



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

Σχεδιασμοί τριών επιπέδων στην ανάλυση αποκριτικών επιφανειών

Διπλωματική εργασία του σπουδαστή της
ΣΕΜΦΕ Βαρβέρη Δημήτρη

ΑΘΗΝΑ 2013

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Ένα απ'τα προβλήματα που αντιμετωπίζουν οι ερευνητές κατά τη διαδικασία της ανάλυσης αποκριτικών επιφανειών είναι ότι η εκθετική αύξηση του πλήθους των εκτελέσεων στους σχεδιασμούς την κάνει ιδιαίτερα χρονοβόρα και αντιοικονομική.

Στην παρούσα εργασία περιγράφονται σχεδιασμοί τριών επιπέδων οι οποίοι συμβάλουν στην επίλυση του συγκεκριμένου προβλήματος.

Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μια εισαγωγή στους παραγοντικούς σχεδιασμούς και παρουσιάζονται συνοπτικά οι σχεδιασμοί δύο και τριών επιπέδων. Στο δεύτερο κεφάλαιο εισάγεται η έννοια των αποκριτικών επιφανειών και τα κριτήρια αξιολόγησης των σχεδιασμών. Στο τρίτο και το τέταρτο περιγράφονται οι Box-Behnken σχεδιασμοί, οι μικροί Box-Behnken σχεδιασμοί καθώς και οι μη πλήρεις σχεδιασμοί κατά μπλοκ. Τέλος στο πέμπτο κεφάλαιο παρουσιάζονται οι βέλτιστοι σχεδιασμοί τριών επιπέδων για αποκριτικές επιφάνειες και κάποια παραδείγματα.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου κύριο Χρ. Κουκουβίνο για την πολύτιμη βοήθεια και συμβολή του στην ολοκλήρωση της εργασίας αυτής, τη συνάδελφο, μα πάνω απ'όλα φίλη μου υπ.διδάκτορα Άννα Σκούντζου γιατί χωρίς τις συμβουλές και την καθοδήγησή της η εργασία αυτή δεν θα είχε πραγματοποιηθεί. Τέλος να ευχαριστήσω τη σύντροφο μου Φαίη για την αμέριστη στήριξη και κατανόηση που επέδειξε όλο αυτό το διάστημα.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Σελ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΟΥΣ ΠΑΡΑΓΟΝΤΙΚΟΥΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥΣ

1.1	Παραγοντικοί σχεδιασμοί	4
1.2	2 ^k Παραγοντικοί σχεδιασμοί	4
1.3	3 ^k Παραγοντικοί σχεδιασμοί	5
1.4	Ανάμειξη στον 3 ^k παραγοντικό σχεδιασμό	8
1.5	Ο 3 ^k παραγοντικός σχεδιασμός σε 3 ^P blocks	8

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΑΠΟΚΡΙΤΙΚΕΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΕΣ

2.1	Ανάλυση αποκριτικών επιφανειών	10
2.2	Η μέθοδος της πιο απότομης ανόδου	11
2.3	Κεντρικά σημεία και έλεγχος καμπυλότητας	12
2.4	Το μοντέλο δεύτερης τάξης	14
2.5	Προσδιορισμός του βέλτιστου σημείου απόκρισης	14
2.6	Χαρακτηρισμός της μορφής της αποκριτικής επιφάνειας	15
2.7	Σχεδιασμοί δεύτερης τάξης και περιστρεψιμότητα	16
2.8	Κεντρικοί Σύνθετοι Σχεδιασμοί	19
2.9	Box-Behnken Σχεδιασμοί	21
2.10	Κριτήρια για την αξιολόγηση πειραματικών σχεδιασμών	23

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΜΙΚΡΟΙ BOX-BEHNKEN ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΙ

3.1	Εισαγωγή στους Box-Behnken σχεδιασμούς	25
3.2	Μικροί Box-Behnken σχεδιασμοί	26
3.3	Εναλλακτική αντικατάσταση	27
3.4	Κατασκευή και σύγκριση	29
3.5	Ένας νέος αλγόριθμος για την κατασκευή υψηλότερων διαστάσεων	

σχεδιασμών	32
------------	----

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

BOX-BEHNKEN ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΙ ΚΑΙ ΝΕΟΙ SODs

4.1	IBD (Incomplete block design) Μη πλήρης σχεδιασμός κατά μπλοκ	35
4.2	Η μέθοδος Box-Behnken (μέθοδος I)	36
4.3	Η γενικευμένη Box-Behnken μέθοδος (Μέθοδος II)	36
4.4	Νέοι σχεδιασμοί δεύτερης τάξης	40
4.5	Box –Behnken ορθογώνιοι κατά μπλοκσχεδιασμοί και νέοι SODs	41
4.6	Αποτελέσματα	43
4.7	Συμπερασματικές παρατηρήσεις	49

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

ΒΕΛΤΙΣΤΟΙ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΙ ΤΡΙΩΝ ΕΠΙΠΕΔΩΝ ΓΙΑ ΤΗ ΜΕΛΕΤΗ ΑΠΟΚΡΙΤΙΚΩΝ ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ

5.1	Βέλτιστοι σχεδιασμοί τριών επιπέδων για αποκριτική επιφάνεια σε σφαιρικές πειραματικές περιοχές	52
5.2	Βασικές έννοιες για τους βέλτιστους σχεδιασμούς	53
5.3	Σχεδιασμοί Box-Behnken	56
5.4	D-Optimal Σχεδιασμοί τριών επιπέδων	59
5.4.1	D-Optimal Σχεδιασμοί για $t = 4$ παράγοντες	59
5.4.2	D-optimal σχεδιασμοί για $t = 5-12$ παράγοντες	62
5.5	Μεροληψία από τρίτης-τάξης όρους και έλεγχος έλλειψης προσαρμογής	65
5.6	Απώλεια της απόδοσης λόγω του περιορισμού των σχεδιασμών τριών επιπέδων	67
5.7	Παραδείγματα για σχεδιασμούς τριών επιπέδων για πιο σύνθετες εφαρμογές	70
5.7.1	Παράδειγμα με διεργασία και μείγμα παραγόντων	71
5.7.2	Παράδειγμα της διαδικασίας και με ποιοτικούς παράγοντες	73

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	74
---------------------	----

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΟΥΣ ΠΑΡΑΓΟΝΤΙΚΟΥΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥΣ

1.1 Παραγοντικοί σχεδιασμοί

Οι παραγοντικοί σχεδιασμοί εμφανίζουν πολύ μεγάλη χρησιμότητα στην ανάλυση πειραμάτων, στα οποία εμπλέκονται διαφορετικοί παράγοντες και οι αλληλεπιδράσεις τους.

Ορισμός: Με τον όρο παραγοντικοί σχεδιασμοί εννοούμε ότι σε κάθε πλήρη δοκιμή ή επανάληψη του πειράματος εξετάζονται όλοι οι δυνατοί συνδυασμοί των επιπέδων των παραγόντων.

Έστω ότι υπάρχουν a επίπεδα του παράγοντα A και b επίπεδα του παράγοντα B , τότε κάθε επανάληψη περιλαμβάνει όλους τους ab συνδυασμούς των επιπέδων. Η αλλαγή που γίνεται στην απόκριση, από την αλλαγή στο επίπεδο του παράγοντα, ονομάζεται επίδραση του παράγοντα, η οποία είναι κύρια όταν αναφέρεται στους παράγοντες που είναι πρωταρχικής σημασίας στο πείραμα. Δεν είναι λίγες οι φορές που, εμφανίζεται αλληλεπίδραση μεταξύ των παραγόντων, αυτό σημαίνει ότι η διαφορά στην απόκριση μεταξύ των επιπέδων ενός παράγοντα δεν είναι ίδια σε όλα τα επίπεδα των άλλων παραγόντων.

Υπάρχουν ορισμένες ειδικές περιπτώσεις των παραγοντικών σχεδιασμών που παρουσιάζουν μεγάλο ενδιαφέρον, διότι χρησιμοποιούνται σε ερευνητικά προγράμματα και επίσης διότι αποτελούν τη βάση για άλλους σχεδιασμούς πειραμάτων με μεγάλη πρακτική αξία.

1.2 2^k Παραγοντικοί σχεδιασμοί

Ιδιαίτερα σημαντική ειδική περίπτωση των παραγοντικών σχεδιασμών είναι οι 2^k . Πρόκειται για σχεδιασμούς στους οποίους οι k παράγοντες του πειράματος βρίσκονται σε δύο στάθμες. Αυτές οι στάθμες μπορεί να είναι ποσοτικές, όπως είναι οι δύο τιμές της θερμοκρασίας, της πίεσης ή του χρόνου, ή μπορεί να είναι ποιοτικές, όπως είναι δύο μηχανές, δύο χειριστές, η «χαμηλή» και «υψηλή» στάθμη ενός παράγοντα, ή ακόμα η παρουσία και απουσία ενός παράγοντα.

Τα αθροίσματα τετραγώνων για τις κύριες επιδράσεις και τις αλληλεπιδράσεις, αν πρόκειται για ισορροπημένο σχεδιασμό, προκύπτουν απ' τον εξής γενικό τύπο :

$$SS_C = \frac{(\sum_{i=1}^{2^k} c_i y_i)^2}{n \sum_{i=1}^{2^k} c_i^2}$$

Αν ο σχεδιασμός δεν είναι ισορροπημένος τότε :

$$SS_C = \frac{(\sum_{i=1}^{2^k} c_i y_i)^2}{\sum_{i=1}^{2^k} n_i c_i^2}$$

Ισορροπημένος είναι ένας σχεδιασμός όταν $\sum_{i=1}^{2^k} c_i = 0$ όπου $c_i = \pm 1$, n είναι ο αριθμός των επαναλήψεων του πειράματος και y_i οι παρατηρήσεις της μεταβλητής

1.3 3^k Παραγοντικοί σχεδιασμοί

Οι παραγοντικοί και οι κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί χρησιμοποιούνται ευρύτατα στην βιομηχανική έρευνα και ανάπτυξη. Υπάρχουν μερικές επεκτάσεις και παραλλαγές των σχεδιασμών αυτών, που είναι αρκετά χρήσιμες, όπως είναι οι σχεδιασμοί για τις περιπτώσεις όπου όλοι οι παράγοντες εμφανίζονται σε τρεις στάθμες, δηλαδή οι 3^k παραγοντικοί σχεδιασμοί. Οι παράγοντες και οι αλληλεπιδράσεις θα συμβολίζονται με κεφαλαία γράμματα. Χωρίς περιορισμό της γενικότητας, μπορούμε να αναφερόμαστε στις τρεις στάθμες των παραγόντων σαν χαμηλή, μεσαία και υψηλή. Αυτές οι στάθμες θα συμβολίζονται με τα ψηφία 0 (χαμηλή), 1 (μεσαία) και 2 (υψηλή). Κάθε συνδυασμός αγωγών στον 3^k σχεδιασμό συμβολίζεται με k ψηφία, όπου το πρώτο ψηφίο δείχνει την στάθμη του παράγοντα Α, το δεύτερο ψηφίο δείχνει τη στάθμη του παράγοντα Β, και το k ψηφίο δείχνει τη στάθμη παράγοντα Κ. Στον 2^k σχεδιασμό, προτιμάμε τον ± 1 συμβολισμό, επειδή αυτός διευκολύνει τη γεωμετρική ερμηνεία του σχεδιασμού και επειδή αυτός εφαρμόζεται άμεσα στο μοντέλο παλινδρόμησης, στην ομαδοποίηση και στην κατασκευή των κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών.

