

# Μεθοδολογία Αποκριτικών Επιφανειών-Σχεδιασμοί Υποσυνόλου

Πέτρος-Παύλος Δ. Υψηλάντης

Διπλωματική Εργασία

Επιβλέπων Καθηγητής: Χρήστος Κουκουβίνος

**Copyright ©2012 by Petros-Pavlos Ypsilantis**

**All rights reserved.**

**to my friends!!!**

# Περιεχόμενα

<b>1</b>	<b>Εισαγωγή</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Παραγοντικοί Σχεδιασμοί</b>	<b>3</b>
2.1	Απλό Γραμμικό Μοντέλο Παλινδρόμησης . . . . .	4
2.1.1	Εκτίμηση των παραμέτρων $\beta_0$ και $\beta_1$ . . . . .	5
2.1.2	Συμπεράσματα για το $\beta_1$ με τη χρήση της κατανομής του δείγματος . . . . .	5
2.1.3	Μελέτη της αποκριτικής μεταβλητής . . . . .	7
2.2	Πολλαπλό γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης . . . . .	7
2.2.1	Εκτίμηση των Συντελεστών . . . . .	8
2.3	Μελέτη της αποκριτικής μεταβλητής του πολλαπλού γραμμικού μοντέλου . . . . .	10
2.4	Παραγοντικοί Σχεδιασμοί . . . . .	10
2.5	Ο $3^2$ Σχεδιασμός . . . . .	11
2.6	Ο γενικός $3^k$ σχεδιασμός . . . . .	11
2.7	Κλασματικοί Παραγοντικοί Σχεδιασμοί (Fractional Factorial Designs) . . . . .	13
2.7.1	Χρήση των κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών . . . . .	13
2.7.2	Το ένα-δεύτερο κλάσμα του $2^k$ παραγοντικού σχεδιασμού . . . . .	14
2.7.3	Διάκριση των κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών . . . . .	15
2.7.4	Ταξινόμηση κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών . . . . .	16
<b>3</b>	<b>Αποκριτικές επιφάνειες</b>	<b>18</b>
3.1	Το μοντέλο πρώτης τάξης . . . . .	20
3.1.1	Έλεγχος έλλειψης προσαρμογής . . . . .	22
3.2	Το μοντέλο δεύτερης τάξης . . . . .	23
3.3	Ορθογώνιοι σχεδιασμοί δεύτερης τάξης . . . . .	24
3.4	Περιστρέψιμοι Σχεδιασμοί . . . . .	25
3.5	Κεντρικοί Σύνθετοι Σχεδιασμοί . . . . .	27
3.6	Σχεδιασμοί Box-Behnken (BBD) . . . . .	29
3.7	Βελτιστοποίηση της διαδικασίας για την RSM . . . . .	30

---

<b>4</b>	<b>Σχεδιασμοί Υποσυνόλου (Subset Designs)</b>	<b>35</b>
4.0.1	Ιδιότητες των σχεδιασμών υποσυνόλων . . . . .	36
4.0.2	Επιλογή των σχεδιασμών . . . . .	38
4.1	Smaller Designs . . . . .	40
4.1.1	Ελλειπείς Σχεδιασμοί Υποσυνόλου . . . . .	41
4.2	Χρήση παραγόντων δύο στάθμεων . . . . .	42
4.3	Παράγοντες με αριθμό στάθμεων μεγαλύτερου του τρεία . . . . .	43
4.3.1	Πέντε και περισσότερες στάθμες . . . . .	43
<b>5</b>	<b>Ευρωστία των σχεδιασμών υποσυνόλου σε ελλειπείς παρατηρήσεις</b>	<b>45</b>
5.1	Έλλειψη παρατηρήσεων . . . . .	45
5.2	Εύρωστοι σχεδιασμοί στην απώλεια παρατηρήσεων . . . . .	47
5.3	Επιλογή $a_r$ για την ελαχιστοποίηση της μέγιστης απώλειας . . . . .	49
5.4	Ευρωστία της πρόβλεψης της διακύμανσης στην απώλεια παρατηρήσεων . . . . .	54

# Κεφάλαιο 1

## Εισαγωγή

Μια από τις πιο σημαντικές μεθοδολογίες στο στατιστικό σχεδιασμό είναι η μεθοδολογία των αποκριτικών επιφανειών (Response Surface Design Methodology). Η μεθοδολογία των αποκριτικών επιφανειών περιλαμβάνει τεχνικές των μαθηματικών και της στατιστικής, χρησιμοποιώντας για τη μοντελοποίηση και την ανάλυση προβλημάτων, στα οποία η απόκριση επηρεάζεται άμεσα από ορισμένες μεταβλητές. Για παράδειγμα, η ανάπτυξη ενός φυτού επηρεάζεται άμεσα από την ποσότητα του νερού  $x_1$ , καθώς και από το ποσό της ηλιοφάνειας  $x_2$ . Το φυτό μπορεί να μεγαλώσει κάτω από οποιονδήποτε συνδυασμό των αγωγών  $x_1$  και  $x_2$ . Όταν οι αγωγές προέρχονται από ένα συνεχόμενο πεδίο τιμών, τότε η μεθοδολογία των αποκριτικών σχεδιασμών είναι χρήσιμη στην ανάπτυξη και βελτίωση της αποκριτικής μεταβλητής. Στην περιπτωσή μας η ανάπτυξη του φυτού  $y$  είναι η αποκριτική μεταβλητή. Είναι λοιπόν εύλογο πως η μεθοδολογία αυτή είναι σημαντική στο σχεδιασμό, στη διαμόρφωση, στην βελτίωση και στην ανάλυση επιστημονικών μελετών και προϊόντων. Οι περισσότερες εφαρμογές της μεθοδολογίας αποκριτικών επιφανειών είναι στη βιομηχανία, στη βιολογία, στην επιστήμη τροφίμων, καθώς και στην επιστήμη της φυσικής και της μηχανικής. Παρατηρώντας την εκτενή δράση των αποκριτικών επιφανειών είναι σημαντικό να γνωρίζουμε την ιστορική της πορεία.

Σύμφωνα με τους Hill και Hunter, η μεθοδολογία των αποκριτικών επιφανειών εισήχθη από τους Box, G.E.P. and Wilson, K.B. (1951). "On the Experimental Attainment of Optimum Conditions". J. Royal Statist. Soc. Ser. B, Vol. 13, pp. 1-45.. Οι Box και Wilson πρότειναν τη χρήση του πολυωνυμικού μοντέλου πρώτου βαθμού με σκοπό να προσεγγίσουν την αποκριτική μεταβλητή. Η εφαρμογή αυτή του μοντέλου αποδείχθηκε ότι ήταν μια προσέγγιση χωρίς ιδιαίτερη ακρίβεια. Το πλεονέκτημα της χρήσης του συγκεκριμένου μοντέλου ήταν η ευκολία στο να εκτιμηθεί και να εφαρμοστεί, ακόμα και χωρίς την γνώση πληροφοριών για την όλη διαδικασία. Επιπλέον, γνωρίζουμε ότι η μεθοδολογία των αποκριτικών επιφανειών είναι απόγονος της χρήσης των αποκριτικών καμπυλών η οποία ξεκίνησε το 1930 (Myers, Khuri, και Carter 1989).

Σύμφωνα με έρευνα που έγινε (Myers, Khuri, και Carter 1989), ο ορθογώνιος σχεδιασμός χρησιμοποιήθηκε από τους Box και Wilson (1951) στην περίπτωση του μοντέλου πρώτου βαθμού. Για το μοντέλο δευτέρου βαθμού, αρκετοί επιστήμονες και μηχανικοί χρησιμοποιούσαν και χρησιμοποιούν τους κεντρικούς σύνθετους σχεδιασμούς καθώς και τους σχεδιασμούς παραγόντων με τρεις στάθμες των Box και Behnken (1960). Επίσης, η ίδια έρευνα

αναφέρει μια αρκετά σημαντική συμβολή του Hartley (1959), ο οποίος κατάφερε να δημιουργήσει έναν οικονομικότερο σχεδιασμό, τον μικρό σύνθετο σχεδιασμό (Small Composite Design). Στην περιοχή αυτή έχουν γίνει αρκετές δημοσιεύσεις για τα μοντέλα αποκριτικών επιφανειών, σε αντίθεση με την περιοχή των κλασματικών σχεδιασμών με παράγοντες τριών στάθμεων, η οποία παραμένει ακόμα ανοικτή. Η εργασία των Connor and Zelen (1959) '*Fractional Factorial Experiment Design for Factor at 3 – Levels*' αποτελεί σημείο αναφοράς για τη μελέτη και την εφαρμογή των κλασματικών σχεδιασμών σε πειράματα.

Ένα από τα σημαντικότερα ζητήματα είναι πως είτε το σύστημα εμφανίζει μέγιστο ή ελάχιστο, είτε έχουμε εμφάνιση σημείου σέλας (saddle node), η εμφάνιση οποιασδήποτε εκ των ανωτέρω κατάστασεων δίνει ζωτικές πληροφορίες στον βιομηχανικό σχεδιασμό. Για το λόγο αυτό, ο σχεδιασμός αποκριτικών επιφανειών εδρώνεται στη βιομηχανία. Επιπλέον, τα τελευταία χρόνια έχει δοθεί ιδιαίτερη έμφαση στη χημική βιομηχανία καθώς και στην δημιουργία των κατάλληλων συνθηκών για τη βελτίωση της απόκρισης, σε αντίθεση με παλαιότερα χρόνια που ο σκοπός ήταν η εύρεση της βέλτιστης απόκρισης (Myers, Khuri, και Carter 1989). Είναι λοιπόν σαφές πως μελλοντικά, η χρήση της μεθοδολογίας των αποκριτικών επιφανειών θα εξαπλωθεί σε με μεγάλο εύρος επιστημονικών και βιομηχανικών δραστηριοτήτων.

Ολοκληρώνοντας την εισαγωγή θεωρώ υποχρέωση μου να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή κ. Χ. Κουκουβίνο για την υπόδειξη του θέματος και τη βοήθεια που μου προσέφερε κατά την περίοδο εκπόνησης της διπλωματικής μου εργασίας, καθώς και την υποψήφια Διδάκτωρ Α. Σκούντζου για τις χρήσιμες συμβουλές και το υλικό που μου προσέφερε, τα οποία με βοήθησαν σε μεγάλο βαθμό, ώστε να ανταπεξέλθω στις απαιτήσεις της διπλωματικής μου εργασίας.

## Κεφάλαιο 2

# Παραγοντικοί Σχεδιασμοί

Στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιάσουμε το απλό γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης, το οποίο είναι ένα από τα βασικότερα αντικείμενα, καθώς καθορίζει τη συναρτησιακή σχέση μεταξύ της αληθούς μέσης απόκρισης και ενός συνόλου μεταβλητών εισόδου. Το μοντέλο αυτό αποτελεί τον πρωταρχικό παράγοντα για τον σχεδιασμό αποκριτικών επιφανειών, σχεδιασμός ο οποίος θα μας απασχολήσει στα επόμενα κεφάλαια. Στη συνέχεια, θα μελετήσουμε το πολλαπλό γραμμικό μοντέλο δεύτερης τάξης, το οποίο προκύπτει όταν το απλό μοντέλο τυγχάνει έλλειψης προσαρμογής. Έπειτα θα αναλύσουμε τους  $3^k$  σχεδιασμούς οι οποίοι χρησιμοποιούνται ευρύτατα στη βιομηχανική έρευνα και ανάπτυξη. Υπάρχουν μερικές επεκτάσεις και παραλλαγές αυτών, που αρκετές φορές είναι χρήσιμες όπως είναι, οι σχεδιασμοί για τις περιπτώσεις όπου όλοι οι παράγοντες εμφανίζονται σε τρεις στάθμες. Αυτούς τους  $3^k$  σχεδιασμούς θα παρουσιάσουμε στο κεφάλαιο αυτό. Επίσης θα θεωρήσουμε και περιπτώσεις όπου μερικοί παράγοντες έχουν δύο στάθμες και άλλοι παράγοντες έχουν τρεις ή τέσσερις στάθμες.

Τα πειράματα αποτελούν το βασικότερο και το πιο αξιόπιστο εργαλείο των ερευνητών στα περισσότερα επιστημονικά πεδία. Η χρήση των πειραμάτων από τους ερευνητές καθίσταται αναγκαία, καθώς μέσω των πειραμάτων είναι δυνατή η εξαγωγή ζωτικών πληροφοριών για το αντικείμενο μελέτης. Η ακολουθία δοκιμασιών, η οποία επιτελείται κατά τη διάρκεια ενός πειράματος, μας δίνει τη δυνατότητα να αλλάζουμε τις μεταβλητές εισόδου, παρατηρώντας έτσι τα αίτια των αλλαγών στην απόκριση.

Οι παραγοντικοί σχεδιασμοί χρησιμοποιούνται ευρέως για την διεξαγωγή πειραμάτων τα οποία περιλαμβάνουν τη μελέτη της επίδρασης δύο ή περισσότερων παραγόντων. Με έναν παραγοντικό σχεδιασμό, εννοούμε πως για κάθε πλήρη επανάληψη του πειράματος όλοι οι πιθανοί συνδυασμοί των στάθμων των παραγόντων διερευνώνται. Για παράδειγμα, αν υπάρχουν  $a$  στάθμες του παράγοντα  $A$  και  $b$  στάθμες του παράγοντα  $B$ , κάθε επανάληψη του πειράματος περιλαμβάνει  $ab$  συνδυασμούς αγωγών. Οι στάθμες ενός παράγοντα μπορούν να είναι ποσοτικές, όπως οι τιμές θερμοκρασίας, υγρασίας, ή πίεσης, αλλά μπορούν να είναι και ποιοτικές, όπως οι τύποι δύο μηχανών, δύο χειριστές, ή "υψηλή" ή "χαμηλή" στάθμη ενός παράγοντα (συμβολίζεται με  $+$  και  $-$  αντίστοιχα), ή πιθανόν η παρουσία ή απουσία ενός παράγοντα. Στην περίπτωση που ο κάθε παράγοντας έχει δύο στάθμες και ο αριθμός των παραγόντων είναι  $k$ , μια πλήρης επανάληψη αυτού του σχεδιασμού απαιτεί  $2 \times 2 \times 2 \cdots \times 2 = 2^k$  παρατηρήσεις και ονομάζεται  $2^k$  παραγοντικός σχεδιασμός.



Ως παράδειγμα παραγοντικού σχεδιασμού δύο παραγόντων μπορεί να αναφερθεί ένα εκπαιδευτικό πρόγραμμα για το οποίο θέλουμε να εξετάσουμε μια ποικιλία απο μεθόδους και να εξάγουμε το βέλτιστο δυνατό αποτέλεσμα. Για παράδειγμα, θα μεταβάλλουμε την χρονική διάρκεια κατά την οποία οι μαθητές λαμβάνουν οδηγίες, με την πρώτη ομάδα μαθητών να λαμβάνουν οδηγίες μία ώρα την εβδομάδα και τη δεύτερη ομάδα μαθητών να λαμβάνουν οδηγίες τέσσερις ώρες την εβδομάδα. Επιπλέον, θέλουμε να μεταβάλλουμε το χώρο στον οποίο δίνονται οι οδηγίες, με την πρώτη ομάδα να λαμβάνει οδηγίες εντός της αίθουσας διδασκαλίας και τη δεύτερη ομάδα σε διαφορετική αίθουσα από αυτή της διδασκαλίας. Σε αυτό το πρόβλημα ο ερευνητής αναζητά απάντηση στα εξής ερωτήματα:

- i) Τι επίδραση έχει η χρονική διάρκεια και η αίθουσα στην οποία οι μαθητές έλαβαν την πληροφορία στην κατανόηση και εφαρμογή των οδηγιών.
- ii) Αν υπάρχει κάποιος συνδυασμός των δύο παραπάνω παραγόντων ώστε η κατανόηση και η εφαρμογή των οδηγιών να είναι η βέλτιστη δυνατή.

## 2.1 Απλό Γραμμικό Μοντέλο Παλινδρόμησης

Το πιο απλό μοντέλο παλινδρόμησης είναι το απλό γραμμικό μοντέλο το οποίο γράφεται ως εξής:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \epsilon \quad (2.1)$$

Το υπολογιστικό μέρος του μοντέλου αυτού είναι το  $\beta_0 + \beta_1 x$ , το οποίο καθορίζει ότι για οποιαδήποτε ανεξάρτητη μεταβλητή  $x$ , η εξαρτημένη μεταβλητή  $y$ , περιγράφεται από τη γραμμική συνάρτηση  $(\beta_0 + \beta_1 x)$ . Η παράμετρος  $\beta_0$ , είναι η μέση τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής όταν το  $x$  είναι μηδέν, και η παράμετρος  $\beta_1$ , η κλίση, είναι η αλλαγή στην μέση τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής εξαιτίας της μοναδιαίας μεταβολής στην μεταβλητή  $x$ . Οι πιο πάνω παράμετροι αναφέρονται συνήθως ως συντελεστές παλινδρόμησης. Η παράμετρος  $\beta_0$  είναι πιθανό να μην έχει ιδιαίτερη σημασία σε περιπτώσεις όπου το  $x$  δεν μπορεί να πάρει την τιμή μηδέν.

Το τυχαίο τμήμα του μοντέλου εξηγεί τη μεταβλητότητα της απόκρισης. Υποθέτουμε ότι οι όροι (γνωστοί σαν όροι σφάλματος) έχουν μέση τιμή μηδέν ( $E(\epsilon)$ ) και σταθερή διακύμανση  $\sigma^2$ . Θέλοντας να εξάγουμε στατιστικά συμπεράσματα υποθέτουμε ότι τα σφάλματα ακολουθούν κανονική κατανομή. Το γεγονός ότι η γραμμή παλινδρόμησης παρουσιάζει ένα σύνολο απο μέσες τιμές συχνά παραβλέπεται, ένα γεγονός που επισκιάζει την ερμηνεία των αποτελεσμάτων της ανάλυσης παλινδρόμησης. Για να το δείξουμε αυτό ορίζουμε ένα γραμμικό μοντέλο:

$$y = \mu + \epsilon, \quad (2.2)$$

όπου οι συνήθεις υποθέσεις ισχύουν για το  $\epsilon$ . Το μοντέλο αυτό μας λέει ότι η παρατηρούμενη τιμή  $y$ , προέρχεται από ένα πληθυσμό με μέση τιμή  $\mu$  και διακύμανση  $\sigma^2$ .

Για το μοντέλο παλινδρόμησης καθορίζουμε ότι η μέση τιμή σχετίζεται άμεσα με την ανεξάρτητη μεταβλητή  $x$  με το μοντέλο

$$\mu = \mu_{y|x} = \beta_0 + \beta_1 x, \quad (2.3)$$

το οποίο μας δείχνει ότι η μέση τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής είναι γραμμικά συσχετισμένη με την ανεξάρτητη μεταβλητή.

### 2.1.1 Εκτίμηση των παραμέτρων $\beta_0$ και $\beta_1$

Στην παράγραφο αυτή εισάγουμε την μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων για την εύρεση μιας εκτίμησης της μέσης τιμής. Επιπλέον χρησιμοποιούμε την ίδια μέθοδο για την εκτίμηση των παραμέτρων της εξίσωσης παλινδρόμησης. Σκόπος μας είναι η εύρεση των τιμών  $\hat{\beta}_0$  και  $\hat{\beta}_1$ , οι οποίες ελαχιστοποιούν την παρεκκλιση του αθροίσματος τετραγώνων:

$$SS = \sum (y - \hat{\mu}_{y|x})^2 = \sum (y - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x)^2. \quad (2.4)$$

Οι τιμές των συντελεστών που ελαχιστοποιούν την παρεκκλιση του αθροίσματος τετραγώνων για οποιαδήποτε σύνολο δείγματος δεδομένων, δίνονται από τις λύσεις των παρακάτω εξισώσεων:

$$\begin{aligned} \hat{\beta}_0 n + \hat{\beta}_1 \sum x &= \sum y \\ \hat{\beta}_0 \sum x + \hat{\beta}_1 \sum x^2 &= \sum xy \end{aligned}$$

Η επίλυση του πιο πάνω γραμμικού συστήματος μας δίνει τις εκτιμήτριες των παραμέτρων ως εξής:

$$\begin{aligned} \beta_0 &= \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x} \\ \beta_1 &= \frac{\sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})}{\sum (x - \bar{x})^2}. \end{aligned}$$

Θα χρησιμοποιούμε τους παρακάτω συμβολισμούς:

$$\begin{aligned} S_{xx} &= \sum (x - \bar{x})^2 = \sum x^2 - (\sum x)^2/n \\ S_{xy} &= \sum (x - \bar{x})(y - \bar{y}) = \sum xy - \sum x \sum y/n \\ S_{yy} &= \sum (y - \bar{y})^2 = \sum y^2 - (\sum y)^2/n \end{aligned}$$

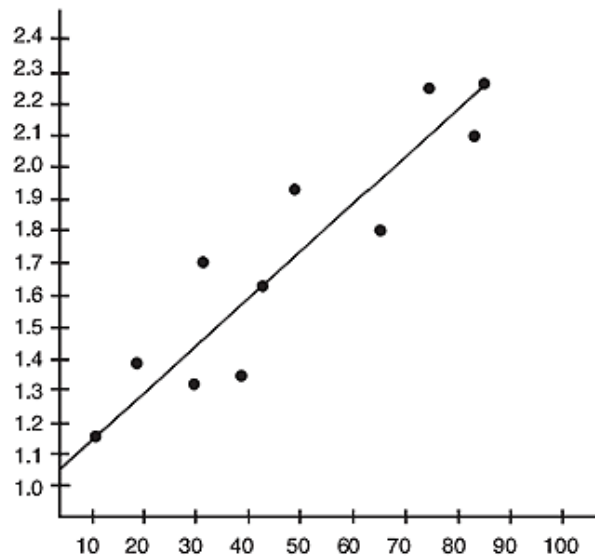
Από τους παραπάνω συμβολισμούς καταλήγουμε στην παρακάτω σχέση:

$$\beta_1 = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}.$$

### 2.1.2 Συμπεράσματα για το $\beta_1$ με τη χρήση της κατανομής του δείγματος

Αν και το μοντέλο παλινδρόμησης έχει δύο παραμέτρους, η κύρια παράμετρος μελέτης είναι η  $\beta_1$ , κλίση της γραμμής παλινδρόμησης. Η σημαντικότητα της  $\beta_1$  οφείλεται στο γεγονός ότι, εάν  $\beta_1 = 0$  δεν υπάρχει παλινδρόμηση.

Από κεντρικό οριακό θεώρημα γνωρίζουμε ότι η κατανομή της εκτιμημένης παραμέτρου  $\hat{\beta}_1$  είναι κανονική με μέση τιμή  $\beta_1$  και διακύμανση  $\frac{\sigma^2}{S_{xx}}$ , όπου το  $\sigma^2$  είναι η διακύμανση



Σχήμα 2.1: Γράφημα των δεδομένων και η γραμμή παλινδρόμησης

του τυχαίου συστατικού του μοντέλου. Συνεπώς το τυπικό σφάλμα (standard error) της εκτιμημένης παραμέτρου είναι  $\frac{\sigma}{\sqrt{S_{xx}}}$ .

Το τυπικό σφάλμα είναι ένα μέτρο για την ακρίβεια της εκτιμημένης παραμέτρου. Είναι ευκολό να παρατηρήσουμε πως αυτό επηρεάζεται από τα δεδομένα καθώς  $S_{xx} = (n - 1)s_x^2$ , όπου  $s_x^2$  είναι η εκτιμημένη διακύμανση υπολογισμένη από τις τιμές της ανεξάρτητης μεταβλητής. Χρησιμοποιώντας την παραπάνω σχέση παρατηρούμε τα εξής:

1. Η ακρίβεια μειώνεται καθώς η τυπική απόκλιση του τυχαίου σφάλματος,  $\sigma$ , αυξάνεται.
2. Κρατώντας σταθερό το  $s_x^2$ , η ακρίβεια αυξάνεται με την αύξηση του δείγματος.
3. Κρατώντας σταθερό το δείγμα, η ακρίβεια αυξάνεται με μεγαλύτερο βαθμό διασποράς των παρατηρούμενων τιμών της ανεξάρτητης μεταβλητής (καθώς το  $s_x^2$  μεγαλώνει)

Ένα στατιστικό μέγεθος το οποίο ακολουθεί κανονική κατανομή, μπορεί να υπολογιστεί εάν η διακύμανση είναι γνωστή και είναι χρήσιμο για τον έλεγχο υποθέσεων καθώς και για την εκτίμηση των διαστημάτων εμπιστοσύνης είναι:

$$z = \frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\frac{\sigma}{\sqrt{S_{xx}}}}$$

Καθώς η διακύμανση είναι άγνωστη, πρέπει να βρούμε μια εκτιμήτρια της διακύμανσης. Γνωρίζουμε ότι οι εκτιμήτριες της διακύμανσης είναι μέσα τετράγωνα τα οποία ορίζονται ως το πηλίκο του αθροίσματος των τετραγώνων των αποκλίσεων από τον εκτιμημένο μέσο προς τους βαθμούς ελευθερίας.

Όταν χρησιμοποιούμε ένα μοντέλο παλινδρόμησης, τις αποκλίσεις τις καλούμε υπόλοιπα, τα οποία υπολογίζονται από τις τιμές του  $\hat{m}_{y|x}$ . Οι βαθμοί ελευθερίας ορίζονται ως ο

αριθμός των στοιχείων στο άθροισμα τετραγώνων πλύν τον αριθμό των παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν για να εκτιμήσουν τις μέσες τιμές στο μοντέλο. Στο απλό γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης υπάρχουν  $n$  όροι στο άθροισμα τετραγώνων, και η  $\hat{\mu}_{y|x}$  υπολογίζεται με ένα μοντέλο το οποίο έχει δύο εκτιμημένες παραμέτρους,  $\beta_0$  και  $\beta_1$ . Επομένως οι βαθμοί ελευθερίας είναι  $(n - 2)$  Το προκύπτον μέσο άθροισμα τετραγώνων είναι η εκτιμημένη διακύμανση και συμβολίζεται με  $s_{y|x}^2$ , υποδηλώνοντας ότι είναι η διακύμανση της εξαρτημένης μεταβλητής,  $y$ , έχοντας προσαρμόσει ένα μοντέλο παλινδρόμησης που αφορά την ανεξάρτητη μεταβλητή,  $x$ . Έτσι έχουμε:

$$s_{y|x}^2 = MSE = \frac{SSE}{n - 2} = \frac{\sum (y - \hat{\mu}_{y|x})^2}{n - 2}.$$

### 2.1.3 Μελέτη της αποκριτικής μεταβλητής

Εκτός από την ανάλυση των παραμέτρων του μοντέλου παλινδρόμησης, μας ενδιαφέρει το πόσο καλά το μοντέλο εκτιμά τη συμπεριφορά της εξαρτημένης μεταβλητής. Με άλλα λόγια θέλουμε πληροφορίες για την αξιοπιστία της εκτίμησης της εξαρτημένης μεταβλητής. Στην κατάσταση αυτή δύο είναι τα ζητούμενα:

1. Συμπεράσματα για τη μέση απόκριση. Στην περίπτωση αυτή, ανησυχούμε για το πόσο καλά το μοντέλο εκτιμά την  $\mu_{y|x}$ .
2. Συμπεράσματα για την πρόβλεψη. Στην περίπτωση αυτή, ενδιαφερόμαστε για το πόσο καλά ένα μοντέλο προβλέπει την τιμή της απόκρισης,  $y$ , για μια τυχαία επιλεγμένη παρατήρηση η οποία έχει συγκεκριμένη τιμή για την ανεξάρτητη μεταβλητή,  $x$ .

Για μια καθορισμένη τιμή του  $x$ , έστω  $x^*$ , η διακύμανση της εκτιμημένης μέσης τιμής είναι:

$$var(\hat{\mu}_{y|x^*}) = \sigma^2 \left[ \frac{1}{n} + \frac{(x^* - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right],$$

και η διακύμανση της εκτιμημένης απόκρισης για μια προβλεπόμενη τιμή είναι:

$$var(\hat{y}_{y|x^*}) = \sigma^2 \left[ 1 + \frac{1}{n} + \frac{(x^* - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right].$$

Και οι δύο διακυμάνσεις ποικίλουν ανάλογα με την τιμή του  $x^*$  και αποκτούν την ελάχιστη τιμή τους όταν  $x^* = \bar{x}$ . Με άλλα λόγια η απόκριση εκτιμάται με ακρίβεια όταν η ανεξάρτητη μεταβλητή είναι στο μέσον της, με τη διακύμανση και των δύο εκτιμητριών να αυξάνονται όσο το  $x^*$  διαφέρει από τη μέση τιμή του  $\bar{x}$ . Επίσης παρατηρούμε ότι  $var(\hat{y}_{y|x^*}) > var(\hat{\mu}_{y|x^*})$  διότι η μέση τιμή εκτιμάται με μεγαλύτερη ακρίβεια σε σχέση με την εκτίμηση της απόκρισης μίας μοναδικής τιμής.

