοκιμάστηκαν δύο τύποι αλγορίθμων: row-wise και column-wise exchange αλγόριθμοι. Στις δικές μας περιπτώσεις, τα N_1 σημεία δύο επιπέδων και τα N_0 κεντρικά σημεία από το πρώτο στάδιο είναι σταθερά, έτσι η διαδικασία χρησιμοποιείται μόνο στο να βρούμε τα N_2 σημεία για το δεύτερο στάδιο.

Εδώ προτιμούνται οι column-wise αλγόριθμοι για τους εξής λόγους:

Πρώτον, είναι μερικές φορές επιθυμητό να έχουμε τη συμμετρική ιδιότητα, δηλαδή η αναλογία των τριών επιπέδων, $\{-1, 0, 1\}$, στις N εκτελέσεις είναι η ίδια για όλες τις k μεταβλητές έτσι ώστε οι παράμετροι να μπορούν να εκτιμηθούν με ίσες αποδοτικότητες. Τέτοια συμμετρική συνθήκη μπορεί εύκολα να ολοκληρωθεί στους column-wise αλγορίθμους, αλλά δύσκολα στους row-wise.

Δεύτερον, για τη βελτίωση μιας στήλης, αντί της ανταλλαγής της από μια άλλη υποψήφια στήλη, η pair-wise στρατηγική ανταλλάσσει δύο διαφορετικά στοιχεία της ίδιας στήλης επανειλημμένα μέχρι να επιτευχθεί το κριτήριο καλύτερης βελτίωσης του σχεδιασμού. Αυτή η στρατηγική αντικαθιστά τη στήλη που ανταλλάσσεται επιλέγοντας μια στήλη από ένα υποσύνολο των υποψήφιων στηλών και έτσι μειώνει σημαντικά τον χρόνο υπολογισμού.

Επιπλέον, στην pair-wise exchanging στρατηγική, η προαναφερθείσα συνθήκη συμμετρίας διατηρείται, υπό την προϋπόθεση ότι πληρείται στον αρχικό σχεδιασμό.

Τέλος, οι column-wise αλγόριθμοι σε συνδυασμό με μια pair-wise exchanging στρατηγική είναι πιο γρήγοροι από τους row-wise στην εύρεση καλών RSDs.

Ένας column-wise αλγόριθμος εκτελείται για 300 με 500 τυχαία επιλεγμένους αρχικούς σχεδιασμούς, για καθένα από τους οποίους το κριτήριο βελτιώνεται επαναληπτικά. Έστω $d = (d_1, \dots, d_k)$ ο σχεδιασμός προς βελτίωση, όπου d_j η j -οστή στήλη και C το κριτήριο προς βελτιστοποίηση (μεγιστοποίηση). Κάθε επανάληψη περιλαμβάνει τα ακόλουθα βήματα :

- (i) Οργανώνουμε τις στήλες σε σειρά $d_{(1)}, \dots, d_{(k)}$ έτσι ώστε όταν η $d_{(j)}$ διαγραφεί, η C τιμή να είναι η j -οστή μεγαλύτερη για τον υποσχεδιασμό που περιέχει τις υπολειπόμενες $k-1$ στήλες. Επιλέγουμε τις πρώτες m στήλες $d_{(1)}, \dots, d_{(m)}$ να είναι αυτές προς ανταλλαγή για $1 \leq m \leq k$.
- (ii) Για την $d_{(1)}$, χρησιμοποιούμε την pair-wise στρατηγική επαναλαμβανόμενα σε αυτή έτσι ώστε οι C τιμές να βελτιωθούν, μέχρι να μην υπάρχει καμία άλλη βελτίωση.
- (iii) Επαναλαμβάνουμε το βήμα (ii) για $d_{(j)}$, $j = 2, \dots, m$.

Αφού βελτιωθούν όλοι οι αρχικοί σχεδιασμοί, παρατηρούνται συνήθως περισσότεροι από ένας να έχουν τη μεγαλύτερη C τιμή. Μεταξύ αυτών επιλέγεται ένας να χρησιμοποιηθεί βάσει άλλων συνθηκών.