Ο 3^k σχεδιασμός χρησιμοποιείται συχνά όταν μας ενδιαφέρει η καμπυλότητα στην συνάρτηση απόκρισης. Η πρόσθεση της τρίτης στάθμης επιτρέπει η σχέση

μεταξύ της απόκρισης και κάθε παράγοντα να παριστάνεται από ένα μοντέλο δεύτερης τάξης. Εντούτοις, πρέπει να θεωρήσουμε τα εξής δύο σημεία:

1. Ο 3^k σχεδιασμός δεν είναι ο καλύτερος τρόπος για να παραστήσουμε το μοντέλο δεύτερης τάξης. Οι σχεδιασμοί αποκριτικής επιφάνειας είναι καλύτεροι για το σκοπό αυτό.
2. Ο 2^k σχεδιασμός που επαυξάνεται με κεντρικά σημεία, είναι ένας πολύ καλός τρόπος για να πάρουμε μια ένδειξη της καμπυλότητας. Αυτός μας επιτρέπει να κρατήσουμε το μέγεθος και την πολύπλοκότητα του σχεδιασμού χαμηλά και ταυτόχρονα μας παρέχει κάποια προστασία ενάντια στην καμπυλότητα.

Ο συνήθης συμβολισμός με τα ψηφία 0, 1, 2 χρησιμοποιείται για τους συνδυασμούς αγωγών. Έτσι για παράδειγμα το 0120 παριστάνει έναν συνδυασμό αγωγών σε έναν 3^4 σχεδιασμό όπου ο A και ο D είναι στη χαμηλή στάθμη, ο B στη μεσαία και ο C στην υψηλή στάθμη. Υπάρχουν 3^k συνδυασμοί αγωγών που έχουν $3^k - 1$ βαθμούς ελευθερίας. Αυτοί οι συνδυασμοί αγωγών επιτρέπουν να προσδιορίζουμε τα αθροίσματα τετραγώνων για τις k κύριες επιδράσεις με 2 βαθμούς ελευθερίας η κάθε μια, τις $\binom{k}{2}$ αλληλεπιδράσεις 2 παραγόντων με 4 βαθμούς ελευθερίας η κάθε μια, ή ακόμα την αλληλεπίδραση k παραγόντων με 2^k βαθμούς ελευθερίας. Γενικά μια αλληλεπίδραση h παραγόντων έχει 2^h βαθμούς ελευθερίας. Αν υπάρχουν n επαναλήψεις, τότε υπάρχουν συνολικά $3k(n-1)$ βαθμοί ελευθερίας για τοσφάλμα. Η ανάλυση διασποράς παρουσιάζεται στον Πίνακα 1.1.

Τα αθροίσματα τετραγώνων για τις κύριες επιδράσεις και τις αλληλεπιδράσεις υπολογίζονται με τις συνήθεις μεθόδους για τους παραγοντικούς σχεδιασμούς. Σαν ένα γενικό κανόνα αναφέρουμε ότι οι αλληλεπιδράσεις τριών παραγόντων και υψηλότερης τάξης δεν διασπώνται επιπλέον. Εντούτοις, οποιαδήποτε αλληλεπίδραση h παραγόντων έχει 2^{h-1} ορθογώνιες συνιστώσες με 2 βαθμούς ελευθερίας η κάθε μια. Για παράδειγμα, η αλληλεπίδραση 4 παραγόντων ABCD έχει $2^{4-1} = 8$ ορθογώνιες συνιστώσες με 2 βαθμούς ελευθερίας η κάθε μια, που συμβολίζονται με $ABCD^2$, ABC^2D , AB^2CD , $ABCD$, ABC^2D^2 , AB^2C^2D , AB^2CD^2 και $AB^2C^2D^2$. Γράφοντας αυτές τις συνιστώσες, σημειώνουμε ότι ο μοναδικός εκθέτης που επιτρέπεται για το πρώτο γράμμα είναι το 1. Αν ο εκθέτης για το πρώτο γράμμα δεν είναι 1, τότε ολόκληρη η έκφραση πρέπει να υψωθεί στο τετράγωνο και οι εκθέτες να υπολογισθούν modulo 3. Για να το εξηγήσουμε αυτό, θεωρούμε την εξής συνιστώσα: $A^2BCD = (A^2BCD)^2 = A^4B^2C^2D^2 = AB^2C^2D^2$. Αυτές οι συνιστώσες της αλληλεπίδρασης δεν έχουν φυσική

σημασία, αλλά είναι χρήσιμες για την κατασκευή πιο περίπλοκων σχεδιασμών.

Το μέγεθος του σχεδιασμού αυξάνει γρήγορα με το k . Για παράδειγμα, ένας 3^3 σχεδιασμός έχει 27 συνδυασμούς αγωγών για κάθε επανάληψη, ένας 3^4 σχεδιασμός έχει 81, ένας 3^5 σχεδιασμός έχει 243 κ.ο.κ. Συνεπώς, συχνά εκτελείται μια μόνον επανάληψη του 3^k σχεδιασμού και οι αλληλεπιδράσεις υψηλής τάξης συνδυάζονται για να μας δώσουν μια εκτίμηση του σφάλματος. Σαν μια επεξήγηση, 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 και μια επανάληψη του 3^4 σχεδιασμού μας εφοδιάζει με 48 βαθμούς ελευθερίας για το σφάλμα. Αυτοί είναι αρκετά μεγάλοι σχεδιασμοί για $k \geq 3$ παράγοντες και κατά συνέπεια όχι τόσο εύκολοι στη χρήση.

Πίνακας 1.1

Πίνακας ANOVA για έναν 3^k σχεδιασμό(Κουκουβίνος, Στατιστικοί σχεδιασμοί, 2005)

Πηγή Μεταβολής	S.S.	d.f.
K Κύριες επιδράσεις		
A	SS_A	2
B	SS_B	2
⋮	⋮	⋮
K	SS_K	2
$\binom{k}{2}$ αλληλεπιδράσεις 2-παραγόντων		
AB	SS_{AB}	4
AC	SS_{AC}	4
⋮	⋮	⋮
JK	SS_{JK}	4
$\binom{k}{3}$ αλληλεπιδράσεις 3-παραγόντων		
ABC	SS_{ABC}	8
ABD	SS_{ABD}	8
⋮	⋮	⋮
IJK	SS_{IJK}	8
⋮	⋮	⋮
$\binom{k}{k} = 1$ αλληλεπίδραση k-παραγόντων		
ABC...K	$SS_{ABC...K}$	2^k
Σφάλμα	SSE	$3^k(n-1)$
Ολική	SST	$n3^k - 1$

1.4 Ανάμειξη στον 3^k παραγοντικό σχεδιασμό

Ακόμη και όταν εκτελείται μια μόνο επανάληψη ενός 3^k σχεδιασμού, ο σχεδιασμός απαιτεί τόσες πολλές παρατηρήσεις που είναι σχεδόν απίθανο όλες οι 3^k παρατηρήσεις να μπορούν να γίνουν κάτω από ομοιόμορφες συνθήκες. Επομένως, η ανάμειξη σε blocks είναι συχνά αναγκαία. Ο 3^k σχεδιασμός μπορεί να αναμειχθεί σε 3^p μη πλήρη blocks, όπου $p < k$. Συνεπώς, οι σχεδιασμοί αυτοί μπορούν να αναμειχθούν σε τρία blocks, εννέα blocks, κ.ο.κ.

1.5 Ο 3^k παραγοντικός σχεδιασμός σε 3^p blocks

Ο 3^k παραγοντικός σχεδιασμός μπορεί να αναμειχθεί σε 3^p blocks με 3^{k-p} παρατηρήσεις το καθένα, όπου $p < k$. Η διαδικασία είναι να επιλέξουμε p ανεξάρτητες επιδράσεις να είναι αναμειγμένες με τα blocks. Σαν αποτέλεσμα, ακριβώς $(3^p - 2p - 1)/2$ άλλες επιδράσεις αναμειγνύονται αυτόματα. Αυτές οι επιδράσεις είναι οι γενικευμένες αλληλεπιδράσεις των επιδράσεων που επελέγησαν αρχικά.

Για μεγαλύτερη κατανόηση, παραθέτουμε ένα παράδειγμα με έναν 3^7 σχεδιασμό να είναι αναμειγμένος σε 27 blocks. Αφού $p = 3$, θέλουμε να επιλέξουμε τρεις ανεξάρτητες συνιστώσες της αλληλεπίδρασης και αυτόματα θα αναμειχθούν άλλες $[3^3 - 2(3) - 1]/2 = 10$ συνιστώσες.

Υποθέτουμε ότι επιλέγουμε τις ABC^2DG , BCE^2F^2G και $BDEFG$. Τρεις βασικές αντιθέσεις μπορούν να κατασκευασθούν από αυτές τις επιδράσεις και τα 27 blocks μπορούν να παραχθούν με τις μεθόδους που περιγράφηκαν προηγουμένως. Οι άλλες 10 επιδράσεις που αναμειγνύονται με τα blocks είναι:

$$(ABC^2DG)(BCE^2F^2G) = AB^2DE^2F^2G^2$$

$$(ABC^2DG)(BCE^2F^2G)^2 = AB^3C^4DEVG^3 = ACDEF$$

$$(ABC^2DG)(BDEFG) = AB^2C^2D^2EFG^2$$

$$(ABC^2DG)(BDEFG)^2 = AB^3C^2D^3E^2F^2G^3 = AC^2E^2F^2$$

$$(BCE^2F^2G)(BDEFG) = B^2CDE^3F^3G^2 = BC^2D^2C$$

$$(BCE^2F^2G)(BDEFG)^2 = B^3CD^2EFG^3 = CD^2EF$$

$$(ABC^2DG)(BCE^2F^2G)(BDEFG) = AB^3C^3D^2E^3F^3G^3 =$$

$$AD^2(ABC^2DG)^2(BCE^2F^2G)(BDEFG) = A^2B^4C^5D^3G^4 = AB^2CG^2$$

$$(ABC^2DG)(BCE^2F^2G)^2(BDEFG) = ABCD^2E^2F^2G$$

$$(ABC^2DG)(BCE^2F^2G)(BDEFG)^2 = ABC^3D^3E^4F^4G^4 = ABDEFG$$

Αυτός είναι ένας πολύ μεγάλος σχεδιασμός που απαιτεί $3^7 = 2187$ παρατηρήσεις ταξινομημένες σε 27 blocks με 81 παρατηρήσεις το καθένα. Στην πράξη, συνήθως καταφεύγουμε σε έναν κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό, ο οποίος απαιτεί λιγότερες παρατηρήσεις.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΑΠΟΚΡΙΤΙΚΕΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΕΣ

2.1 Ανάλυση αποκριτικών επιφανειών

Η μεθοδολογία των αποκριτικών επιφανειών (response surface methodology ή RSM), είναι μια συλλογή μαθηματικών και στατιστικών τεχνικών που είναι χρήσιμες για τη μοντελοποίηση και ανάλυση προβλημάτων στα οποία η απόκριση που ενδιαφέρει επηρεάζεται από αρκετές μεταβλητές και το αντικείμενο είναι να βελτιστοποιήσουμε αυτή την απόκριση. Αν συμβολίσουμε την αναμενόμενη απόκριση με $E(y) = f(x_1, x_2) = \eta$, τότε η επιφάνεια που παριστάνεται από την:

$$\eta = f(x_1, x_2)$$

ονομάζεται αποκριτική επιφάνεια.