## 2.2 Πολλαπλό γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης

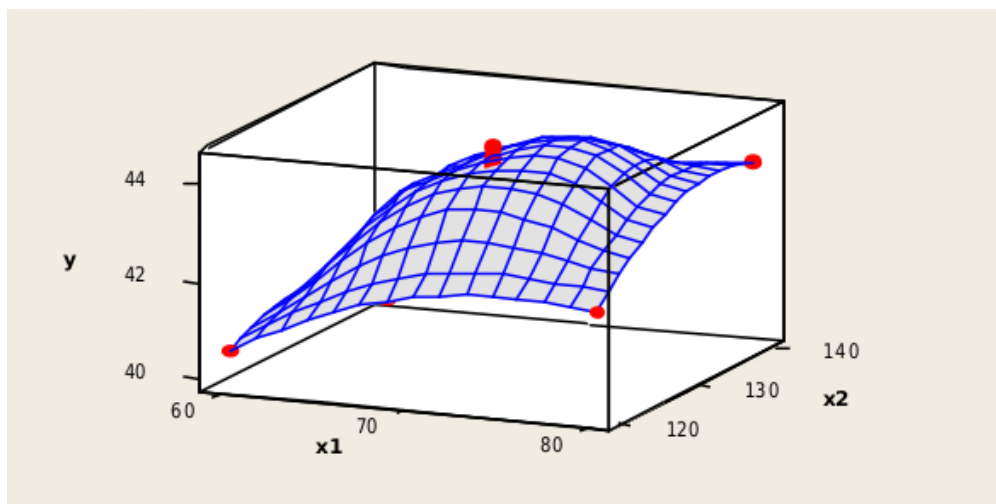
Το πολλαπλό γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης είναι κατά κάποιον τρόπο η επέκταση του απλού γραμμικού μοντέλου, καθώς μελετά τη συμμετοχή περισσότερων από μια μεταβλητών στο μοντέλο. Το αντικείμενο μελέτης του πολλαπλού μοντέλου είναι το ίδιο με αυτό

του απλού γραμμικού μοντέλου, μόνο που στο πολλαπλό θέλουμε να χρησιμοποιήσουμε τη σχέση μεταξύ της αποκριτικής μεταβλητής (εξαρτημένη μεταβλητή) και των ανεξάρτητων μεταβλητών, ώστε να προβλέψουμε ή να ερμηνεύσουμε τη συμπεριφορά της αποκριτικής μεταβλητής.

Το πολλαπλό γραμμικό μοντέλο είναι μια επέκταση του απλού γραμμικού μοντέλου και εκφράζεται ως εξής:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_m x_m + \epsilon \quad (2.5)$$

Ένας συντελεστής,  $\beta_j$ , σε ένα πολλαπλό μοντέλο παλινδρόμησης, ορίζεται σαν ένας μερικός συντελεστής παλινδρόμησης, η σημασία του οποίου είναι η αλλαγή που επιτελείται στη μέση απόκριση,  $\mu_{y|x}$ , σαν αποτέλεσμα της μοναδιαίας μεταβολής στην ανεξάρτητη μεταβλητή  $x_j$ , κρατώντας τις άλλες μεταβλητές σταθερές.



Σχήμα 2.2: Σχεδιασμός Αποκριτικής Επιφάνειας  $y$  vs  $x_1, x_2$

### 2.2.1 Εκτίμηση των Συντελεστών

Για την εκτίμηση των συντελεστών παλινδρόμησης, χρησιμοποιούμε ένα σύνολο  $n$  παρατηρήσεων σχετικά με την  $(m+1)$ -άδα  $(x_1, \dots, x_m, y)$  και με την χρήση των ελαχίστων τετραγώνων προσδιορίζουμε την ακόλουθη εξίσωση για εκτίμηση της μέσης τιμής του  $y$ :

$$\hat{\mu}_{y|x} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \dots + \hat{\beta}_m x_m.$$

Η αρχή των ελαχίστων τετραγώνων δηλώνει ότι οι εκτιμήτριες,  $\beta_i$ , ελαχιστοποιούν το άθροισμα των τετραγώνων του σφάλματος:

$$SSE = \sum (y - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_1 - \dots - \hat{\beta}_m x_m)^2.$$

Για περισσότερη ευκολία ορίζουμε ξάνα το μοντέλο πολλαπλής παλινδρόμησης ως εξής:

$$y = \beta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_m x_m + \epsilon,$$

όπου  $x_0$  είναι η μεταβλητή η οποία έχει την τιμή 1 για όλες τις παρατηρήσεις. Το αθροισμα των τετραγώνων του σφάλματος γράφεται:

$$SSE = \sum (y - \hat{\beta}_0 x_0 - \hat{\beta}_1 x_1 - \dots - \hat{\beta}_m x_m)^2.$$

Οι εκτιμήτριες των ελαχίστων τετραγώνων προκύπτουν από τη λύση του ακόλουθου συστήματος των  $(m + 1)$  γραμμικών εξισώσεων με  $(m + 1)$  αγνώστων παραμέτρων,  $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m$ . Η λύση αυτού του συστήματος μας δίνει τις εκτιμήτριες των συντελεστών, τις οποίες έχουμε ήδη ορίσει ως:  $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_m$ .

$$\begin{aligned} \beta_0 n + \beta_1 \sum x_1 + \beta_2 \sum x_2 + \dots + \beta_m \sum x_m &= \sum y \\ \beta_0 \sum x_1 + \beta_1 \sum x_1^2 + \beta_2 \sum x_1 x_2 + \dots + \beta_m \sum x_1 x_m &= \sum x_1 y \\ \beta_0 \sum x_2 + \beta_1 \sum x_2 x_1 + \beta_2 \sum x_2^2 + \dots + \beta_m \sum x_2 x_m &= \sum x_2 y \\ \dots & \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ \beta_0 \sum x_m + \beta_1 \sum x_m x_1 + \beta_2 \sum x_m x_2 + \dots + \beta_m \sum x_m^2 &= \sum x_m y \end{aligned}$$

Η διαδικασία επίλυσης χρησιμοποιώντας πίνακες γίνεται εξής:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nm} \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad E = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_1 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_m \end{pmatrix}$$

όπου  $x_{ij}$  είναι η  $i$ -οστή παρατήρηση της  $j$ -οστής ανεξάρτητης μεταβλητής,  $i = 1, \dots, n$  και  $j = 1, \dots, m$ .

Χρησιμοποιώντας τους παραπάνω πίνακες, η εξίσωση του μοντέλου για όλες τις παρατηρήσεις,

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_m x_m + \epsilon,$$

μπορεί να γραφεί στην μορφή

$$Y = XB + E. \tag{2.6}$$

Η εξίσωση αυτή μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$(X'X)\hat{B} = X'Y,$$

όπου το  $\hat{B}$  είναι ένα διάνυσμα που προκύπτει από τις εκτιμήτριες των ελαχίστων τετραγώνων του. Η λύση στην εξίσωση πινάκων είναι:

$$\hat{B} = (X'X)^{-1}X'Y.$$

Οι παραπάνω εκφράσεις ισχύουν για πολλαπλή παλινδρόμηση και για κάθε αριθμό ανεξάρτητων μεταβλητών. Στην περιπτωσή μας, για παλινδρόμηση με  $m$  ανεξάρτητες μεταβλητές, ο πίνακας  $X$  έχει  $n$  γραμμές και  $(m + 1)$  στήλες. Συνεπώς, οι πίνακες  $B$  και  $X'Y$  είναι  $\{(m + 1) \times 1\}$ , και οι πίνακες  $X'X$  και  $(X'X)^{-1}$  είναι της τάξης  $\{(m + 1) \times (m + 1)\}$ . Η διαδικασία

για την εύρεση των εκτιμητριών των παραμέτρων ενός πολλαπλού μοντέλου παλινδρόμησης είναι εφαρμογή αλγεβρικών ιδιοτήτων για την επίλυση ενός γραμμικού συστήματος. Για την εφαρμογή της διαδικασίας αυτής υπολογίζουμε τον πίνακα  $X'X$ :

$$X'X = \begin{pmatrix} n & \sum x_1 & \sum x_2 & \dots & \sum x_m \\ \sum x_1 & \sum x_1^2 & \sum x_1x_2 & \dots & \sum x_1x_m \\ \sum x_2 & \sum x_2x_1 & \sum x_2^2 & \dots & \sum x_2x_m \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum x_m & \sum x_mx_1 & \sum x_mx_2 & \dots & \sum x_m^2 \end{pmatrix}$$

και στη συνέχεια υπολογίζουμε τον πίνακα  $X'Y$ :

$$X'Y = \begin{pmatrix} \sum y \\ \sum x_1y \\ \sum x_2y \\ \vdots \\ \sum x_my \end{pmatrix}.$$

### 2.3 Μελέτη της αποκριτικής μεταβλητής του πολλαπλού γραμμικού μοντέλου

Για την πολλαπλή παλινδρόμηση, ο προσδιορισμός των τυπικών σφαλμάτων της εκτιμημένης μέσης τιμής ή των εκτιμημένων τιμών δεν είναι απλή διαδικασία. Ο πίνακας  $\hat{\mu}_{x|Y}$  μεγέθους  $(n \times 1)$  ορίζεται ως ο πίνακας των εκτιμημένων μέσων τιμών της αποκριτικής μεταβλητής για κάθε παρατήρηση. Οι διακυμάνσεις και οι συνδιακυμάνσεις αυτών των εκτιμημένων μέσων τιμών δίνονται από τα στοιχεία του πίνακα:

$$Variance(\hat{\mu}_{y|X}) = \sigma^2 X[X'X]^{-1} X'.$$

Ο πίνακας αυτός είναι ένας  $(n \times n)$  πίνακας, του οποίου τα στοιχεία της διαγωνίου είναι οι διακυμάνσεις των εκτιμημένων μέσων τιμών για κάθε παρατήρηση και τα μη διαγώνια στοιχεία είναι οι συνδιακυμάνσεις όλων των ζευγαριών των παρατηρήσεων. Ο πίνακας  $X[X'X]^{-1}X'$  ονομάζεται Χατ πίνακας και θα μας αποσχολήσει στα επόμενα κεφάλαια. Καθώς ο στόχος μας είναι η απόκριση ενός συγκεκριμένου συνόλου τιμών των ανεξάρτητων μεταβλητών, είναι ανάγκη να έχουμε τη διακύμανση της απόκρισης αυτής. Ορίζοντας ως  $X_i$  έναν  $1 \times (m + 1)$  πίνακα τιμών των ανεξάρτητων μεταβλητών του συνόλου, η διακύμανση των εκτιμημένων μέσων τιμών θα είναι:

$$Variance(\hat{\mu}_{y|X_i}) = \sigma^2 (X_i[X'X]^{-1}X_i').$$

Όμοια, η διακύμανση για μια προβλεπόμενη τιμή στον  $X_i$  είναι:

$$Variance(\hat{y}_{y|X}) = \sigma^2 [1 + X_i[X'X]X_i'].$$

### 2.4 Παραγοντικοί Σχεδιασμοί

Θα παρουσιάσουμε πρώτα τον  $3^k$  παραγοντικό σχεδιασμό. Είναι ένας παραγοντικός σχεδιασμός με  $k$  παράγοντες καθένας σε τρεις στάθμες. Οι στάθμες των παραγόντων αναφέρονται

σαν χαμηλή μεσαία και υψηλή και συμβολίζονται με τα ψηφία 0 (χαμηλή), 1 (μεσαία), και 2 (υψηλή). Κάθε συνδυασμός αγωγών στον  $3^k$  σχεδιασμό θα συμβολίζεται με  $k$  ψηφία, όπου το πρώτο ψηφίο θα δείχνει τη στάθμη του παράγοντα  $A$ , το δεύτερο ψηφίο θα δείχνει τη στάθμη του παράγοντα  $B, \dots$ , και το  $k$  ψηφίο θα δείχνει τη στάθμη του παράγοντα  $K$ . Για παράδειγμα, σε έναν  $3^2$  σχεδιασμό, το 00 συμβολίζει το συνδυασμό αγωγών που αντιστοιχεί στους  $A$  και  $B$  και στους δύο στη χαμηλή στάθμη και το 01 συμβολίζει το συνδυασμό αγωγών που αντιστοιχεί στον  $A$  στη χαμηλή στάθμη και στον  $B$  στη μεσαία στάθμη.

Αυτός ο παραγοντικός σχεδιασμός με τους παράγοντες στις  $k$  στάθμες,  $k > 2$ , χρησιμοποιείται από έναν ερευνητή, ο οποίος ενδιαφέρεται για την επίδραση της καμπυλότητας ενός ποσοτικού παράγοντα στη συνάρτηση απόκρισης. Η πρόσθεση της τρίτης στάθμης δίνει τη δυνατότητα η σχέση μεταξύ της απόκρισης και κάθε παράγοντα να παριστάνεται από ένα μοντέλο δεύτερης τάξης. Στο σημείο αυτό θα πρέπει να επισημάνουμε τα δύο παρακάτω σημεία:

- i) Ο  $3^k$  σχεδιασμός δεν είναι ο καλύτερος σχεδιασμός για να παραστήσουμε το μοντέλο δεύτερης τάξης. Οι σχεδιασμοί αποκριτικής επιφάνειας είναι καλύτεροι για το μοντέλο δεύτερης τάξης.
- ii) Ο  $2^k$  σχεδιασμός, ο οποίος εφοδιάζεται με κεντρικά σημεία, είναι ένας αρκετά καλός τρόπος προσέγγισης της καμπυλότητας. Αυτό μας επιτρέπει να κρατήσουμε το μέγεθος και την πολυπλοκότητα του σχεδιασμού χαμηλά και ταυτόχρονα μας παρέχει κάποια προστασία ενάντια στην καμπυλότητα.

## 2.5 Ο $3^2$ Σχεδιασμός

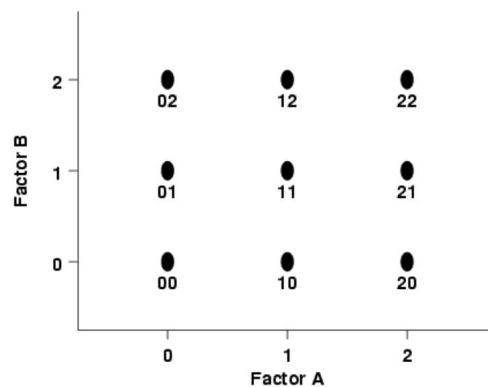
Ο πιο απλός από τους  $3^k$  σχεδιασμούς είναι ο  $3^2$  σχεδιασμός, ο οποίος έχει δύο παράγοντες καθένα σε τρεις στάθμες. Οι συνδυασμοί αγωγών για το σχεδιασμό αυτό παρουσιάζονται στο σχήμα 2.3.

Αφού υπάρχουν  $3^2 = 9$  συνδυασμοί αγωγών, υπάρχουν οκτώ βαθμοί ελευθερίας μεταξύ αυτών των συνδυασμών αγωγών. Οι κύριες επιδράσεις  $A$  και  $B$  έχουν δύο βαθμούς ελευθερίας η καθεμία και η αλληλεπίδραση  $AB$  έχει τέσσερις βαθμούς ελευθερίας. Αν υπάρχουν  $n$  επαναλήψεις, θα υπάρχουν συνολικά  $n3^2 - 1$  βαθμοί ελευθερίας και  $3^2(n - 1)$  βαθμοί ελευθερίας για το σφάλμα.

## 2.6 Ο γενικός $3^k$ σχεδιασμός

Οι έννοιες που χρησιμοποιήθηκαν στον  $3^2$  σχεδιασμό μπορούν ευκολά να επεκταθούν στην περίπτωση των  $k$  παραγόντων, καθένας σε τρεις στάθμες, δηλαδή σε έναν  $3^k$  παραγοντικό σχεδιασμό. Ο συμβολισμός που επικρατεί είναι με τα ψηφία 0, 1, 2 τα οποία χρησιμοποιούνται για τους συνδυασμούς αγωγών. Για παράδειγμα το 01211 παριστάνει ένα συνδυασμό αγωγών σε ένα  $3^5$  σχεδιασμό, όπου ο  $A$  είναι στη χαμηλή στάθμη, ο  $B$ ,  $D$  και ο  $E$  είναι στη μεσαία και ο  $C$  είναι στην υψηλή στάθμη.



Σχήμα 2.3:  $3^2$  Παραγοντικός Σχεδιασμός

Υπάρχουν  $3^κ$  συνδυασμοί αγωγών που έχουν  $3^κ - 1$  βαθμούς ελευθερίας. Αυτοί οι συνδυασμοί αγωγών επιτρέπουν να προσδιορίζουμε τα αθροίσματα τετραγώνων για τις  $κ$  κύριες επιδράσεις με δύο βαθμούς ελευθερίας  $n$  κάθε μια, τις  $\binom{κ}{2}$  αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων με τέσσερις βαθμούς ελευθερίας  $n$  κάθε μια, ... την αλληλεπίδραση  $κ$  παραγόντων με  $2^κ$  βαθμούς ελευθερίας. Γενικά μια αλληλεπίδραση  $h$  παραγόντων έχει  $2^h$  βαθμούς ελευθερίας. Αν υπάρχουν  $n$  επαναλήψεις, τότε υπάρχουν συνολικά  $3^κ(n - 1)$  βαθμοί ελευθερίας για το σφάλμα.

Τα αθροίσματα τετραγώνων για τις κύριες επιδράσεις και τις αλληλεπιδράσεις υπολογίζονται με τις συνήθειες μεθόδους για τους παραγοντικούς σχεδιασμούς. Σαν ένα γενικό κανόνα αναφέρουμε ότι οι αλληλεπιδράσεις τριών παραγόντων και υψηλότερης τάξης δεν διασπώνται επιπλέον. Εντούτοις, κάθε αλληλεπίδραση  $h$  παραγόντων έχει  $2^{h-1}$  ορθογώνιες συνιστώσες με 2 βαθμούς ελευθερίας  $n$  κάθε μια. Για παράδειγμα, η αλληλεπίδραση τεσσάρων παραγόντων  $ABCD$  έχει  $2^{4-1}$  ορθογώνιες συνιστώσες με δύο βαθμούς ελευθερίας  $n$  κάθε μια, που συμβολίζονται με  $ABCD^2$ ,  $ABC^2D$ ,  $AB^2CD$ ,  $ABCD$ ,  $ABC^2D^2$ ,  $AB^2C^2D$ ,  $AB^2CD^2$  και  $AB^2C^2D^2$ . Αν ο εκθέτης για το πρώτο γράμμα δεν είναι 1, τότε ολόκληρη η έκφραση θα πρέπει να υψωθεί στο τετράγωνο και οι εκθέτες να υπολογισθούν modulo 3.

Επίσης παρατηρούμε ότι το μέγεθος του σχεδιασμού αυξάνει γρήγορα με το  $κ$ . Επομένως, συχνά εκτελείται μια μόνον επανάληψη του  $3^κ$  σχεδιασμού και οι αλληλεπιδράσεις υψηλής τάξης συνδυάζονται για να μας δώσουν μια εκτίμηση του σφάλματος. Για παράδειγμα, αν οι αλληλεπιδράσεις 3 παραγόντων και υψηλότερης τάξης είναι αμελητέες, τότε μια επανάληψη του  $3^3$  σχεδιασμού μας εφοδιάζει με 8 βαθμούς ελευθερίας για το σφάλμα.

## 2.7 Κλασματικοί Παραγοντικοί Σχεδιασμοί (Fractional Factorial Designs)

Είναι προφανές πως όσο μεγαλώνει ο αριθμός των παραγόντων του πειράματος, τόσο δυσκολεύει η πλήρης επανάληψη του πειράματος. Ιδανική θα ήταν η περίπτωση κατά την οποία ο πειραματιστής θα μπορούσε να εκτελέσει πλήρως το πείραμα και να εκτιμήσει όλες τις παραγοντικές επιδράσεις. Στην πράξη όμως αυτό δυστυχώς είναι αδύνατο, είτε λόγω έλλειψης χρόνου, είτε λόγω περιορισμένων πηγών για την εκτέλεση των δοκιμών, είτε λόγω του απαγορευτικού κόστους της όλης διαδικασίας.

Στην περίπτωση όπου ο πειραματιστής μπορεί να υποθέσει, χωρίς σημαντικό σφάλμα, ότι κάποιες από τις αλληλεπιδράσεις υψηλής τάξης είναι αμελητέες η εκτέλεση του πειράματος απλοποιείται σημαντικά. Μπορούμε με αυτόν τον τρόπο να πάρουμε πληροφορίες για τις κύριες επιδράσεις και τις αλληλεπιδράσεις χαμηλής τάξης, εκτελώντας μόνο ένα κλάσμα του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού. Αυτοί οι σχεδιασμοί ονομάζονται κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί (Fractional Factorial Designs) και χρησιμοποιούνται στην επίλυση πολλών πρακτικών προβλημάτων.

### 2.7.1 Χρήση των κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών

Οι κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί χρησιμοποιούνται κυρίως σε πειράματα κρησαρίσματος (screening experiments). Στα πειράματα αυτά θεωρούμε ότι υπεισέρχονται πολλοί παράγοντες και ο σκοπός του πειράματος είναι να προσδιοριστούν εκείνοι οι παράγοντες (αν φυσικά υπάρχουν) που έχουν σημαντικές επιδράσεις. Τα πειράματα κρησαρίσματος διεξάγονται συνήθως στα πρώιμα στάδια της έρευνας, όπου είναι πιθανό κάποιοι από τους παράγοντες που αρχικά θεωρήθηκαν σημαντικοί να έχουν μικρή ή μηδενική επίδραση στην απόκριση. Με αυτόν τον τρόπο οι μη σημαντικοί παράγοντες εξαιρούνται από τα μετέπειτα πειράματα, ενώ οι σημαντικοί ερευνώνται λεπτομερώς.

Η επιτυχία στην χρήση των κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών βασίζεται στις παρακάτω ιδέες:

- i) Η αρχή της σποραδικότητας των επιδράσεων (the sparsity of effects principle).

Όταν υπάρχουν πολλές μεταβλητές είναι πιθανό το σύστημα ή η διαδικασία να οδηγείται αρχικά από μερικές από τις κύριες επιδράσεις και αλληλεπιδράσεις χαμηλής τάξης

- ii) Η προβολική ιδιότητα (the projective property).

Οι κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί μπορούν να προβάλλονται σε ισχυρότερους (μεγαλύτερους) σχεδιασμούς με αντικείμενο τους σημαντικούς παράγοντες.

- iii) Ο ακολουθιακός πειραματισμός (sequential experimentation).

Οι εκτελέσεις δύο ή περισσότερων κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών μπορούν να συνδυαστούν, ώστε να συγκεντρωθεί ακολουθιακά ένας μεγαλύτερος σχεδιασμός, για να εκτιμήσουμε τις επιδράσεις και αλληλεπιδράσεις των παραγόντων που παρουσιάζουν ενδιαφέρον για τον πειραματιστή.

2.7.2 Το ένα-δεύτερο κλάσμα του  $2^k$  παραγοντικού σχεδιασμού

Πρόκειται για ένα σχεδιασμό τριών παραγόντων που ο καθένας τους έχει δύο στάθμες. Υποθέτουμε πως οι πειραματιστές αδυνατούν να εκτελέσουν πλήρως το πείραμα, μπορούν όμως να κάνουν τις τέσσερις εκτελέσεις, δηλαδή το  $\frac{1}{2}$  κλάσμα του  $2^3$  παραγοντικού σχεδιασμού. Ο κλασματικός αυτός σχεδιασμός περιέχει  $2^{3-1} = 4$  συνδυασμούς αγωγών και ονομάζεται  $2^{3-1}$  σχεδιασμός. Ο πίνακας προστίμων για τον  $2^3$  φαίνεται στον πίνακα που ακολουθεί.

Συνδυασμός Αγωγών	Παραγοντική Επίδραση							
	I	A	B	C	AB	AC	BC	ABC
a	+	+	-	-	-	-	+	+
b	+	-	+	-	-	+	-	+
c	+	-	-	+	+	-	-	+
ab	+	+	+	-	+	-	-	-
ac	-	+	-	+	-	+	-	-
bc	+	-	+	+	-	-	+	-
abc	+	+	+	+	+	+	+	+
(1)	+	-	-	-	+	+	+	-

Για το σχηματισμό του  $2^{3-1}$  σχεδιασμού επιλέγουμε τους συνδυασμούς αγωγών που έχουν “+” στη στήλη που θεωρούμε αμελητέα (εδώ στη στήλη  $ABC$  που είναι η αλληλεπίδραση μεγαλύτερης τάξης). Το πρώτο μισό του παραπάνω πίνακα μας δίνει το  $\frac{1}{2}$  κλάσμα του  $2^3$  παραγοντικού σχεδιασμού.

Η  $ABC$  ονομάζεται γεννήτορας (generator) του παραγοντικού σχεδιασμού. Επιπλέον, αφού η μοναδιαία στήλη  $I$  έχει πάντοτε μόνο θετικά πρόσημα, θεωρούμε  $I = ABC$  και την ονομάζουμε ορίζουσα σχέση (defining relation). Η ορίζουσα σχέση ενός παραγοντικού κλασματικού σχεδιασμού αποτελείται πάντοτε από όλες τις στήλες που ταυτίζονται με τη στήλη  $I$ . Στον  $2^3$  σχεδιασμό η στήλη  $ABC$  ταυτίζεται με την  $I$  οπότε λέμε ότι η στήλη  $I$  είναι ταυτόσημη (aliased) με την  $ABC$ . Παρατηρώ επίσης πως στο πρώτο μισό του πίνακα έχουμε  $C = AB$ ,  $A = BC$ , και  $B = AC$  οι οποίες είναι αντιστοίχως ταυτόσημες. Αυτό πρακτικά σημαίνει πως δε μπορώ να εκτιμήσω ξεχωριστά το  $C$  και  $AB$  αλλά η εκτίμηση του  $C$  στην πραγματικότητα είναι εκτίμηση του  $C + AB$ . Αν πολλαπλασιάσουμε την ορίζουσα σχέση με κάποια επίδραση λαμβάνουμε τις ταυτόσημες με αυτή επιδράσεις. Το  $\frac{1}{2}$  που έχει ως ορίζουσα σχέση την  $I = ABC$  ονομάζεται κύριο κλάσμα (principle).

Αντίστοιχα, από το δεύτερο μισό του πίνακα σχηματίζεται το εναλλακτικό ή συμπληρωματικό κλάσμα. Το συμπληρωματικό κλάσμα έχει ως ορίζουσα σχέση τις στήλες που είναι αντίθετες με τη στήλη  $I$ , δηλαδή για τον  $2^{3-1}$  σχεδιασμό  $I = -ABC$ . Ομοίως υπολογίζονται οι ταυτόσημες επιδράσεις  $C = -AB$ ,  $A = -BC$  και  $B = -AC$ . Οι ταυτόσημες επιδράσεις αποτελούν ένα σύνολο ταυτόσημων επιδράσεων και είναι αδύνατο να τις εκτιμήσουμε απευθείας ξεχωριστά.

Στους κλασματικούς παραγοντικούς σχεδιασμούς ισχύουν γενικά τα παρακάτω, που επαληθεύονται και στην περίπτωση του  $2^{3-1}$  σχεδιασμού:

1. Ο κλασματικός σχεδιασμός  $2^{n-k}$  έχει  $k$  γεννήτορες.

2. Η ορίζουσα σχέση του συνεπώς θα περιέχει όλους τους  $\kappa$  γεννήτορες καθώς και τις  $2^\kappa - \kappa - 1$  αλληλεπιδράσεις τους (όλες οι επιδράσεις και οι αλληλεπιδράσεις των  $\kappa$  γεννητόρων θα είναι  $2^\kappa - 1$ ).
3. Για να υπολογίσω τις ταυτόσημες επιδράσεις πολλαπλασιάζω modulo 2 την κάθε επίδραση με κάθε μέλος της ορίζουσας σχέσης.
4. Στο σχεδιασμό  $2^{n-k}$  οι επιδράσεις είναι ταυτόσημες ανά  $2^\kappa$ .

### 2.7.3 Διάκριση των κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών

Ένας ορθογώνιος σχηματισμός  $OA(n, q, s, t)$  είναι ένας  $n \times q$  πίνακας με στοιχεία από ένα σύνολο  $s$  διακριτών συμβόλων, τοποθετημένα έτσι ώστε για κάθε επιλογή από  $t$  στήλες του πίνακα, καθένα από τα  $s^t$  διανύσματα γραμμής να εμφανίζονται το ίδιο συχνά.

Ονομάζουμε  $n$  τον αριθμό των εκτελέσεων του  $OA$ ,  $q$  το πλήθος των παραγόντων,  $s$  τον αριθμό των στάθμεων του κάθε παράγοντα και  $t$  τη δύναμη του πίνακα.

Δύο ορθογώνιοι σχηματισμοί ονομάζονται ισόμορφοι όταν ο ένας μπορεί να προκύψει από τον άλλο μετά από μια σειρά εναλλαγών γραμμών, στηλών, καθώς και των στάθμεων της κάθε στήλης.

**Ορισμός 2.7.1.** Ορθογώνιοι παραγοντικοί σχεδιασμοί δύο στάθμεων ονομάζονται οι σχεδιασμοί που ικανοποιούν τα εξής:

1. Σε κάθε στήλη το πλήθος των θετικών προσήμων "+" ισούτε με το πλήθος των αρνητικών προσήμων "-".
2. Σε κάθε δύο στήλες οι τέσσερις συνδυασμοί (+,+), (+,-), (-,-), (-,+) εμφανίζονται με την ίδια συχνότητα.

Είναι προφανές πως οι ορθογώνιοι σχεδιασμοί δύο στάθμεων είναι ειδική περίπτωση των ορθογώνιων πινάκων και διατηρούν όλες τις ιδιότητες αυτών. Επιπλέον οι ορθογώνιοι σχεδιασμοί μπορούν να ταξινομηθούν σε δύο κατηγορίες ανάλογα με τον τρόπο κατασκευής τους:

- i) Σε απλούς (regular) αν ο κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός μπορεί να κατασκευαστεί χρησιμοποιώντας την ορίζουσα σχέση (defining relation). Οι απλοί σχεδιασμοί είναι της μορφής  $2^{n-k}$ , δηλαδή σχεδιασμοί  $n$  παραγόντων όπου ο καθένας έχει δύο στάθμες και διαθέτουμε το  $\frac{1}{2^k}$  των συνολικών εκτελέσεων. Ένας απλός σχεδιασμός έχει μια απλή δομή, σύμφωνα με την οποία δύο επιδράσεις είναι είτε ορθογώνιες, είτε πλήρως ταυτόσημες. Οι ορίζουσες σχέσεις των απλών κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών πάντα παρέχουν πληροφορίες για την κατασκευή του σχεδιασμού. Μπορούμε να κατασκευάσουμε απλούς σχεδιασμούς για οποιοδήποτε αριθμό εκτελέσεων που είναι δύναμη του 2. Παραδείγματα απλών σχεδιασμών είναι οι σχεδιασμοί οι οποίοι προκύπτουν από τους πίνακες Hadamard τάξης  $n = 2^p$ .