Κατά τη διαδικασία, όταν $m=1$ μόνο μια στήλη ανταλλάσσεται σε κάθε επανάληψη, ενώ όταν $m=k$ όλες οι στήλες ανταλλάσσονται σε κάθε επανάληψη. Στην περίπτωση όπου $m=1$, η επαναληπτική διαδικασία συγκλίνει γρήγορα, αλλά η πιθανότητα απόκτησης ενός βέλτιστου σχεδιασμού είναι μικρή. Ενώ στην περίπτωση που $m=k$, η επαναληπτική διαδικασία συγκλίνει αργά για μεγάλα k , αλλά η πιθανότητα απόκτησης βέλτιστου σχεδιασμού είναι μεγάλη. Έχει διαπιστωθεί ότι ένα ενδιάμεσο m είναι η καλύτερη επιλογή μεταξύ των δύο ακραίων περιπτώσεων. Οι Li και Wu συνιστούν το $m=5$ στην κατασκευή υπερκορεσμένων σχεδιασμών όπου το k είναι μεγάλο (π.χ. μεγαλύτερο του 20). Για την κατασκευή ενός RSD το k είναι συνήθως μικρότερο του 10, άρα εδώ χρησιμοποιούμε $m=3$. Αντί της μεγιστοποίησης του C άμεσα, ισοδύναμα, μεγιστοποιείται η

$$\log C = w_I \log D_I + w_L \log D_L + w_B \log D_B + w_Q \log D_Q .$$

Αφού $D_j = N^{-1} \left\{ |X'X| / |X'_j X_j| \right\}^{1/k_j}$ για $j = I, L, B, Q$, έχουμε

$$\log C = -\log N + \sum_{j=I,L,B,Q} \frac{w_j}{k_j} \log |X'X| - \sum_{j=I,L,B,Q} \frac{w_j}{k_j} \log |X'_j X|$$

Έτσι δε χρειάζεται να υπολογισθούν τα D_j για $j = I, L, B, Q$ αμέσως, αλλά μόνο τα $|X'X|$ και $|X'_j X|$ για $j = I, L, B, Q$ και κατά συνέπεια μειώνονται οι φορές υπολογισμού αποφεύγοντας τον υπολογισμό αντίστροφου πίνακα σε κάθε D_j .

Επιπρόσθετα, ο υπολογισμός του $|X'X|$ μπορεί να απλοποιηθεί περαιτέρω. Έστω X_x ο υποπίνακας του X , ο οποίος συνίσταται από στήλες που αφορούν ένα παράγοντα με τη γραμμική στήλη x και που θα αντικατασταθεί από άλλη γραμμική στήλη y και έστω X_- ο συμπληρωματικός υποπίνακας του X_x στον αρχικό X . Ο X_x αποτελείται από $k+1$ στήλες, οποίες είναι η γραμμική στήλη x , η τετραγωνική στήλη του x και οι $k-1$ διγραμμικές στήλες του x . Τότε

$$|X'X| = |X'_- X_-| \left| X'_x X_x - X'_x X_- (X'_- X_-)^{-1} X_- X_x \right|.$$

Όταν η στήλη x αντικαθίσταται από τη στήλη z , ο πρώτος παράγοντας $|X'_- X_-|$ παραμένει ίδιος, μόνο ο δεύτερος παράγοντας μετατρέπεται σε $\left| X'_z X_z - X'_z X_- (X'_- X_-)^{-1} X_- X_z \right|$, όπου X_z ο υποπίνακας του νέου X και συνίσταται από στήλες που αφορούν τη γραμμική στήλη z . Άρα, όταν η στήλη x ενημερώνεται από μια στήλη z , δε χρειάζεται να επαναυπολογιστεί το $|X'X|$, παρά μόνο το $\left| X'_z X_z - X'_z X_- (X'_- X_-)^{-1} X_- X_z \right|$, το οποίο είναι η ορίζουσα ενός τετραγωνικού πίνακα τάξης $(k+1)$. Επίσης, δεδομένου ότι για κάθε στήλη που θα ανταλλαχθεί σε μια τέτοια διαδικασία, υπάρχουν πολλά ζευγάρια για ανταλλαγή, η εξοικονόμηση χρόνου υπολογισμού είναι σημαντική. Ομοίως, μπορούν να απλοποιηθούν οι υπολογισμοί των $|X'_j X|$ για $j = I, L, B, Q$.