Στα περισσότερα προβλήματα της μεθοδολογίας των αποκριτικών επιφανειών (RSM), η μορφή της σχέσης μεταξύ της απόκρισης και των ανεξάρτητων μεταβλητών είναι άγνωστη. Έτσι, το πρώτο βήμα στη μεθοδολογία των αποκριτικών επιφανειών είναι να βρούμε μια κατάλληλη προσέγγιση για την αληθινή συναρτησιακή σχέση μεταξύ του y και του συνόλου των ανεξάρτητων μεταβλητών. Συνήθως χρησιμοποιείται ένα πολυώνυμο μικρού βαθμού σε κάποια περιοχή των ανεξάρτητων μεταβλητών.

Αν η απόκριση εκφράζεται καλά από ένα μοντέλο γραμμικής συνάρτησης των ανεξάρτητων μεταβλητών, τότε η προσεγγιστική συνάρτηση είναι το μοντέλο πρώτης τάξης

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + \varepsilon \quad (1)$$

Αν στο σύστημα υπάρχει καμπυλότητα, τότε πρέπει να χρησιμοποιηθεί ένα πολυώνυμο υψηλότερου βαθμού, όπως το μοντέλο δεύτερης τάξης

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

Σχεδόν όλα τα προβλήματα της μεθοδολογίας των αποκριτικών επιφανειών χρησιμοποιούν το ένα ή και τα δύο από αυτά τα προσεγγιστικά πολυώνυμα. Βέβαια, είναι απίθανο ένα πολυωνυμικό μοντέλο να αποτελεί λογική προσέγγιση μιας αληθινής συναρτησιακής σχέσης πάνω σε ολόκληρο το χώρο των ανεξάρτητων μεταβλητών, αλλά για μια σχετικά μικρή περιοχή αυτά συνήθως δουλεύουν αρκετά καλά.

Η μέθοδος των ελάχιστων τετραγώνων χρησιμοποιείται για την εκτίμηση των παραμέτρων στα προσεγγιστικά πολυώνυμα. Η ανάλυση της αποκριτικής επιφάνειας γίνεται τότε στους όρους της επιφάνειας που προσαρμόζεται. Αν η επιφάνεια που προσαρμόζεται αποτελεί επαρκή προσέγγιση της αληθινής συνάρτησης απόκρισης, τότε η ανάλυση της επιφάνειας που προσαρμόζεται θα είναι προσεγγιστικά ισοδύναμη με την ανάλυση του πραγματικού συστήματος.

Οι παράμετροι του μοντέλου μπορούν να εκτιμηθούν πολύ πιο αποτελεσματικά αν χρησιμοποιηθούν κατάλληλοι πειραματικοί σχεδιασμοί αποκριτικών επιφανειών (response surface designs).

Η μεθοδολογία των αποκριτικών επιφανειών είναι μια ακολουθιακή διαδικασία. Συχνά, όταν είμαστε σε ένα σημείο της αποκριτικής επιφάνειας που είναι απομακρυσμένο από το βέλτιστο, υπάρχει μικρή καμπυλότητα στο σύστημα και το μοντέλο πρώτης τάξης θεωρείται κατάλληλο. Ο σκοπός μας εδώ είναι να οδηγήσουμε τον πειραματιστή γρήγορα και αποτελεσματικά στη γενική περιοχή του βέλτιστου. Από τη στιγμή που έχει βρεθεί η περιοχή του βέλτιστου, ένα πιο περίπλοκο μοντέλο, όπως αυτό της δεύτερης τάξης, μπορεί να χρησιμοποιηθεί και μπορεί να εκτελεστεί μια ανάλυση για τον εντοπισμό του βέλτιστου. Ο τελικός αντικειμενικός σκοπός της μεθοδολογίας των αποκριτικών επιφανειών είναι να προσδιορίσουμε τις βέλτιστες συνθήκες λειτουργίας για το σύστημα ή να καθορίσουμε μια περιοχή του χώρου των παραγόντων στην οποία ικανοποιούνται οι προδιαγραφές λειτουργίας. Η μεθοδολογία των αποκριτικών επιφανειών (RSM) δεν χρησιμοποιείται αρχικά για να κατανοήσουμε το φυσικό μηχανισμό του συστήματος, παρόλο που η RSM μπορεί να βοηθήσει στην απόκτηση τέτοιας γνώσης. Επιπλέον, σημειώνουμε ότι το «βέλτιστο» στην RSM χρησιμοποιείται με ειδικό νόημα, οι διαδικασίες «ανάβασης του λόφου» της RSM εξασφαλίζουν σύγκλιση μόνο σε ένα τοπικό βέλτιστο.

2.2 Η μέθοδος της πιο απότομης ανόδου

Συχνά, η αρχική εκτίμηση των βέλτιστων συνθηκών λειτουργίας ενός συστήματος απέχει πολύ από το πραγματικό βέλτιστο. Σε αυτές τις περιπτώσεις, ο αντικειμενικός σκοπός του πειραματιστή είναι να μετακινηθεί γρήγορα στη γενική περιοχή του βέλτιστου. Επιθυμούμε να χρησιμοποιήσουμε μια απλή και οικονομική αποδοτική πειραματική διαδικασία. Όταν είμαστε μακριά από το βέλτιστο, συνήθως

υποθέτουμε ότι ένα μοντέλο πρώτης τάξης είναι μια επαρκής προσέγγιση της αληθινής επιφάνειας σε μια μικρή περιοχή των x .

Η μέθοδος της πιο απότομης ανόδου είναι μια διαδικασία για να μετακινούμαστε ακολουθιακά κατά μήκος του μονοπατιού της πιο απότομης ανόδου, δηλαδή, στην κατεύθυνση της μέγιστης αύξησης στην απόκριση. Φυσικά, αν επιθυμούμε ελαχιστοποίηση, τότε μιλάμε για τη μέθοδο της πιο απότομης καθόδου. Το μοντέλο πρώτης τάξης που προσαρμόζεται είναι

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i \quad (3)$$

και η αποκριτική επιφάνεια πρώτης τάξης, δηλαδή, τα περιγράμματα του \hat{y} , είναι μια σειρά παραλλήλων ευθειών

Η κατεύθυνση της πιο απότομης ανόδου είναι η κατεύθυνση στην οποία το \hat{y} αυξάνει πιο γρήγορα. Αυτή η κατεύθυνση είναι παράλληλη στην κανονική στην αποκριτική επιφάνεια που προσαρμόζεται. Συχνά παίρνουμε σαν το μονοπάτι της πιο απότομης ανόδου τη γραμμή δια μέσου του κέντρου της περιοχής που ενδιαφέρει και της κανονικής στην επιφάνεια που προσαρμόζεται. Επομένως, τα βήματα κατά μήκος του μονοπατιού είναι ανάλογα των συντελεστών παλινδρόμησης $\{\hat{\beta}_i\}$. Το πραγματικό μέγεθος του βήματος προσδιορίζεται από τον πειραματιστή και βασίζεται στη γνώση της διαδικασίας ή άλλων πρακτικών θεωρήσεων.

Τα πειράματα εκτελούνται κατά μήκος του μονοπατιού της πιο απότομης ανόδου μέχρις ότου να μην παρατηρείται επιπλέον αύξηση στην απόκριση. Τότε μπορεί να προσαρμοστεί ένα νέο μοντέλο πρώτης τάξης, να προσδιοριστεί ένα νέο μονοπάτι της πιο απότομης ανόδου και η διαδικασία συνεχίζεται. Τελικά, ο πειραματιστής θα φθάσει στην περιοχή του βέλτιστου. Αυτό συνήθως δείχνεται με την έλλειψη προσαρμογής του μοντέλου πρώτης τάξης. Στο σημείο αυτό εκτελούνται επιπρόσθετα πειράματα για να πάρουμε μια πιο ακριβή εκτίμηση του βέλτιστου.

2.3 Κεντρικά σημεία και έλεγχος καμπυλότητας.

Η πρόσθεση κεντρικών σημείων σε έναν 2^k παραγοντικό σχεδιασμό επιτρέπει στον πειραματιστή να εκτιμήσει το καθαρό πειραματικό σφάλμα. Η πρόσθεση των κεντρικών σημείων επιτρέπει τη διαμέριση του αθροίσματος τετραγώνων των

καταλοίπων SSE σε δυο παράγοντες. Ο ένας παράγοντας είναι το άθροισμα των τετραγώνων που οφείλεται στο καθαρό σφάλμα SSPE και ο άλλος το άθροισμα των τετραγώνων που οφείλεται στην έλλειψη προσαρμογής SSLOF. Δηλαδή ισχύει:

$$SSE = SSPE + SSLOF$$

Μια γενική ανάπτυξη των παραπάνω μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας ένα μοντέλο παλινδρόμησης με k παράγοντες. Έστω ότι έχουμε 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:

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

Υψώνοντας στο τετράγωνο και αθροίζοντας ως προς i και j έχουμε:

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

Το αριστερό μέλος της παραπάνω εξίσωσης είναι το σύνθητες άθροισμα τετραγώνων των καταλοίπων. Ο πρώτος παράγοντας του δεύτερου μέλους είναι το άθροισμα τετραγώνων του καθαρού σφάλματος SSPE ενώ 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 καθαρό σφάλμα είναι:

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

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:

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

Η μέση τιμή του MSPE είναι σ^2 ενώ εκείνη του MSLOF είναι:

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

Αν το μοντέλο είναι γραμμικό τότε έχουμε $\text{MSLOF} = \sigma^2$. Αν το μοντέλο δεν είναι γραμμικό τότε $E(\text{MSLOF}) > \sigma^2$. 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.

Πρέπει να τονίσουμε το γεγονός ότι για να προσαρμόσουμε ένα μοντέλο πρώτης τάξης χρησιμοποιούμε ορθογώνιους σχεδιασμούς. Η χρήση ορθογώνιων σχεδιασμών επιτρέπει στις επιδράσεις των k μεταβλητών εισόδου να εκτιμηθούν ανεξάρτητα. Επίσης, είναι βέλτιστοι με την έννοια ότι παρέχουν εκτιμήσεις ελάχιστης διασποράς στις τιμές των β_i .

2.4 Το μοντέλο δεύτερης τάξης

Όταν ο πειραματιστής είναι σχετικά κοντά στο βέλτιστο, συνήθως απαιτείται ένα μοντέλο βαθμού 2 ή υψηλότερου για να προσεγγίσουμε την απόκριση λόγω της καμπυλότητας στην αληθινή αποκριτική επιφάνεια. Στις περισσότερες περιπτώσεις, το μοντέλο δεύτερης τάξης

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_i x_i + \sum_{i=1}^k \hat{\beta}_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \hat{\beta}_{ij} x_i x_j \quad (4)$$

είναι κατάλληλο. Στην παράγραφο αυτή θα δείξουμε πως χρησιμοποιούμε αυτό το προσαρμοσμένο μοντέλο για να βρούμε το βέλτιστο σύνολο των συνθηκών λειτουργίας για τα x και να χαρακτηρίσουμε τη φύση της αποκριτικής επιφάνειας.

2.5 Προσδιορισμός του βέλτιστου σημείου απόκρισης

Υποθέτουμε ότι θέλουμε να βρούμε τα επίπεδα των x_1, x_2, \dots, x_k που βελτιστοποιούν την απόκριση που προβλέπουμε. Αυτό το σημείο, αν υπάρχει, θα είναι το σύνολο των x_1, x_2, \dots, x_k για τις οποίες οι μερικές παράγωγοι $\frac{\partial \hat{y}}{\partial x_1} = \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_2} =$

$\dots = \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_k} = 0$. Αυτό το σημείο, έστω $x_{1,0}$, $x_{2,0}$, $x_{k,0}$, ονομάζεται στάσιμο σημείο. Το στάσιμο σημείο μπορεί να παριστάνει (1) ένα σημείο της μέγιστης απόκρισης, (2) ένα σημείο της ελάχιστης απόκρισης, ή (3) ένα σημείο καμπής.