Αν  $A_i(D)$  είναι ο αριθμός των διακριτών λέξεων μήκους  $i$  στην ορίζουσα σχέση του  $D$ , η ακολουθία  $(A_1(D), A_2(D), \dots, A_n(D))$  ονομάζεται διάνυσμα μήκους λέξης (wordlength pattern) του σχεδιασμού.

- ii) Σε σύνθετους σχεδιασμούς (non regular). Αυτοί οι σχεδιασμοί είναι της μορφής  $k2^{n-m}$  οι οποίοι προκύπτουν από συνδυασμός  $k, (k \neq 2^t)$  κλασμάτων  $2^{n-m}$ . Αυτοί οι σχεδιασμοί δεν είναι ορθογώνιοι αλλά ούτε και πλήρως ταυτόσημοι και σε αντίθεση με τους απλούς σχεδιασμούς έχουν πολύπλοκη δομή.

#### 2.7.4 Ταξινόμηση κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών

**Ορισμός 2.7.2.** Ένας σχεδιασμός είναι αναλυτικής τάξης  $R$ , αν καμία επίδραση  $p$  παραγόντων δεν είναι ταυτόσημη με άλλη επίδραση που περιέχει λιγότερους από  $R - p$  παράγοντες.

Για την αναλυτική τάξη ενός σχεδιασμού (resolution) χρησιμοποιούμε σαν υποσημείωση το συμβολισμό της Ρωμαϊκής αρίθμησης. Συνεπώς το  $\frac{1}{2}$  κλάσμα του  $2^3$  παραγοντικού σχεδιασμού με ορίζουσα σχέση την  $I = ABC$  (ή για το εναλλακτικό κλάσμα  $I = -ABC$ ) είναι ένας  $2_{III}^{3-1}$  σχεδιασμός, αφού όπως προκύπτει και από την παράγραφο 1.3.2 καμία κύρια επίδραση δεν είναι ταυτόσημη με καμία άλλη κύρια επίδραση, αλλά οι κύριες επιδράσεις είναι ταυτόσημες με αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων.

Οι σχεδιασμοί αναλυτικής τάξης  $III$ ,  $IV$  και  $V$  είναι ιδιαίτερος χρήσιμοι και σημαντικοί. Ακολουθεί ο ορισμός για τον κάθε σχεδιασμό, καθώς και ένα παράδειγμα για την κάθε περίπτωση.

**Ορισμός 2.7.3.** Σχεδιασμός αναλυτικής τάξης  $III$

Σε αυτούς τους σχεδιασμούς καμία κύρια επίδραση δεν είναι ταυτόσημη με κάποια άλλη κύρια επίδραση, αλλά κύριες επιδράσεις είναι ταυτόσημες με αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων και αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων ενδεχομένως να είναι μεταξύ τους ταυτόσημες.

Ο  $2^{3-1}$  σχεδιασμός του πίνακα που ακολουθεί, με ορίζουσα σχέση την  $I = ABC$  για το κύριο κλάσμα και  $I = -ABC$  για το εναλλακτικό είναι ένας  $2_{III}^{3-1}$  σχεδιασμός.

**Ορισμός 2.7.4.** Σχεδιασμός αναλυτικής τάξης  $IV$

Σε αυτούς τους σχεδιασμούς καμία κύρια επίδραση δεν είναι ταυτόσημη με κάποια άλλη κύρια επίδραση ή με αλληλεπίδραση δύο παραγόντων, αλλά αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων είναι ταυτόσημες μεταξύ τους.

Ένας  $2^{4-1}$  σχεδιασμός με ορίζουσα σχέση  $I = ABCD$  για το κύριο κλάσμα ( $I = -ABCD$  για το εναλλακτικό) είναι ένας  $2_{IV}^{3-1}$  σχεδιασμός.

Όπως παρατηρούμε και στον παραπάνω πίνακα οι αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων είναι ταυτόσημες μεταξύ τους και συγκεκριμένα  $AB = CD$ ,  $AC = BD$  και  $AD = BC$ . Το πάνω κομμάτι του πίνακα είναι το κύριο  $\frac{1}{2}$  κλάσμα του σχεδιασμού, ενώ το κάτω μισό είναι το εναλλακτικό κλάσμα, με ορίζουσα σχέση την  $I = -ABCD$ .

**Ορισμός 2.7.5.** Σχεδιασμός αναλυτικής τάξης  $V$ .

Σε αυτούς τους σχεδιασμούς καμία κύρια επίδραση ή αλληλεπίδραση δύο παραγόντων δεν είναι ταυτόσημη με άλλη κύρια επίδραση ή αλληλεπίδραση δύο παραγόντων, αλλά οι αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων είναι ταυτόσημες με αλληλεπιδράσεις τριών παραγόντων. Ένας  $2^{5-1}$  σχεδιασμός με ορίζουσα σχέση την  $I = ABCDE$  και με πίνακα σχεδιασμού όπως και προηγουμένως, είναι ένας σχεδιασμός  $2_V^{5-1}$ .

Γενικά, η αναλυτική τάξη ενός κλασματικού παραγοντικού σχεδιασμού δύο στάθμεων, ισούται με τον μικρότερο αριθμό γραμμάτων σε οποιαδήποτε λέξη της ορίζουσας σχέσης. Συνήθως προτιμούμε τη χρήση κλασματικών σχεδιασμών που έχουν την υψηλότερη δυνατή αναλυτική τάξη, σύμφωνα πάντα με τον απαιτούμενο βαθμό κλασματικότητας. Η υψηλή αναλυτική τάξη περιορίζει λιγότερο τις υποθέσεις που απαιτούνται και αφορούν στο ποιές αλληλεπιδράσεις είναι αμελητέες, ώστε να πάρουμε τελικά μια μοναδική ερμηνεία των δεδομένων

Ένα λογικό λοιπόν κριτήριο είναι η επιλογή των γεννητόρων ώστε ο κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός που θα προκύψει να έχει την μεγαλύτερη αναλυτική τάξη.

## Κεφάλαιο 3

# Αποκριτικές επιφάνειες

Η μεθοδολογία των αποκριτικών επιφανειών αναπτύχθηκε από τους Box και Wilson (1951)-Box και Youle (1955) και επαναδιατυπώθηκε από τον Box (1999). Στη συνέχεια αρκετά βιβλία πάνω στη μεθοδολογία αποκριτικών επιφανειών αναπτύχθηκαν από τους Box και Draper (1987), Khuri και Cornell (1966), Myers και Montgomery (2002), οι οποίοι έδωσαν ποικίλα παραδείγματα για μεγάλο εύρος εφαρμογών, δείχνοντας ιδιαίτερο ενδιαφέρον στη χημική βιομηχανία.

Σε ορισμένες όμως εφαρμογές, όπως η γεωργία και τα πειράματα θερμοκήπιου, η μεθοδολογία των αποκριτικών επιφανειών αποδείχθηκε αναγκαία και έπρεπε να εφαρμοστεί. Επιπλέον ο τομέας της βιοτεχνολογίας ο οποίος εξελίσσεται ραγδαία ακόμα και στις μέρες μας, καθιστά αναγκαία την εφαρμογή των αποκριτικών επιφανειών στα βιοτεχνολογικά πειράματα.

Η μεθοδολογία αποκριτικών επιφανειών είναι μια συλλογή μαθηματικών και στατιστικών τεχνικών για την ανάπτυξη, βελτίωση και βελτιστοποίηση διαδικασιών. Έχει επίσης, σημαντικές εφαρμογές στο σχεδιασμό, στην ανάπτυξη και σχηματοποίηση νέων προϊόντων, όπως και στη βελτίωση των ήδη υπαρχόντων σχεδιασμών προϊόντων.

Η συλλογή αυτή είναι χρήσιμη για την μοντελοποίηση και ανάλυση προβλημάτων στα οποία μια απόκριση ενδιαφέροντος επηρεάζεται από αρκετές μεταβλητές και σκοπός είναι η βελτιστοποίηση της απόκρισης. Η RSM περιλαμβάνει το σχεδιασμό ενός συνόλου πειραμάτων για την εξερεύνηση του χώρου της διαδικασίας και την εξαγωγή επαρκών και αξιόπιστων μετρήσεων για την απόκριση που μας ενδιαφέρει. Συγκεκριμένα, κατά την εκλογή ενός σχεδιασμού αποκριτικών επιφανειών πρέπει να πληρούνται ορισμένες ιδιότητες, οι οποίες είναι:

1. Να καταλήγει σε μια καλή προσαρμογή του μοντέλου στα δεδομένα.
2. Να δίνει επαρκή πληροφορία για να επιτρέψει έναν έλεγχο προσαρμογής.
3. Να επιτρέπει να κατασκευάζονται ακολουθιακά μοντέλα αυξανόμενης τάξης.
4. Να παρέχει μια εκτίμηση του καθαρού πειραματικού σφάλματος.
5. Να είναι ευσταθής στην παρουσία outliers στα δεδομένα.
6. Να είναι ευσταθής σε σφάλματα στον έλεγχο των επιπέδων του σχεδιασμού.

7. Να είναι οικονομικά αποτελεσματικός.
8. Να επιτρέπει να γίνονται πειράματα σε blocks.
9. Να παρέχει μια καλή προσαρμογή της  $nVar\hat{Y}(x)/\sigma^2$ .

Σε ένα δεύτερο στάδιο περιλαμβάνεται η εμπειρική στατιστική μοντελοποίηση για την κατασκευή μιας κατάλληλης προσεγγιστικής σχέσης μεταξύ της απόκρισης και των μεταβλητών της διαδικασίας. Τέλος, η RSM προϋποθέτει τη χρησιμοποίηση μεθόδων βελτιστοποίησης για την εύρεση των τιμών των μεταβλητών της διαδικασίας, οι οποίες οδηγούν σε επιθυμητές τιμές της απόκρισης και ιδιαίτερα στη βέλτιστη τιμή της.

Με τον όρο απόκριση εννοούμε τη μετρούμενη ποσότητα, της οποίας η τιμή επηρεάζεται από τις αλλαγές των επιπέδων των  $\kappa$  παραγόντων  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ . Η πραγματική τιμή της απόκρισης που αντιστοιχεί σε κάθε ιδιαίτερο συνδυασμό αγωγών και με την απουσία πειραματικού σφάλματος, ορίζεται ως  $\mu$ . Το πειραματικό σφάλμα συνίσταται από το τυχαίο σφάλμα που προκαλείται από πηγές όπως, τα εφόδια παραγωγής και ελέγχου και τους ανθρώπους που τα χειρίζονται, όπως επίσης και από το μη τυχαίο σφάλμα που προκαλείται από παράγοντες οι οποίοι δεν έχουν συμπεριληφθεί στο πείραμα. Επειδή το πειραματικό σφάλμα υπάρχει σε όλα τα πειράματα, στα οποία εμπλέκονται μετρήσεις, η τιμή της απόκρισης που πραγματικά παρατηρείται για κάθε συνδυασμό αγωγών των παραγόντων διαφέρει από την  $\mu$ . Αυτή η διαφορά από την πραγματική τιμή γράφεται ως  $Y = \mu + \epsilon$ , όπου  $Y$  είναι η παρατηρούμενη τιμή της απόκρισης και  $\epsilon$  το πειραματικό σφάλμα.

Αφού λοιπόν η τιμή της απόκρισης  $\mu$  εξαρτάται από τους συνδυασμούς των αγωγών των  $x_1, x_2, \dots, x_k$ , υπάρχει κάποια συνάρτηση των  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$  η τιμή της οποίας για κάθε δεδομένο συνδυασμό αγωγών των  $\kappa$  παραγόντων αντιστοιχεί σε μια τιμή της  $\mu$ , δηλαδή:

$$\mu = f(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k)$$

Η συνάρτηση  $f$  λέγεται αληθής συνάρτηση απόκρισης και υποθέτουμε ότι είναι συνεχής συνάρτηση των  $\xi_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, k$ .

Εν γένει ο πειραματιστής ασχολείται με μια διαδικασία, στην οποία η απόκριση  $Y$  εξαρτάται από τις μεταβλητές εισόδου  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ . Η σχέση εξάρτησης είναι:

$$Y = f(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k) + \epsilon$$

Η πραγματική μορφή της  $f$  είναι άγνωστη και γι' αυτό ζητείται μια προσεγγιστική μορφή χρησιμοποιώντας ένα πολυώνυμο ή κάποιον άλλον τύπο μοντέλου. Το  $\epsilon$  είναι ένας όρος που αντιπροσωπεύει άλλες πηγές μεταβλητότητας που δεν εξηγούνται από την  $f$  και το θεωρούμε ως ένα στατιστικό σφάλμα, υποθέτοντας ότι ακολουθεί την κανονική κατανομή με μέσο μηδέν και διασπορά  $\sigma^2$ . Αν ο μέσος του  $\epsilon$  είναι μηδέν τότε ισχύει:

$$\mu = f(x_1, x_2, \dots, x_k)$$

Οι μεταβλητές  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$  ονομάζονται φυσικές μεταβλητές, γιατί είναι εκφρασμένες σε φυσικές μονάδες μέτρησης, όπως γραμμάρια, βαθμοί Kelvin κ.λ.π.. Είναι ιδιαίτερα βολικό να μετασχηματίζουμε τις φυσικές μεταβλητές σε τυποποιημένες ή κωδικοποιημένες μεταβλητές  $x_1, x_2, \dots, x_k$ . Οι κωδικοποιημένες αυτές μεταβλητές ορίζονται να είναι κατηγορικές με μέσο



μπδέν και την ίδια διασπορά ή τυπική απόκλιση. Για παράδειγμα, αν σε κάποιο στάδιο της έρευνας ορίσουμε την τρέχουσα περιοχή του ενδιαφέροντος μας για τις  $\xi_i$  να είναι  $\xi_{i0} - S_i$  και  $\xi_{i0} + S_i$ , όπου  $\xi_{i0}$  είναι το κέντρο της περιοχής, τότε είναι βολικό να ορίσουμε μια ισοδύναμη μεταβλητή  $x_i$  για την οποία ισχύει:

$$x_i = \frac{\xi_i - \xi_{i0}}{S_i} \quad (3.1)$$

Οι κωδικοποιημένες ποσότητες  $x_i$  είναι μετασχηματισμοί των αρχικών  $\xi_i$  και έτσι οι εκφράσεις που περιέχουν τα  $x_i$  μπορούν πάντα να ξαναγραφούν με όρους των  $\xi_i$ .

Παραδοσιακά το πρώτο βήμα στον πειραματισμό για την εφαρμογή αποκριτικών επιφανειών είναι η χρήση ενός μικρού σχεδιασμού ώστε να προσαρμοστεί ένα μοντέλο πρώτης τάξης. Για την προσαρμογή του μοντέλου καθώς και για την αξιόπιστη εκτίμηση των παραμέτρων του μοντέλου απαιτούνται αρκετές επαναλήψεις του εν λόγω σχεδιασμού. Όμως, εξαιτίας των ιδιοτήτων των επαναλήψεων του παραγοντικού σχεδιασμού, μας δίνεται η δυνατότητα να κάνουμε χρήση μεγάλου αριθμού επαναλήψεων με σκοπό να προσαρμόσουμε στο μοντέλο μας όρους τάξης μεγαλύτερης από αυτή της μονάδας, χωρίς να αλλοιώσουμε αισθητά την εκτίμηση των γραμμικών κύριων επιδράσεων. Συνήθως είναι εύλογο να χρησιμοποιούμε σχεδιασμούς οι οποίοι περιγράφονται από πολυωνμικά μοντέλα δευτέρου βαθμού. Μετά την προσαρμογή του μοντέλου και την εκτίμηση του βέλτιστου συνδυασμού των στάθμεων των παραγόντων, ώστε να επιτευχθεί η μέγιστη δύναμη απόκριση, είναι πρόβλημα να γίνουν κάποιες επιπλέον επαναλήψεις ώστε να ελεγχθούν οι προβλέψεις. Οι πειραματισμοί, οι οποίοι επιτελούνται σε αυτό το στάδιο είναι εφικτό να πραγματοποιηθούν, καθώς δεν απαιτούνται δαπάνες όπως απαιτούνται σε βιομηχανικές εφαρμογές.

Οι απαιτούμενοι σχεδιασμοί, είναι αυτοί οι οποίοι επιτρέπουν την ικανοποιητική προσαρμογή του μοντέλου δεύτερης τάξης καθώς και τον έλεγχο της έλλειψης προσαρμογής του μοντέλου, ενώ παρέχουν αρκετούς βαθμούς ελευθερίας για την εκτίμηση του καθαρού σφάλματος. Προκειμένου να ικανοποιηθούν οι πιο πάνω απαιτήσεις, κρίνεται απαραίτητη η χρήση παραγόντων τριών και τεσσάρων στάθμεων, χωρίς να αποκλείουμε τη χρήση παραγόντων με δύο στάθμες. Στο βιομετασχηματισμό, το μοναδιαίο κόστος για κάθε επανάληψη είναι άμεσα συσχετισμένο με το σταθερό κόστος και είναι εφικτό να γίνουν συνεχόμενες επαναλήψεις ώστε να ελεγχθεί το αποτέλεσμα της προσαρμογής του μοντέλου. Σαν αποτέλεσμα των παραπάνω, οι σχεδιασμοί με παράγοντες τριών στάθμεων κρίνονται ως οι καταλληλότεροι από οικονομικής και αποτελεσματικής σκοπιάς.

Οι επικρατέστεροι σχεδιασμοί με παράγοντες τριών στάθμεων είναι οι κεντρικοί σύνθετοι σχεδιασμοί (Central Composite Designs) με δύο αξονικά σημεία στον άξονα κάθε μεταβλητής, σε απόσταση  $a = 1$  από το κέντρο του σχεδιασμού (Σχήμα 2.1). Το σύνολο των αξονικών αυτών σημείων ονομάζεται αξονικό τμήμα (axial portion) του σχεδιασμού.

### 3.1 Το μοντέλο πρώτης τάξης

Η γενική μορφή του μοντέλου πρώτης τάξης με  $k$  μεταβλητές εισόδου  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$  είναι:

$$y = \beta_0 + \sum_i \beta_i \xi_i + \sum_i \sum_j \beta_{ij} x_i x_j + \epsilon, \quad (3.2)$$

όπου  $y$  είναι η παρατηρούμενη αποκριτική μεταβλητή,  $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_\kappa$  είναι οι άγνωστες παράμετροι και  $\epsilon$  το τυχαίο σφάλμα. Αν  $E(\epsilon) = 0$ , τότε το μη τυχαίο τμήμα παριστάνει την αληθή μέση απόκριση και το  $\epsilon$  θεωρείται ως πειραματικό σφάλμα. Αν το παραπάνω μοντέλο είναι μια ανεπαρκής παράσταση της μέσης απόκρισης, τότε το  $\epsilon$  περιέχει, εκτός από το πειραματικό σφάλμα και ένα μη τυχαίο σφάλμα το συστηματικό. Το συστηματικό σφάλμα οφείλεται στην απουσία παραγόντων υψηλότερου του πρώτου βαθμού όπως και στην απουσία άλλων μεταβλητών που έχουν κάποια επίδραση στην απόκριση.

Υποθέτουμε ότι τα επίπεδα των  $\kappa$  μεταβλητών εισόδου  $\xi_i$  κωδικοποιούνται χρησιμοποιώντας το μετασχηματισμό

$$x_{ui} = \frac{\xi_{ui} - \bar{\xi}_i}{S_i}, \quad \bar{\xi}_i = \sum_{i=1}^N \frac{\xi_{ui}}{N}$$

όπου  $S_i$  είναι το μισό του εύρους μεταξύ της χαμηλότερης και της υψηλότερης θέσης. Ο πίο πάνω μετασχηματισμός καθορίζει τους μέσους των  $\kappa$  μεταβλητών εισόδου σε κωδικοποιημένες μεταβλητές ως τις συντεταγμένες του σημείου  $(x_1, x_2, \dots, x_\kappa) = (0, 0, \dots, 0)$ , το οποίο ονομάζεται κέντρο του σχεδιασμού. Αναπτύσσοντας το μοντέλο πρώτης τάξης (2.2) με τη μορφή πινάκων για  $n$  παρατηρήσεις, ( $n > \kappa$ ):

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{B} + \boldsymbol{\epsilon}$$

όπου:

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_\kappa \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}$$

Στην παρούσα φάση πρέπει να τονιστεί ότι τα στοιχεία του πίνακα σχεδιασμού  $\mathbf{X}$ , είναι τα επίπεδα των κωδικοποιημένων μεταβλητών  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, \kappa$ .

Εφαρμόζοντας τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων, η οποία παρουσιάστηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο, έχουμε τη δυνατότητα να εκτιμήσουμε μια εκτιμήτρια του  $\boldsymbol{\beta}$ , έστω  $\mathbf{b}$ :

$$\mathbf{b} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}, \quad (3.3)$$

Έχοντας υπόψιν τη σχέση (2.3), το προσαρμοσμένο μοντέλο παλινδρόμησης είναι:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\mathbf{b} \quad (3.4)$$

όπου  $\hat{\mathbf{y}}$  είναι το διάνυσμα των προσαρμοσμένων τιμών. Οι διαφορές μεταξύ των τιμών που παρατηρούνται κατά την εκτέλεση του πειράματος  $y_i$  και των προσαρμοσμένων τιμών  $\hat{y}_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , ονομάζονται κατάλοιπα, και συμβολίζονται:

$$\mathbf{e} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} \quad (3.5)$$

Η εκτιμήτρια των ελαχίστων τετραγώνων  $\mathbf{b}$  είναι μια αμερόληπτη εκτιμήτρια ελάχιστης διασποράς και ο πίνακας διασποράς-συνδιασποράς του  $\mathbf{b}$  είναι:

$$\text{Cov}(\mathbf{b}) = \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}. \quad (3.6)$$

Τέλος, αποδεικνύεται ότι η εκτιμήτρια των ελαχίστων τετραγώνων των καταλοίπων,  $SSE = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \mathbf{b}^T \mathbf{X} \mathbf{y}$  το οποίο έχει  $n - \kappa$  βαθμούς ελευθερίας.

## 3.1.1 Έλεγχος έλλειψης προσαρμογής

Η εκτίμηση του καθαρού σφάλματος σ'έναν  $2^k$  παραγοντικό σχεδιασμό είναι δυνατότητα που απορρέει από την προσθήκη κεντρικών σημείων. Η πρόσθεση των κεντρικών σημείων επιτρέπει τη διαμέριση του αθροίσματος τετραγώνων των καταλοίπων SSE σε δύο παράγοντες. Ο πρώτος παράγοντας είναι το άθροισμα των τετραγώνων που οφείλεται στο καθαρό σφάλμα SSPE και ο δεύτερος το άθροισμα των τετραγώνων που οφείλεται στην έλλειψη προσαρμογής SSLOF. Δηλαδή ισχύει:

$$SSE = SSPE + SSOF \quad (3.7)$$

Με τη χρήση ενός μοντέλου παλινδρόμησης  $\kappa$  παραγόντων, έχοντας  $n_i$  παρατηρήσεις για την απόκριση που αντιστοιχεί στο  $i$ -οστό επίπεδο των παραγόντων  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$  και  $j = 1, 2, \dots, n_i$ . Έστω επίσης,  $y_{ij}$  η  $j$ -οστή παρατήρηση της απόκρισης για το  $x_i$ . Οι συνολικές παρατηρήσεις είναι  $n = n_1 + n_2 + \dots + n_m$ . Το  $ij$ -οστό κατάλοιπο γράφεται:

$$y_{ij} - \hat{y}_i = (y_{ij} - \bar{y}_i) + (\bar{y}_i - \hat{y}_i). \quad (3.8)$$

Υψώνοντας στο τετράγωνο και αθροίζοντας ως προς  $i$  και  $j$  ισχύει:

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_i)^2 + \sum_{i=1}^m (\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2 \quad (3.9)$$

Το αριστερό μέλος της εξίσωσης (3.9) είναι το άθροισμα τετραγώνων των καταλοίπων. Ο πρώτος παράγοντας του δευτέρου μέλους είναι το άθροισμα των τετραγώνων του καθαρού σφάλματος SSPE και ο δεύτερος παράγοντας είναι αυτό που οφείλεται στην έλλειψη προσαρμογής. Σε κάθε επίπεδο των  $x_i$  υπάρχουν  $n_i - 1$  διαθέσιμοι βαθμοί ελευθερίας για το καθαρό σφάλμα. Επομένως οι συνολικοί βαθμοί ελευθερίας για το σφάλμα είναι:

$$\sum_{i=1}^m (n_i - 1) = n - m \quad (3.10)$$

Οι βαθμοί ελευθερίας για την έλλειψη προσαρμογής είναι  $m - p$ , αφού υπάρχουν  $m$  επίπεδα των  $x$  και πρέπει να εκτιμηθούν  $p$  παράμετροι. Ο στατιστικός έλεγχος για την έλλειψη προσαρμογής είναι:

$$F_0 = \frac{SSLOF/(m-p)}{SSPE/(n-m)} = \frac{MSLOF}{MSPE} \quad (3.11)$$

Η μέση τιμή του MSPE είναι  $\sigma^2$  ενώ η μέση τιμή του MSLOF είναι:

$$E(MSLOF) = \sigma^2 + \frac{\sum_{i=1}^m n_i (E(y_i) - (\beta_0 + \sum_j \beta_i x_i + \sum_j \sum_k \beta_{jk} x_j x_k))}{m-2} \quad (3.12)$$

Στην περίπτωση όπου το μοντέλο είναι γραμμικό τότε έχουμε  $MSLOF = \sigma^2$ . Αν το μοντέλο είναι γραμμικό τότε ο  $F_0$  ακολουθεί την κατανομή  $F_{m-p, n-m}$ . Αν  $F_0 > F_{\alpha, m-p, n-m}$  τότε υπάρχει έλλειψη προσαρμογής και πρέπει να αναζητήσουμε ένα μοντέλο μεγαλύτερης τάξης.

Στην παρούσα φάση πρέπει να τονίσουμε ότι για να προσαρμόσουμε ένα μοντέλο πρώτης τάξης χρησιμοποιούμε ορθογώνιους σχεδιασμούς. Η χρήση ορθογώνιων σχεδιασμών επιτρέπει στις επιδράσεις των  $\kappa$  μεταβλητών εισόδου να εκτιμηθούν ανεξάρτητα. Επίσης, είναι βέλτιστοι με την έννοια ότι παρέχουν εκτιμήσεις βέλτιστης διασποράς στις τιμές των  $\beta_i$ . Από τα παραπάνω για το μοντέλο πρώτης τάξης θα περιοριστούμε στους ορθογώνιους σχεδιασμούς, οι οποίοι περιλαμβάνουν τους  $2^\kappa$  σχεδιασμούς καθώς και τα κλάσματα αυτών.

## 3.2 Το μοντέλο δεύτερης τάξης

Το μοντέλο δεύτερης τάξης προκύπτει από την αδυναμία του μοντέλου πρώτης τάξης να περιγράψει την απόκριση, εξαιτίας της ύπαρξης κυρτότητας στην επιφάνεια. Στην φάση αυτή το μοντέλο πρώτης τάξης αναβαθμίζεται σ'ένα μοντέλο δεύτερης τάξης, το οποίο έχει τη μορφή:

$$y = \beta_0 + \sum_i \beta_i \xi_i + \sum_i \beta_{ii} \xi_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} \xi_i \xi_j + \epsilon \quad (3.13)$$

όπου  $x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{i\kappa}$  είναι οι μεταβλητές εισόδου που επηρεάζουν την απόκριση  $y$ ,  $\beta_0, \beta_i, \beta_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, \dots, \kappa$ ) οι άγνωστοι παράμετροι και  $\epsilon$  το τυχαίο σφάλμα.

Ορίζοντας ένα σύνολο κανονικοποιημένων μεταβλητών  $x_i$ , των οποίων τα επίπεδα για την  $u$ -οστή δοκιμή ( $u = 1, 2, \dots, n$ ) είναι:

$$x_{ui} = \frac{\xi_{ui} - \bar{\xi}_i}{s_{\xi_i}}, \quad u = 1, \dots, n, \quad i = 1, \dots, \kappa, \quad (3.14)$$

$$\bar{\xi}_i = \frac{\sum_{u=1}^n \xi_{ui}}{n}, \quad (3.15)$$

$$s_{\xi_i} = \sqrt{\frac{\sum_{u=1}^n (\xi_{ui} - \bar{\xi}_i)^2}{n}}, \quad (3.16)$$

όπου το  $x_{ui}$  το  $u$ -οστό επίπεδο της  $i$ -οστής μεταβλητής εισόδου,  $s_{\xi_i}$  ένα μέτρο της τυπικής απόκλισης και  $n$  ο αριθμός των παρατηρήσεων. Τότε η παρατηρούμενη τιμή της απόκλισης για την  $u$ -οστή δοκιμή είναι:

$$y_u = \beta_0 + \sum_i \beta_i x_i + \sum_i \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \epsilon_u \quad (3.17)$$

όπου  $\epsilon_u$  το πειραματικό σφάλμα για την  $y_u$ . Τα  $\epsilon_u$  είναι ανεξάρτητα και ακολουθούν την κανονική κατανομή με μέσο μηδέν και διασπορά  $\sigma^2$ .

Η εκτίμηση των παραμέτρων, καθώς και ο έλεγχος των προϋποθέσεων του μοντέλου ακολουθούν την ίδια ακριβώς διαδικασία που περιγράψαμε στην προηγούμενη παράγραφο.