6.4. Συγκρίσεις

Ο Morris (2000) έκανε σύγκριση RSDs δύο σταδίων κατασκευασμένων βάσει των D και C κριτηρίων για τους σχεδιασμούς HC, SC και AP, γνωστούς και ως “*συστηματικά κατασκευασμένους σχεδιασμούς*”. Και οι τρεις έχουν τα ίδια σημεία δύο σταδίων, ένα κεντρικό σημείο στο πρώτο στάδιο και ίσο αριθμό ολικών εκτελέσεων στο δεύτερο στάδιο. Ο αριθμός των επαναλήψεων των κεντρικών σημείων σίγουρα επηρεάζει την αποδοτικότητα της εκτίμησης ενός σχεδιασμού. Συμπεριλαμβάνεται ένα κεντρικό σημείο σε κάθε σχεδιασμό για να διατηρηθούν οι σχεδιασμοί όσο το δυνατό μικρότεροι. Μια και διαφορετικοί τύποι συστηματικά κατασκευασμένων σχεδιασμών έχουν διαφορετικό μέγεθος επαναλήψεων για δεδομένο k , οι συγκρίσεις διαχωρίζονται για αυτούς του τρεις τύπους σχεδιασμών.

Οι ελάχιστοι (minimal) RSDs (με μέγεθος εκτελέσεων $N = p$) μπορούν να χρησιμοποιηθούν υπό το μοντέλο (6.1), αλλά δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν υπό το μοντέλο (6.2), το οποίο έχει $p+1$ παραμέτρους. Ως εκ τούτου, οι συγκρίσεις βασίζονται στο μοντέλο (6.2) αν οι σχεδιασμοί δεν είναι ελάχιστοι και στο μοντέλο (6.1) αν είναι.

Στις συγκρίσεις τα βάρη w_I, w_L, w_B και w_Q στο C επιλέχθηκαν διαφορετικά για διαφορετικές καταστάσεις. Οι συγκρίσεις παρουσιάζονται στον Πίνακα 6.1, όπου συγκρίνονται οι τιμές D, D_L, D_B και D_Q . Από τον Πίνακα 6.1 καταλήγουμε στα εξής συμπεράσματα:

- (i) Σε όλες τις περιπτώσεις, οι C -βέλτιστοι σχεδιασμοί έχουν D -αποδοτικότητες σχεδόν τόσο υψηλές όσο οι D -βέλτιστοι σχεδιασμοί, ενώ οι τρεις τύποι συστηματικά κατασκευασμένων σχεδιασμών έχουν πάντα χαμηλές D -αποδοτικότητες.
- (ii) Οι D -βέλτιστοι σχεδιασμοί έχουν πάντα τις υψηλότερες D_L - και D_B -αποδοτικότητες. Οι C -βέλτιστοι σχεδιασμοί έχουν D_L - και D_B -αποδοτικότητες σχεδόν τόσο υψηλές όσο οι D -βέλτιστοι σχεδιασμοί, ενώ οι τρεις τύποι συστηματικά κατασκευασμένων σχεδιασμών έχουν πάντα χαμηλές D_L - και D_B -αποδοτικότητες.
- (iii) Οι D -βέλτιστοι σχεδιασμοί έχουν τις χαμηλότερες D_Q -αποδοτικότητες. Αντίθετα, οι τρεις τύποι συστηματικά κατασκευασμένων σχεδιασμών και οι C -βέλτιστοι σχεδιασμοί έχουν συνήθως υψηλότερες D_Q -αποδοτικότητες.
- (iv) Το κριτήριο C εξαπλώνει τις αποδοτικότητες εκτιμήσεων όσο το δυνατό πιο ομοιόμορφα. Αυτό είναι πιο προφανές για μεγάλα N_2 .