Μπορούμε να πάρουμε μια γενική λύση για το στάσιμο σημείο. Γράφοντας το μοντέλο δεύτερης τάξης σε μορφή πινάκων, έχουμε:

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \underline{x}\underline{b} + \underline{x}B\underline{x} \quad (5)$$

Όπου:

$$\underline{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix}, \underline{b} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_k \end{bmatrix} \quad \text{και} \quad B = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \hat{\beta}_{12}/2 & \dots & \hat{\beta}_{1k}/2 \\ & \hat{\beta}_{22} & \dots & \hat{\beta}_{2k}/2 \\ & & Sym & \ddots \\ & & & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix}$$

Δηλαδή, το \underline{b} είναι ένα $(k \times 1)$ διάνυσμα των συντελεστών παλινδρόμησης πρώτης τάξης και B είναι ένας $(k \times k)$ συμμετρικός πίνακας του οποίου τα κύρια διαγώνια στοιχεία είναι οι καθαρά τετραγωνικοί συντελεστές ($\hat{\beta}_{ii}$) και του οποίου τα στοιχεία εκτός της κυρίας διαγώνιου είναι το μισό των μεικτών τετραγωνικών συντελεστών ($\hat{\beta}_{ij}$, $i \neq j$). Η παράγωγος του \hat{y} ως προς το διάνυσμα \underline{x} ισούται με $\underline{0}$, έτσι έχουμε

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial \underline{x}} = \underline{b} + 2B\underline{x} = \underline{0} \quad (6)$$

Το στάσιμο σημείο είναι η λύση της εξίσωσης (6), ή

$$\underline{x}_0 = -\frac{1}{2}B^{-1}\underline{b} \quad (7)$$

Επιπλέον, αντικαθιστώντας την εξίσωση (7) στην εξίσωση (5), μπορούμε να βρούμε την πρόβλεψη της απόκρισης στο στάσιμο σημείο σαν:

$$\hat{y}_0 = \hat{\beta}_0 + \frac{1}{2}\underline{x}_0\underline{b} \quad (8)$$

2.6 Χαρακτηρισμός της μορφής της αποκριτικής επιφάνειας

Όταν βρούμε το στάσιμο σημείο, είναι συνήθως αναγκαίο να χαρακτηρίσουμε την αποκριτική επιφάνεια στην άμεση περιοχή αυτού του σημείου. Όταν λέμε χαρακτηρίζουμε, εννοούμε να προσδιορίσουμε αν το στάσιμο σημείο είναι ένα σημείο μέγιστης ή ελάχιστης απόκρισης ή ένα σημείο καμπής και τη σχετική ευαισθησία της απόκρισης στις μεταβλητές x_1, x_2, \dots, x_k .

Ο πιο άμεσος τρόπος να το κάνουμε αυτό είναι να εξετάσουμε ένα διάγραμμα

περιγράμματος του προσαρμοσμένου μοντέλου. Αν υπάρχουν μόνον δύο ή τρεις μεταβλητές της διαδικασίας (οι x) η κατασκευή και η ερμηνεία αυτού του διαγράμματος του περιγράμματος είναι σχετικά εύκολη. Εντούτοις, ακόμη και όταν υπάρχουν σχετικά λίγες μεταβλητές, μια περισσότερο τυπική ανάλυση μπορεί να είναι χρήσιμη.

Είναι χρήσιμο πρώτα να μετασχηματίσουμε το μοντέλο σε ένα νέο σύστημα συντεταγμένων με αρχή το \underline{x}_0 και τότε να περιστρέψουμε τους άξονες αυτού του συστήματος έως ότου αυτοί να είναι παράλληλοι με τους κύριους άξονες της προσαρμοσμένης αποκριτικής επιφάνειας

Μπορούμε να δείξουμε ότι αυτό έχει ως αποτέλεσμα το προσαρμοσμένο μοντέλο:

$$\hat{y} = \hat{y}_0 + \lambda_1 w_1^2 + \lambda_2 w_2^2 + \dots + \lambda_k w_k^2 \quad (9)$$

όπου τα $\{w_i\}$ είναι οι μετασχηματισμένες ανεξάρτητες μεταβλητές και τα $\{\lambda_i\}$ είναι σταθερές. Η εξίσωση (9) ονομάζεται κανονική μορφή του μοντέλου. Επιπλέον, τα $\{\lambda_i\}$ είναι οι ιδιοτιμές του πίνακα B .

Η φύση της αποκριτικής επιφάνειας μπορεί να προσδιοριστεί από το στάσιμο σημείο και το πρόσημο και μέγεθος των $\{\lambda_i\}$. Πρώτα, υποθέτουμε ότι το στάσιμο σημείο είναι μέσα στην περιοχή εξερεύνησης για την προσαρμογή του μοντέλου δεύτερης τάξης. Αν τα $\{\lambda_i\}$ είναι όλα θετικά, τότε το \underline{x}_0 είναι ένα σημείο ελάχιστης απόκρισης. Αν τα $\{\lambda_i\}$ είναι όλα αρνητικά, τότε το \underline{x}_0 είναι ένα σημείο μέγιστης απόκρισης. Και αν τα $\{\lambda_i\}$ έχουν διαφορετικά πρόσημα, τότε το \underline{x}_0 είναι σημείο καμπής. Επιπλέον, η επιφάνεια είναι πιο απότομη στην κατεύθυνση του w_1 , για το οποίο το $|\lambda_i|$ είναι το μεγαλύτερο.

2.7 Σχεδιασμοί δεύτερης τάξης και περιστρεψιμότητα

Είναι σημαντικό για έναν σχεδιασμό δεύτερης τάξης να έχει μια λογικά σταθερή κατανομή της $n\text{Var}Y(x)/\sigma^2$, όπου $Y(x)$ οι προβλεπόμενες τιμές της $y(x)$, σε όλη την έκταση της περιοχής του πειραματικού σχεδιασμού. Μια σταθερή $n\text{Var}Y(x)/\sigma^2$ παρέχει την απαιτούμενη ασφάλεια στο ότι η ποιότητα της $Y(x)$ σαν μια πρόβλεψη μελλοντικών τιμών απόκρισης είναι περίπου η ίδια σε όλη την έκταση της περιοχής του ενδιαφέροντος. Οι Box και Hunter (1957) ανέπτυξαν την ιδέα της

περιστρεψιμότητας του σχεδιασμού (design rotatability).

Ένας σχεδιασμός ονομάζεται περιστρέψιμος (rotatable), όταν η $n\text{Var}Y(x)/\sigma^2$ έχει την ίδια τιμή σε οποιοσδήποτε δυο θέσεις που έχουν την ίδια απόσταση από το κέντρο του σχεδιασμού. Με άλλα λόγια η $n\text{Var}Y(x)/\sigma^2$ είναι σταθερή σε σφαίρες.

Ο σκοπός της ιδέας της περιστρεψιμότητας των Box-Hunter ήταν να επιβάλλουν έναν τύπο σταθερότητας στη $n\text{Var}y(x)/\sigma^2$. Η περιστρεψιμότητα αιτιολογείται από το γεγονός ότι για δυο 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 είναι εξίσου καλές, δηλαδή να έχουν ίση διασπορά.

Πολλές ιδιότητες των πειραματικών σχεδιασμών σχετίζονται με τις ροπές σχεδιασμού. Παρακάτω, δεδομένου του πίνακα σχεδιασμού \mathbf{D} ,

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix}$$

Ορίζουμε ορισμένες από τις ροπές σχεδιασμού που θα χρησιμοποιηθούν παρακάτω:

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

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

κτλ.

Αυτές οι ροπές χαρακτηρίζουν τον τρόπο με τον οποίο είναι κατανομημένα τα σημεία του σχεδιασμού στον κ-διάστατο χώρο. Υπό μια έννοια οι ροπές σχεδιασμού μας βοηθούν στο να χαρακτηρίσουμε τη γεωμετρία του σχεδιασμού, το οποίο είναι πολύ σημαντικό.

Ορίζουμε ως περιττές ροπές όλες τις ροπές για τις οποίες τουλάχιστον μια μεταβλητή του σχεδιασμού είναι υψωμένη σε περιττή δύναμη.

Στη συνέχεια, για την περίπτωση ενός μοντέλου πρώτης τάξης ένας σχεδιασμός είναι περιστρέψιμος αν και μόνο αν όλες οι περιττές ροπές μέχρι δεύτερης τάξης είναι μηδέν και οι καθαρές ροπές δεύτερης τάξης είναι όλες ίσες. Δηλαδή,

$$(i)=0$$

$$(ij)=0$$

$$(ii)=\lambda_2$$

$$i, j = 1, 2, \dots, k, i \neq j$$

Θεωρώντας ότι οι μεταβλητές εισόδου είναι κωδικοποιημένες έχουμε ότι $\lambda_2 = 1$. Σαν αποτέλεσμα στην περίπτωση του μοντέλου πρώτης τάξης οι συνθήκες των ροπών σχεδιασμού για έναν περιστρέψιμο σχεδιασμό είναι ισοδύναμες με τις συνθήκες ροπών για έναν σχεδιασμό βέλτιστης διασποράς. Πράγματι, για έναν 2^k παραγοντικό σχεδιασμό αναλυτικής τάξης μεγαλύτερης ή ίσης του III με κωδικοποιημένες μεταβλητές εισόδου έχουμε:

$$(i)=0$$

$$(ij)=0$$

$$(ii)=1$$

$$i, j=1, 2, \dots, k, i \neq j$$

Το παραπάνω αποτέλεσμα επιβεβαιώνεται και από τη σχέση $n\text{Var}Y(x)/\sigma^2 = 1+\rho_x^2$, όπου ρ_x η απόσταση του x από την περιοχή σχεδιασμού.

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:

$$\frac{(iii)}{(iiij)} = 3, i \neq j$$

Γενικά ορίζεται ο συντελεστής περιστρεψιμότητας Q^* ο οποίος περιγράφεται στην εργασία των Draper και Pukelsheim με τίτλο “Another look at rotatability” και δίνεται από τον τύπο :

$$Q^* = \{ \text{tr}(\bar{A} - V_0)^2 \} / \{ \text{tr}(A - V_0)^2 \}$$

Με:

$$A = N^{-1} X' X$$

$$\bar{A} = V_0 + V_2 \text{tr}(A V_2) + V_4 \text{tr}(A V_4)$$

Και: X είναι ο πίνακας σχεδιασμού, V_0 ένας πίνακας με 1 στη θέση (1,1) και μηδέν οπουδήποτε αλλού, V_2 ένας πίνακας με $(3k)^{-1/2}$ σε κάθε μία από τις $3k$ θέσεις που αντιστοιχούν στις δεύτερης τάξης ροπές και μηδέν στις υπόλοιπες και V_4 ένας πίνακας με $3[3k(k+2)]^{-1/2}$ στις k θέσεις που αντιστοιχούν στις καθαρές ροπές τέταρτης τάξης, $[3k(k+2)]^{-1/2}$ στις $3k(k-1)$ θέσεις που αντιστοιχούν στις μεικτές ροπές τέταρτης τάξης και μηδέν οπουδήποτε αλλού.

Μερικοί σχεδιασμοί δεύτερης τάξης είναι οι Κεντρικοί Σύνθετοι Σχεδιασμοί (CCDs), οι 3^k Παραγοντικοί σχεδιασμοί και οι Box-Behnken.