Για τη συλλογή των τιμών της απόκρισης, έτσι ώστε να εκτιμήσουμε τις παραμέτρους του μοντέλου δεύτερης τάξης χρησιμοποιούμε τους παρακάτω σχεδιασμούς, οι οποίοι ονομάζονται σχεδιασμοί δεύτερης τάξης:

1. Κεντρικοί Σύνθετοι Σχεδιασμοί (Central Composite Design).
2.  $3^k$  Παραγοντικοί Σχεδιασμοί ( $3^k$  Factorial Designs).
3. Σχεδιασμοί DeBaun.
4. Σχεδιασμοί Box-Behnken.
5. Ισο-ακτινικοί Σχεδιασμοί (Equiradial Designs).
6. Κυλινδρικά Περιστρέψιμοι Σχεδιασμοί (Cylindrically rotatable Designs).
7. Ασύμμετρα Περιστρέψιμοι Σχεδιασμοί (Asymmetric Rotatable Designs).
8. Σχεδιασμοί Ομοιόμορφου κελύφους (Uniform Shell Designs).
9. Κορεσμένοι Σχεδιασμοί Box-Draper.
10. Σχεδιασμοί Hoke.
11. Υβριδικοί Σχεδιασμοί (Hybrid Designs).
12. Μικροί Σύνθετοι Σχεδιασμοί (Small Composite Designs).
13. Σχεδιασμοί Koshal.

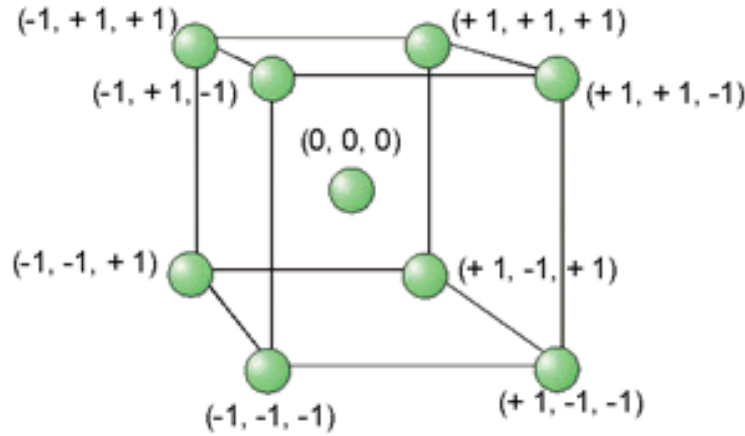
Ορισμένοι από τους πιο πάνω σχεδιασμούς θα αναλυθούν στις παρακάτω παραγράφους. Επιπλέον ως κατάλληλοι σχεδιασμοί για την περιγραφή ενός μοντέλου δευτέρου βαθμού είναι οι σχεδιασμοί υποσυνόλου οι οποίοι θα αναλυθούν στο επόμενο κεφάλαιο.

### 3.3 Ορθογώνιοι σχεδιασμοί δεύτερης τάξης

Ένας ορθογώνιος σχεδιασμός είναι εκείνος για τον οποίο ο αντίστοιχος πίνακας σχεδιασμού  $X'X$  ή ο πίνακας ροπών  $N^{-1}X'X$  είναι διαγώνιος.

Ο πίνακας ροπών  $N^{-1}X'X$  περιέχει ροπές σχεδιασμού τάξης 0, 1, 2, 3 και 4. Μια μόνο ροπή σχεδιασμού τάξης  $\delta$ ,  $\delta \geq 0$  είναι της μορφής  $\frac{1}{N} \sum x_{u_1}^{\delta_1} x_{u_2}^{\delta_2} \dots x_{u_k}^{\delta_k}$ , όπου  $\sum_{i=1}^k \delta_i = \delta$ . Από την κωδικοποίηση της προηγούμενης παραγράφου, οι ροπές πρώτης τάξης  $[i]$ , είναι μηδέν και οι ροπές δεύτερης τάξης  $[ii]$  ικανοποιούν την  $[ii] = 1$  για  $i = 1, 2, \dots, k$ . Υπό την ίδια σύμβαση, οι ποσότητες  $[iii]^2$  και  $[iii]$  είναι αντίστοιχα, μέτρα λοξότητας και κύρτωσης της κατανομής της κατανομής των σημείων του σχεδιασμού που παίρνονται στην κατεύθυνση του άξονα της  $i$ -οστής μεταβλητής εισόδου ( $i = 1, 2, \dots, k$ ). Εάν η κατανομή αυτή είναι συμμετρική γύρω από την αρχή, τότε  $[iii]^2 = 0$ , σε οποιαδήποτε άλλη περίπτωση το μέγεθος του  $[iii]^2$  μετρά την αναχώρηση από τη συμμετρία. Επιπλέον η ροπή  $[iii]$  δίνει πληροφορία για την έκταση των σημείων του σχεδιασμού στην  $i$ -οστή κατεύθυνση, δηλαδή την τάση των σημείων να συγκεντρώνονται στο κέντρο και στα άκρα του  $i$ -οστού ευρούς ή να είναι ομοιόμορφα κατανεμημένα.

Τέλος, για σχεδιασμούς δεύτερης τάξης είναι αδύνατον να επιτευχθεί ένας διαγώνιος πίνακας ροπών. Αυτό συμβαίνει διότι οι ροπές  $[ii]$  και  $[ijj]$  είναι αναγκαστικά θετικές, καθώς αντιπροσωπεύουν αθροίσματα γινομένων των 1 και  $x_i^2$  και των  $x_i^2$  και  $x_j^2$  αντίστοιχα.



Σχήμα 3.1: Ορθογώνιος σχεδιασμός

### 3.4 Περιστρέψιμοι Σχεδιασμοί

Είναι αρκετά σημαντικό για ένα σχεδιασμό δεύτερης τάξης να έχει μια λογικά σταθερή κατανομή της  $nVarY(x)/\sigma^2$ , όπου  $Y(x)$  οι προβλεπόμενες τιμές της  $y(x)$ , σε όλη την έκταση της περιοχής του πειραματισμού. Η σταθερότητα της  $nVarY(x)/\sigma^2$  μας παρέχει την ασφάλεια ότι η ποιότητα της  $Y(x)$  σαν πρόβλεψη μελλοντικών τιμών απόκρισης, θα είναι η ίδια σε όλη την έκταση του πειραματικού σχεδιασμού.

Ένας σχεδιασμός ονομάζεται περιστρέψιμος, όταν η  $nVar(x)/\sigma^2$  έχει την ίδια απόσταση από το κέντρο του σχεδιασμού. Δηλαδή η  $nVar(x)/\sigma^2$  είναι σταθερή σε σφαίρες (βλ. σχήμα 3.3). Η περιστρεψιμότητα είναι αποτέλεσμα του γεγονότος ότι για δύο διαφορετικές θέσεις στο χώρο σχεδιασμού  $x_1$  και  $x_2$  για τις οποίες οι αποστάσεις από το κέντρο του σχεδιασμού είναι ίδιες, οι προβλεπόμενες τιμές  $\hat{y}(x_1)$  και  $\hat{y}(x_2)$  πρέπει να έχουν ίση διασπορά.

Πολλές από τις ιδιότητες των πειραματικών σχεδιασμών σχετίζονται με τις ροπές σχεδιασμού. Παρακάτω δεδομένου του πίνακα σχεδιασμού  $X$ :

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nk} \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

ορίζουμε ορισμένες από τις ροπές σχεδιασμού ως εξής:

$$[i] = \frac{\sum_{u=1}^n x_{ui}}{n}, \quad [ii] = \frac{\sum_{u=1}^n x_{ui}^2}{n}, \quad [ij] = \frac{\sum_{u=1}^n x_{ui}x_{uj}}{n},$$

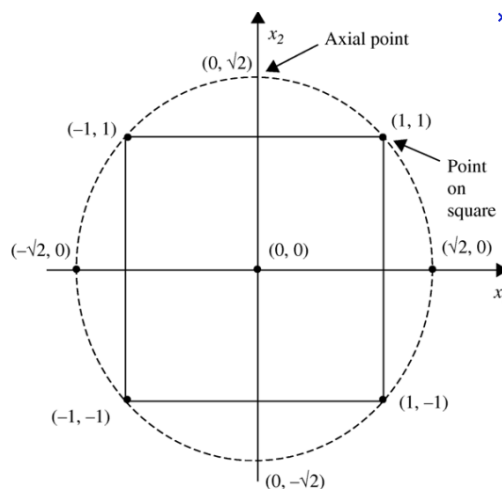
$$[iii] = \frac{\sum_{u=1}^n x_{ui}^3}{n}, \quad [iijj] = \frac{\sum_{u=1}^n x_{ui}^2x_{uj}^2}{n}, \quad [iiii] = \frac{\sum_{u=1}^n x_{ui}^4}{n}.$$

Οι ροπές χαρακτηρίζουν τον τρόπο με τον οποίο είναι κατανεμημένα τα σημεία του σχεδιασμού στον  $\kappa$ -διάστατο χώρο. Επομένως, οι ροπές του σχεδιασμού μας προσδιορίζουν τη γεωμετρία του σχεδιασμού. Ως περιττές ροπές ορίζουμε τις ροπές για τις οποίες τουλάχιστον μια μεταβλητή του σχεδιασμού είναι υφωμένη σε περιττή δύναμη.

Για την περίπτωση ενός μοντέλου πρώτης τάξης ένας σχεδιασμός είναι περιστρέψιμος αν και μόνο αν οι περιττές ροπές μέχρι και δεύτερης τάξης είναι μηδέν και οι καθαρές ροπές δεύτερης τάξης είναι όλες ίσες. Θεωρώντας ότι οι μεταβλητές εισόδου είναι κωδικοποιημένες έχουμε ότι  $[ii] = 1$ . Σαν αποτέλεσμα στην περίπτωση του μοντέλου πρώτης τάξης οι συνθήκες των ροπών σχεδιασμού για ένα περιστρέψιμο σχεδιασμό είναι ισοδύναμες με τις συνθήκες ροπών για ένα σχεδιασμό βέλτιστης διασποράς.

Τέλος, στην περίπτωση του μοντέλου δεύτερης τάξης όλες οι περιττές ροπές τάξης μικρότερης ή ίσης του 4 πρέπει να είναι μηδέν και η καθαρή ροπή τέταρτης τάξης πρέπει να είναι 3 φορές μεγαλύτερη από τη μικτή ροπή τέταρτης τάξης, δηλαδή:

$$\frac{[iiii]}{[iijj]} = 3, \quad i \neq j$$



Σχήμα 3.2: Περιστρέψιμος σχεδιασμός

Στο σχήμα 3.3 παρατηρούμε ότι η ποσότητα  $nVar\hat{Y}(x)/\sigma^2$  παραμένει σταθερή κατά μήκος του κύκλου που σχηματίζεται από τις διακεκομμένες γραμμές και είναι περιγεγραμμένος του ορθογωνίου διανύσματος.

### 3.5 Κεντρικοί Σύνθετοι Σχεδιασμοί

Οι Box και Wilson (1951) εισήγαγαν μια νέα κλάση στους  $3^k$  παραγοντικούς σχεδιασμούς, την κλάση των κεντρικών σύνθετων σχεδιασμών (Central Composite Design, (CCD)). Ένας CCD σχεδιασμός αποτελείται από:

- i) Έναν πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό ή κλάσμα αυτού αναλυτικής τάξης  $V$ , όπου τα επίπεδα των παραγόντων είναι κωδικοποιημένα στις τιμές  $-1, +1$ . Αυτό λέγεται παραγοντικό τμήμα (factorial portion) του σχεδιασμού.
- ii)  $n_C$  κεντρικά σημεία ( $n_C > 1$ ).
- iii) Δύο αξονικά σημεία στον άξονα κάθε μεταβλητής του σχεδιασμού σε απόσταση  $a$  από το κέντρο του σχεδιασμού. Αυτό λέγεται αξονικό τμήμα του σχεδιασμού.

Επομένως, ο σχεδιασμός αποτελείται από  $F$  παραγοντικά σημεία,  $2\kappa$  αξονικά σημεία και  $n_C$  κεντρικά σημεία, για την εκτίμηση  $p = (\kappa + 1)(\kappa + 2)/2$  επιδράσεων. Η ακολουθιακή φύση του σχεδιασμού είναι φανερή. Τα παραγοντικά σημεία αντιπροσωπεύουν ένα σχεδιασμό βέλτιστης διασποράς για ένα μοντέλο πρώτης τάξης. Τα κεντρικά σημεία παρέχουν πληροφόρηση για την ύπαρξη κυρτότητας στο σύστημα. Η ύπαρξη κυρτότητας στο σύστημα δίνει τη δυνατότητα στα αξονικά σημεία να εκτιμήσουν τους δευτεροβάθμιους όρους.

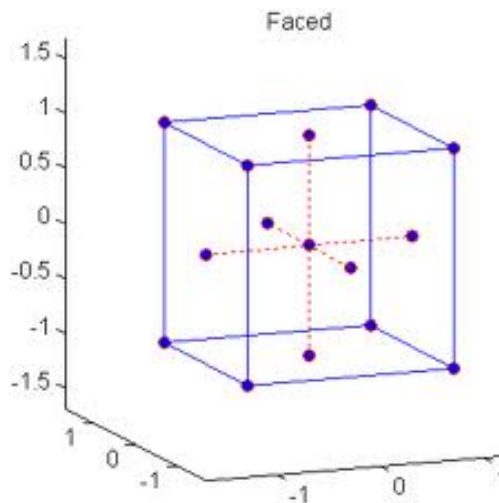
Η εκτίμηση των γραμμικών όρων και των όρων αλληλεπίδρασης δεύτερης τάξης γίνεται κατά κύριο λόγο από το κλάσμα αναλυτικής τάξης  $V$ . Τα παραγοντικά σημεία είναι τα μόνα που συνεισφέρουν στην εκτίμηση των όρων αλληλεπίδρασης. Τα αξονικά σημεία συνεισφέρουν στην εκτίμηση των δευτεροβάθμιων όρων. Με την απουσία των αξονικών σημείων, μόνο το άθροισμα των δευτεροβάθμιων όρων μπορεί να εκτιμηθεί και όχι κάθε ένας ξεχωριστά. Τα αξονικά σημεία δεν συνεισφέρουν στην εκτίμηση των όρων αλληλεπίδρασης. Τέλος, τα κεντρικά σημεία μας δίνουν τη δυνατότητα να εκτιμήσουμε το καθαρό σφάλμα και συνεισφέρουν και αυτά στην εκτίμηση των δευτεροβάθμιων όρων.

Η επιλογή των παραμέτρων  $a$  και  $n_C$  είναι ιδιαίτερος σημαντική. Οι συνθήκες του πειράματος είναι καθοριστικές για την επιλογή του  $a$ , ενώ η επιλογή του  $n_C$  έχει μεγάλη επιρροή στην κατανομή του  $nVar\hat{y}(x)/\sigma^2$  μέσα στην περιοχή του πειράματος. Η επιλογή και των δύο παραμέτρων συνδέεται άμεσα με το ότι ο CCD έχει την ιδιότητα της περιστρεψιμότητας.

Έχοντας κωδικοποιήσει τις μεταβλητές εισόδου είναι εύκολο να δειχθεί ότι για τον CCD οι περιττές ροπές σχεδιασμού μέχρι και τέταρτης τάξης είναι μηδέν. Ένας CCD σχεδιασμός είναι περιστρέψιμος εάν  $[iiii] = 3[iijj]$  για  $i, j = 1, 2, \dots, \kappa$  με  $i \neq j$ . Εάν  $g$  είναι ο παράγοντας κλίμακας που εκλέγεται έτσι ώστε  $[ii] = 1$ , τότε  $g = [N/(F + 2^{a_2})]^{1/2}$ , όπου  $F$  είναι ο αριθμός των παραγοντικών σημείων και  $N = F + 2\kappa + n_C$  είναι ο συνολικός αριθμός σημείων. Έτσι η συνθήκη περιστρεψιμότητας γράφεται:

$$Fg^4 + 2a^4g^4 = 3Fg^4$$





Σχήμα 3.3: Κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός

Ένας CCD είναι ορθογώνιος εάν η μικτή ροπή τετάρτης τάξης  $[iijj] = \lambda_4$  είναι ίση με τη μονάδα. Σε όρους του παράγοντα κλίμακας  $g$ , η  $[iijj]$  γράφεται:

$$[iijj] = \frac{Fg^4}{N} = \frac{FN}{(F + 2a^2)^2}$$

Για  $[iijj] = 1$  έχουμε  $(F + 2a^2)^2 = FN$ . Λύνοντας ως προς  $a$  συμπεραίνουμε ότι ένας CCD μπορεί να γίνει ορθογώνιος εάν εκλέξουμε την τιμή της αξονικής απόστασης  $a$  να είναι ίση με  $a = \left[\frac{FN^{1/2} - F}{2}\right]^{1/2}$ . Απο τη δεύτερη συνθήκη για να είναι ο CCD περιστρέψιμος έχουμε:

$$\frac{[iiii]}{[iijj]} = \frac{F + 2a^2}{F} = 3, i \neq j, a = F^{1/4}$$

Η περιστρεψιμότητα του CCD διατηρείται πάντα αν ικανοποιείται η παραπάνω εξίσωση για το  $a$ , ανεξάρτητα απο τον αριθμό των κεντρικών σημείων. Για τις διάφορες τιμές των παραγόντων του σχεδιασμού υπάρχουν πίνακες, όπως ο παρακάτω, που δίνουν την τιμή του  $a$  έτσι ώστε ο CCD να είναι περιστρέψιμος.

k	F	n	a
2	4	$8 + n_C$	1.414
3	8	$14 + n_C$	1.682
4	16	$24 + n_C$	2.000
5	32	$42 + n_C$	2.378
5(1/2 κλάσμα)	16	$26 + n_C$	2.000
6	64	$76 + n_C$	2.828
6(1/2 κλάσμα)	32	$44 + n_C$	2.378
7	128	$142 + n_C$	3.364
7(1/2 κλάσμα)	64	$78 + n_C$	2.828

Ο CCD είναι ένας αποτελεσματικός σχεδιασμός για ακολουθιακό πειραματισμό και επιτρέπει ένα λογικό ποσό πληροφορίας για τον έλεγχο προσαρμογής, ενώ παράλληλα δεν απαιτεί μεγάλο αριθμό πειραμάτων (runs). Ο σχεδιασμός διευκολύνει μια σφαιρική περιοχή με πέντε επίπεδα για κάθε παράγοντα και  $a = \kappa^{1/2}$ . Επίσης διευκολύνει μια κυβοειδή περιοχή με τρία επίπεδα για κάθε παράγοντα και  $a = 1$  αν και η περιστρεψιμότητα του δεν είναι απαραίτητη ιδιότητα. Στη σφαιρική περίπτωση, ο σχεδιασμός είναι περιστρέψιμος ή σχεδόν περιστρέψιμος και πρέπει να χρησιμοποιηθούν 3-5 κεντρικά σημεία, ενώ στην κυβοειδή περίπτωση 1-2 κεντρικά σημεία είναι αρκετά.

### 3.6 Σχεδιασμοί Box-Behnken (BBD)

Οι Box-Behnken (1960) δημιούργησαν μια οικογένεια σχεδιασμών τριών επιπέδων για την προσαρμογή δευτεροβάθμιων αποκριτικών επιφανειών. Οι οικογένεια των σχεδιασμών αυτών βασίζεται στους ισορροπημένους μη πλήρης σχεδιασμούς κατά μπλόκ (BIBD). Για παράδειγμα, ένας BIBD σχεδιασμός με τρεις αγωγές και τρία μπλόκ δίνεται από:

	Αγωγή 1	Αγωγή 2	Αγωγή 3
Μπλόκ 1	X	X	
Μπλόκ 2	X		X
Μπλόκ 3		X	X

Σχήμα 3.4: BIBD σχεδιασμός

Το ζευγάρι των αγωγών 1 και 2 υπονοεί, σύμφωνα με τη μεθοδολογία των αποκριτικών επιφανειών, ότι οι παράγοντες σχεδιασμού  $A$  και  $B$  εμπλέκονται σε ένα  $2^2$  παραγοντικό σχεδιασμό, ενώ ο τρίτος παράγοντας  $C$  σταθεροποιείται στην τιμή μηδέν. Το ίδιο ισχύει για τα μπλόκ 2 και 3. Έτσι, για  $\kappa = 3$  ο BBD δίνεται από:

$$D = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Για  $\kappa = 3$  ο CCD περιέχει  $14 + n_c$  επαναλήψεις, ενώ ο BBD  $12 + n_c$  επαναλήψεις. Για  $\kappa = 4$  και οι δύο σχεδιασμοί περιέχουν  $24 + n_c$  επαναλήψεις. Για  $\kappa = 5$  ο CCD έχει  $42 + n_c$  επαναλήψεις, ενώ ο BBD  $40 + n_c$ .

Αντίθετα με τις περιπτώσεις για  $\kappa = 3, 4, 5$  η κατασκευή των BBD για  $\kappa > 6$  βασίζεται στους μερικώς ισορροπημένους μη πλήρεις σχεδιασμούς κατά μπλόκ. Σύμφωνα με αυτούς, κάθε αγωγή δεν εμφανίζεται με κάθε άλλη τον ίδιο αριθμό φορών. Άρα σύμφωνα με την κατασκευή των BBD κάθε παράγοντας δεν εμφανίζεται σε έναν  $2^2$  παραγοντικό σχεδιασμό τον ίδιο αριθμό φορών με κάθε άλλο παράγοντα. Για να κατασκευάσουμε έναν BBD με  $\kappa = 6, 7$  πρέπει να χρησιμοποιήσουμε έναν  $2^3$  παραγοντικό σχεδιασμό.

Οι BBD είναι σχεδόν περιστρέψιμοι και στην περίπτωση των  $\kappa = 4, 7$  επιτυγχάνεται η περιστρεψιμότητα. Πράγματι για  $\kappa = 4$  είναι εύκολο να δείξουμε ότι όλες οι περιττές ροπές σχεδιασμού είναι μηδέν, ενώ  $[iiii] = 12/24$  και  $[iijj] = 4/24$  για  $i$  διάφορο του  $j$  και συνεπώς  $[iiii]/[iijj] = 3$ . Τέλος για να αποφεύγεται το ιδιάζον πρέπει να χρησιμοποιούνται 3-5 κεντρικές παρατηρήσεις.

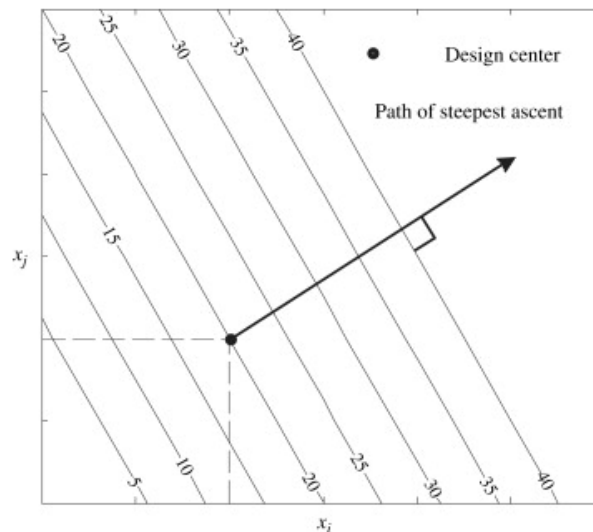
### 3.7 Βελτιστοποίηση της διαδικασίας για την RSM

Στην παράγραφο αυτή παρουσιάζεται μια διαδικασία, αυτή της μεθόδου του μονοπατιού της πιο απότομης ανόδου / καθόδου (Path of the Steepest Ascent/Descent) που χρησιμοποιείται για να βρούμε τις θέσεις των μεταβλητών εισόδου που παράγουν τις επιθυμητές τιμές της απόκρισης. Το σύνολο των τιμών των μεταβλητών εισόδου που δίνουν τις πιο επιθυμητές τιμές απόκρισης λέγεται σύνολο των βέλτιστων συνθηκών.

Η μέθοδος της πιο απότομης ανόδου είναι μια διαδικασία που μας μεταφέρει από την αρχική περιοχή πειραματισμού σε μια περιοχή κοντά στη βέλτιστη τιμή της απόκρισης, όπου μπορούμε να προσαρμόσουμε ένα μοντέλο δευτέρου βαθμού. Περιλαμβάνει τον πειραματικό σχεδιασμό, τη διαδικασία κατασκευής μοντέλου και τον ακολουθιακό πειραματισμό που χρησιμοποιούνται στην έρευνα για μια περιοχή βελτιωμένης απόκρισης και αποτελείται από τα εξής βήματα:

1. Προσαρμόζουμε ένα μοντέλο πρώτης τάξης χρησιμοποιώντας έναν ορθογώνιο σχεδιασμό.
2. Υπολογίζουμε το μονοπάτι της πιο απότομης ανόδου αν ζητείται μεγιστοποίηση της απόκρισης ή αυτό της πιο απότομης καθόδου αν ζητείται ελαχιστοποίηση. Το μονοπάτι της πιο απότομης ανόδου υπολογίζεται έτσι ώστε να αναμένεται η μέγιστη αύξηση της απόκρισης (βλ. σχήμα 3.5).
3. Διεξάγουμε πειραματικές δοκιμές κατά μήκος του μονοπατιού. Δηλαδή εκτελούμε απλές ή επαναλαμβανόμενες δοκιμές και παρατηρούμε την τιμή της απόκρισης. Τα αποτελέσματα θα δείχνουν κανονικά βελτιωμένες τιμές της απόκρισης. Σε κάποια περιοχή κατά μήκος του μονοπατιού η βελτίωση θα παρακμάσει και τελικά θα εξαφανιστεί. Αυτό προκύπτει από τη χειροτέρευση του μοντέλου πρώτης όταν κάποιος εκτρέπεται τόσο μακριά από την αρχική πειραματική περιοχή.
4. Σε κάποια θέση όπου μια προσέγγιση της μέγιστης (ή ελάχιστης) απόκρισης βρίσκεται πάνω στο μονοπάτι, εκλέγεται μια βάση για ένα δεύτερο πείραμα. Ο σχεδιασμός πρέπει να είναι πάλι δεύτερης τάξης. Σε αυτό το σημείο, οι κεντρικές παρατηρήσεις για τον έλεγχο της κυρτότητας και οι βαθμοί ελευθερίας για την έλλειψη τύπου αλληλεπίδρασης είναι αρκετά σημαντικές.

5. Διεξάγεται ένα δεύτερο πείραμα και προσαρμόζεται ένα άλλο μοντέλο πρώτης τάξης όπου και γίνεται έλεγχος για την έλλειψη προσαρμογής. Αν η έλλειψη προσαρμογής δεν είναι σημαντική, υπολογίζεται ένα δεύτερο μονοπάτι βασισμένο στο νέο μοντέλο και διεξάγονται απλά ή επαναλαμβανόμενα πειράματα κατα μήκος του δεύτερου μονοπατιού. Είναι αρκετά πιθανό ότι η βελτίωση δεν θα είναι τόσο ισχυρή όσο αυτή του πρώτου μονοπατιού.



Σχήμα 3.5: Μονοπάτι της πιο απότομης ανόδου

Η ακολουθία των δοκιμών συνεχίζεται έως ότου γίνει προφανές ότι ελάχιστη ή καμία πρόσθετη αύξηση της απόκρισης δεν μπορεί να επιτευχθεί από τη μέθοδο. Τότε έχει κάποιος τη βάση για την διεξαγωγή ενός πιο επεξεργασμένου πειράματος και μιας πιο περίπλοκης διαδικασίας βελτιστοποίησης.

Για να περιγράψουμε τη μέθοδο της πιο απότομης ανόδου ξεκινάμε υποθέτοντας ότι η πραγματική αποκριτική επιφάνεια μπορεί να προσεγγισθεί τοπικά από την εξίσωση ενός υπερεπιπέδου:

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^{\kappa} \beta_i x_i \quad (3.19)$$

Δεδομένα συλλέγονται από τα σημεία ενός σχεδιασμού πρώτης τάξης και χρησιμοποιούνται για να υπολογίσουμε τις εκτιμήσεις των συντελεστών ώστε να αποκτήσουμε το προσαρμοσμένο μοντέλο πρώτης τάξης:

$$Y(x) = b_0 + \sum_{i=1}^{\kappa} b_i x_i \quad (3.20)$$

Το επόμενο βήμα είναι να κινηθούμε μακριά από το κέντρο του σχεδιασμού, μια απόσταση  $r$  μονάδων, στην κατεύθυνση της μέγιστης αύξησης της της απόκρισης. Εκλέγοντας το κέντρο του σχεδιασμού σε κωδικοποιημένες μεταβλητές  $x_1, x_2, \dots, x_{\kappa}$  να δηλώνεται με  $(0, 0, \dots, 0)$ ,

τότε μια κίνηση  $r$  μονάδων μακριά από το κέντρο είναι ισοδύναμη με το να βρούμε τις τιμές των  $(x_1, x_2, \dots, x_\kappa)$  που μεγιστοποιούν το

$$b_0 + \sum_{i=1}^{\kappa} b_i x_i \quad (3.21)$$

υποκειμένο στον περιορισμό

$$\sum_{i=1}^{\kappa} x_i^2 = r^2 \quad (3.22)$$

Η μεγιστοποίηση της συνάρτησης απόκρισης εκτελείται χρησιμοποιώντας πολλαπλασιαστές Lagrange. Θέτουμε:

$$Q(x_1, \dots, x_\kappa) = b_0 + \sum_{i=1}^{\kappa} b_i x_i - \mu \sum_{i=1}^{\kappa} (x_i^2 - r^2), \quad (3.23)$$

όπου  $\mu$  ο πολλαπλασιαστής lagrange. Για να μεγιστοποιήσουμε την  $\hat{y}(x)$  που υπόκειται στον παραπάνω περιορισμό θέτουμε ίσες με το μηδέν τις μερικές παραγώγους της  $Q$  ως προς  $x_i, i = 1, 2, \dots, \kappa$  και ως προς  $\mu$ . Επομένως έχουμε:

$$\frac{d}{dx_i} Q(x_i) = b_i - 2\mu x_i = 0, i = 1, \dots, \kappa \quad (3.24)$$

$$\frac{d}{d\mu} Qx = -\sum_{i=1}^{\kappa} x_i^2 + r^2 \quad (3.25)$$

$$x_i = \frac{b_i}{2\mu}, i = 1, \dots, \kappa, \quad (3.26)$$

όπου η τιμή του  $\mu$  μένει να καθοριστεί. Η σταθερά  $1/2\mu$  θεωρείται ως μια σταθερά αναλογικότητας, δηλαδή οι συντεταγμένες δίνονται από:

$$x_1 = qb_1, x_2 = qb_2, \dots, x_\kappa = qb_\kappa$$

όπου για άνοδο η σταθερά  $q$  είναι θετική και για κάθοδο αρνητική. Αυτό συνεπάγεται ότι η εκλογή του  $q$ , που σχετίζεται με το  $\mu$ , καθορίζει την απόσταση από το κέντρο του σχεδιασμού όπου και θα βρίσκεται το συγκεκριμένο σημείο που προκύπτει κάθε φορά. Αποτέλεσμα του παραπάνω είναι η σταθερά  $q$  να καθορίζεται από τον πειραματιστή.