Πίνακας 6.1. Σύγκριση σχεδιασμών για διάφορες D - αποδοτικότητες.

k	Design	N_1	N	First stage Design	w	D	D_L	D_B	D_Q
3	HC,SC,AP					.268	.182	.121	.193
	C-optimal	4	11	$2^{3-1}_{III^*}$	$(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$.372	.480	.453	.113
	D-optimal					.385	.601	.550	.091
4	HC,SC					.272	.176	.211	.136
	C-optimal	8	17	$2^{4-1}_{III^*}$	$(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$.393	.583	.575	.078
	D-optimal					.393	.583	.575	.078
	AP					.306	.541	.242	.209
	C-optimal	8	37	2^{4-1}_{IV}	$(0, 0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3})$.435	.719	.546	.185
	D-optimal					.455	.827	.718	.128
5	HC					.387	.667	.593	.088
	C-optimal	16	27	2^{5-1}_V	$(0, 0, 0, 1)$.427	.769	.664	.085
	D-optimal					.439	.735	.674	.082
	SC					.218	.091	.163	.107
	C-optimal	11	22	12-run PB	$(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$.402	.559	.543	.083
	D-optimal					.412	.677	.655	.060
6	AP					.307	.503	.262	.209
	C-optimal	8	37	2^{5-2}_{IV}	$(0, 0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3})$.444	.736	.549	.169
	D-optimal					.470	.810	.696	.120
	HC,SC					.240	.069	.229	.082
	C-optimal	16	29	$2^{6-2}_{III^*}$	$(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$.398	.441	.509	.074
	D-optimal					.400	.451	.527	.059
7	AP					.279	.479	.201	.209
	C-optimal	8	37	2^{6-3}_{III}	$(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$.422	.649	.481	.154
	D-optimal					.456	.716	.657	.081
	SC					.183	.054	.155	.064
	C-optimal	22	37	$2^{6-2}_{III^*}$	$(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$.354	.410	.431	.049
	D-optimal					.370	.409	.476	.038
8	AP					.254	.494	.201	.209
	C-optimal	8	37	2^{6-3}_{III}	$(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$.324	.385	.322	.095
	D-optimal					.385	.392	.467	.058
	SC					.192	.053	.185	.050
	C-optimal	30	47	36-run PB	$(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$.338	.295	.395	.046
	D-optimal					.357	.363	.441	.035
9	AP					.239	.526	.190	.224
	C-optimal	16	137	2^{8-4}_{IV}	$(0, 0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3})$.438	.668	.490	.191
	D-optimal					.531	.849	.761	.100
	SC					.188	.035	.189	.041
	C-optimal	38	57	40-run PB	$(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$.342	.273	.403	.037
	D-optimal					.347	.223	.426	.022
10	AP					.239	.526	.190	.224
	C-optimal	16	137	2^{8-5}_{III}	$(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$.440	.696	.485	.189
	D-optimal					.546	.861	.793	.078
	SC					.165	.030	.161	.035
	C-optimal	46	67	48-run PB	$(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$.327	.232	.387	.024
	D-optimal					.346	.209	.414	.023
10	AP					.240	.511	.202	.223
	C-optimal	16	137	2^{10-6}_{III}	$(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$.442	.698	.484	.179
	D-optimal					.553	.832	.778	.073

Από τα αποτελέσματα των συγκρίσεων, συμπεραίνει κανείς ότι η χρήση του κριτηρίου C -αποδοτικότητα στην κατασκευή RSDs δύο σταδίων προσφέρει καλή ισορροπία ανάμεσα στην ολική αποδοτικότητα εκτίμησης και στην ομοιόμορφη κατανομή των αποδοτικότητας εκτιμήσεων μεταξύ συνόλων παραμέτρων. Η

προτεινόμενη αυτή μέθοδος για την κατασκευή RSDs δύο σταδίων προσφέρει ευκολία στους σχεδιαστές πειραμάτων στο πώς να κατασκευάσουν N_2 σημεία για το δεύτερο στάδιο, δεδομένων των σημείων σχεδιασμού στο πρώτο στάδιο. Δύο κριτήριο, D και C , μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την επιλογή αυτών των σημείων στο δεύτερο στάδιο. Όπως έχει επισημανθεί, οι αποδοτικότητες για τετραγωνικούς συντελεστές (D_Q 's) είναι μάλλον χαμηλές. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι οι τετραγωνικοί όροι συνήθων συγχέονται με το σημείο τομής στους περισσότερους RSDs δεύτερης τάξης.