2.8 Κεντρικοί Σύνθετοι Σχεδιασμοί

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

1. 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.
2. n_c κεντρικά σημεία ($n_c > 1$).
3. Δύο αξονικά σημεία στον άξονα κάθε μεταβλητής του σχεδιασμού σε απόσταση a από το κέντρο του σχεδιασμού. Αυτό λέγεται αξονικό τμήμα (axial portion) του σχεδιασμού.

Έτσι λοιπόν ο σχεδιασμός περιλαμβάνει F παραγοντικά σημεία, $2k$ αξονικά σημεία και n_c κεντρικά σημεία, για να εκτιμηθούν $p = (k+1)(k+2)/2$ επιδράσεις. Η ακολουθιακή φύση του σχεδιασμού είναι φανερή. Τα παραγοντικά σημεία αντιπροσωπεύουν έναν σχεδιασμό βέλτιστης διασποράς για ένα μοντέλο πρώτης τάξης. Τα κεντρικά σημεία παρέχουν πληροφόρηση όσο αφορά την ύπαρξη κυρτότητας στο σύστημα. Αν υπάρχει κυρτότητα στο σύστημα, η προσθήκη των αξονικών σημείων επιτρέπει την επαρκή εκτίμηση των δευτεροβάθμιων όρων.

Το κλάσμα αναλυτικής τάξης V συνεισφέρει σε μεγάλο βαθμό στην εκτίμηση των γραμμικών όρων και των αλληλεπιδράσεων δεύτερης τάξης. Είναι βέλτιστης διασποράς για αυτούς τους όρους. Τα παραγοντικά σημεία είναι τα μόνα που συνεισφέρουν στην εκτίμηση των όρων αλληλεπίδρασης. Τα αξονικά σημεία συνεισφέρουν στην εκτίμηση των δευτεροβάθμιων όρων. Χωρίς τα αξονικά σημεία, μόνο το άθροισμα των δευτεροβάθμιων όρων μπορεί να εκτιμηθεί και όχι κάθε ένας ξεχωριστά. Τα αξονικά σημεία δεν συνεισφέρουν στην εκτίμηση των όρων αλληλεπίδρασης. Τα κεντρικά σημεία παρέχουν μια εσωτερική εκτίμηση του σφάλματος (καθαρό σφάλμα) και συνεισφέρουν και αυτά στην εκτίμηση των δευτεροβάθμιων όρων.

Η επιλογή των παραμέτρων a και n_c είναι ιδιαίτερα σημαντική. Η επιλογή του a

εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από την περιοχή του πειράματος, ενώ αυτή των n_c έχει μεγάλη επιρροή στην κατανομή της $n\text{Var } \hat{y}(\chi)/\sigma^2$ μέσα στην περιοχή του πειράματος. Η επιλογή και των δυο παραμέτρων είναι άρρηκτα συνδεδεμένη με την ιδιότητα της περιστρεψιμότητας που εμφανίζει ο CCD.

Δεδομένου ότι έχουμε κωδικοποιήσει τις μεταβλητές εισόδου είναι εύκολο να δειχθεί ότι για τον CCD (εφόσον βέβαια το παραγοντικό τμήμα του σχεδιασμού είναι πλήρες παραγοντικό ή κλάσμα αναλυτικής τάξης V) οι περιττές ροπές σχεδιασμού μέχρι και τέταρτης τάξης είναι όλες μηδέν. Ένας CCD είναι περιστρέψιμος εάν $[iiii] = 3[iijj]$ για $i, j = 1, 2, \dots, k$ με $i \neq j$. Εάν g είναι ο παράγοντας κλίμακας που εκλέγεται έτσι ώστε $[ii] = 1$, τότε $g = [N/(F+2a^2)]^{1/2}$, όπου F είναι ο αριθμός των παραγοντικών σημείων και $N = F+2k+n_c$ είναι ο συνολικός αριθμός σημείων. Έτσι η συνθήκη περιστρεψιμότητας γράφεται:

$$Fg^4 + 2a^4g^4 = 3Fg^4 \text{ ή ισοδύναμα } a = F^{1/4}.$$

Ένας CCD είναι ορθογώνιος αν η μικτή ροπή τέταρτης τάξης $[iijj] = \lambda_4$ είναι ίση με τη μονάδα. Σε όρους του παράγοντα κλίμακα 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 $a = \left[\frac{FN^{1/2} - F}{2} \right]^{1/2}$. Από τη δεύτερη συνθήκη για να είναι ο CCD περιστρέψιμος έχουμε:

$$\frac{[iii]}{[iijj]} = \frac{F + 2a^4}{F} = 3, i \neq j \text{ ή } a = \sqrt[4]{F}$$

Η περιστρεψιμότητα του CCD διατηρείται πάντα αν ικανοποιείται η παραπάνω εξίσωση για το a , ανεξάρτητα από 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.

Πίνακας 2.1

**Τιμές του a για έναν περιστρέψιμο CCD(Χρ. Κουκουβίνος, Στατιστικοί
σχεδιασμοί, 2005)**

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

Αν θέλουμε ένας CCD να είναι ορθογώνιος όσο και περιστρέψιμος τότε θέτουμε $a = F^{1/4}$ και προσθέτουμε κεντρικά σημεία που αποδεικνύεται ότι ικανοποιούν την παρακάτω σχέση:

$$n_c = 4\sqrt{F} + 4 - 2k$$

όπου F το πλήθος των παραγοντικών σημείων και k το πλήθος των παραγόντων του σχεδιασμού. Το n_c είναι ίσο με τον πλησιέστερο ακέραιο που ικανοποιεί την παραπάνω σχέση.

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 $a = k^{1/2}$. Επίσης διευκολύνει μια κυβοειδή περιοχή με τρία επίπεδα για κάθε παράγοντα και $a = 1$, αν και η περιστρεψιμότητά 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.

2.9 Box-Behnken Σχεδιασμοί

Οι Box και Behnken (1960) δημιούργησαν μια οικογένεια σχεδιασμών τριών επιπέδων για την προσαρμογή δευτεροβάθμιων αποκριτικών επιφανειών. Η κατασκευή της κλάσης αυτής των σχεδιασμών βασίζεται στους ισορροπημένους μη πλήρεις σχεδιασμούς κατά μπλοκ (BIBD). Για παράδειγμα, ένας BIBD με τρεις αγωγές και τρία μπλοκ δίνεται από:

	Αγωγή 1	Αγωγή 2	Αγωγή 3
Μπλοκ 1	X	X	
Μπλοκ 2	X		X
Μπλοκ 3		X	X

και προέρχεται από την κλάση $(u, b, w, r, \lambda) = (k, k(k-1)/2, 2, k-1, 1)$.

Το ζευγάρι των αγωγών 1 και 2 υπονοεί, σύμφωνα με την RSM, 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 block 2 και 3 όπου οι τσεκαρισμένοι παράγοντες εμπλέκονται σε ένα 2^2 παραγοντικό σχεδιασμό, ενώ ο τρίτος παράγοντας φιξάρεται στο μηδέν. Έτσι, για $k = 3$ ο BBD δίνεται από:

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

Η τελευταία σειρά υπονοεί έναν υποπίνακα κεντρικών παρατηρήσεων.

Για $k = 3$ ο CCD περιέχει $14+n_c$ runs, ενώ ο BBD $12+n_c$ runs. Για $k = 4$ και οι δυο σχεδιασμοί περιέχουν $24+n_c$ runs. Για $k = 5$ ο CCD περιέχει $42+n_c$ runs (όταν το παραγοντικό τμήμα του είναι πλήρες παραγοντικό), ενώ ο BBD $40+n_c$ runs.

Αντίθετα με τις περιπτώσεις για $k = 3, 4, 5$ η κατασκευή των BBD για $k > 6$ βασίζεται στους μερικώς ισορροπημένους μη πλήρεις σχεδιασμούς κατά μπλοκ (Partial BIBDs-PBIBDs), (Montgomery). Σύμφωνα με αυτούς, κάθε αγωγή δεν εμφανίζεται με κάθε άλλη τον ίδιο αριθμό φορές. Άρα σύμφωνα με την κατασκευή των BBDs κάθε παράγοντας δεν εμφανίζεται σε ένα 2^2 παραγοντικό σχεδιασμό τον ίδιο αριθμό φορές με κάθε άλλο παράγοντα. Για να κατασκευάσουμε έναν BBD με $k = 6, 7$ πρέπει να χρησιμοποιήσουμε έναν 2^3 παραγοντικό σχεδιασμό.

Οι BBD είναι σχεδόν περιστρέψιμοι και στην περίπτωση των $k = 4, 7$

επιτυγχάνεται η περιστρεψιμότητα. Πράγματι για $k = 4$ είναι εύκολο να δείξουμε ότι όλες οι περιττές ροπές σχεδιασμού είναι μηδέν, ενώ $(iii) = 12/24$ και $(ijj) = 4/24$ για i διάφορο του j και συνεπώς $(iii)/(ijj) = 3$. Τέλος για να αποφεύγεται το ιδιάζον πρέπει να χρησιμοποιούνται 3-5 κεντρικές παρατηρήσεις.

2.10 Κριτήρια για την αξιολόγηση πειραματικών σχεδιασμών

Τα κριτήρια βελτιστότητας σχεδιασμού χαρακτηρίζονται από γράμματα του αλφάβητου και λέγονται συχνά αλφαβητικά κριτήρια βελτιστότητας. Το πιο διαδεδομένο είναι αυτό της D-βελτιστότητας (D-Optimality).

Η D-Optimality βασίζεται στην ιδέα ότι ο σχεδιασμός πρέπει να εκλέγεται ώστε να επιτυγχάνει συγκεκριμένες ιδιότητες στον πίνακα ροπών:

$$M = \frac{X^T X}{n}$$

Ο αντίστροφος του M δηλαδή $M^{-1} = n(X^T X)^{-1}$ (scaled dispersion matrix) περιέχει διασπορές και συνδιασπορές των συντελεστών παλινδρόμησης κλιμακοποιημένες με n/σ^2 . Σαν αποτέλεσμα, έλεγχος του πίνακα των ροπών σχεδιασμού σημαίνει έλεγχο των διασπορών και των συνδιασπορών.

Μια σημαντική νόρμα του πίνακα των ροπών σχεδιασμού είναι η ορίζουσα, δηλαδή:

$$|M| = \frac{|X^T X|}{n}$$

όπου p ο αριθμός των παραμέτρων στο μοντέλο. Κάτω από την υπόθεση της ανεξαρτησίας των κανονικών σφαλμάτων του μοντέλου με σταθερή διασπορά, η ορίζουσα του $X^T X$ είναι αντιστρόφως ανάλογη προς το τετράγωνο του όγκου της περιοχής εμπιστοσύνης των συντελεστών της παλινδρόμησης. Ο όγκος αυτός είναι σχετικός γιατί αντανακλά πόσο καλά εκτιμάται το σύνολο των συντελεστών. Μικρή τιμή της ορίζουσας του $X^T X$ σημαίνει ανεπαρκή εκτίμηση του β στο μοντέλο. Ένας D-βέλτιστος σχεδιασμός είναι εκείνος για τον οποίο μεγιστοποιείται η ορίζουσα του M , δηλαδή:

$$\text{Max}_\zeta |M|$$

όπου Max σημαίνει το μέγιστο πάνω από όλους τους σχεδιασμούς. Σαν αποτέλεσμα ορίζουμε την D-αποτελεσματικότητα (D-Efficiency) ενός σχεδιασμού ζ ως:

$$D_{eff} = \left(\frac{|M(\zeta)|}{\text{Max}_{\zeta} |M(\zeta)|} \right)^{1/p}$$

Εδώ το $1/p$ λογαριάζει για τις ρεκτιμήσεις παραμέτρων που εκτιμώνται όταν κάποιος υπολογίσει την ορίζουσα του πίνακα διασποράς-συνδιασποράς. Ο ορισμός της D-Efficiency επιτρέπει τη σύγκριση σχεδιασμών που έχουν διαφορετικά μεγέθη δείγματος συγκρίνοντας τις D-Efficiencies.