Για να υπολογίσουμε την τιμή του  $x_i$  πρέπει πρώτα να έχουμε την τιμή του  $\mu$ . Μια μέθοδος είναι να απομονώσουμε μια από τις μεταβλητές  $\xi_j$ , η οποία αν η τιμή της μεταβαλλόταν κατά  $\Delta_j$ , θα καταλήγαμε σε μια αυξήση της τιμής της απόκρισης. Βασιζόμενοι στην αυξητική μεταβολή  $\Delta_j$  υπολογίζουμε το  $x_j = \Delta_j/s_j$ , όπου  $s_j$  είναι ο παράγοντας της κλίμακας που θεωρούμε στον παρονομαστή του:

$$x_j = \frac{\xi_j - \bar{\xi}_j}{s_j}.$$

Αντικαθιστώντας την τιμή του  $\Delta_j/s_j$  στη λύση των  $x_j$  η τιμή του  $\mu$  γίνεται  $\mu = b_j/2x_j = b_j s_j/2\Delta_j$ . Αυτή η τιμή του  $\mu$  παράγει τις θέσεις των υπολοίπων τιμών των  $x_i$  και οι τιμές

των  $x_i$  που προκύπτουν, καθορίζουν το πρώτο σημείο πάνω στο μονοπάτι της πιό απότομης ανόδου.

Όταν αρχίζουν να επικρατούν όροι δεύτερης τάξης που περιγράφουν αλληλεπίδραση και κυρτότητα του μοντέλου, τότε η συνέχιση του πειράματος μέσω της διαδικασίας της πιό απότομης ανόδου καθίσταται αναποτελεσματική. Είναι πιθανό ότι όροι δεύτερης τάξης μπορεί να είναι στατιστικά σημαντικοί, παρόλα αυτά όμως η προσέγγιση πρώτης τάξης επιτρέπει μια επιτυχή πειραματική στρατηγική. Στατιστική σημαντικότητα σημαίνει ότι οι επιδράσεις είναι πραγματικές σε σύγκριση με το πειραματικό σφάλμα. Οι επιδράσεις δεύτερης τάξης μπορεί να είναι μικρές σε μέγεθος όταν συγκρίνονται με εκείνες τις πρώτης τάξης. Σαν αποτέλεσμα θα υπάρχουν καταστάσεις όπου θα πρέπει κανείς να υπολογίσει το μονοπάτι και να εκτελέσει πειραματικές δοκιμές, παρότι κάποιες επιδράσεις δεύτερης τάξης είναι σημαντικές.

Όταν ο πειραματιστής είναι σχετικά κοντά στο βέλτιστο, απαιτείται ένα μοντέλο δεύτερης τάξης διότι ενσωματώνει κυρτότητα για να προσεγγίσουμε την απόκριση. Μια σχεδόν στάσιμη περιοχή ορίζεται σαν μια περιοχή όπου οι κλίσεις της επιφάνειας είναι μικρές συγκρινόμενες με την εκτίμηση του πειραματικού σφάλματος. Το στάσιμο σημείο (stationary point) μια σχεδόν στάσιμης περιοχής είναι το σημείο στο οποίο η κλίση της αποκριτικής επιφάνειας είναι μηδέν όταν παίρνεται προς όλες τις κατευθύνσεις.

Για να προσδιορίσουμε τις συντεταγμένες του στάσιμου σημείου γράφουμε το προσαρμοσμένο μοντέλο δεύτερης τάξης με  $\kappa$  μεταβλητές ύπο μορφή πινάκων σαν:

$$\hat{y}(x) = b_0 + x^T b + x^T B x \quad (3.27)$$

Τα στοιχεία του  $b$  είναι οι εκτιμώμενοι συντελεστές των όρων πρώτης τάξης, ενώ αυτά του  $B$  οι εκτιμώμενοι συντελεστές των όρων δεύτερης τάξης.

Στη συνέχεια παίρνουμε τις μερικές παραγώγους του προσαρμοσμένου μοντέλου  $\hat{y}(x)$  ως προς  $x_i$ , τις εξισώνουμε με το μηδέν και λύνουμε ως προς  $x_i$ . Οι λύσεις είναι οι συντεταγμένες του στάσιμου σημείου  $x_0$ . Είναι εύκολο να δείξουμε ότι ισχύει:

$$\frac{\partial}{\partial x} \hat{y}(x) = b + 2Bx \quad (3.28)$$

και τελικά, αφού εξισώσουμε με το μηδέν, έχουμε:

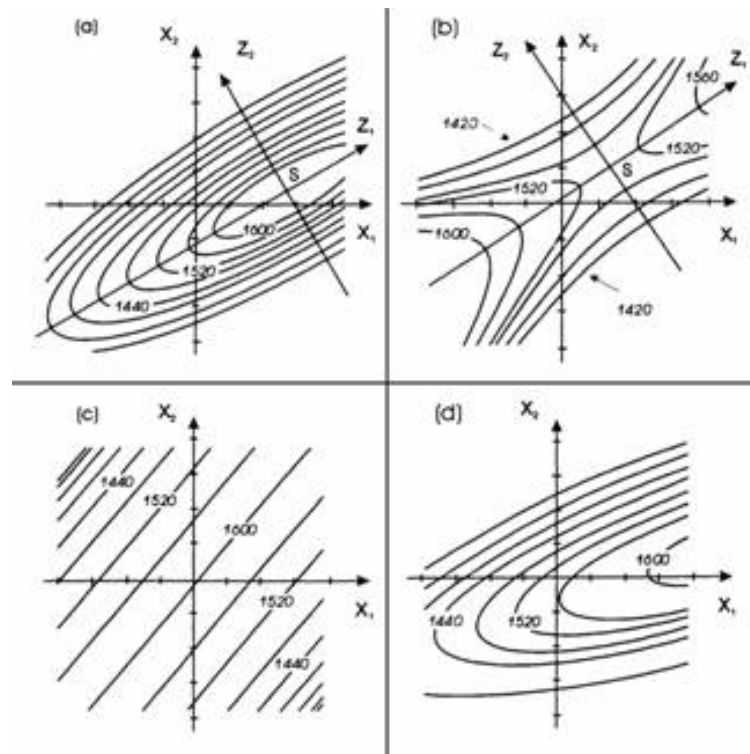
$$x_0 = -\frac{1}{2} B^{-1} b \quad (3.29)$$

Το στάσιμο σημείο μπορεί να είναι σημείο μέγιστης απόκρισης, ελάχιστης απόκρισης ή ένα σαγματικό σημείο (saddle point).

Όταν βρούμε το στάσιμο σημείο, είναι συνήθως αναγκαίο να χαρακτηρίσουμε την αποκριτική επιφάνεια. Δηλαδή να προσδιορίσουμε αν το στάσιμο σημείο είναι σημείο μέγιστης ή ελάχιστης απόκρισης ή σαγματικό σημείο.

Ο πιό άμεσος τρόπος να το κάνουμε είναι να εξετάσουμε ένα διάγραμμα περιγράμματος του προσαρμοσμένου μοντέλου. Αν υπάρχουν δύο ή τρεις μεταβλητές εισόδου η κατασκευή και η ερμηνεία του διαγράμματος είναι εύκολη. Εντούτις μια περισσότερο τυπική ανάλυση είναι χρήση.

Καταρχήν μετασχηματίζουμε το μοντέλο σε ένα νέο σύστημα συντεταγμένων με αρχή το στάσιμο σημείο και τότε περιστρέφουμε τους άξονες αυτού του συστήματος έως ότου να



Σχήμα 3.6: (a) σημείο ελάχιστης απόκρισης, (b) σαγματικό σημείο, (c) σημείο κορυφής, (d) σημείο μέγιστης απόκρισης

είναι παράλληλοι με τους κύριους άξονες της προσαρμοσμένης αποκριτικής επιφάνειας. Μπορούμε να δείξουμε ότι αυτό έχει ως αποτέλεσμα το προσαρμοσμένο μοντέλο:

$$\hat{y} = y_0 + \sum_{i=1}^{\kappa} \lambda_i w_i, \quad (3.30)$$

με  $\mathbf{W} = (w_1, w_2, \dots, w_{\kappa})^T$  και  $\mathbf{W} = \mathbf{M}^T \mathbf{z}$ , όπου  $\mathbf{M}$  είναι ένας  $\kappa \times \kappa$  ορθογώνιος πίνακας του οποίου οι στήλες είναι τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{z}$  τα διανύσματα που χρησιμοποιούμε για τη μεταφορά από το κέντρο του σχεδιασμού στο στάσιμο σημείο και  $\{\lambda_i, i = 1, \dots, \kappa\}$  οι ιδιοτιμές του πίνακα  $\mathbf{B}$ . Η παραπάνω εξόσωση ονομάζεται κανονική μορφή του μοντέλου δεύτερης τάξης.

Αν τα  $\{\lambda_i\}$  είναι όλα αρνητικά ή όλα θετικά, τότε το στάσιμο σημείο είναι σημείο μέγιστης απόκρισης ή ελάχιστης απόκρισης αντίστοιχα. Επιπλέον, αν κάποια  $\lambda_i$  είναι θετικά και κάποια αρνητικά τότε το στάσιμο σημείο είναι σαγματικό σημείο. Τέλος, η επιφάνεια απόκρισης είναι πιο απότομη στην κατεύθυνση του  $w_i$  αν το αντίστοιχο  $\lambda_i$  είναι μεγαλύτερα από τα άλλα κατά απόλυτη τιμή.

## Κεφάλαιο 4

# Σχεδιασμοί Υποσυνόλου (Subset Designs)

**Ορισμός 4.0.1.** Παρουσιάζουμε μία πλούσια ομάδα σχεδιασμών για παράγοντες με τρεις ισαπέχουσες στάθμες. Οι στάθμες των παραγόντων θα συμβολίζονται ως  $-1$  (χαμηλή),  $0$  (μεσαία) και  $1$  (υψηλή). Οι σχεδιασμοί αυτοί είναι κατασκευασμένοι από υποσύνολα του  $3^q$  παραγοντικού σχεδιασμού. Έστω  $S_r$ ,  $r = 1, \dots, q$ , το υποσύνολο σημείων του  $3^q$  παραγοντικού σχεδιασμού τα οποία ανήκουν σε μια υπερσφαίρα ακτίνας  $r^{\frac{1}{2}}$ , με κέντρο το κεντρικό υποσύνολο,  $S_0$ . Επιπλέον, το υποσύνολο  $S_r$  περιλαμβάνει όλα τα σημεία τα οποία έχουν  $r$  παράγοντες στο  $\pm 1$  καθώς και τους υπόλοιπους  $q - r$  παράγοντες στο  $0$ . Η μελέτη των σχεδιασμών βασίζεται σε ένα συνδυασμό των υποσυνόλων  $S_r$ . Ένας σχεδιασμός που αποτελείται από συνδυασμούς υποσυνόλων ορίζεται ως  $c_{r1}S_{r1} + c_{r2}S_{r2} + \dots$ , όπου  $c_r S_r$  δηλώνει ότι τα σημεία στο υποσύνολο  $S_r$  επαναλαμβάνονται  $c_r$  φορές.

Η ομάδα αυτών των σχεδιασμών έχει όλες τις προϋποθέσεις ώστε να επιτρέψει την εφαρμογή μοντέλου δεύτερης τάξης. Με σκοπό να υλοποιηθεί η εφαρμογή του μοντέλου αυτού αποδοτικά θα πρέπει να ικανοποιούνται τα εξής:

- $c_r > 0$  για δύο τουλάχιστον  $r$  και  $c_r > 0$  για τουλάχιστον ένα  $r$  με  $1 \leq r \leq q - 1$ , έτσι ώστε να μπορούν να εκτιμηθούν όλες οι τετραγωνικές παράμετροι.
- $c_r > 0$  για ένα τουλάχιστον  $r \geq 2$ , έτσι ώστε να μπορούν να εκτιμηθούν όλες οι αλληλεπιδράσεις.

Ο σχεδιασμός ο οποίος ικανοποιεί τις πιο πάνω προϋποθέσεις ορίζεται ως σχεδιασμός υποσυνόλων.

Το υποσύνολο  $S_r$  περιλαμβάνει  $\binom{q}{r} 2^r$  σημεία, τα οποία συνιστούν έναν  $2^r$  παραγοντικό σχεδιασμό στις στάθμες  $-1$  και  $1$  για κάθε συνδυασμό των  $r$  παραγόντων, με τους υπόλοιπους  $q - r$  παράγοντες να είναι στο μηδέν. Για παράδειγμα, ο κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός με  $a = 1$  είναι σχεδιασμός υποσυνόλων  $S_q + S_1 + c_0 S_0$ .



#### 4.0.1 Ιδιότητες των σχεδιασμών υποσυνόλων

Οι σχεδιασμοί υποσυνόλου έχουν ορισμένες ιδιότητες, οι οποίες τους καθιστούν αποδοτικούς σε αρκετά πειράματα. Το πρώτο στάδιο της ανάλυσης δεδομένων σε ένα πείραμα αποκριτικής επιφάνειας με  $q$  παράγοντες, περιλαμβάνει την προσαρμογή, καθώς και την έλλειψη προσαρμογής του δευτέρου βαθμού πολυωνυμικού μοντέλου,

$$\mu = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^q \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^{q-1} \sum_{j=i+1}^q \beta_{ij} x_i x_j, \quad (4.1)$$

όπου  $x_1, \dots, x_q$  αντιπροσωπεύουν τις στάθμες των παραγόντων,  $\mu$  είναι η αναμενόμενη απόκριση η οποία δίνεται από το  $x$ ,  $x' = [x_1, \dots, x_q]$ , και οι αποκρίσεις από διαφορετικές επαναλήψεις υποθέτουμε ότι είναι ανεξάρτητες με σταθερή διακύμανση  $\sigma^2$ . Εάν υπάρχει μεγάλη έλλειψη προσαρμογής του μοντέλου μας, τότε είναι αναγκαίο να προσθέσουμε όρους μίας ή δύο τάξεων υψηλότερους στο μοντέλο μας, ώστε να εξηγήσουμε την έλλειψη της προσαρμογής. Αντίθετα, αν δεν υπάρχει έλλειψη προσαρμογής του πολυωνυμικού μοντέλου δευτέρου βαθμού, είναι κοινός αποδεκτό να προσπαθήσουμε να απλοποιήσουμε το μοντέλο, απορρίπτοντας τους τετραγωνικούς όρους, καθώς και τους όρους αλληλεπίδρασης οι οποίοι φαίνεται να μην έχουν σημαντική επιρροή στην απόκριση. Καθώς η ανάλυση των δεδομένων προϋποθέτει την εφαρμογή αρκετών μοντέλων και τον έλεγχο της έλλειψης προσαρμογής, ένας D- ή A-βέλτιστος σχεδιασμός δεν είναι κατάλληλος. Η ακαταλληλότητα του βέλτιστου σχεδιασμού οφείλεται στο γεγονός ότι προκειμένου να προσαρμοστεί η προσέγγιση του βέλτιστου σχεδιασμού, θα ήταν αναγκαίο να αναζητήσει κανείς σχεδιασμούς οι οποίοι προσφέρουν ικανοποιητικούς βαθμούς ελευθερίας για το καθαρό σφάλμα και την έλλειψη προσαρμογής, και έπειτα να εκτιμήσει το D ή A κριτήριο. Η όλη αυτή διαδικασία και ο προσδιορισμός του κριτηρίου είναι υπολογιστικά ανέφικτα. Είναι λοιπόν προτιμότερο να υιοθετήσουμε τους εν λόγω σχεδιασμούς εξαιτίας των ιδιοτήτων που προαναφέραμε.

Προσαρμόζοντας το μοντέλο δευτέρου βαθμού το οποίο δίνεται από την εξίσωση (2.2) στα δεδομένα ενός σχεδιασμού υποσυνόλων, μπορούμε να διαχωρίσουμε τον πίνακα σχεδιασμού  $X$  σε τμήματα, ένα για κάθε ένα από τα  $s$  υποσύνολα,

$$X = \begin{pmatrix} X_1 \\ \vdots \\ X_s \end{pmatrix}.$$

Τότε έχουμε:

$$X'X = X_1'X_1 + \dots + X_s'X_s, \quad (4.2)$$

και στον  $X_i'X_i$  τα μοναδικά μη μηδενικά εκτός διαγωνίου στοιχεία είναι αυτά τα οποία αντιστοιχούν στις τετραγωνικές επιδράσεις, καθώς και στα σημεία τομής των υποσυνόλων. Για το λόγο αυτό, όλοι οι παράμετροι μπορούν να εκτιμηθούν ορθογώνια, εκτός των τετραγωνικών παραμέτρων  $\beta_{ii}$ , οι εκτιμήτριες των οποίων συσχετίζονται μεταξύ τους και με το σημείο τομής. Αυτό υποδηλώνει πως οι σχεδιασμοί αυτοί είναι κατάλληλοι για την επιλογή μοντέλων, ιδιαίτερα εάν η μη ορθογωνιότητα ανάμεσα στις τετραγωνικές επιδράσεις ελαχιστοποιείται.

Συνήθως οι παράγοντες θεωρούνται ισοδύναμης σημαντικότητας πριν από την εκτέλεση ενός πειράματος, αν και οι επιδράσεις μπορεί να μην είναι ισοδύναμες. Για παράδειγμα, οι

γραμμικές επιδράσεις μπορούν να θεωρηθούν σημαντικότερες απο τις τετραγωνικές επιδράσεις, οι οποίες επιδράσεις με τη σειρά τους μπορούν να θεωρηθούν πιο σημαντικές απο αυτές των αλληλεπιδράσεων. Κάτω απο αυτές τις προϋποθέσεις η παρακάτω ιδιότητα είναι ιδιαίτερος χρήσιμη: ένας σχεδιασμός λέγεται παραγοντικά ισορροπημένος για ένα συγκεκριμένο μοντέλο εάν οι διακυμάνσεις των εκτιμητριών των παραμέτρων είναι αμετάβλητες στις μεταθέσεις των παραγόντων. Για το μοντέλο δευτέρου βαθμού η παραγοντική ισορροπία σημαίνει ότι όλες οι γραμμικές επιδράσεις έχουν την ίδια διακύμανση, όλες οι τετραγωνικές επιδράσεις έχουν την ίδια διακύμανση και οι επιδράσεις των αλληλεπιδράσεων έχουν επίσης την ίδια διακύμανση. Επομένως, γνωρίζοντας ότι οι σχεδιασμοί υποσυνόλων δεν επηρεάζονται απο τις διακυμάνσεις των παραγόντων, παρουσιάζουν παραγοντική ισορροπία.

Όταν καθορίσουμε το πόσο καλός είναι ένας σχεδιασμός, με βάση την προσαρμογή υπομοντέλων, τα οποία περιγράφονται απο πολυώνυμα δευτέρου βαθμού, τότε οι ιδιότητες της προβολής του σχεδιασμού είναι αρκετά σημαντικές. Οι Box και Hunter (1961) έδειξαν ότι οποιοσδήποτε δευτέρου βαθμού παραγοντικός σχεδιασμός ή μη ελλειπής κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός αναλυτικής τάξης-III ή υψηλότερης, προβάλλεται σ'έναν αριθμό επαναλήψεων πλήρους  $2^2$  παραγοντικού σχεδιασμού. Άμεση συνέπεια του παραπάνω είναι ότι εάν ένας σχεδιασμός υποσυνόλων προβληθεί σ'ένα χώρο δύο παραγόντων, κάθε σημείο της μορφής  $(\pm 1, \pm 1)$  εμφανίζεται  $r_2$  φορές, κάθε σημείο της μορφής  $(\pm 1, 0)$  ή  $(0, \pm 1)$  εμφανίζεται  $r_1$  φορές και το σημείο  $(0, 0)$  εμφανίζεται  $r_0$  φορές. Κάθε παράγοντας έχει  $s_1 = 2r_2 + r_1$  επαναλήψεις σε κάθε σημείο  $\pm 1$  και  $s_0 = 2r_1 + r_0$  επαναλήψεις στο μηδέν.

Για την προσαρμογή του μοντέλου δευτέρου βαθμού για ένα σχεδιασμό υποσυνόλων, οι διακυμάνσεις των εκτιμητριών των παραμέτρων εκφράζονται ως εξής:

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{n} + \frac{n - 2s_1}{2s_1 n} \quad (4.3)$$

$$V(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{4}{n} + \frac{(\sqrt{r_0} - 2\sqrt{r_2})^2}{2r_1 n} + \frac{(\sqrt{r_0 r_2} - r_1)^2 \{4q(\sqrt{r_0 r_2} + r_1) - n\}}{r_1 n \{r_1 n + 2q(r_0 r_2 - r_1^2)\}} \quad (4.4)$$

$$V(\hat{\beta}_{ij}) = \frac{1}{n} + \frac{n - 4r_2}{4r_2 n} \quad (4.5)$$

Στις παραπάνω σχέσεις των διακυμάνσεων, ο πρώτος όρος στο δεξί μέλος των εξισώσεων είναι η μικρότερη δυνατή τιμή που μπορεί να πάρει η διακύμανση και αυτό επιτυγχάνεται στις γραμμικές επιδράσεις, όταν για την προβολή ενός παράγοντα, μισές απο τις παρατηρήσεις βρίσκονται στο  $-1$  και οι υπόλοιπες στο  $1$ , στις τετραγωνικές επιδράσεις, όταν για την προβολή ενός παράγοντα, μισές απο τις παρατηρήσεις βρίσκονται στο  $0$  και οι υπόλοιπες ισομοιράζονται στο  $-1$  και στο  $1$ . Τέλος, η μικρότερη δυνατή διακύμανση για μια επίδραση αλληλεπίδρασης επιτυγχάνεται όταν για την προβολή δύο παραγόντων, το ένα-τέταρτο των παρατηρήσεων βρίσκεται σε κάθε σημείο  $(\pm 1, \pm 1)$ . Αντιλαμβανόμαστε ότι ο ταυτόχρονος συνδυασμός των παραπάνω είναι ανέφικτος. Ο δεύτερος όρος σε κάθε έκφραση των εξισώσεων διακύμανσης αντιπροσωπεύει την αύξηση της διακύμανσης εξαιτίας της ανισορροπίας στις στάθμες των παραγόντων. Ο τρίτος όρος στη διακύμανση της τετραγωνικής επίδρασης αντιπροσωπεύει την αύξηση στη διακύμανση εξαιτίας της μη ύπαρξης ορθογωνιότητας μεταξύ των τετραγωνικών επιδράσεων. Αυτό σημαίνει πως αν ο σχεδιασμός είναι ορθογώνιος ο όρος αυτός είναι μηδέν. Όμοια εάν  $r_0 = 4r_2$ , κάτι που δηλώνει ότι ο αριθμός των σημείων που βρίσκονται στο μηδέν είναι τετραπλάσιος απο τον αριθμό των σημείων που βρίσκονται στο  $\pm 1$ , τότε ο δεύτερος όρος είναι μηδέν.

Οι παραπάνω τύποι μας δίνουν την δυνατότητα να επιλέξουμε ένα σχεδιασμό υποσυνόλων με όλες τις καλές ιδιότητες που εμείς επιθυμούμε. Εν γένει είναι πρόπον να επιλέγουμε ένα σχεδιασμό ο οποίος μας παρέχει:

- για τις προβολές ενός παράγοντα, έναν καλό συμβιβασμό μεταξύ της μη ύπαρξης επαναλήψεων και των διπλών επαναλήψεων σημείων στο μηδέν σε σχέση με εκείνους στα σημεία  $\pm 1$ .
- για τις προβολές δύο παραγόντων, όσο το δυνατόν υψηλότερο αριθμό επαναλήψεων στα σημεία  $(\pm 1, \pm 1)$ .
- όσο το δυνατόν μικρότερη αύξηση της διακύμανσης, η οποία προκύπτει εξαιτίας της μη ύπαρξης ορθογωνιότητας.

Για οποιουδήποτε μεγέθους πείραμα, ο κάθε όρος ξεχωριστά μπορεί να υπολογιστεί για κάθε πιθανό σχεδιασμό υποσυνόλων. Διαχωρίζοντας την αύξηση που προκαλείται στη διακύμανση από την απουσία ορθογωνιότητας, η οποία είναι αποτέλεσμα της αύξησης που προκαλείται εξαιτίας της μη ύπαρξης ισορροπίας, καθώς όσο μεγαλύτερη είναι η απουσία της ορθογωνιότητας τόσο μεγαλύτερη είναι η δυσκολία για την επιλογή της μεταβλητής, πρόβλημα το οποίο θα πάψει να υπάρχει όταν απαλείψουμε τις τετραγωνικές παραμέτρους. Επίσης, η τελική επιλογή του σχεδιασμού θα επηρεαστεί και από άλλες εκτιμήσεις, όπως για παράδειγμα ο αριθμός των σημείων επανάληψης για την εκτίμηση του καθαρού σφάλματος. Μια εύλογη στρατηγική θα ήταν να χρησιμοποιήσουμε το σχεδιασμό υποσυνόλων ο οποίος ικανοποιεί ένα από τα κριτήρια βελτιστοποίησης, στρατηγική η οποία ικανοποιεί με τον καλύτερο δυνατό τρόπο τις προϋποθέσεις που αναφέραμε πιο πάνω. Η χρήση του πιο πάνω σχεδιασμού θα μπορούσε να γίνει διαδραστικά αναγνωρίζοντας όλους τους σχεδιασμούς υποσυνόλων οι οποίοι είναι σχεδόν A- ή D-βέλτιστοι και επιλέγοντας εκείνον ο οποίος ικανοποιεί τους όρους των άλλων ιδιοτήτων.

#### 4.0.2 Επιλογή των σχεδιασμών

**Παράδειγμα 4.0.1.** Σε πείραμα το οποίο έγινε για να μελετηθεί η λειτουργία ενός μίξερ, το οποίο χρησιμοποιήθηκε για να αναδεύσει τη ζύμη, χρησιμοποιήθηκαν συνδυασμοί από ταχύτητες στροφών και θερμοκρασίες για την ανάδευση των υλικών της ζύμης πριν από το ψήσιμο. Το αποτέλεσμα ήταν η ψημένη ζύμη να παρουσιάσει εκτεταμένες διακυμάνσεις, κάτι που οφείλεται σε μεγάλο βαθμό στις διακυμάνσεις λειτουργίας του μίξερ οι οποίες τέθηκαν από τους πειραματιστές. Στην πρώτη περίπτωση αποφασίστηκε να μελετηθεί η επίδραση στην ποικιλία της ψημένης ζύμης εξαιτίας της ροής των υλικών στο μίξερ, της αρχικής υγρασίας του περιεχομένου καθώς και της ταχύτητας ανάδευσης των υλικών μέσα στο μίξερ. Μια πρωταρχική προσέγγιση αποκριτικής επιφάνειας ξεκινά με έναν πλήρη  $2^2$  παραγοντικό σχεδιασμό με επιπλέον τέσσερα κεντρικά σημεία. Σύντομα θα παρατηρήσουμε ότι η προσέγγιση αυτή είναι ελλειπής εξαιτίας της αναμενόμενης διακύμανσης που θα παρατηρείται από επανάληψη σε επανάληψη. Επιπλέον, ένας κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός 18 επαναλήψεων θεωρείται ανεπαρκής για να δώσει αξιόπιστα αποτελέσματα για την κατασκευή ενός δευτέρου βαθμού μοντέλο. Ο κύριος περιορισμός στο μέγεθος του πειράματος ήταν η έλλειψη χρόνου του πειραματιστή, με αποτέλεσμα να επιλεγεί ένας πειραματισμός 28 επαναλήψεων.