Ας επανέλθουμε στο παράδειγμα της πενικιλίνης που εισήχθηκε στην αρχή. Σε αυτή την περίπτωση τα $k=4$, $N_1=8$ και $N_0=4$. Το μοντέλο δεύτερης τάξης (6.2) έχει $p+1=16$ παραμέτρους (ένα σταθερό όρο, τέσσερις γραμμικούς όρους, έξι όρους διασταυρωτού γινομένου, τέσσερις καθαρά τετραγωνικούς όρους και έναν όρο μπλοκινγκ). Αφού οι τέσσερις επαναλήψεις κεντρικών σημείων δίνουν μόνο ένα βαθμό ελευθερίας, για το μοντέλο (6.2), θα χρειαστούμε τουλάχιστον $N_2=16-8-1=7$ σημεία. Χρησιμοποιώντας τα D και C κριτήρια, κατασκευάζονται σχεδιασμοί με $N_2=8, 16$ και 24 , αντίστοιχα. Για το κριτήριο C , χρησιμοποιούνται βάρη $w_l = w_L = 0$, $w_b = 1/3$ και $w_q = 2/3$, αφού το πρώτο στάδιο περιέχει ένα 2_{IV}^{4-1} κλασματικό παραγοντικό στο οποίο το σύνολο των γραμμικών παραμέτρων μπορεί να εκτιμηθεί με αρκετά υψηλή ακρίβεια.

Οι ποιότητες αποδοτικότητας αυτών των σχεδιασμών συγκρίνονται στον Πίνακα 6.2 και οι C -βέλτιστοι σχεδιασμοί με $N_2=8$, οι οποίοι προτάθηκαν στον μηχανικό, παρουσιάζονται στον Πίνακα 6.3. Από τον Πίνακα 6.2, παρατηρούμε ότι η D_Q -αποδοτικότητα αυξάνεται με N_2 και για τους δύο τύπους σχεδιασμών, αλλά οι τιμές D_Q των C -βέλτιστων σχεδιασμών είναι υψηλότερες από τις αντίστοιχες των D -βέλτιστων σχεδιασμών κατά περίπου 10% με 25%.

Πίνακας 6.2. Σύγκριση C - και D - βέλτιστων RSDs.

N_2	Σχεδιασμός	D	D_L	D_B	D_Q	r_Q
8	C - βέλτιστος	.351	.538	.420	.087	1.10
	D - βέλτιστος	.372	.544	.499	.079	
16	C - βέλτιστος	.432	.689	.565	.154	1.26
	D - βέλτιστος	.446	.789	.667	.122	
24	C - βέλτιστος	.445	.739	.595	.170	1.24
	D - βέλτιστος	.452	.802	.672	.136	

Το πρώτο στάδιο είναι 2_{IV}^{4-1} , $k=4$, $w=(0, 0, 1/3, 2/3)$.

r_Q : Ο λόγος D_Q για C - βέλτιστο προς D_Q για D - βέλτιστο σχεδιασμό.

Πίνακας 6.3. Το δεύτερο στάδιο των C - και D - βέλτιστων RSDs για το πείραμα πενικιλίνης του οποίου ο σχεδιασμός στο πρώτο στάδιο είναι ένα 2_{IV}^{4-1} κλασματικό παραγοντικό με τέσσερα κεντρικά σημεία.

D - βέλτιστος	C - βέλτιστος
-----------------	-----------------

1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	-1	1	-1	0	-1	-1
-1	-1	-1	1	1	-1	0	1
-1	1	-1	-1	-1	0	1	0
0	-1	1	-1	0	0	1	-1
-1	0	1	-1	0	1	-1	0
1	1	0	1	0	-1	0	1
-1	-1	1	0	-1	-1	0	0