Θεωρούμε τον σχεδιασμό βέλτιστης διασποράς, δηλαδή τον ορθογώνιο σχεδιασμό με όλα τα επίπεδα στα άκρα ± 1 της περιοχής του πειράματος. Ο πίνακας ροπών σχεδιασμού είναι:

$$M = \frac{x^T x}{n} = I_p$$

Αποδεικνύεται ότι για μοντέλα πρώτης τάξης η βελτιστότητα εκτείνεται στην ορίζουσα δηλαδή:

$$\text{Max}_{\zeta} |M(\zeta)| = 1$$

και έτσι για αυτά τα απλούστερα μοντέλα ο λεγόμενος σχεδιασμός βέλτιστης διασποράς είναι επίσης βέλτιστος με την έννοια της ορίζουσας, δηλαδή D-βέλτιστος.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3**ΜΙΚΡΟΙ BOX-BEHNKEN ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΙ****3.1 Εισαγωγή στους Box-Behnken σχεδιασμούς**

Οι Box-Behnken σχεδιασμοί είναι σχεδιασμοί τριών επιπέδων δεύτερης τάξης (SODs) που εισήγαγαν οι Box και Behnken (1958, 1960), για την εκτίμηση του μοντέλου απόκρισης δεύτερης τάξης

$$y = X\beta + \varepsilon \quad (1)$$

για m παράγοντες x_1, \dots, x_m , σε n εκτελέσεις όπου y είναι το $n \times 1$ διάνυσμα απόκρισης, το X είναι ένας $n \times p$ πίνακας μοντέλο με $n-1 \times p$ διανύσματα γραμμών $x = (1, x_1, \dots, x_m, x_1x_2, \dots, x_{m-1}x_m, x_1^2, \dots, x_m^2)$, το β είναι ένα $p \times 1$ διάνυσμα των παραμέτρων που πρέπει να εκτιμάται και ε είναι ένα $n \times 1$ διάνυσμα των σφαλμάτων με μηδενική μέση τιμή και πίνακας συνδιακύμανσης $I_n \sigma^2$. Οι Box-Behnken σχεδιασμοί είναι διαθέσιμοι για 3-12 και 16 παράγοντες. Οι Box-Behnken σχεδιασμοί είναι σφαιρικοί σχεδιασμοί επειδή όλα τα σημεία σχεδιασμού είναι είτε σε μια σφαίρα ή στο κέντρο μίας σφαίρας. Αυτοί οι σχεδιασμοί χρησιμοποιούνται όταν υπάρχει μικρό ή καθόλου ενδιαφέρον για την πρόβλεψη της απόκρισης στα άκρα, δηλαδή τις γωνίες του κύβου. Οι Box-Behnken σχεδιασμοί είναι είτε περιστρέψιμοι (για εκείνους με 4 και 7 παράγοντες) ή σχεδόν περιστρέψιμοι. Όλοι οι Box-Behnken σχεδιασμοί εκτός από αυτούς με 3 και 11 παράγοντες είναι ορθογώνιοι κατά μπλοκ. Για έναν ορθογώνιο κατά μπλοκ σχεδιασμό, η ύπαρξη των μπλοκ δεν επηρεάζει τους εκτιμώμενους συντελεστές παλινδρόμησης, και ως τέτοια η κύρια επίδραση του μπλοκ είναι να μειώσει δυνητικά το μέγεθος του πειραματικού σφάλματος. Το μπλοκ, ωστόσο, μειώνει τον αριθμό των βαθμών ελευθερίας για την εκτίμηση της εν δυνάμει μειωμένης διακύμανσης.

Η έννοια της περιστρεψιμότητας εισήχθη από τους Box και Hunter (1957), οι οποίοι ορίζουν ένα m -διαστάσεων σχεδιασμό περιστρέψιμο εάν η προβλεπόμενη διακύμανση στο σημείο (x_1, \dots, x_m) είναι μία συνάρτηση του

$$\rho^2 = \sum_{i=1}^m x_i^2$$

Δηλαδή, οι προβλεπόμενες διακυμάνσεις είναι ίσες για όλα τα σημεία σε ίση απόσταση από το κέντρο της περιοχής του σχεδιασμού. Η περιστρεψιμότητα, επομένως, είναι μια επιθυμητή ιδιότητα για κάθε πειραματικό σχεδιασμό. Έδειξαν ότι

οι ακόλουθες συνθήκες είναι αναγκαίες ώστε το n –σημείο του SOD να μπορεί να στρέφεται:

$$(i) \sum x_i = 0, \sum x_i^3 = 0, \sum x_i x_j = 0, \sum x_i x_j^2 = 0, \sum x_i x_j^3 = 0, \sum x_i x_j x_k = 0, \sum x_i x_j x_k^2 = 0, \\ \text{και} \sum x_i x_j x_k x_l = 0,$$

για $i \neq j \neq k \neq l$

$$(ii) \sum x_i^2 = \text{σταθερά}$$

$$(iii) \sum x_i^4 = \text{σταθερά}$$

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

Τα αθροίσματα στο (i)-(iv) λαμβάνονται πάνω από τα n σημεία σχεδιασμού. Οι Box-Behnken(1960)χρησιμοποίησαν τον όρο σχεδόν περιστρέψιμος για μια κατηγορία σχεδιασμών που πληρούν τις συνθήκες (i)-(iii), ενώ έχουν $(iv) \sum x_i^4 / \sum x_i^2 x_j^2 \approx 3$ για το (iv). Οι Box και Behnken σχεδιασμοί και οι κεντρικοί σύνθετοι σχεδιασμοί Box και Wilson(1951) (υπό την κατάλληλη επιλογή από τα επίπεδα του παράγοντα) είναι περιστρέψιμοι ή σχεδόν περιστρέψιμοι και είναι ορθογώνιοι. Επιπλέον, πληρούν ορισμένα κριτήρια που κρίνονται απαραίτητα για το σχεδιασμό της αποκριτικής επιφάνειας(Box και Draper , 1975, 1987). Από τους 17 σχεδιασμούς BB, 10 έχουν κατασκευαστεί από τον ισορροπημένο μη πλήρη σχεδιασμό κατά μπλοκ (BIBDs) και επτά έχουν κατασκευαστεί μερικώς από BIBDs (PBIBDs). Παρακάτω θα δείξουμε ότι και οι επτά σχεδιασμοί BB που έχουν κατασκευαστεί από PBIBDs μπορούν να βελτιωθούν ως προς την περιστρεψιμότητα καθώς και ως προς τα κριτήρια D- και G-βελτιστότητας. Επιπλέον αναφέρουμε τους ορθογώνιους κατά μπλοκ σχεδιασμούς για 5, 8, 9, 11 και 13 παράγοντες, καθώς και έναν BB σχεδιασμό με 11 παράγοντες που όμως δεν είναι ορθογώνιος κατά μπλοκ.

3.2 Μικροί Box-Behnken σχεδιασμοί

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται μία μέθοδος κατασκευής μικρών Box-Behnken σχεδιασμών η οποία δημοσιεύτηκε το 2011 απ'τους Tian-Fang Zhang, Jian-Feng Yang και Dennis J. K Lin με τίτλο “Small Box-Behnken Designs”.

Εξετάζονται k παράγοντες, x_1, \dots, x_k για να προσδιοριστεί η επίδρασή τους σε μια μεταβλητή y. Συχνά προσεγγίζουμε τις συναρτησιακές σχέσεις σε μία περιορισμένη

πειραματική περιοχή από μία πολυωνυμική αναπαράσταση. Ξεκινάμε με το πρώτης τάξης μοντέλο:

$$y_t = \beta_0 + \beta_1 x_{1t} + \beta_k x_{kt} + \varepsilon_t$$

όπου $t=1, \dots, n$, είναι ο αριθμός των γραμμών, και ε_t , είναι ο όρος σφάλματος στη t γραμμή με μηδενική μέση τιμή και διακύμανση σ^2 . Εάν υπάρχει έλλειψη προσαρμογής, μπορούν να προστεθούν περισσότερες εκτελέσεις για να επιτραπεί το πλήρες δεύτερης τάξης μοντέλο,

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

Υπάρχει ένα σύνολο $(k + 2) (k + 1)/2$ παραμέτρων που πρέπει να εκτιμηθούν, συμπεριλαμβανομένων ενός σταθερού όρου, k όρων πρώτης τάξης, k τετραγωνικών όρων, και $k(k - 1)/2$ όρων αλληλεπίδρασης. Οι Box και Hunter είναι δύο από τους πιο δημοφιλείς επιστήμονες όσον αφορά το σχεδιασμό της απόκρισης δεύτερης τάξης. Αυτοί οι σχεδιασμοί έχουν κάποιες επιθυμητές ιδιότητες, όπως είναι, η ορθογωνιότητα και υψηλή αποδοτικότητα. Το πλήθος εκτελέσεων των σχεδιασμών αυτών αυξάνεται ραγδαία καθώς ο αριθμός των παραγόντων k αυξάνεται. Όσον αφορά τον σχεδιασμό Box-Behnken, λίγα είναι γνωστά για τη μείωση του μεγέθους. Στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιάσουμε το πως μπορούν κατασκευαστούν Box-Behnken σχεδιασμοί με καλές ιδιότητες αλλά μικρότερο αριθμό εκτελέσεων από τους αρχικούς.

3.3 Εναλλακτική αντικατάσταση

Ο σχεδιασμός Box-Behnken, που προτείνεται από τους Box και Benken (1958), προκύπτει από το συνδυασμό παραγοντικών σχεδιασμών δύο επιπέδων και μη-πλήρων σχεδιασμών κατά μπλοκ. Για παράδειγμα, ένας μπλοκ σχεδιασμός με έξι αγωγές και έξι μπλοκ δίνεται από το παρακάτω:

$$\begin{bmatrix} * & * & 0 & * & 0 & 0 \\ 0 & * & * & 0 & * & 0 \\ 0 & 0 & * & * & 0 & * \\ * & 0 & 0 & * & * & 0 \\ 0 & * & 0 & 0 & * & * \\ * & 0 & * & 0 & 0 & * \end{bmatrix}$$

Παίρνουμε τις έξι στήλες ως έξι παράγοντες εισόδου, $x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6$ σε μια μελέτη αποκριτικής επιφάνειας. Αντικαθιστούμε τους τρεις αστερίσκους σε κάθε μπλοκ με ένα 2^3 πλήρη σχεδιασμό και εισάγουμε μια στήλη με μηδενικά όπου ο αστερίσκος δεν εμφανίζεται. Επαναλαμβάνοντας τη διαδικασία για κάθε μπλοκ και προσθέτοντας λίγα κεντρικά σημεία οδηγούμαστε στον ακόλουθο Box-Behnken σχεδιασμό με $k = 6$ παράγοντες. Ο σχεδιασμός που προκύπτει έχει 48 γραμμές συν τα κεντρικά σημεία.

$$\begin{bmatrix} \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 \\ \pm 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 & \pm 1 \\ 1 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 & \pm 1 & 0 & 0 & \pm 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Σημείωση: $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ υποδηλώνει όλους τους 2^3 συνδυασμούς των επιπέδων -1 και +1.