Εξετάζοντας την επιλογή ενός πειράματος τριών παραγόντων σε 28 επαναλήψεις, ο πίνακας 1 δείχνει όλα τα διαθέσιμα υποσύνολα και ο πίνακας 2 δείχνει τα πιθανά υποσύνολα σχεδιασμού, τους βαθμούς ελευθερίας για την εκτίμηση του καθαρού σφάλματος, τις προβολές σε έναν και δύο παράγοντες και την κλιμακωτή αύξηση της διακύμανσης. Είναι ευδιάκριτο από τον πίνακα 1 ότι προβάλλοντας τα υποσύνολα σε δύο παράγοντες: από το  $S_3$  κάθε σημείο της μορφής  $(\pm 1, \pm 1)$  εμφανίζεται δύο φορές, από το  $S_2$  κάθε σημείο της μορφής  $(\pm 1, \pm 1)$  εμφανίζεται μια φορά και κάθε σημείο της μορφής  $(\pm 1, 0)$  ή  $(0, \pm 1)$  εμφανίζεται δύο φορές, από το  $S_1$  κάθε σημείο της μορφής  $(\pm 1, 0)$  ή  $(0, \pm 1)$  εμφανίζεται μια φορά και το σημείο  $(0, 0)$  εμφανίζεται δύο φορές. Επιπλέον για τον υπολογισμό των προβολών δύο παραγόντων  $r_2, r_1$  και  $r_0$  για οποιοδήποτε σχεδιασμό προσθέτουμε τους συντελεστές ανάλογα για τα αντίστοιχα υποσύνολα. Για παράδειγμα  $2S_3 + S_2$ ,  $r_2 = 2 \times 2 + 1 = 5$ ,  $r_1 = 2 \times 0 + 2 \times 1 = 2$ , και  $r_0 = 0$ . Όμοια υπολογίζονται οι προβολές ενός παράγοντα. Η κλιμακωτή αύξηση της διακύμανσης είναι ένα μέτρο σύγκρισης της απώλειας πληροφορίας για κάθε παράμετρο που σχετίζεται με τον σχεδιασμό, ο οποίος είναι βέλτιστος για την συγκεκριμένη παράμετρο. Η αύξηση της διακύμανσης εξαιτίας της μη ύπαρξης ισορροπίας είναι ένα συνυπάρχον χαρακτηριστικό του σχεδιασμού και παραμένει ακόμα και αν διώξουμε όρους από το μοντέλο μας. Η αύξηση της διακύμανσης εξαιτίας της απουσίας της ορθογωνιότητας εμφανίζεται μόνο για τα πλήρη μοντέλα και μειώνεται εάν οι άλλες τετραγωνικές παράμετροι απαλειφούν από το μοντέλο μας. Ο πίνακας 2 μας δείχνει ότι κάποια μοντέλα είναι υποδιαίστερα κάποιων άλλων, για παράδειγμα το  $S_3 + 2S_1 + 2S_0$  είναι υποδιαίστερο του  $S_3 + 3S_1 + 2S_0$ , καθώς παρουσιάζει μεγαλύτερη απώλεια πληροφορίας κρίνοντας από τις τιμές των τεσσάρων τελευταίων στηλών. Ο σχεδιασμός, ο οποίος εν τέλει θα επιλεγεί θα είναι προϊόν μελέτης των πλεονεκτημάτων και των μειονεκτημάτων των καλύτερων σχεδιασμών, καθώς και των απαιτήσεων που προκύπτουν από την εκάστοτε φύση του πειράματος. Η επιλογή του  $S_3 + S_2 + S_1 + 2S_0$  φαίνεται να είναι φυσιολογική, καθώς είναι ένας  $3^3$  πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός με επιπλέον κεντρικά σημεία. Όμως ο σχεδιασμός αυτός δεν είναι καλύτερος από αρκετούς άλλους σχεδιασμούς από θέμα διακυμάνσεων καθώς και ότι επιτρέπει ένα βαθμό ελευθερίας για την εκτίμηση του καθαρού σφάλματος. Ένας σχεδιασμός ο οποίος είναι αρκετά αποδοτικός είναι ο  $2S_3 + 2S_1$ . Ο σχεδιασμός αυτός έχει καλή εκτίμηση όλων των παραμέτρων, η μη ορθογωνιότητα των τετραγωνικών επιδράσεων προκαλεί μικρή αύξηση της διακύμανσης και επιπλέον επιτρέπει 14 βαθμούς ελευθερίας για το σφάλμα. Το μειονέκτημα του σχεδιασμού αυτού είναι ότι δεν περιέχει κεντρικά σημεία κάτι που μπορεί να επηρεάσει δυσμενώς την καταλληλότητα του σχεδιασμού εάν τα κεντρικά σημεία έχουν καταλυτική σημασία στο συγκεκριμένο πείραμα.

**Παράδειγμα 4.0.2.** Οι σχεδιασμοί υποσυνόλων για τη μελέτη τεσσάρων παραγόντων με 36 επαναλήψεις παρουσιάζεται στον πίνακα 3. Ο σχεδιασμός  $S_3 + 4S_0$  δίνει σχετικά καλές εκτιμήσεις των επιδράσεων και είναι ασυνήθιστα ορθογώνιος για την εκτίμηση όλων των επιδράσεων συμπεριλαμβανομένων και των τετραγωνικών. Αν και ο συγκεκριμένος σχεδιασμός εμφανίζει αρκετά πλεονεκτήματα, επιτρέπει τέσσερις βαθμούς ελευθερίας για το σφάλμα. Το μειονέκτημα αυτό καθιστά τον συγκεκριμένο σχεδιασμό υποδιαίστερο σε καταλληλότητα από τον  $S_4 + 2S_1 + 4S_0$ , ο οποίος επιτρέπει 11 βαθμούς ελευθερίας για το σφάλμα.

Πίνακας 4.1: Διαθέσιμα υποσύνολα

$S_3$			$S_2$			$S_1$			$S_0$		
-1	-1	-1	-1	-1	0	-1	0	0	0	0	0
-1	-1	1	-1	1	0	1	0	0			
-1	1	-1	1	-1	0	0	-1	0			
-1	1	1	1	1	0	0	1	0			
1	-1	-1	-1	0	-1	0	0	-1			
1	-1	1	-1	0	1	0	0	1			
1	1	-1	1	0	-1						
1	1	1	1	0	1						
			0	-1	-1						
			0	-1	1						
			0	1	-1						
			0	1	1						

Πίνακας 4.2: Πιθανά υποσύνολα σχεδιασμού και ιδιότητες των.

Design	df	Projections		Variants Inflations			
		$s_1 : s_0$	$r_2 : r_1 : r_0$	$\beta_i$	$\beta_{ii}^{bal}$	$\beta_{ii}^{orth}$	$\beta_{ij}$
$2S_3 + S_2$	8	12:4	5:2:0	0.167	1.25	-0.25	0.4
$2S_3 + S_2$	8	12:4	5:2:0	0.167	1.25	-0.25	0.4
$2S_3 + 2S_1$	14	10:8	4:2:4	0.4	0.25	1.25	0.75
$2S_3 + S_1 + 6S_0$	13	9:10	4:1:8	0.556	0.172	1.314	0.75
$S_3 + S_2 + S_1 + 2S_0$	1	9:10	3:3:4	0.556	0.089	0.004	1.33
$S_3 + S_2 + 8S_0$	7	8:12	3:2:8	0.75	0.025	0.255	1.33
$S_3 + 3S_1 + 2S_0$	13	7:14	2:3:8	1	0	0.021	2.5
$S_3 + 2S_1 + 8S_0$	13	6:16	2:2:12	1.167	0.025	0.255	2.5
$S_3 + S_1 + 14S_0$	13	5:18	2:1:16	1.8	0.172	1.314	2.5
$2S_2 + 4S_0$	15	8:12	2:4:4	0.75	0.021	0.024	2.5
$S_2 + 2S_1 + 4S_0$	9	6:16	1:4:8	1.167	0.021	0.024	6
$S_2 + S_1 + 10S_0$	9	5:18	1:3:12	1.8	0.089	0.024	6
$S_2 + 16S_0$	15	4:20	1:2:16	2.5	0.25	0.125	6

## 4.1 Smaller Designs

Στο παράδειγμα 2.0.2 παρατηρήσαμε ότι υπήρχαν αρκετά λίγοι σχεδιασμοί για να επιλέξουμε. Επιπλέον με πέντε ή περισσότερους παράγοντες και αναλόγως σε μέγεθος πειράματα οι διαθέσιμοι σχεδιασμοί φθίνουν συνεχώς και συχνά οι κεντρικοί σύνθετοι σχεδιασμοί τρίτης τάξης είναι οι κατάλληλοι. Είναι λοιπόν εύλογη η χρήση σχεδιασμών υποσυνόλων με μερικά παραγοντικά υποσύνολα να μπορούν να αντικατασταθούν από κλασματικές επαναλήψεις.

Ένας κλασματικός σχεδιασμός υποσυνόλου είναι ένας σχεδιασμός υποσυνόλου με όλους τους παραγοντικούς σχεδιασμούς τάξης δύο σε ένα τουλάχιστον  $S_r$  υποσύνολο να είναι αντικατεστημένοι από κλασματικές επαναλήψεις. Οι κλασματικές επαναλήψεις μέσα σ'ένα  $S_r$

υποσύνολο θα πρέπει να έχουν όλες την ίδια καθορισμένη αντίθεση, εκτός από αλλαγές σε ονόματα παραγόντων ή συμβόλων. Η ανάλυση του κλασματικού σχεδιασμού υποσυνόλου είναι η ελάχιστη δυνατή ανάλυση από όλες τις κλασματικές επαναλήψεις που χρησιμοποιούνται για να ορίσουν τον κλασματικό σχεδιασμό υποσυνόλων. Στο σχεδιασμό αναλυτικής τάξης IV, οι όροι αλληλεπίδρασης του πολυωνυμικού μοντέλου δευτέρου βαθμού συσχετίζονται μεταξύ τους. Στο σχεδιασμό αναλυτικής τάξης III, οι γραμμικές επιδράσεις συσχετίζονται με τις αλληλεπιδράσεις.

Οι ιδιότητες που αναφέραμε στους σχεδιασμούς υποσυνόλων ισχύουν και για τους σχεδιασμούς κλασματικών υποσυνόλων αναλυτικής τάξης V ή υψηλότερης, αλλά οι εξισώσεις (3.13)-(3.15) παύουν να ισχύουν για κλασματικούς σχεδιασμούς αναλυτικής τάξης μικρότερης της V, εξαιτίας των επιπρόσθετων ορθογωνιοτήτων. Όμως, εάν χρησιμοποιήσουμε κλασματικούς σχεδιασμούς αναλυτικής τάξης III ή μεγαλύτερης, οι προβολές ενός ή δύο παραγόντων παραμένουν αμετάβλητες για κάθε παράγοντα. Επίσης μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το ελάχιστο όριο καθώς και τις αυξήσεις εξαιτίας της μη ύπαρξης ισορροπίας των εξισώσεων (3.13-3.15), το υπόλοιπο της διακύμανσης αποδίδεται στην μη ύπαρξη ορθογωνιοτήτων. Αυτό σημαίνει ότι για τις γραμμικές επιδράσεις, αλλά και για τις επιδράσεις των αλληλεπιδράσεων, εάν προβάλλουμε πάνω σε δύο παράγοντες, οι όροι για τη μη ορθογωνιότητα θα απαλειφθούν.

Στο παράδειγμα 2 τεσσάρων παραγόντων με 36 επαναλήψεις μπορούμε να θεωρήσουμε κλασματικούς σχεδιασμούς υποσυνόλων χρησιμοποιώντας  $\frac{1}{2}S_4^{IV}$ ,  $\frac{1}{2}S_4^{III}$ ,  $\frac{1}{2}S_3^{III}$ , όπου  $\frac{1}{2^p}S_r^R$  ορίζει έναν  $\frac{1}{2^p}$  κλασματικό σχεδιασμό του  $S_r$ , αναλυτικής τάξης  $R$ . Αρχικά, το παραπάνω δίνει 39 υποψήφιους σχεδιασμούς, αρκετοί από τους οποίους δεν είναι χρήσιμοι. Για παράδειγμα είναι ανούσιο να αντικαταστήσουμε μια επανάληψη του  $S_4$  με έναν επαναλαμβανόμενο  $\frac{1}{2}S_4$  κλασματικό σχεδιασμό, εκτός και αν υπάρχει πρόβλημα στην εκτίμηση του καθαρού σφάλματος. Σε άλλες περιπτώσεις, οι προβολές ενός ή δύο παραγόντων κάνουν σαφές ότι οι κλασματικοί σχεδιασμοί δεν είναι καλύτεροι από τους σχεδιασμούς στον πίνακα 3, διότι εάν οι προβολές αυτές είναι οι ίδιες, τότε οι κλασματικοί σχεδιασμοί θα είναι υποδιαίστεροι εξαιτίας της ύπαρξης μη ορθογωνιοτήτων. Στον πίνακα 4 απεικονίζονται οι σχεδιασμοί οι οποίοι είναι κατάλληλοι, καθώς και οι ιδιότητες των. Σε αυτήν την περίπτωση η επιλογή του σχεδιασμού θα εξαρτηθεί από τη θεώρηση μας για το ποιά από τις επιδράσεις είναι η πιο σημαντική, αλλά και από το πόσο σημαντική είναι η εκτίμηση του σφάλματος.

#### 4.1.1 Ελλειπείς Σχεδιασμοί Υποσυνόλου

Οι σχεδιασμοί Box-Behnken για περισσότερους από πέντε παράγοντες περιλαμβάνουν την χρήση ελλειπών σχεδιασμών. Για το  $S_r$  δεν χρησιμοποιούνται όλα τα  $\binom{q}{r}$  παραγοντικά σύνολα δεύτερης τάξης των  $r$  παραγόντων. Σε αντίθεση, σύνολα παραγόντων βασισμένα στον ελλειπή σχεδιασμό μπλόκ επιλέγονται και παραγοντικοί σχεδιασμοί τάξης δύο των συνόλων αυτών χρησιμοποιούνται. Η ιδέα αυτή έχει τη δυνατότητα να εμπλουτίσει την τάξη των σχεδιασμών υποσυνόλου. Οι ισορροπημένοι ελλειπείς σχεδιασμοί μπλόκ θα πρέπει να χρησιμοποιούνται εάν το μέγεθος των επαναλήψεων το επιτρέπει, αλλιώς οι σχεδόν ισορροπημένοι σχεδιασμοί θα είναι οι κατάλληλοι. Από τον ισορροπημένο ελλειπή παραγοντικό σχεδιασμό είναι πιθανό να υπολογιστούν όλες οι επιδράσεις του μοντέλου δεύτερης τάξης, χωρίς να αλλοιώνεται η παραγοντική ισορροπία.

Εάν ο περιορισμός για ισορροπημένους σχεδιασμούς δε ληφθεί υπ'όψιν, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε παραγοντικούς σχεδιασμούς οι οποίοι δεν είναι παραγοντικά ισορροπημένοι.

## 4.2 Χρήση παραγόντων δύο στάθμεων

Σε πολλά πειράματα, υπάρχουν μερικοί ποιοτικοί παράγοντες δύο στάθμεων οι οποίοι θα πρέπει να συμπεριληφθούν στο πείραμα, μαζί με τους υπόλοιπους ποσοτικούς παράγοντες. Οι ποιοτικοί παράγοντες μπορούν εύκολα να ενσωματωθούν στους σχεδιασμούς υποσυνόλου αφαιρώντας σημεία τα οποία έχουν μηδέν στους ποιοτικούς παράγοντες. Εάν οι  $s$  από τους  $q$  παράγοντες έχουν δύο στάθμες, τότε μόνο τα υποσύνολα  $S_s, \dots, S_q$  ορίζονται και συνδυάζονται σύμφωνα με τα προηγούμενα. Επιπλέον οι παράγοντες εκτιμούνται ορθογώνια, εκτός από τους τετραγωνικούς παράγοντες τριών στάθμεων. Εάν  $x_1, \dots, x_s$  είναι παράγοντες δύο στάθμεων και  $x_{s+1}, \dots, x_q$  παράγοντες τριών στάθμεων, τότε έχουμε την προσαρμογή του μοντέλου:

$$\mu = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=s+1}^q \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^{q-1} \sum_{j=i+1}^q \beta_{ij} x_i x_j, \quad (4.6)$$

Οι διακυμάνσεις των εκτιμητριών των παραμέτρων εκφράζονται ως εξής:

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{n}, \quad i = 1, \dots, s \quad (4.7)$$

$$V(\hat{\beta}_i) = \frac{1}{n} + \frac{n - 2s_1}{2s_1 n}, \quad i = s + 1, \dots, q \quad (4.8)$$

$$V(\hat{\beta}_{ii}) = \frac{4}{n} + \frac{(\sqrt{r_0} - 2\sqrt{r_2})^2}{2r_1 n} + \frac{(\sqrt{r_0 r_2} - r_1)^2 \{4(q-s)(\sqrt{r_0 r_2} + r_1) - n\}}{r_1 n \{r_1 n + 2(q-s)(r_0 r_2 - r_1^2)\}}, \quad i = s + 1, \dots, q \quad (4.9)$$

$$V(\hat{\beta}_{ij}) = \frac{1}{n}, \quad i = 1, \dots, s, \quad j = s + 1, \dots, q \quad (4.10)$$

$$V(\hat{\beta}_{ij}) = \frac{1}{n} + \frac{n - 2s_1}{2s_1 n}, \quad i = 1, \dots, s, \quad j = s + 1, \dots, q \quad (4.11)$$

$$V(\hat{\beta}_{ij}) = \frac{1}{n} + \frac{n - 4r_2}{4r_2 n}, \quad i = s + 1, \dots, q, \quad j = s + 1, \dots, q \quad (4.12)$$

Η επιλογή ενός σωστού σχεδιασμού ακολουθεί την ίδια διαδικασία που περιγράψαμε σε προηγούμενο κεφάλαιο. Από τις παραπάνω εξισώσεις συμπεραίνουμε ότι είναι ευκολότερο να έχουμε ικανοποιητικές εκτιμήσεις για τους όρους που αφορούν τους παράγοντες δύο στάθμεων. Έτσι είναι προτιμότερο να δώσουμε περισσότερη έμφαση στην εκτίμηση όρων που αφορούν παράγοντες τριών στάθμεων.

**Παράδειγμα 4.2.1.** Ένα σχετικό παράδειγμα με τα παραπάνω είναι η εύρεση ενός σχεδιασμού για παράγοντες με δύο και τρεις στάθμες σε 56 επαναλήψεις. Χρησιμοποιώντας κλασματικούς σχεδιασμούς αναλυτικής τάξης-V, παρατηρούμε στον πίνακα 6 ότι υπάρχουν μόνο δύο ικανοποιητικοί σχεδιασμοί.

### 4.3 Παράγοντες με αριθμό στάθμεων μεγαλύτερου του τρεία

Υπάρχουν περιπτώσεις που είναι αρκετά χρήσιμο να χρησιμοποιήσεις μικρό αριθμό απο παράγοντες με τέσσερις στάθμες. Ο Edmondson (1991) έδειξε την κατασκευή μιάς αποκριτικής επιφάνειας με παράγοντες τεσσάρων στάθμεων απο παραγοντικούς σχεδιασμούς παραγόντων με δύο στάθμες και απο κλασματικούς παραγοντικούς σχεδιασμούς. Η κύρια ιδέα της κατασκευής αυτής ήταν η εμφάνιση ενός παράγοντα τεσσάρων στάθμεων απο δύο ψευδοπαράγοντες δύο στάθμεων ο καθένας. Για παράδειγμα, η κατασκευή ενός σχεδιασμού με ένα παράγοντα τεσσάρων στάθμεων και έναν με τρεις στάθμες σε 56 επαναλήψεις, επιλέγουμε ένα σχεδιασμό απο το παράδειγμα 4 και αντικαθιστούμε δύο παράγοντες δύο στάθμεων με ένα παράγοντα τεσσάρων στάθμεων, σύμφωνα με τον πίνακα 4.

Οι διακυμάνσεις των εκτιμητριών των παραμέτρων εξάγονται απευθείας απο τα αποτελέσματα του Edmondson. Εάν  $z_1$  και  $z_2$  είναι ψευδοπαράγοντες του παράγοντα τεσσάρων στάθμεων  $x_1$  (πίνακας 7) και όμοια  $z_3$  και  $z_4$  ψευδοπαράγοντες του  $x_2$ , τότε χρησιμοποιώντας το  $\theta$  για να δηλώσουμε τις παραμέτρους για τις ψευδομεταβλητές έχουμε:

$$V(\hat{\beta}_1) = \frac{\{4V(\hat{\theta}_1) + V(\hat{\theta}_2)\}}{9} \quad (4.13)$$

$$V(\hat{\beta}_{11}) = \frac{\{16V(\hat{\theta}_{12}) + 25\}}{9} \quad (4.14)$$

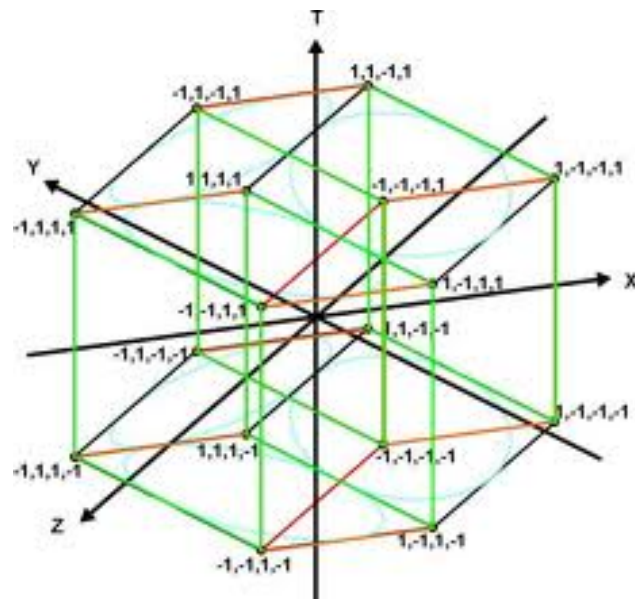
$$V(\hat{\beta}_1) = \frac{\{16(\hat{\theta}_{13}) + 4V(\hat{\theta}_{14}) + 4V(\hat{\theta}_{23}) + V(\hat{\theta}_{24})\}}{81} \quad (4.15)$$

#### 4.3.1 Πέντε και περισσότερες στάθμες

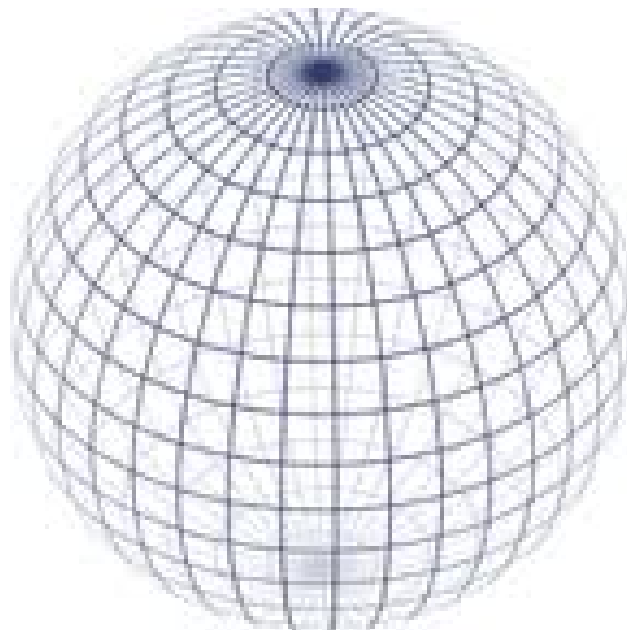
Ένα μειονέκτημα των σχεδιασμών μέχρι στιγμής είναι ότι οι σχεδιασμοί προσαρμόζονται σε μια υπερκυβοειδή περιοχή του πειραματισμού και συχνά έχουμε εμφάνιση σημείων σε ιδιαίτερες περιοχές της περιοχής αυτής. Εξαιτίας των σημείων αυτών, αρκετές φορές είναι επικίνδυνο να συμπεριληφθούν τα συγκεκριμένα σημεία στο σχεδιασμό, διότι μπορεί να οδηγήσουν το σχεδιασμό σε αποτυχία. Είναι λοιπόν λογικό να θεωρήσουμε μια υπερσφαιρική περιοχή του πειραματισμού. Στην πράξη μπορούμε να τροποποιήσουμε το σχεδιασμό υποσυνόλου ώστε να προσαρμόζεται μέσα σε μια υπερσφαιρική ή άλλου είδους ομαλή περιοχή.

Η μετατροπή αυτή θα γίνει απο τον ορισμό του υποσυνόλου  $S_r$ , εάν αντικαταστήσουμε όλα τα σημεία  $\pm 1$  με το  $a_r$ , όπου  $a_r$  έχει επιλεγεί έτσι ώστε να ταιριάζει σε μια κατάλληλη περιοχή του πειραματισμού. Αν θεωρήσουμε ότι  $a_q = 1$  έτσι ώστε ο σχεδιασμός  $S_q + S_1 + c_0 S_0$  να είναι ο συνήθης κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός με αξονικά σημεία  $\pm a_1$ . Στην περίπτωση αυτή, όλες εκτός των τετραγωνικών παραμέτρων μπορούν να εκτιμηθούν ορθογώνια, τα σύνολα των υποψήφιων σχεδιασμών παραμένουν τα ίδια, οι κλασματικοί και οι ελλειπείς σχεδιασμοί μπορούν να σχηματιστούν με τον ίδιο τρόπο όπως και πριν και οι παράγοντες δύο και τεσσάρων στάθμεων μπορούν να συμπεριληφθούν με την ίδια ακριβώς διαδικασία. Οι εξισώσεις (3.13-3.15) μπορούν να υπολογιστούν, αλλά δεν παρουσιάζουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον, καθώς ο ορισμός της ελάχιστης διακύμανσης δεν είναι ξεκάθαρος διότι οι στάθμες επιτρέπεται να ποικίλουν και οι προβολές είναι ιδιαίτερα πολύπλοκες. Έπομένως είναι προτιμότερο να αντιστρέψουμε τον πίνακα  $X'X$  για κάθε σχεδιασμό και να μελετήσουμε εκτενέστερα τις ιδιότητες των σχεδιασμών που παρουσιάζουν τα πλεονεκτήματα που θέλουμε. Υπάρχει ένα





Σχήμα 4.1: Υπερκυβοειδής σχεδιασμός



Σχήμα 4.2: Υπερσφαιρική περιοχή

επιπλέον μειωνέκτημα με τη σφαιρική περιοχή του πειραματισμού, καθώς ο σχεδιασμός θα πρέπει να περιλαμβάνει τουλάχιστον ένα  $S_0$  σημείο ώστε να μπορεί να εκτιμηθεί το μοντέλο δευτέρου βαθμού.

## Κεφάλαιο 5

# Ευρωστία των σχεδιασμών υποσυνόλου σε ελλειπίες παρατηρήσεις

### 5.1 Έλλειψη παρατηρήσεων

Σε αρκετές περιπτώσεις έχουμε να αντιμετωπίσουμε την έλλειψη παρατηρήσεων ή παρατηρήσεων οι οποίες δεν είναι διαθέσιμες εξαιτίας κάποιου ατυχήματος ή οικονομικών περιορισμών, κάτι που μπορεί να δημιουργήσει αρνητικές επιπτώσεις στην εκτίμηση των παραμέτρων. Σε πειράματα τα οποία εκτελούνται διαδοχικά, η απουσία μίας ή δύο παρατηρήσεων μπορεί να μην επηρεάσει ιδιαίτερα την εκτίμηση, καθώς ο πειραματιστής έχει την δυνατότητα να αντικαταστήσει την ελλατωματική επανάληψη του πειράματος. Για παράδειγμα, ο Terner et al.(2004) χρησιμοποίησε διαδοχικές διαδικασίες βελτιστοποίησης ώστε να βελτιστοποιήσει τη διαδικασία στην οποία κατά την εξαγωγή ενός υγρού από τους σπόρους, εμφανίζεται το κρίσιμο σημείο, όπου πραγματοποιείται ενζυματική αντίδραση για τον προσδιορισμό της σύνθεσης των λιπαρών οξέων της συγκεκριμένης ποικιλίας σπόρων. Σαν καταλύτης της παραπάνω αντίδρασης χρησιμοποιήθηκε μια ειδική ουσία, η οποία επιτάχυνε την όλη διαδικασία. Ο πειραματιστής χρησιμοποίησε ένα Box-Behnken σχεδιασμό τεσσάρων παραγόντων για να μελετήσει την επίδραση της πίεσης, της θερμοκρασίας, της συγκέντρωσης μεθανόλης και τη συγκέντρωση του νερού στην εξαγωγή μεθυλωμένου σπορέλαιου. Η βελτιστοποίηση των αποτελεσμάτων έγινε σταδιακά, χρησιμοποιώντας ζωτικές πληροφορίες των αρχικών σταδίων για το σχεδιασμό των επόμενων σταδίων. Παρατηρώντας την επίδραση των παραγόντων κατά την αλληλουχία των σταδίων, ο πειραματιστής είναι σε θέση να αποφασίσει ποιά επίδραση είναι σημαντική και ποιά όχι. Σε περίπτωση απουσίας πληροφορίας σε ένα συγκεκριμένο στάδιο, ο πειραματιστής έχει τη δυνατότητα να το επαναλάβει για να πάρει την πληροφορία που έχασε.

Η δυνατότητα επανάληψης σταδίων του πειραματισμού δεν είναι πάντοτε εφικτή, ιδιαίτερα σε περιπτώσεις πειραμάτων οι οποίοι βασίζονται σε σχεδιασμούς περιορισμένου μεγέθους. Υπο τις συνθήκες αυτές, η έλλειψη παρατηρήσεων μπορεί να προκαλέσει πρόβλημα στο σχεδιασμό, καθώς καταστρέφονται χρήσιμες ιδιότητες. Η μελέτη αποτυχίας των σχεδιασμών λόγω

απουσίας παρατηρήσεων μελετήθηκε απο τους Herzberg και Andrews (1976) οι οποίοι όρισαν ως συνθήκη αποτυχίας του σχεδιασμού την  $|X^T X| = 0$ . Το πρόβλημα απουσίας παρατηρήσεων κατά των σχεδιασμό είναι ιδιαίτερα σημαντικό όταν οι πειραματικές επαναλήψεις είναι ανέφικτες και ιδιαίτερα δαπανηρές.

**Παράδειγμα 5.1.1.** Ερεύνα η οποία διεξάχθηκε (Djouidi et al.,2007) για να μελετήσει την επίδραση τεσσάρων παραγόντων: αρχική συγκέντρωση του χαλκού ( $x_1$ ), θερμοκρασία ( $x_2$ ), pH διαλύματος ( $x_3$ ), ροή ( $x_4$ ) στην ένδοση της συγκόλλησης του χαλκού (%).

$$y = 100 \frac{[Cu^{2+}]_0 - [Cu^{2+}]_t}{[Cu^{2+}]_0},$$

όπου  $[Cu^{2+}]_0$  είναι η αρχική συγκέντρωση του χαλκού ( $mg/l$ ) και  $[Cu^{2+}]_t$  είναι η συγκέντρωση χαλκού τη χρονική στιγμή  $t$ . Ο σκοπός του πειράματος ήταν η μελέτη των κύριων επιδράσεων και των αλληλεπιδράσεων πρώτης τάξης, καθώς και ο εντοπισμός των συνδυασμών των παραγόντων που βελτιστοποιούν την απόκριση. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον παρακάτω πίνακα 2. Το πείραμα διεξήχθη χρησιμοποιώντας έναν κεντρικό σύνθετο σχεδιασμό τεσσάρων παραγόντων με 36 επαναλήψεις σε σφαιρική περιοχή, σχεδιασμός ο οποίος είναι ένα είδος σχεδιασμών υποσυνόλου  $S_4 + S_1 + 12S_0$ .