Βιβλιογραφία

1. Κουκουβίνος, Χ., *Γραμμικά μοντέλα και σχεδιασμοί* (2005) – Ε.Μ.Π., Αθήνα
2. Κουκουβίνος, Χ., *Στατιστικός έλεγχος ποιότητας* (2008) – Ε.Μ.Π., Αθήνα
3. Κουκουβίνος, Χ., *Στατιστικοί σχεδιασμοί* (2005) – Ε.Μ.Π., Αθήνα
4. Alvarez, A. R., Abdi, B. L., Young, D. L., Weed, H. D., Teplik, J. and Herald, E. R., “Application of statistical design and response surface methods to computer-aided VLSI device design” (1988) – *IEEE Transactions on computer-aided design*, vol.7, pp.272-288.
5. Antille, G. and Weinberg, A., “A study of D-optimal designs. Efficiency for polynomial regression” (2000) – *Cahiers du département d'économétrie, Faculté des sciences économiques et sociales, Université de Genève*.
6. Borkowski, J. J., “A comparison of prediction variance criteria for response surface designs” (2003) – *Journal of Quality technology*, vol. 35, pp. 70-77.
7. Borkowski, J. J., “Spherical prediction variance properties of central composite and Box-Behnken designs” (1995) – *Technometrics*, vol. 35, pp. 70-77.
8. Box, G. E. P. and Behnken, D., “New three level designs for study of quantitative variables” (1960) - *Technometrics*, vol. 2, no. 4, pp. 455-475.
9. Box, G. E. P. and Behnken, D. W., *Some new three level second-order designs for surface fitting*. (1958) – Statistical technical research group, technical report no. 26. Princeton University, Princeton, NJ.
10. Box, G. E. P. and Draper, N. R., *Empirical model-building and response surfaces*. (1987) – Wiley, New York.
11. Box, G. E. P. and Hunter, J. S., “The 2^{k-p} fractional factorial designs, Part I” (1961) – *Technometrics*, vol. 2, pp. 311-352.
12. Box, G. E. P. and Hunter, J. S., “The 2^{k-p} fractional factorial designs, Part II” (1961) – *Technometrics*, vol. 3, pp. 449-458.

- 13.Box, G. E. P. and Hunter, J. S., “Multi-factor experimental designs for exploring response surfaces” (1957) – *Annals of Mathematical Statistics*, vol.28, pp.195-241.
- 14.Box, G. E. P. and Wilson, K. B., “On the experimental attainment of optimum conditions” (1951) – *Journal of the royal statistical society. Series B (Methodological)*, vol. 13, no. 1, pp. 1-45.
- 15.Chen, R. B., Lin, D. K. J. and Tsai, Y. J., “Conditional optimal composite designs” (2008) – *Statistics and Applications*, vol.6, pp. 29-48.
- 16.Cheng, S. W. and Wu, C. F. J., “Factor screening and response surface exploration (with comment)” (2001) – *Statistica Sinica*, vol.11, pp. 553-604.
- 17.Cochran, W. G. and Cox, G. M., *Experimental designs*. Second edition. (1957) – John Wiley, New York.
- 18.Cook, R. D. and Nachtsheim, C. J., “A comparison of algorithms for constructing exact D -optimal design” (1980) – *Technometrics*, vol. 22, pp. 315-324.
- 19.DeBaun, R. M., “An experimental design for three factors at three levels” (1956) – *Nature*, vol.181, pp.209-210.
- 20.Draper, N. R., “Center points in second-order response surface designs” (1982) – *Technometrics*, vol. 24, no. 2, pp. 127-133.
- 21.Draper, N. R., “Small composite designs” (1985) – *Technometrics*, vol. 27, no. 2, pp. 173-180.
- 22.Draper, N. R. and Lin, D. K. J., “Small response-surface designs” (1990) – *Technometrics*, vol. 32, no. 2, pp. 187-194.
- 23.Draper, N. R. and Pukelsheim, F., “Another look at rotatability” (1990) – *Technometrics*, vol. 32, pp. 195-202.
- 24.Edwards, D. J. and Mee, R. W., “Fractional Box-Behnken designs for one-step response surface methodology” (2011) – *Journal of quality technology*, vol. 43, no. 4, pp. 288-306.
- 25.Finney, D. J., “The fractional replication of experiments” (1945) – *Ann. Eugenics*, vol. 1, pp. 91-106.