Οι Box και Behnken (1958) αντικατέστησαν τις αγωγές σε κάθε μπλοκ με τον ίδιο σχεδιασμό (συνήθως 2^2 ή 2^3). Κρατώντας αμετάβλητη δομή στον BIBD (ή PBIBD), το μέγεθος των εκτελέσεων του σχεδιασμού που προκύπτει μπορεί να είναι μικρότερο, εάν χρησιμοποιούνται εναλλακτικοί σχεδιασμοί. Ως χαρακτηριστικό παράδειγμα, εξετάζουμε τον παραπάνω σχεδιασμό για $k = 6$. Διαιρούμε πρώτα τα έξι τετράγωνα σε δύο τμήματα. Ας υποθέσουμε ότι έχουμε θέσει τις πρώτες δύο ομάδες ως μέρος I και το υπόλοιπο ως μέρος II. Οι τρεις αγωγές του κάθε μπλοκ στο Μέρος I αντικαθίστανται από το 2^3 σχεδιασμό, ενώ οι αγωγές σε κάθε μπλοκ στο μέρος II αντικαθίστανται από ένα 2_{III}^{3-1} σχεδιασμό.

± 1	± 1	0	± 1	0	0	2^3
0	± 1	± 1	0	± 1	0	
0	0	± 1	± 1	0	± 1	2_{III}^{3-1}
± 1	0	0	± 1	± 1	0	
0	± 1	0	0	± 1	± 1	
± 1	0	± 1	0	0	± 1	

Στο μέρος I, $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ δηλώνει τους 2^3 συνδυασμούς των επιπέδων -1 και +1,

ενώ στο μέρος II, $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ είναι η σύντομη μορφή του $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$, που είναι

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

3.4 Κατασκευή και σύγκριση

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε τη μέθοδο κατασκευής των μικρών Box-Behnken σχεδιασμών. Η μέθοδος κατασκευής περιλαμβάνει τα εξής τρία βήματα:

Βήμα 1: (Κατασκευή μπλοκ σχεδιασμών). Οι μη-πλήρεις σχεδιασμοί κατά μπλοκ που χρησιμοποιούνται πρέπει να ικανοποιούν τις ακόλουθες ιδιότητες:

- (i) κάθε μπλοκ περιέχει όχι περισσότερο από τρεις αγωγές,
- (ii) κάθε ζεύγος αγωγών πρέπει να συμπίπτει σε κάποιο μπλοκ, αλλά όσο το δυνατόν λιγότερες φορές.

Βήμα 2: (Αγωγές αντικατάστασης) Χρησιμοποιούμε έναν κατάλληλο παραγοντικό σχεδιασμό για να αντικαταστήσουμε τις αγωγές του κάθε μπλοκ. Εάν το μέγεθος του μπλοκ είναι δυο, τότε υιοθετείται ένας 2^2 σχεδιασμός. Εάν το μέγεθος του μπλοκ είναι τρία, υιοθετείται είτε ένας 2^3 είτε ένας 2_{III}^{3-1} σχεδιασμός.

Βήμα 3: (Πρόσθεση κεντρικών σημείων.) Μερικά κεντρικά σημεία, εάν είναι επιθυμητό, μπορούν να προστεθούν για να εκτιμηθεί ο συνολικός μέσος.

Για κάθε BIBD (ή PBIBD) που επιλέγεται στο Βήμα 1, ας είναι το b_0 ο αριθμός των μπλοκ με τρεις αγωγές και το b_1 ο αριθμός των μπλοκ στα οποία οι αγωγές έχουν αντικατασταθεί από έναν σχεδιασμό 2^3 . Στη συνέχεια, οι αγωγές στα υπόλοιπα $b_0 - b_1$ μπλοκ θα αντικατασταθούν από έναν σχεδιασμό 2_{III}^{3-1} . Να σημειωθεί ότι ο συνολικός αριθμός των παραμέτρων στο μοντέλο δεύτερης τάξης είναι $(k + 2)(k + 1)/2 - 1$ (εκτός από το σταθερό όρο). Η ανισότητα:

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

ισχύει αν ο Box-Behnken είναι ικανός να εκτιμήσει όλες τις παραμέτρους σε αυτό το μοντέλο (εκτός από το σταθερό όρο). $b^* = [(k + 2)(k + 1) / 2 - 1] / 4 - b_0$ ο μικρότερος ακέραιος b_1 που ικανοποιεί την ανισότητα (4). Αναφέρουμε μερικές χρήσιμες λεπτομέρειες για την υλοποίηση του δεύτερου βήματος:

Πίνακας 3.1

Συνολικά σημεία (εκτός από κεντρικά σημεία) και D- αποτελεσματικότητα

Number of factors k	Number of parameters $p = \frac{(k+2)(k+1)}{2} - 1$	Total points n			D-efficiency		
		BBD	NBD	SBBD	BBD	NBD	SBBD
3	9	12	-	12	96.29	-	96.29
4	14	24	-	16	98.70	-	82.34
5	20	40	40	24	97.16	91.55	70.29
6	27	48	48	32	92.72	95.51	77.21
7	35	56	56	40	98.07	98.07	82.85
8	44	192	128	56	95.94	96.84	82.14
9	54	120	96	60	93.09	96.95	79.91
10	64	160	160	76	91.54	96.30	70.77
11	77	175	176	96	97.62	95.91	82.34

Βήμα 2α: Για τα σταθερά b^* μπλοκ, υπολογίζουμε το D-efficiency (D-αποτελεσματικότητα) (D-eff) του πίνακα ροπών $M = Z'Z / n$, όπου το Z είναι ο πίνακας μοντέλου. Για μια δίκαιη σύγκριση, θεωρούμε το D-eff ως $(\|\hat{Z}'\hat{Z}\|)^{1/p} / n$, όπου \hat{Z} είναι ο πίνακας Z διορθωμένος με τη μέθοδο των Nguyen και Borkowski (2008). Άλλοι τύποι D-αποτελεσματικότητας (για παράδειγμα, Kiefer, 1960) μπορούν επίσης να χρησιμοποιηθούν. Εάν ο πίνακας είναι ομαλός, πηγαίνουμε στο Βήμα 2β. Διαφορετικά επιλεγούμε ένα νέο μη ισόμορφο b^* μπλοκ για να επαναλάβουμε την

παραπάνω διαδικασία (δύο διαφορετικά b^* μπλοκ καλούνται ισόμορφα εάν οι πίνακες ροπών τους είναι όμοιοι). Αν δεν υπάρχει ομαλός πίνακας, μετά από μια αναζήτηση μεταξύ όλων των μη-ισόμορφων b^* μπλοκ, πηγαίνουμε στο Βήμα 2γ.

Βήμα 2β: Εάν ο πίνακας ροπών είναι ομαλός, ψάχνουμε όλα τα μη-ισόμορφα b^* μπλοκ για να ενημερώσουμε το μπλοκ σχήμα που μεγιστοποιεί την D-eff. Ο αλγόριθμος σταματά μέχρι να συγκριθούν όλα τα μη-ισόμορφα b^* μπλοκ.

Βήμα 2γ: Αν $b^* < b_0$ ενημερώνουμε το b^* από το $b^* + 1$. Επιλέγουμε τα πρώτα b^* μπλοκ και πηγαίνουμε στο βήμα 2α. Αν $b^* = b_0$, τότε επιλέγουμε όλα τα μπλοκ και ο αλγόριθμος σταματά.

Ως αποτέλεσμα, θα υπάρξει ένα b^* μπλοκ επιλεγμένο για να αντικατασταθεί από έναν 2^3 σχεδιασμό και το υπόλοιπο θα πρέπει να αντικατασταθεί από ένα 2_{III}^{3-1} . Όταν $b^* = b_0$, το αποτέλεσμα είναι πράγματι ο αρχικός σχεδιασμός Box-Behnken. Οι νέοι σχεδιασμοί εξασφαλίζουν ότι όλες οι παράμετροι του μοντέλου (1) μπορούν να εκτιμηθούν με αρκετά υψηλή απόδοση, ενώ ο αριθμός των γραμμών μειώνεται.

Οι πίνακες ροπών για τους νέους σχεδιασμούς έχουν τις εξής τρεις ιδιότητες. Μπορεί να αποδειχθεί ότι διατηρούνται όλες οι ιδιότητες ορθογωνιότητας των αρχικών Box-Behnken σχεδιασμών. Όπως έχουμε ορίσει και προηγούμενα, οι ροπές δίνονται από τις εξής σχέσεις:

$$[i] = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n x_{it} ,$$

$$[ij] = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n x_{it} x_{jt} ,$$

$$[iij] = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n x_{it}^2 x_{jt} \text{ και ούτω καθεξής.}$$

Μπορεί να επαληθευτεί ότι:

1. $[i] = 0$ και
2. $[ij] = 0$, για $i \neq j$
3. $[ijk] = 4$, για τη θέση «*» που εμφανίζεται στο i, j, k ταυτόχρονα στο μέρος II, διαφορετικά:
4. $[ijk] = 0$, για $i \neq j \neq k$,
5. $[iij] = 0$, για $i \neq j$,
6. $[iii] = 0$.
7. $[ijkl] = 0$, για $i \neq j \neq k \neq l$, $[iijk] = 0$, για $i \neq j \neq k$, $[iiij] = 0$, για $i \neq j$.

Οι νέοι μικροί Box-Behnken σχεδιασμοί (SBBD) συγκρίνονται με τους αρχικούς Box-Behnken σχεδιασμούς (BBD) και τους σχεδιασμούς των τριών επιπέδων των Nguyen και Borkowski (2008) σε σχέση με το συνολικό αριθμό εκτελέσεων και των αντίστοιχων τιμών της D-αποτελεσματικότητας. Οι συγκρίσεις εμφανίζονται στον Πίνακα 3.1.

Οι ακόλουθες παρατηρήσεις είναι σαφείς από τον πίνακα 3.1:

1. (Πλήθος εκτελέσεων). Το πλήθος των εκτελέσεων για τον προτεινόμενο SBBD είναι σαφώς μικρότερο από τον αρχικό και BBD και NBD, ειδικά για μεγαλύτερα k . Για παράδειγμα, όταν το $k = 8$, το πλήθος των εκτελέσεων για SBBD είναι περίπου 25% (56 έναντι 192) του αρχικού BBD και 50% (56 έναντι 128) του NBD. Και είναι πολύ κοντά στον ελάχιστο αριθμό σημείων (ο συνολικός αριθμός των παραμέτρων που πρέπει να εκτιμάται).
2. (Απόδοση). Οι προτεινόμενοι SBBDs, ακόμη και με πολύ λίγες εκτελέσεις, εξακολουθούν να έχουν υψηλές τιμές D-αποτελεσματικότητας, αν και αυτές είναι χαμηλότερες από τις αντίστοιχες τιμές των BBD και NBD. Όλες οι D-efficiencies είναι πάνω από 70%, για παράδειγμα.