Operating factors	Factor levels				
	-2	-1	0	1	2
$[Cu^{2+}]_0$	10	32.5	55	77.5	100
T (°C)	20	30	40	50	60
pH	1	2	3	4	5
$Q_c$ (ml/s)	0.46	1.44	2.42	3.40	4.38

Σχήμα 5.1: Πίνακας 2

Το παράδειγμα αυτό έχει σκοπό να παρουσιάσει την επίδραση της απώλειας μιας παρατήρησης στην εκτίμηση του μοντέλου. Ο πίνακας 3 παρουσιάζει τις επιδράσεις στις εκτιμήτριες των συντελεστών που προκαλούνται απο τις εκάστοτε απώλειες των σημείων σχεδιασμού. Στις δύο πρώτες στίλες παρουσιάζονται οι συντελεστές παλλινδρόμησης και τα τυπικά σφάλματα για τον πλήρη σχεδιασμό, χωρίς καμία απώλεια. Στις επόμενες στίλες παρουσιάζονται οι συντελεστές παλλινδρόμησης και τα τυπικά σφάλματα για την απουσία ενός παραγοντικού σημείου, ενός αξονικού σημείου και ενός κεντρικού σημείου.

Είναι εμφανές ότι η ροή ( $x_4$ ) παρουσιάζει τη μεγαλύτερη επιρροή στην ένδοση της συγκόλλησης για τον πλήρη σχεδιασμό ( $\hat{\beta} = 4.834$ ). Όταν απουσιάζει ένα παραγοντικό σημείο, η επίδραση της ροής  $x_4$  σχεδόν διπλασιάζεται και το τυπικό σφάλμα της αυξάνεται σημαντικά. Η ίδια συμπεριφορά παρουσιάζεται κατά την απουσία ενός κεντρικού σημείου, με την έλλειψη του αξονικού σημείου να έχει τη μικρότερη επιρροή στις εκτιμήτριες της παλλινδρόμησης του σχεδιασμού. Οι τετραγωνικές αλληλεπιδράσεις έχουν περίπου την ίδια συμπεριφορά κατά την απουσία σημείων απο το σχεδιασμό. Επιπλέον, παρατηρούμε ότι η αλληλεπίδραση της θερμοκρασίας και του pH ( $x_2x_3$ ), καθώς και του pH και της ροής ( $x_3x_4$ ) είναι οι σημαντικότερες για τον πλήρη σχεδιασμό. Η απουσία ενός παραγοντικού σημείου ή ενός κεντρικού σημείου μετατρέπει τις αλληλεπιδράσεις ( $x_1x_3$ ) και ( $x_1x_4$ ) σε σημαντικές.

Αν και ο σχεδιασμός των 36 επαναλήψεων που χρησιμοποιήθηκε στο συγκεκριμένο πείραμα είναι ένας ικανοποιητικά μεγάλος σχεδιασμός, παρατηρούμε όμως ότι η απουσία ενός

σημείου προκαλεί σημαντικές αλλαγές στις εκτιμήτριες των παραμέτρων. Κρίνεται λοιπόν αναγκαία η χρήση ενός σχεδιασμού, ο οποίος θα πρέπει να επηρεάζεται όσο το δυνατόν λιγότερο από την απουσία σημείων.

Terms	Missing point							
	None		Factorial		Axial		Center	
	Coef	SE coef	Coef	SE coef	Coef	SE coef	Coef	SE coef
$X_1$	2.101	0.265	4.126	0.567	2.101	0.268	4.202	0.543
$X_2$	3.261	0.265	6.445	0.567	3.261	0.268	6.521	0.543
$X_3$	3.367	0.265	6.658	0.567	3.367	0.268	6.734	0.543
$X_4$	4.834	0.265	9.593	0.567	4.968	0.317	9.670	0.543
$X_1^2$	-1.168	0.230	-4.633	0.941	-1.134	0.236	-4.666	0.948
$X_2^2$	-0.771	0.230	-3.046	0.941	-0.737	0.236	-3.079	0.948
$X_3^2$	-1.562	0.230	-6.209	0.941	-1.528	0.236	-6.242	0.948
$X_4^2$	-2.269	0.230	-9.039	0.941	-2.436	0.314	-9.072	0.948
$X_1 X_2$	0.018	0.325	0.299	1.421	0.018	0.328	0.071	1.331
$X_1 X_3$	-0.440	0.325	-1.534	1.421	-0.440	0.328	-1.762	1.331
$X_1 X_4$	-0.347	0.325	-1.160	1.421	-0.347	0.328	-1.388	1.331
$X_2 X_3$	-1.312	0.325	-5.022	1.421	-1.312	0.328	-5.250	1.331
$X_2 X_4$	-0.127	0.325	-0.282	1.421	-0.127	0.328	-0.510	1.331
$X_3 X_4$	-2.193	0.325	-8.543	1.421	-2.193	0.328	-8.771	1.331

Σχήμα 5.2: Πίνακας 3

## 5.2 Εύρωστοι σχεδιασμοί στην απώλεια παρατηρήσεων

Η ευρωστία είναι χαρακτηριστικό το οποίο προστατεύει τους αξιόπιστους σχεδιασμούς από την απώλεια παρατηρήσεων. Ένας σχεδιασμός θεωρείται ως εύρωστος, αν κατασκευαστεί σύμφωνα με ένα κριτήριο και ικανοποιεί ορισμένες συνθήκες. Για να ελαχιστοποιήσουμε την επίδραση στο μοντέλο από την έλλειψη παρατηρήσεων θα πρέπει να έχουμε ένα μοντέλο το οποίο θα είναι εύρωστο στην έλλειψη παρατηρήσεων. Οι Box και Draper (2007) συμπεριέλαβαν στην λίστα με τις 14 ιδιότητες που πρέπει να ικανοποιεί ένας αξιόλογος σχεδιασμός αποκριτικής επιφάνειας και την ιδιότητα της ευρωστίας στην έλλειψη παρατηρήσεων. Ένας σχεδιασμός θεωρείται ότι είναι εύρωστος στην έλλειψη δεδομένων εάν οι παράμετροι του μοντέλου εξακολουθούν να μπορούν να εκτιμηθούν χωρίς να έχουν χάσει την αποδοτικότητα τους. Επιπλέον τα δεδομένα που μας έχουν απομείνει θα πρέπει να μπορούν να διαχειριστούν με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Σε κάθε πειραματισμό η απώλεια παρατηρήσεων διαφορετικού τύπου έχει διαφορετικές επιδράσεις στο σχεδιασμό. Ο σχεδιασμός ο οποίος έχει τον ελάχιστο αντίκτυπο από την απουσία δεδομένων κρίνεται ως ο περισσότερος ανεκτικός.

Οι Akhtar και Prescott εισήγαγαν ένα κριτήριο απώλειας, βασισμένο στην D-αποδοτικότητα για σύνθετους κεντρικούς σχεδιασμούς οι οποίοι είναι ανεκτικοί στην απώλεια παρατηρήσεων. Το κριτήριο αυτό έχει ως σκοπό να ελαχιστοποιήσει την μέγιστη απώλεια από την απουσία των παρατηρήσεων. Οι Andrews και Herzberg (1979) καθιέρωσαν μια σχέση ανάμεσα στη μείωση της ορίζουσας από την απουσία  $m$  σημείων σχεδιασμού ( $m = 1, 2, \dots$ ),  $|\mathbf{X}^T \mathbf{X}|_{red}$  και στην ορίζουσα του πίνακα πληροφορίας που προκύπτει από τον πλήρη σχεδιασμό,  $|\mathbf{X}^T \mathbf{X}|$ . Η παραπάνω σχέση είναι:

$$\frac{|\mathbf{X}^T \mathbf{X}|_{red}}{|\mathbf{X}^T \mathbf{X}|} = R_j,$$

όπου  $R_j = 1 - h_{jj}$  είναι το  $j$ -οστό διαγώνιο στοιχείο του πίνακα  $(\mathbf{I} - \mathbf{H})$  και ο  $\mathbf{H}$  είναι ο hat πίνακας,

$$\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \quad (5.1)$$

Η απώλεια απο την απουσία του  $j$ -οστού σημείου ορίζεται ως εξής:

$$L_j = 1 - R_j = h_{jj} \quad (5.2)$$

Η απώλεια  $L_j$  είναι μέτρο αποδοτικότητας,  $0 \leq L_j \leq 1$ . Μικρή τιμή του  $L_j$  υποδηλώνει μικρή μείωση της ορίζουσας του πίνακα πληροφορίας και κατά συνέπεια ελάχιστη απώλεια πληροφορίας. Το πρόβλημα είναι η επιλογή ενός σχεδιασμού με ελάχιστη δυνατή απώλεια.

Με σκοπό την προσαρμογή του μοντέλου, υποθέτουμε ότι  $E(\epsilon) = 0$  και  $V(\epsilon) = \sigma^2 \mathbf{I}_n$ . Παίρνουμε την απόκριση  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\beta}$ . Αντικαθιστώντας την τιμή του  $\hat{\beta}$  έχουμε:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{y} \quad (5.3)$$

Ο πίνακας διασποράς-συνδιασποράς της απόκρισης  $\hat{\mathbf{y}}$  γράφεται ως εξής  $V(\hat{\mathbf{y}}) = \sigma^2 \mathbf{H}$ . Η αποκλειστική εξάρτηση του Hat πίνακα  $\mathbf{H}$  απο τον πίνακα σχεδιασμού  $\mathbf{X}$ , είναι αρκετά χρήσιμη στην ανάλυση της ευαισθησίας ενός σχεδιασμού, καθώς έχουμε την δυνατότητα να αναγνωρίζουμε τα σημεία τα οποία έχουν τη μεγαλύτερη επιρροή στο σχεδιασμό. Λέγοντας μεγαλύτερη επιρροή στο σχεδιασμό, εννοούμε τα σημεία τα οποία όταν αφαιρεθούν απο το σχεδιασμό έχουν μεγαλύτερη απώλεια απο την απώλεια άλλων σημείων.

Ο Montgomery και ο Voth (1994) χρησιμοποίησαν τις διαγώνιες τιμές του πίνακα σχεδιασμού σαν μέτρο μόχλευσης. Αυτοί ανέφεραν ότι υψηλές τιμές της διαγωνίου του πίνακα  $\mathbf{H}$  υποδεικνύουν ότι τα σημεία αυτά ασκούν δυσανάλογες επιρροές στο προσαρμοσμένο μοντέλο. Η πρόβλεψη της διακύμανσης στο  $j$ -οστό σημείο ενός σχεδιασμού υπολογίζεται απο τον τύπο  $V(\hat{y}_j) = \sigma^2 h_{jj}$ , η οποία θα είναι ίδια για όλες τις παρατηρήσεις στο υποσύνολο  $S_r$ . Επιπλέον μια υψηλή τιμή του  $h_{jj}$  θα έχει ως αποτέλεσμα υψηλή τιμή στην πρόβλεψη της διακύμανσης. Εν γένει, είναι επιθυμητό οι διαφοροποιήσεις μεταξύ των τιμών των στοιχείων  $h_{jj}$  να είναι ελάχιστες, ώστε η ποιότητα του εκτιμωμένου μοντέλου να μπορεί να εκτιμηθεί. Το κριτήριο της ελαχιστοποίησης του μεγίστου έχει ως σκοπό να ελαχιστοποιήσει τις μέγιστες τιμές της διαγωνίου του πίνακα  $\mathbf{H}$ ,  $h_{jj}$ , καθώς απο την εξίσωση (4.2) συμπεραίνουμε ότι η τιμή του  $h_{jj}$  συμβολίζει την απώλεια απο ένα σημείο του σχεδιασμού το οποίο ανήκει στο υποσύνολο  $S_r$ . Επιπλέον, οι σχεδιασμοί οι οποίοι έχουν κατασκευαστεί με το κριτήριο της ελαχιστοποίησης της μέγιστης απώλειας, λογίζεται σαν σχεδιασμός ελάχιστης διακύμανσης.

**Παράδειγμα 5.2.1.** Στον πίνακα 4 παρουσιάζεται η απώλεια απο την απουσία ενός σημείου σχεδιασμού διαφορετικού είδους κάθε φορά. Η απώλεια υπολογίζεται για όλους τους σχεδιασμούς υποσυνόλου τριών παραγόντων, 28 επαναλήψεων για κυβοειδή περιοχή. Παρατηρούμε ότι ο σχεδιασμός  $2S_2 + 4S_0$  εμφανίζει την ελάχιστη τιμή της μέγιστης απώλειας, ενώ ο σχεδιασμός  $S_3 + S_1 + 14S_0$  εμφανίζει τη μέγιστη τιμή της μέγιστης απώλειας. Επιπλέον, ο σχεδιασμός  $2S_3 + S_2$  εμφανίζει χαμηλή μέγιστη απώλεια.

Στη σφαιρική περιοχή, ο σχεδιασμός  $S_2 + 4S_0$  εμφανίζει την ελάχιστη τιμή της μέγιστης απώλειας. Επιπλέον, είναι αξιοσημείωτο ότι οι απώλειες των σχεδιασμών  $2S_2 + 4S_0$  και  $S_2 + 16S_0$  είναι ανεξάρτητες απο την επιλογή του  $a_2$ , καθώς και για τις περιοχές του σχεδιασμού οι απώλειες είναι οι ίδιες.

Design	Cuboidal					Spherical
	$L_3$	$L_2$	$L_1$	$L_0$	$\text{Max} L_r$	$\text{Max} L_r$
$2S_3 + S_2^a$	0.337500	0.383333	-	-	0.383333	-
$2S_3 + 2S_1^a$	0.400000	-	0.300000	-	0.400000	-
$2S_3 + S_1 + 6S_0$	0.414914	-	0.443406	0.116822	0.443406	0.515152
$S_3 + S_2 + S_1 + 2S_0$	0.504902	0.341503	0.241830	0.205882	0.504902	0.376068
$S_3 + S_2 + 8S_0$	0.517045	0.412879	-	0.113636	0.517045	0.499020
$S_3 + 3S_1 + 2S_0$	0.708333	-	0.227513	0.119048	0.708333	0.528846
$S_3 + 2S_1 + 8S_0$	0.738636	-	0.287879	0.079546	0.738636	0.575000
$S_3 + S_1 + 14S_0$	0.791822	-	0.469159	0.060748	0.791822	0.669712
$2S_2 + 4S_0$	-	0.375000	-	0.250000	0.375000	0.375000
$S_2 + 2S_1 + 4S_0$	-	0.572917	0.208333	0.156250	0.572917	0.450000
$S_2 + S_1 + 10S_0$	-	0.636275	0.247059	0.088235	0.636275	0.527778
$S_2 + 16S_0$	-	0.750000	-	0.062500	0.750000	0.750000

Σχήμα 5.3: Πίνακας 4

**Παράδειγμα 5.2.2.** Ο πίνακας 5 παρουσιάζει τις απώλειες των σχεδιασμών υποσυνόλου για τέσσερις παράγοντες σε διαφορετικές περιοχές σχεδιασμού. Ο σχεδιασμός  $S_3 + 4S_0$  εμφανίζει την ελάχιστη τιμή της μέγιστης απώλειας σε μια κυβοειδή περιοχή, τιμή που παραμένει σταθερή για οποιαδήποτε περιοχή σχεδιασμού. Επιπλέον, παρατηρούμε ότι ο σχεδιασμός  $S_4 + \frac{1}{2}S_4^{III} + S_1 + 4S_0$  είναι καλύτερος από τον όμοιο σχεδιασμό, στον οποίο το  $\frac{1}{2}S_4^{III}$  έχει αντικατασταθεί με το  $\frac{1}{2}S_4^{IV}$ . Από το παραπάνω αποτέλεσμα συμπεραίνουμε ότι είναι προτιμότερο ένα κλάσμα αναλυτικής τάξης από ένα κλάσμα αναλυτικής τάξης  $IV$ . Ο σχεδιασμός  $\frac{1}{2}S_4^{III} + S_2 + 4S_0$  εμφανίζεται ως ο λιγότερος αποδοτικός στην κυβοειδή περιοχή. Στην σφαιρική περιοχή ο σχεδιασμός  $\frac{1}{2}S_4^{III} + S_2 + 4S_0$  είναι αποδοτικότερος όλων πλίν του σχεδιασμού  $S_3 + 4S_0$ .

Design	Cuboidal	Spherical	Minimax loss
$S_4 + 2S_1 + 4S_0$	0.636321	0.531250	0.459952
$S_4 + S_1 + 12S_0$	0.648571	0.583333	0.583333
$S_2 + S_1 + 4S_0$	0.532331	0.468750	0.440769
$S_3 + 4S_0$	0.437500	0.437500	0.437500
$S_4 + \frac{1}{2}S_3 + 4S_0$	0.460669	0.458163	0.428740
$S_4 + \frac{1}{2}S_4^{III} + S_1 + 4S_0$	0.484605	0.542614	- <sup>a</sup>
$S_4 + \frac{1}{2}S_4^{IV} + S_1 + 4S_0$	0.570108	0.531250	0.531250
$\frac{1}{2}S_4^{III} + S_2 + 4S_0$	0.668888	0.453599	0.428643
$\frac{1}{2}S_4^{IV} + S_2 + 4S_0$	0.596154	0.468750	0.440769

Σχήμα 5.4: Πίνακας 5

### 5.3 Επιλογή $a_r$ για την ελαχιστοποίηση της μέγιστης απώλειας

Σκοπός μας είναι η εκ νέου κατασκευή των σχεδιασμών υποσυνόλου έχοντας ως στόχο την ελαχιστοποίηση της απώλειας από την απουσία ενός σημείου σχεδιασμού. Η κατασκευή αυτή επιτυγχάνεται χρησιμοποιώντας το κριτήριο ελαχιστοποίησης της μέγιστης απώλειας. Θέλοντας να απλοποιήσουμε τους υπολογισμούς γράφουμε:

$$\mu(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{\kappa} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{\kappa} \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^{\kappa-1} \sum_{j=i+1}^{\kappa} \beta_{ij} x_i x_j. \quad (5.4)$$

Ορίζοντας το  $\delta_r$  να αναπαριστά τον αριθμό των σημείων τύπου  $S_r$  τα οποία χρησιμοποιούνται στο σχεδιασμό, έχουμε:

$$\delta_r = 2^r \binom{\kappa}{r} \nu_r, \quad r = 0, 1, \dots, \kappa,$$

όπου  $\nu_r$  είναι ο συνολικός αριθμός των επαναλήψεων του  $r$ -οστού υποσυνόλου με  $\nu_r \geq 0$ ,  $\forall r \in \{0, 1, \dots, \kappa\}$ . Για παράδειγμα, στο σχεδιασμό  $S_4 + \frac{1}{2}S_4 + S_1 + 4S_0$ , η τιμή του  $\nu_4$  θα είναι  $(1 + \frac{1}{2})$ . Ο πίνακας πληροφορίας τάξης  $p$ , για τη χρήση ενός σχεδιασμού υποσυνόλου με σκοπό την εφαρμογή ενός μοντέλου στην εξίσωση (4.4) μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{B} \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

όπου  $\mathbf{A} = \psi_1 \mathbf{I}_\kappa$

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} n & \psi_1 & \dots & \dots & \psi_1 \\ \psi_1 & \tau & \dots & \dots & \psi_2 \\ \vdots & \psi_2 & \tau & \dots & \psi_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1 & \psi_2 & \psi_2 & \dots & \tau \end{pmatrix}, \quad (5.6)$$

$\mathbf{B} = \psi_2 \mathbf{I}_l$  και  $l = \kappa(\kappa-1)/2$ . Καθώς ο πίνακας πληροφορίας (5.5) είναι ένας διαγώνιος πίνακας, ο οποίος περιέχει στις διαγωνίους του τους υποπίνακες  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{C}$  και  $\mathbf{B}$ , η ορίζουσα του μπορεί να γραφεί ως:

$$d = |\mathbf{A}| |\mathbf{C}| |\mathbf{B}|, \quad (5.7)$$

όπου  $|\mathbf{A}| = \psi_1^\kappa$  και  $|\mathbf{B}| = \psi_2^l$ . Η ορίζουσα του πίνακα  $\mathbf{C}$  υπολογίζεται ως εξής:

$$|\mathbf{C}| = n |(\tau - \psi_2) \mathbf{I}_\kappa + \psi_2 \mathbf{I}_\kappa - \frac{\psi_1^2}{n} \mathbf{J}_\kappa| \quad (5.8)$$

Επιλέον, η εξίσωση (5.7) μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$d = n \psi_1^\kappa \psi_2^l (\tau - \psi_2)^{\kappa-1} \left\{ (\tau - \psi_2) + \kappa \left( \psi_2 - \frac{\psi_1^2}{n} \right) \right\} \quad (5.9)$$

όπου

$$\psi_1 = \sum_{r=1}^{\kappa} \delta_r a_r^2 \quad (5.10)$$

$$\psi_2 = \delta_\kappa + \sum_{r=1}^{\kappa-1} \frac{1}{\kappa - r + 1} \delta_r a_r^4 \quad (5.11)$$

$$\tau = \sum_{r=1}^{\kappa} \delta_r a_r^4 \quad (5.12)$$

και το  $a_\kappa$  ορίζεται να είναι μονάδα.

Ο αντίστροφος του πίνακα πληροφορίας μπορεί να υπολογιστεί απο την εξίσωση (4.5) ως εξής:

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{B}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (5.13)$$

Καθώς τα  $\mathbf{A}$  και  $\mathbf{B}$  είναι διαγώνιοι πίνακες, οι αντίστροφοι των υπολογίζονται απευθείας με τη χρήση του αντιστρόφου του κάθε στοιχείου, όπου  $\mathbf{C}^{-1}$  υπολογίζεται ως εξής:

$$\mathbf{C}^{-1} = \begin{pmatrix} R & \lambda^T \\ \lambda & \mathbf{W} \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

όπου  $R = (n - \psi_1^2 \mathbf{1}^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{1})^{-1}$ ,  $\mathbf{M} = (\tau - \psi_2) \mathbf{I}_\kappa + \psi_2 \mathbf{J}_\kappa$ , και  $\mathbf{M}^{-1} = (\tau^* - \psi_2^*) \mathbf{I}_\kappa + \psi_2^* \mathbf{J}_\kappa$

Οι όροι στον πίνακα  $\mathbf{M}^{-1}$  υπολογίζονται ως εξής:

$$\psi_2^* = \frac{-\psi_2}{(\tau - \psi_2)\{\tau + (\kappa - 1)\psi_2\}} \quad \tau^* = \frac{\tau + (\kappa - 2)\psi_2}{(\tau - \psi_2)\{\tau + (\kappa - 1)\psi_2\}}$$

Εκτελώντας μερικές αλγεβρικές πράξεις, η τιμή του  $R$  είναι:

$$R = \frac{\tau + (\kappa - 1)\psi_2}{n\tau(\kappa - 1)\psi_2 - \kappa\psi_1^2}.$$

Οι τιμές του διανύσματος  $\lambda$  της εξίσωσης (3.14), μπορούν να γραφούν στην απλούστερη μορφή  $\lambda = \lambda \mathbf{1}$ , όπου

$$\lambda = \frac{\psi_1}{n\{\tau + (\kappa - 1)\psi_2\} - \kappa\psi_1^2}$$

Τέλος, ο πίνακας  $\mathbf{W}$  της εξίσωσης (3.14) γράφεται  $\mathbf{W} = (\Delta - \Omega) \mathbf{I}_\kappa + \Omega \mathbf{J}_\kappa$ . Μετά απο κάποιες αλγεβρικές απλοποιήσεις, οι όροι στον  $\mathbf{W}$  μπορούν να γραφούν  $\Delta = \tau^* + E$  και  $\Omega = \psi_2^* + E$ . όπου

$$E = \frac{\psi_1^2}{n[\{\tau + (\kappa - 1)\psi_2\} - \kappa\psi_1^2]\{\tau + (\kappa - 1)\psi_2\}}.$$

Επομένως, ο αντίστροφος του πίνακα πληροφορίας ενός σχεδιασμού υποσυνόλου μπορεί να γραφεί στην πρωτότυπη μορφή του, σύμφωνα με το μοντέλο της εξίσωσης (4.4) ως εξής:

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \begin{pmatrix} R & \mathbf{0} & \lambda & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}^{-1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \lambda & \mathbf{0} & \mathbf{W} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{B}^{-1} \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

Ο παραπάνω υπολογισμός έγινε για να προσδιορίσουμε τον Hat πίνακα, κάτι που είναι χρήσιμο για τη μελέτη της διασποράς και της συνδιασποράς της κατασκευής του σχεδιασμού. Η  $j$ -οστή τιμή της διαγωνίου του  $\mathbf{H}$ , η οποία αντιστοιχεί στο  $j$ -οστό σημείο σχεδιασμού υπολογίζεται ως εξής:

$$h_{jj} = \mathbf{x}_j^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_j. \quad (5.16)$$

Η τιμή του  $h_{jj}$  στην ουσία είναι η απώλεια απο την απουσία ενός σημείου σχεδιασμού του υποσυνόλου στο οποίο το  $j$ -οστό σημείο ανήκει, έστω  $S_r$ , απο την εξίσωση (3.2) και θα το



ορίσουμε ως  $h_{rr}$ . Απο ιδιότητες της άλγεβρας το  $h_{rr}$  γράφεται στη γενική του μορφή ως  $h_{rr} = R + \{r\Delta + r(r-1)\Omega + (r(r-1)/2\psi_2)\}a_r^4 + ((r/\psi_1) + 2r\lambda)a_r^2$ , για  $r = 0, 1, 2, \dots, k$ . Για την ελαχιστοποίηση της μέγιστης απώλειας, πρέπει να ελαχιστοποιήσουμε τη μέγιστη απώλεια που προκαλείται απο την απουσία ενός σημείου σχεδιασμού. Ο στόχος αυτός επιτυγχάνεται απο την ελαχιστοποίηση του μεγίστου του  $(h_{00}, h_{11}, \dots, h_{kk})$ .

Έχοντας μελετήσει τη συμπεριφορά των τιμών της διαγωνίου του πίνακα  $H$ , διαπιστώνουμε ότι οι τιμές  $h_{kk}$  παρουσιάζουν αρνητική κλίση σαν συνάρτηση του  $a_r$ ,  $\forall r = 1, 2, \dots, k-1$ , όπου η  $h_{rr}$ ,  $0 < r < k$  είναι αύξουσα συνάρτηση του  $a_r$ . Η συμπεριφορά του  $h_{00}$  διαφέρει, καθώς σχηματίζει καμπύλη σε σχήμα καμπάνας σε σχέση με το  $a_r$ . Η  $h_{00}$  μεγιστοποιείται όταν  $a = \sqrt{k}$ . Όταν χρησιμοποιούμε μια επανάληψη ενός κεντρικού σημείου, το  $h_{00}$  επιτυγχάνει τη μέγιστη τιμή του στο 1. Το ύψος της καμπύλης του  $h_{00}$  μειώνεται καθώς αυξάνεται ο αριθμός των επαναλήψεων των κεντρικών σημείων στο σχεδιασμό. Χρησιμοποιώντας δύο η περισσότερα κεντρικά σημεία μειώνουμε σημαντικά την τιμή του  $h_{00}$ , με αποτέλεσμα η καμπύλη του να μην τέμνει τις καμπύλες του  $h_{rr}$ . Επιπλέον, στην περίπτωση των σχεδιασμών υποσυνόλου, η μέγιστη απώλεια είναι  $MaxL_r = \max(h_{11}, h_{22}, \dots, h_{kk})$ . Για να επιτευχθεί η ελάχιστη τιμή του  $MaxL_r$ , εξισώνουμε τις  $h_{tt}$  και  $h_{ss}$  για όλα τα ζευγάρια  $(s, t)$  έτσι ώστε  $\nu_s \neq 0$  και  $\nu_t \neq 0$  για το σχεδιασμό υποσυνόλου  $\nu_0 S_0 + \nu_1 S_1 + \dots + \nu_k S_k$ . Έτσι για το σχεδιασμό υποσυνόλου με την ελάχιστη απώλεια έχουμε  $h_{tt} = h_{ss}$ , όπου  $s = 1, 2, \dots, k-1$  και  $t = s+1, \dots, k$ .

Μπορούμε να υπολογίσουμε την τιμή του  $a_r$  για το σχεδιασμό υποσυνόλου με την ελαχιστοποιημένη μέγιστη απώλεια για κάθε  $r = 1, 2, \dots, k$ . Για παράδειγμα, η τιμή του  $a_1$  για το σχεδιασμό  $\nu_0 S_0 + \nu_1 S_1 + \nu_k S_k$ , ο οποίος σχεδιάστηκε για την επίτευξη της ελαχιστοποίησης της μέγιστης απώλειας, υπολογίζεται εξισώνοντας τα  $h_{11}$  και  $h_{kk}$  με αποτέλεσμα

$$a_1 = [\{-a + (a^2 + 4b\Delta\psi_1)^{1/2}\}/2\Delta\psi_1]^{1/2}$$

όπου  $a = 1 + 2\psi_1\lambda$ ,  $b = g\psi_1 + ka$  και  $g = k\Delta + k(k-1)\Omega$ . Όμοια για ένα σχεδιασμό του τύπου  $\nu_0 S_0 + \nu_2 S_2 + \nu_k S_k$  μπορούμε να υπολογίσουμε το  $a_2$  εξισώνοντας τα  $h_{kk}$  και  $h_{22}$  ώστε

$$a_2 = [\{-a + (a^2 + bm\psi_1)^{1/2}\}/m\psi_1]^{1/2}, \quad (5.17)$$

όπου  $\mu = 2\Delta + 2\Omega + (1/\psi_2)$ .

Για ένα συγκεκριμένο σχεδιασμό που περιέχει δύο είδη υποσυνόλων  $S_1$  και  $S_q$ , ώστε να ισχύει ότι  $1 < q < k$ , θα παίρνουμε δύο σχέσεις απο την εξίσωση  $h_{11} = h_{qq}$ , καθεμία για κάθε μεταβλητή  $a_1$  και  $a_q$ .