26. Hardin, R. H. and Sloane, N. J. A., "A new approach to construction of optimal designs" (1993) – *Journal of statistical planning and inference*, vol.37, pp. 339-369.
27. Hartley, H. O., "Smallest composite designs for quadratic response surfaces" (1959) – *Biometrics*, vol. 15, pp. 611-624.
28. John, J.A. and Mitchell, T. J., "Optimal incomplete block designs" (1977) – *Journal of royal statistical society, Series B*, vol. 39, pp. 39-43.
29. Johnson, C. R., "Matrix theory and applications" (1989) – American mathematical society lecture notes, pp. 1-44.
30. Khuri, A. I. and Cornell, J.A., *Response Surfaces*. (1996) – Marcel Dekker, New York.
31. Khuri, A. I. and Mukhopadhyay, S., "Response surface methodology" (2010) – *John Wiley and Sons, Incorporation, WIREs Computational Statistics*, pp. 128-149.
32. Kiefer, J., "Optimum experimental designs" (1959) – *Journal of the royal statistical society, Series B*, vol. 21, pp. 272-304.
33. Kiefer, J. and Wolfowitz, J., "Optimum designs in regression problems" (1959) – *Annals of mathematical statistics*, vol. 30, pp. 271-294.
34. Lawson, J., "One-step screening and process optimization" (2003) – *The American Statistician*, vol.57, pp. 15-20.
35. Li, W. and Wu, C. F. J., "Columnwise-pairwise algorithms with applications to the construction of supersaturated designs" (1997) – *Technometrics*, vol. 39, pp. 171-179.
36. Lu, X. , Lin, D. K. J. and Zhou, D., "On construction of two-stage response surface designs" (2009) – *Quality technology and quantitative management*, vol. 6, no. 4, pp. 493-502.
37. Lucas, J. M., "Optimum composite designs" (1974) – *Technometrics*, vol. 16, pp. 561-567.
38. Lucas, J.M., "Which response surface design is best" (1976) – *Technometrics*, vol. 18, pp. 411-417.

39. Mee, R. W., "Optimal three-level designs for response surfaces in spherical experimental regions" (2007) – *Journal of Quality Technology*, vol.39, pp. 340-354.
40. Montgomery, D. C., *Design and analysis of experiments*. Eighth edition (2012) – John Wiley, New York.
41. Montgomery, D. C., *Statistical quality control*. Seventh edition (2012) – John Wiley, New York.
42. Montgomery, D. C. and Douglas, C., *Design and analysis of experiments: Response surface method and designs*. (2005) – John Wiley & Sons, Incorporated, New Jersey.
43. Morris, M. D., "A class of three-level experimental designs for response surface modeling" (2000) – *Technometrics*, vol. 42, pp. 111-121.
44. Myers, R. H. and Montgomery, D. C., *Response Surface Methodology: Process and product optimization using designed experiments*. First edition (1995) – John Wiley & Sons, Incorporated, New York.
45. Myers, R. H. and Montgomery, D. C., *Response Surface Methodology* (2002) – John Wiley, New York.
46. Nguyen, N. K., "An algorithm approach to constructing supersaturated designs" (1996) – *Technometrics*, vol. 38, pp. 69-73.
47. Nguyen, N. K., "Construction of optimal incomplete block designs by computer" (1994) – *Technometrics*, vol. 36, pp. 300-307.
48. Nguyen, N. K. and Borkowski, J. J., "New 3-level response surface designs constructed from incomplete block designs" (2007) – *Journal of statistical planning and interface* 138, pp. 294-305.
49. Plackett, R. L. and Burman, J. P., "The design of optimum multifactor experiments" (1946) – *Biometrika*, vol.33, pp. 305-325.
50. Silva, M. B., *Design of experiments – Applications*. First edition (2013) – InTech, Rijeka.
51. St. John, R. C. and Draper, N. R., "D-optimality for regression designs: A review" (1975) – *Technometrics*, vol. 17, pp. 15-23.

52. Zhang, T. F., Yang, J. F. and Lin, D. K. J., “Small Box-Behnken designs” (2011) – *Statistics and probability letters* 81, pp. 1027-1033.

53. e-handbook of statistical methods (2003) – National institute of standards and technology. Statistical engineering division.
www.itl.nist.gov/div898/handbook