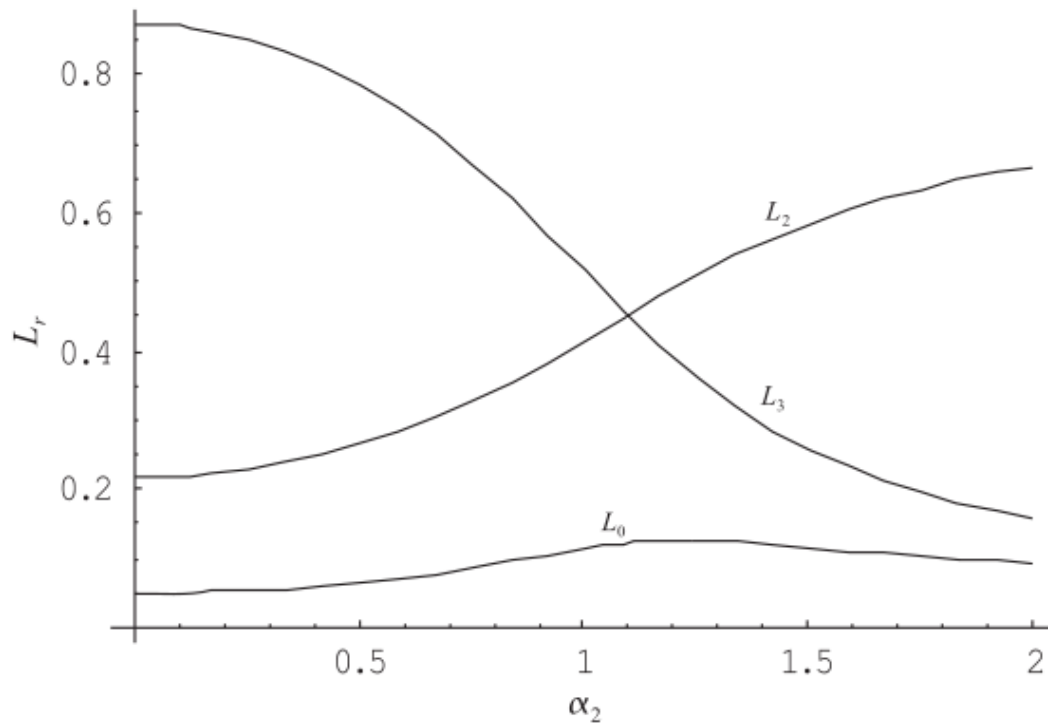
**Παράδειγμα 5.3.1.** Έστω ο σχεδιασμός υποσυνόλου  $S_3 + S_2 + 8S_0$  για τρεις παράγοντες σε 28 επαναλήψεις. Μελετάμε την απώλεια της δομής του σχεδιασμού για τις διάφορες τιμές του  $a_2$ . Το  $L_3$  αναπαριστά την απώλεια απο την απουσία ενός σημείου του υποσυνόλου  $S_3$ . Όμοια τα  $L_2$  και  $L_0$  αναπαριστούν την απώλεια απο την απουσία σημείων που ανήκουν στα αντίστοιχα υποσύνολα. Τα αποτελέσματα αναπαριστώνται στον πίνακα 6, όπου είναι εμφανές ότι το  $L_3$  μειώνεται σταδιακά με την αύξηση της τιμής του  $a_2$  και το  $L_2$  αυξάνεται καθώς αυξάνεται η τιμή του  $a_2$ . Το  $L_0$  παρουσιάζει μια διαφορετική συμπεριφορά σχηματίζοντας μια καμπύλη σχήματος καμπάνας συναρτήση του  $a_2$  και μεγιστοποιείται ανάμεσα στο 1 και στο 1.5. Συγκρίνοντας τις διάφορες απώλειες, παρατηρούμε ότι υπάρχει ένα σημείο για  $1.05 < a_2 < 1.10$  για το οποίο οι τιμές  $L_2$  και  $L_3$  συμπίπτουν, στο σημείο αυτό η μέγιστη απώλεια ελαχιστοποιείται. Επιπλέον, παρατηρούμε απο τη γραφική παράσταση ότι οι καμπύλες απωλειών  $L_2$  και  $L_3$  τέμνονται κάπου για  $a_2 = 1$ . Η ακριβής τιμή του  $a_2$ , για την

οποία ο σχεδιασμός  $S_3 + S_2 + 8S_0$  είναι σχεδιασμός υποσυνόλου ελαχιστοποιημένης μέγιστης απώλειας, υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τη σχέση (4.17) και είναι  $a_2 = 1.09963$ .

$a_2$	$d^{1/p}$	$L_3$	$L_2$	$L_0$	Max $L_r$
0.50	5.18478	0.786136	0.267576	0.062500	0.786136
0.55	5.67047	0.767720	0.277684	0.065754	0.767720
0.60	6.17199	0.747384	0.288717	0.069541	0.747384
0.65	6.69416	0.725035	0.300716	0.073891	0.725035
0.70	7.24247	0.700611	0.313724	0.078803	0.700611
0.75	7.82309	0.674103	0.327772	0.084239	0.674103
0.80	8.44303	0.645587	0.342874	0.09103	0.645587
0.85	9.11009	0.615246	0.359016	0.096231	0.615246
0.90	9.83288	0.583394	0.376144	0.102391	0.583394
0.95	10.6206	0.550475	0.394153	0.108296	0.550475
1.00	11.4830	0.517045	0.412879	0.113636	0.517045
1.05	12.4299	0.483728	0.432097	0.118127	0.483728
1.10	13.4707	0.451150	0.451532	0.121551	0.451150
1.15	14.6148	0.419873	0.470885	0.123799	0.470885
1.20	15.8704	0.390342	0.489856	0.124874	0.489856
1.25	17.2452	0.362855	0.508179	0.124876	0.508179
1.30	18.7462	0.337567	0.525640	0.123973	0.525640
1.35	20.3794	0.314505	0.542090	0.122361	0.542090
1.40	22.1504	0.293606	0.557438	0.120237	0.557438
1.45	24.0645	0.274745	0.571651	0.117779	0.571651
1.50	26.1265	0.257764	0.584737	0.115132	0.584737
1.55	28.3412	0.242491	0.596733	0.112409	0.596733
1.60	30.7132	0.228755	0.607700	0.109696	0.607700
1.65	33.2469	0.216393	0.617705	0.107048	0.617705
1.70	35.9468	0.205256	0.626826	0.104505	0.626826
1.75	38.8175	0.195206	0.635136	0.102089	0.635136
1.80	41.8635	0.186122	0.642711	0.099812	0.642711
1.85	45.0893	0.177895	0.649618	0.097678	0.649618
1.90	48.4994	0.170429	0.655923	0.095685	0.655923
1.95	52.0984	0.163641	0.661686	0.093830	0.661686
2.00	55.8909	0.157456	0.666959	0.092105	0.666959

Σχήμα 5.5: Πίνακας 6

Ο πίνακας 7 μας παρουσιάζει την απώλεια της δομής σχεδιασμών ελαχιστοποιημένης μέγιστης απώλειας για τις διάφορες επιλογές των  $a_2$  και  $a_1$  για τρεις παράγοντες σε 28 επαναλήψεις. Οι σχεδιασμοί  $2S_3 + S_2$  και  $2S_3 + 2S_1$  παρουσιάζουν την ελάχιστη τιμή της μέγιστης απώλειας για την απουσία μιας παρατήρησης. Ο κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός,  $S_3 + S_1 + 14S_0$  έχει τη μέγιστη απώλεια. Για τους σχεδιασμούς  $S_2 + 2S_1 + 4S_0$  και  $S_2 + S_1 + 10S_0$  θα έχουμε δύο σύνολα λύσεων  $(a_1, a_2)$  λύνοντας την εξίσωση  $h_{ss} = h_{tt}$  και τα δύο υποσύνολα σε κάθε περίπτωση δείχνουν την ίδια απώλεια δομής. Ο πειραματιστής μπορεί να επιλέξει το ένα σύνολο λύσεων  $(a_1, a_2)$ , το οποίο είναι το καταλληλότερο ανάλογα με τις συνθήκες του πειράματος το οποίο καλείται να εκτελέσει. Για το σχεδιασμό  $S_3 + 3S_1 + 2S_0$ , δε μπορούμε να πάρουμε έναν ακριβή σχεδιασμό ελαχιστοποιημένης μέγιστης απώλειας, διότι η καμπύλη απώλειας για την έλλειψη ενός παραγοντικού σημείου του σχεδιασμού αυτού πέφτει απότομα μεταξύ του  $0 < a_1 \leq 1.8$  και γίνεται σχεδόν οριζόντια για μεγάλες τιμές του  $a_1$ . Η καμπύλη απώλειας για την απουσία ενός αξονικού σημείου επιτυγχάνει το μέγιστο για  $a_1 > 2$ . Για μεγάλες τιμές του  $a_1$ , οι καμπύλες γίνονται σχεδόν παράλληλες και δεν υπάρχει περίπτωση να τέμνονται μεταξύ τους. Για το σχεδιασμό αυτό, εάν ένας πειραματιστής επιλέξει  $a_1 = 1.8$ , είναι πιθανό να επιλέξει ένα σχεδιασμό ελαχιστοποιημένης μέγιστης απώλειας. Τέλος, ο σχεδιασμός  $S_3 + S_1 + 14S_0$  παρουσιάζει την χειρότερη δυνατή εφαρμογή και για σφαιρικές και για κυβοειδείς περιοχές σχεδιασμού.

Σχήμα 5.6: Καμπύλες απώλειας για το σχεδιασμό  $S_3 + S_2 + 8S_0$ 

Design	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$L_3$	$L_2$	$L_1$	$L_0$	Max $L_r$
$2S_3 + S_2$	-	0.90	0.357143	0.357143	-	-	0.357143
$2S_3 + 2S_1$	1.73	-	0.357143	-	0.357143	-	0.357143
$2S_3 + S_1 + 6S_0$	0.62	-	0.428631	-	0.428631	0.095018	0.428631
$S_3 + S_2 + S_1 + 2S_0$	2.27	1.57	0.227305	0.418819	0.418819	0.321410	0.418819
$S_3 + S_2 + 8S_0$	-	1.10	0.451388	0.451388	-	0.121530	0.451388
$S_3 + 3S_1 + 2S_0$	1.80	-	0.520234	-	0.269654	0.492178	0.520234
$S_3 + 2S_1 + 8S_0$	3.87	-	0.469184	-	0.469184	0.077040	0.469184
$S_3 + S_1 + 14S_0$	1.83	-	0.643092	-	0.643092	0.071194	0.643092
$S_2 + 2S_1 + 4S_0$	0.71	0.37	-	0.388833	0.388833	0.167004	0.388833
	1.72	0.90	-	0.388833	0.388833	0.167004	0.388833
$S_2 + S_1 + 10S_0$	0.69	0.45	-	0.500637	0.500637	0.988540	0.500637
	6.40	4.17	-	0.500637	0.500637	0.988540	0.500637

Σχήμα 5.7: Πίνακας 7: Απώλεια δομής των σχεδιασμών υποσυνόλου ελαχιστοποιημένης μέγιστης απώλειας.

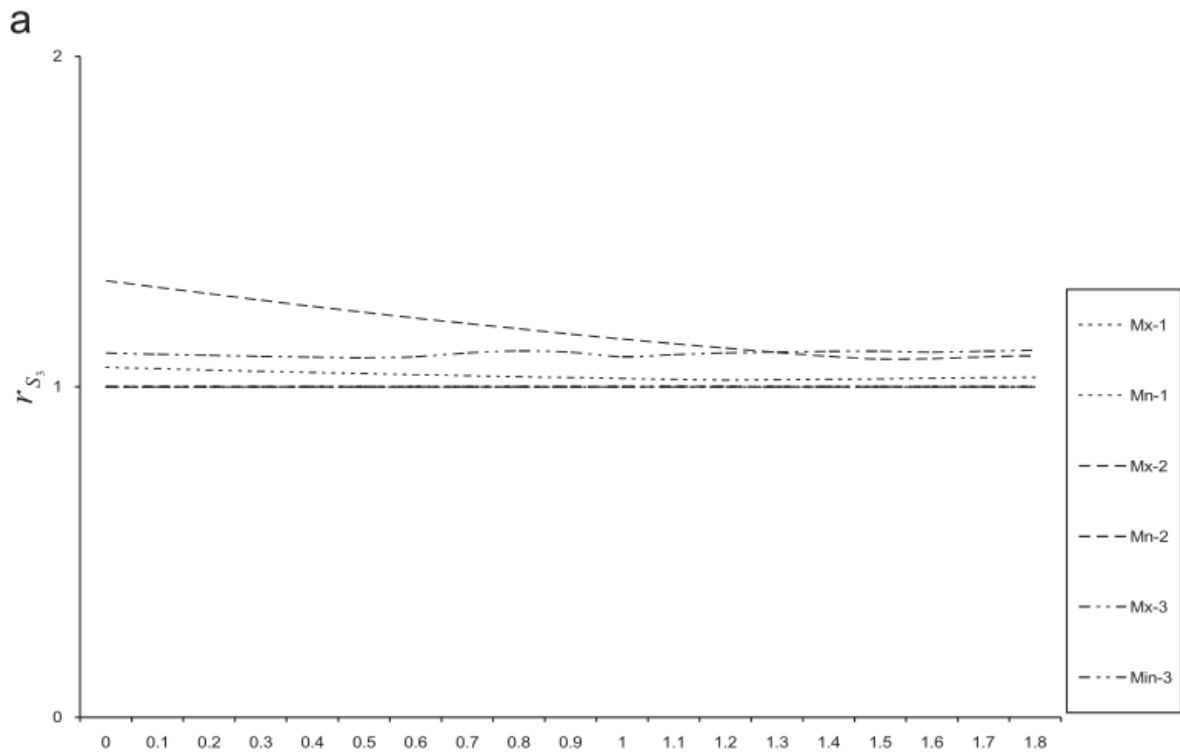
## 5.4 Ευρωστία της πρόβλεψης της διακύμανσης στην απώλεια παρατηρήσεων

Για το μοντέλο της εξίσωσης (3.4) η πρόβλεψη της διακύμανσης της προβλεπόμενης απόκρισης δίνεται από τον τύπο:

$$\text{Var}[\hat{\mu}_{\mathbf{x}_m}] = \sigma^2 \mathbf{x}_m^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_m, \quad (5.18)$$

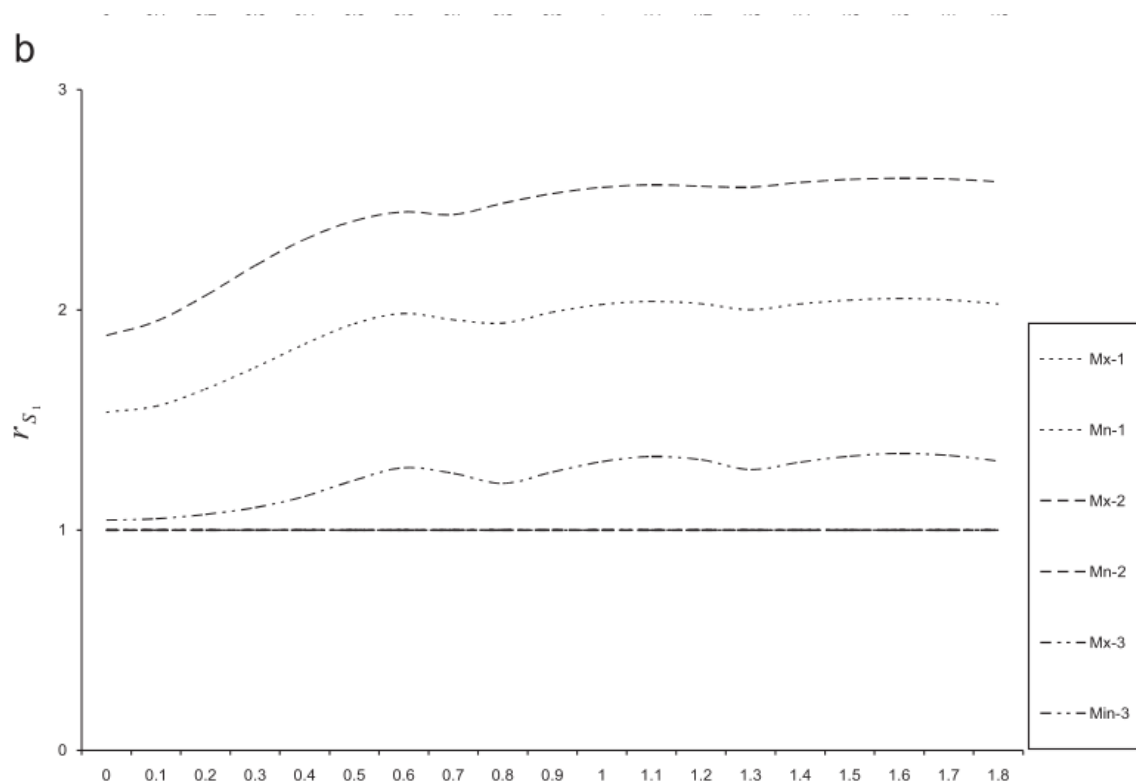
όπου  $x_m$  καθορίζει μια θέση στο χώρο του σχεδιασμού, τον οποίο ο πειραματιστής θέλει να προβλέψει. Η πρόβλεψη της διακύμανσης είναι ένα σημαντικό χαρακτηριστικό στη μελέτη του σχεδιασμού αποκριτικής επιφάνειας. Η αναλογία της πρόβλεψης της διακύμανσης για ένα σχεδιασμό, με απουσία μιας παρατήρησης, σε σχέση με την πρόβλεψη της διακύμανσης για έναν πλήρη σχεδιασμό είναι ένα καλό μέτρο ελέγχου της ανοχής του σχεδιασμού για την απουσία μιας παρατήρησης, σε μονάδες προβλεπόμενης διακύμανσης. Καθώς οι σχεδιασμοί υποσυνόλου περιλαμβάνουν διάφορα είδη σημείων σχεδιασμού με διαφορετικές τιμές προβλεπόμενης διακύμανσης, πρέπει να υπολογίσουμε τις αναλογίες για κάθε σημείο σχεδιασμού.

**Παράδειγμα 5.4.1.** Θεωρούμε παράδειγμα με τρεις παράγοντες και σχεδιάζουμε την αναλογία διακυμάνσεων συναρτήσει της ακτίνας,  $0 \leq r \leq 1.8$ . Διάφοροι σχεδιασμοί όπως  $2S_3 + S_1 + 6S_0$  (design-1),  $S_3 + S_1 + 14S_0$  (design-2),  $S_3 + 3S_1 + 2S_0$  (design-3),  $S_3 + S_2 + S_1 + 2S_0$  (design-4),  $S_3 + S_2 + 8S_0$  (design-5)  $S_2 + S_1 + 4S_0$  (design-6). Οι σχεδιασμοί 1-3 επιλέχθηκαν για τη σύγκριση των αναλογιών, όταν έχουμε έλλειψη σημείων τύπου:  $S_3, S_1$  και  $S_0$ , ενώ οι σχεδιασμοί 4-6 χρησιμοποιήθηκαν για να συγκριθούν οι αναλογίες όταν σημεία τύπου  $S_2$  λείπουν.



Σχήμα 5.8: Αναλογία πρόβλεψης διακύμανσης σημείων τύπου- $S_3$  σε σχέση με την πρόβλεψη διακύμανσης πλήρους σχεδιασμού

Στο σχήμα (4.8) παρουσιάζεται η αναλογία της προβλεπόμενης διακύμανσης του σχεδιασμού με την απουσία ενός σημείου τύπου- $S_3$ , σε σχέση με την προβλεπόμενη διακύμανση του πλήρους σχεδιασμού, αναλογία που συμβολίζεται με  $r_{S_3}$ . Επίσης στο σχήμα (3.9) παρουσιάζεται η αναλογία της προβλεπόμενης διακύμανσης του σχεδιασμού εν απουσία ενός σημείου



Σχήμα 5.9: Αναλογία πρόβλεψης διακύμανσης σημείων τύπου- $S_1$  σε σχέση με την πρόβλεψη διακύμανσης πλήρους σχεδιασμού

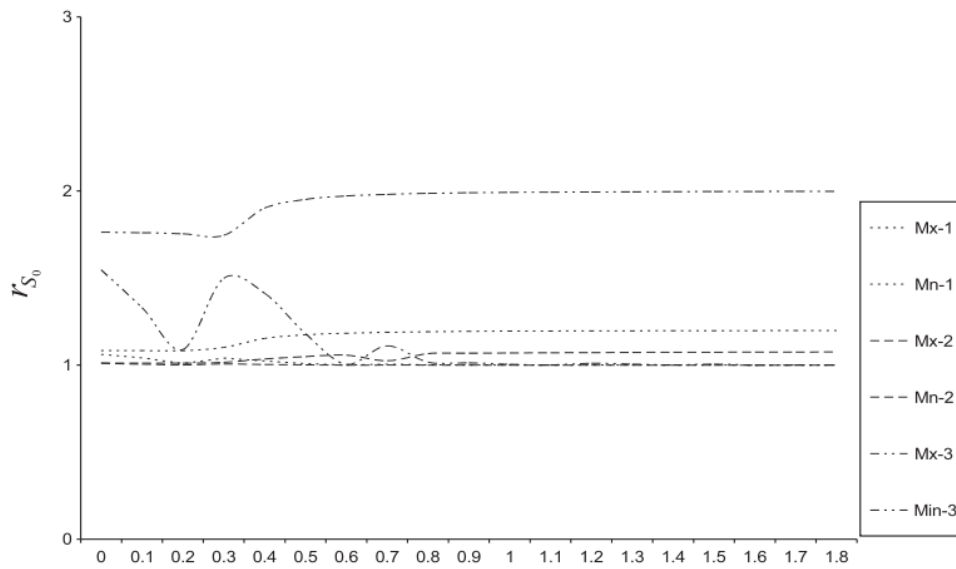
τύπου  $S_1$ , σε σχέση με την προβλεπόμενη διακύμανση του πλήρους σχεδιασμού, αναλογία η οποία συμβολίζεται ως  $r_{S_1}$ . Όμοια, στα σχήματα (3.10) και (3.11) παρουσιάζονται οι αναλογίες  $r_{S_0}$  και  $r_{S_2}$ . Για κάθε σχεδιασμό το μέγιστο ( $M_x$ ) και το ελάχιστο ( $M_n$ ) των αναλογιών σχεδιάζεται για ακτίνα  $0 < r < 1.8$ .

Είναι εμφανές από τα γραφήματα (4.8), (4.9), (4.10) και (4.11) ότι η ελάχιστη προβλεπόμενη διακύμανση είναι αρκετά ανεκτική στην έλλειψη σημείων σχεδιασμού για σχεδόν όλους τους σχεδιασμούς, καθώς και για όλα τα είδη των σημείων που απουσιάζουν, εκτός των σημείων τύπου- $S_0$ . Ο σχεδιασμός-3 (design-3) παρουσιάζει μεγάλη διακύμανση στην αναλογία της ελάχιστης προβλεπόμενης διακύμανσης για ακτίνα  $r < 0.8$ , όταν ένα σημείο τύπου  $S_0$  απουσιάζει, ενώ για μεγαλύτερη ακτίνα σταθεροποιείται.

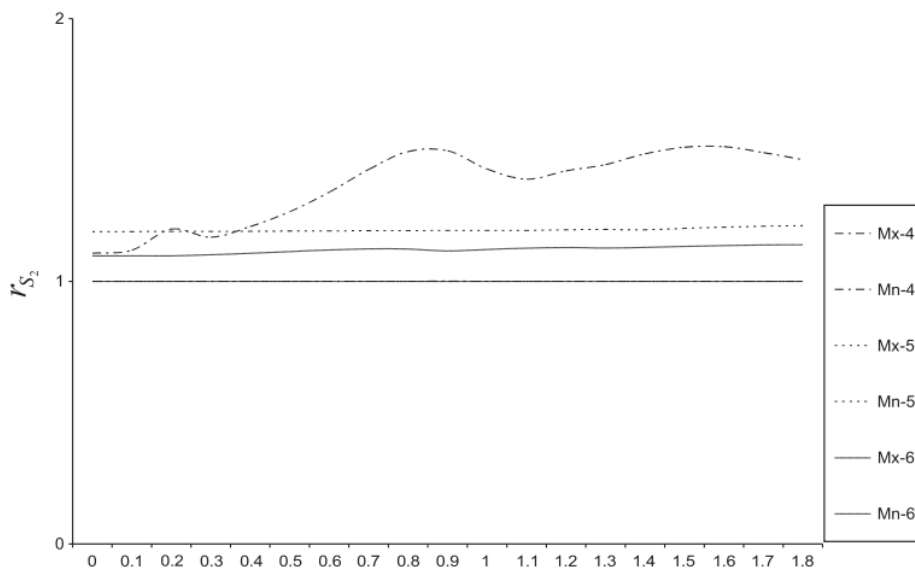
Η μέγιστη αναλογία της προβλεπόμενης διακύμανσης για το σχεδιασμό-2 (design-2) εν απουσία ενός σημείου τύπου  $S_3$ , σε σχέση με την προβλεπόμενη διακύμανση του ίδιου πλήρους σχεδιασμού, σταδιακά μειώνεται με την αύξηση της ακτίνας. Η μείωση αυτή διακόπτεται για ακτίνα  $1.2 < r < 1.8$  και διατηρείται σταθερή. Η αναλογία παραμένει σταθερή για τους σχεδιασμούς-3 (design-3) και (design-1), και επιπλέον ο σχεδιασμός-1 εμφανίζει μικρότερη αύξηση μέγιστης προβλεπόμενης διακύμανσης για  $0 \leq r \leq 1.8$ .

Στην περίπτωση απουσίας ενός σημείου τύπου  $S_1$ , στους σχεδιασμούς 1-3 (designs 1-3), οι

αναλογίες παρουσιάζουν αυξανόμενη πορεία με την αύξηση της ακτίνας. Ο σχεδιασμός-2 (design-2) εμφανίζει την ελάχιστη αύξηση της προβλεπόμενης διακύμανσης, όταν ένα σημείο τύπου  $S_1$  απουσιάζει.



Σχήμα 5.10: Αναλογία πρόβλεψης διακύμανσης σημείων τύπου- $S_0$  σε σχέση με την πρόβλεψη διακύμανσης πλήρους σχεδιασμού



Σχήμα 5.11: Αναλογία πρόβλεψης διακύμανσης σημείων τύπου- $S_2$  σε σχέση με την πρόβλεψη διακύμανσης πλήρους σχεδιασμού

#### 5.4 Ευρωστία της πρόβλεψης της διακύμανσης στην απώλεια παρατηρήσεων 58

Στο γράφημα (4.11), έχοντας την απουσία ενός σημείου τύπου  $S_2$ , οι σχεδιασμοί 4-6 (designs 4-6) παρουσιάζουν τη μέγιστη αύξηση στη μέγιστη προβλεπόμενη διακύμανση για ακτίνα  $r > 0.4$ , όπου ο σχεδιασμός-6 (design-6) εμφανίζει καλύτερη επίδοση για  $0 < r < 1.8$ .

Καταλήγοντας, οι σχεδιασμοί-3 και 6 (designs-3,6) εμφανίζονται να είναι οι πιο ανεκτικές σε όρους προβλεπόμενης διακύμανσης. Το κύριο χαρακτηριστικό των σχεδιασμών αυτών είναι ότι περιλαμβάνουν επαναλήψεις αξονικών σημείων.

# Βιβλιογραφία

- [1] Steven G. Gilmore - *Response Surface Designs for Experiments in Bioprocessing*, Biometrics 62, 323-331
- [2] Tanvir Ahmad, Steven G. Gilmore - *Robustness of Subset Surface Designs to Missing Observations*, Dover (1976)
- [3] Χρήστος Κουκουβίνος - *Γραμμικά μοντέλα και Σχεδιασμοί*, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Αθήνα (2003)
- [4] Box G. E. P, Draper N. R. - *Response Surface and Empirical Model Building*, John Wiley and Sons, New York (1986)
- [5] Box G. E. P, Hunter J.S - *Statistics for Experimenters*, John Wiley and Sons, New York (1978)
- [6] Box G. E. P, Meyer R. D - *An Analysis for Unreplicated Fractional Factorials*, Technometrics Vol.28, No 1, pp 11-18 (1986)
- [7] Box G. E. P, Meyer R. D - *Dispersion Effects from Fractional Factorials*, Technometrics Vol.28, No 1, pp 19-27 (1986)
- [8] Christensen R. - *Analysis of Variance, Design and Regression*, Chapman, Hall/CRC, New York (1996)
- [9] Daniel C. and Woods F.S - *Fitting Equations to Data*, 2nd Edition John Wiley and Sons, New York (1971)
- [10] Davies O. L - *The Design and Analysis of Industrial Experiments*, London: Oliver and Boyd
- [11] Draper N. and Smith H. - *Applied regression Analysis* 3rd Edition John Wiley and Sons, New York (1997)
- [12] Montgomery D. C. - *Design and Analysis of Experiments* 5th Edition, John Wiley and Sons, New York (2000)
- [13] Scheffe H. - *The Analysis of Variance*, John Wiley and Sons, New York (1959)
- [14] Κοκολάκης Γ. και Σπηλιώτης Ι. - *Εισαγωγή στη Θεωρία Πιθανοτήτων και Στατιστικής*, 3η Έκδοση, Εκδόσεις Συμεών, Αθήνα (1999)



- 
- [15] Nuran Bradley - *The Response Surface Methodology*, Department of Mathematical Science, Indiana University of South Bed (2007)
- [16] Ρούσσα Γ. Γ. -*Στατιστική Συμπερασματολογία-Έλεγχοι Υποθέσεων*, 2η Έκδοση, Εκδόσεις Ζήτη, Θεσσαλονίκη (1997)
- [17] Richard A. Johnson, Gouri K. Bhattacharyya -*Statistics-principles and methods*, Fourth Edition, John Wiley and Sons, New York (2001)
- [18] Graybill, Franklin A. -*Regression Analysis-concepts and Applications*, ITP (1994)
- [19] Box, G. E. P. and Wilson -*On the Experimental Attainment of Optimum Conditions*, J. Royal Statist. Soc. Ser. B, Vol. 13, pp. 1-45.