3.5 Ένας νέος αλγόριθμος για την κατασκευή υψηλότερων διαστάσεων σχεδιασμών

Για την προσαρμογή ενός μοντέλου δεύτερης τάξης χρειάζεται να υπολογίσουμε τον αντίστροφο πίνακα του πίνακα ροπών. Όταν το k είναι μικρό, μπορεί να υπολογιστεί εύκολα. Όταν το k αυξάνει, ο υπολογισμός δυσκολεύει. Για παράδειγμα, όταν το $k = 9$ ο πίνακας ροπών είναι ένας 54×54 πίνακας. Ο υπολογισμός του αντιστρόφου του δεν μπορεί να είναι απλός. Ο μικρός Box-Behnken σχεδιασμός έχει μια καλή ιδιότητα θα μπορούσαμε να μειώσουμε την προσπάθεια υπολογισμού χωρίζοντας τις παραμέτρους σε ομάδες. Για παράδειγμα, για $k = 9$, με την κατάλληλη ομαδοποίηση των παραμέτρων πρέπει μόνο να υπολογίσουμε τους αντίστροφους ενός 4×4 και ενός άλλου 9×9 πίνακα. Αυτό μπορεί να είναι πολύ πιο εύκολο να γίνει σε αντίθεση με τον αντίστροφο του 54×54 πίνακα. Με βάση την ομαδοποίηση των παραμέτρων, παρουσιάζουμε στην ενότητα αυτήν έναν αλγόριθμο ώστε να μειωθεί σημαντικά ο υπολογιστικός φόρτος.

Σύμφωνα με τη δομή του πίνακα σχεδιασμού X , μπορούμε να κατατάξουμε τις παραμέτρους σε ομάδες, καθεμία από τις οποίες μπορεί να υπολογιστεί ανεξάρτητα. Πάλι, παίρνουμε $k = 9$ ως παράδειγμα. Έστω,

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

όπου $X_{11}, X_{12}, X_{13}, X_{21}, X_{22}, X_{23}, X_{24}, X_{25}, X_{26}, X_{27}, X_{28}$ και X_{29} αντιστοιχούν σε όλα τα μπλοκ του X . Σημειώστε ότι κάθε X_{11}, X_{12} και X_{13} αντικαθίσταται από ένα πλήρες σχεδιασμό 2^3 , το οποίο κάνει όλες τις κύριες επιδράσεις και τις αλληλεπιδράσεις ορθογώνιες σε κάθε μπλοκ. Εν τω μεταξύ, καθένα από τα $X_{21}, X_{22}, X_{23}, X_{24}, X_{25}, X_{26}, X_{27}, X_{28}$ και X_{29} αντικαθίσταται από ένα 2_{III}^{3-1} σχεδιασμό, το οποίο καθιστά όλες τις κύριες επιδράσεις και τις αντίστοιχες αλληλεπιδράσεις ταυτόσημες σε κάθε μπλοκ του μέρους αυτού. Για παράδειγμα στο μπλοκ X_{21} , η 1η, 2η και 3η στήλη είναι « ± 1 », με αποτέλεσμα οι β_1 και β_{23} να είναι ταυτόσημες. Εδώ, το β_i συμβολίζει την κύρια επίδραση του παράγοντα X_i , ενώ το β_{ij} συμβολίζει την αλληλεπίδραση μεταξύ παραγόντων X_i και X_j . Ως εκ τούτου, βάζουμε τις β_1 και β_{23} σε μία ομάδα, την οποία συμβολίζουμε ως Ομάδα 1. Είναι προφανές ότι η β_1 ταυτόσημη πάλι με τη β_{59} στο X_{24} και με τη β_{68} στο X_{27} . Έτσι, η β_{59} και η β_{68} έχουν επίσης τεθεί στην Ομάδα 1. Επειδή οποιαδήποτε παράμετρος στην Ομάδα 1, δεν είναι ταυτόσημη με οποιαδήποτε άλλη παράμετρο στα υπόλοιπα μπλοκ του μέρους II, όλες οι παράμετροι ($\beta_1, \beta_{23}, \beta_{59}, \beta_{68}$) αποτελούν την ομάδα 1 με τον πίνακα ροπών ομάδας (GMM) να είναι:

$$G_1 = \begin{bmatrix} [11] & [123] & [159] & [168] \\ [123] & [2233] & [2359] & [2368] \\ [159] & [2359] & [559] & [5689] \\ [168] & [2368] & [5689] & [6688] \end{bmatrix} = \frac{1}{15} = \begin{bmatrix} 5 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Ομοίως, οι ακόλουθες οκτώ ομάδες μπορούν να ληφθούν ως εξής: $(\beta_2, \beta_{13}, \beta_{49}, \beta_{67})$, $(\beta_3, \beta_{12}, \beta_{48}, \beta_{57})$, $(\beta_4, \beta_{56}, \beta_{29}, \beta_{38})$, $(\beta_5, \beta_{45}, \beta_{27}, \beta_{18})$, $(\beta_6, \beta_{45}, \beta_{27}, \beta_{18})$, $(\beta_7, \beta_{89}, \beta_{26}, \beta_{35})$, $(\beta_8, \beta_{79}, \beta_{34}, \beta_{16})$, $(\beta_9, \beta_{78}, \beta_{15}, \beta_{24})$. Κάθε ένα από αυτά έχει τον ίδιο πίνακα ροπών ομάδας G_1 όπως η Ομάδα 1.

Η πλήρης ομάδα που χρησιμοποιείται για την εκτίμηση των τετραγωνικών όρων

$(\beta_{11}, \beta_{22}, \beta_{33}, \beta_{44}, \beta_{55}, \beta_{66}, \beta_{77}, \beta_{88}, \beta_{99})$ συμβολίζεται με:

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

Τέλος, κάθε μία από τις υπόλοιπες παραμέτρους αποτελούν ενιαία ομάδα, όπως η β_{14} μόνη της.

Σημειώστε ότι ο πίνακας ροπών M για ένα τέτοιο σχεδιασμό μπορεί να αναλυθεί ως:

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

όπου diag δηλώνει ένα διαγώνιο μπλοκ πίνακα και c_i είναι σταθερές που αντιστοιχούν σε μεμονωμένες ομάδες. Γι' αυτό και το μόνο που χρειάζεται είναι ο υπολογισμός των αντιστρόφων του G_1 (ένας 4 x 4 πίνακας) και G_2 (9 X 9 πίνακας) για να προσαρμόσουμε το μοντέλο.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4**BOX-BEHNKEN ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΙ ΚΑΙ ΝΕΟΙ SODs****4.1 IBD (Incomplete block design) Μη πλήρης σχεδιασμός κατά μπλοκ**

Μια σχέση υπάρχει ανάμεσα σε συνδυαστικές δομές και τους IBDS. Οι Box και Behnken (1958, 1960) εκμεταλλεύονται αυτήν τη σχέση για την κατασκευή τριών επιπέδων SODs ενώ ο Nguyen (1996) αξιοποιεί αυτή τη σχέση για να κατασκευάσει βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς. Στο παρόν κεφάλαιο θα περιγραφεί μια διαδικασία βελτίωσης των σχεδιασμών Box-Behnken η οποία παρουσιάστηκε απ'τους Nam-Ky Nguyen, John. J Borkowski με τον τίτλο "New 3-level response surface designs constructed from incomplete block designs" το 2008. Επειδή οι Box-Behnken σχεδιασμοί έχουν κατασκευαστεί είτε από BIBDs είτε από PBIBDs, εξετάζουμε εν συντομία κάποιες σημαντικές έννοιες IBD.

Ένας (δυναδικός) IBD μεγέθους (v, k, r) είναι μια διάταξη από v αγωγές σε $b = vr / k$ μπλοκ μεγέθους $k < v$ έτσι ώστε κάθε αγωγή να προκύπτει σε r μπλοκ και καμία αγωγή να μην εμφανίζεται περισσότερο από μία φορά σε οποιαδήποτε μπλοκ. Ένας IBD λέγεται ότι είναι r / s -αναλύσιμος εάν μπορεί να χωριστεί σε επαναληπτικές γραμμές (του μπλοκ) καθένα από το οποίο είναι ένα IBD μεγέθους $(v, k, r / s)$. Ένα I -αναλύσιμο IBD είναι ένα αναλύσιμο IBD.

Σε κάθε ένα IBD αντιστοιχεί ένας πίνακας αγωγών $NN' = \{\lambda_{ij}\}$ με $\lambda_{ij} = r$, ($i = 1, \dots, v$) και λ_{ij} ($i \neq j$) είναι ο αριθμός των μπλοκ στα οποία εμφανίζονται οι δύο αγωγές i και j . Επειδή το $\sum \lambda_{ij}$ είναι σταθερό ($= ukr$), το $\sum \lambda_{ij}^2$ ελαχιστοποιείται αν λ_{ij} διαφέρουν το πολύ κατά 1. Σχεδιασμοί με αυτήν την ιδιότητα ονομάστηκαν κανονικά γραφήματα (RGDS) από τους John και Mitchell (1977) οι οποίοι δηλώνουν ότι οι D-, A- και E-optimal σχεδιασμοί είναι επίσης RGDS. Έτσι, τα RGDS περιλαμβάνουν BIBDs (των οποίων τα λ_{ij} δε διαφέρουν) και όλα τα PBIBDs των οποίων τα λ_{ij} διαφέρουν κατά 1. Τα RGDS είναι μια σημαντική ομάδα, των IBDS και υπάρχει η υπόθεση ότι οι βέλτιστοι IBDS είναι RGDS, αλλά επίσης επειδή οι περισσότεροι IBDS χρησιμοποιούνται από τους ερευνητές στην πράξη, όπως αυτοί που χρησιμοποιούνται από τους Box και Behnken (1958, 1960) είναι RGDS.

4.2 Η μέθοδος Box-Behnken (μέθοδος 1)

Με εξαίρεση το σχεδιασμό των Box και Behnken για 11 παράγοντες, όλοι οι σχεδιασμοί Box και Behnken σχηματίζονται με υπέρθεση στις αγωγές σε κάθε μπλοκ του BIBD ή του PBIBD. Οι Box και Behnken σχεδιασμοί για 11 παράγοντες χρησιμοποιούν ένα $\frac{1}{2}$ κλάσμα ενός 2^5 παραγοντικού. Για παράδειγμα, ο σχεδιασμός Box και Behnken για 6 παράγοντες δομήθηκε με υπέρθεση ενός 2^3 παραγοντικού επί τις αντίστοιχες αγωγές (0, 1, 2, 3, 4, 5) των μπλοκ του παρακάτω PBIBD μεγέθους (6, 3, 3):(0 13), (1 24), (2 35), (3 40), (4 51), (5 02). Ο πίνακας NN' του PBIBD(που είναι επίσης ένα RGD)έχει 3 στην διαγώνιο και είτε 1 ή 2, ως όχι-διαγώνια στοιχεία. Το αποτέλεσμα του σχεδιασμού BB για 6 παράγοντες(χωρίς κεντρικά σημεία) είναι:

±1	±1	0	±1	0	0
0	±1	±1	0	±1	0
0	0	±1	±1	0	±1
±1	0	0	±1	±1	0
0	±1	0	0	±1	±1
± 1	0	±1	0	0	±1

όπου το 0 συμβολίζει ένα διάνυσμα στήλης οκτώ μηδενικών και $(\pm 1 \pm 1 \pm 1)$ συμβολίζει τα οκτώ σημεία σε ένα 2^3 παραγοντικό σχεδιασμό. Δεν είναι δύσκολο να εξακριβωθεί ότι αυτός ο SOD είναι σχεδόν περιστρέψιμος με $\sum x_i^2 x_j^2 = 2^3 \lambda_{ij}$ όπου τα λ_{ij} είναι τα στοιχεία του (2). Έτσι $\sum x_i^4 = 24$ για $\lambda_{ij} = r = 3$, και $\sum x_i^2 x_j^2 = 8$ και 16 για $\lambda_{ij} = 1$ και 2,

αντιστοίχως, τα οποία με τη σειρά τους αποδίδουν $\sum x_i^4 / \sum x_i^2 x_j^2 = r / \lambda_{ij} = 3$ και $\frac{3}{2}$.

Το μέτρο της περιστρεψιμότητας Q^* αυτού του Box – Behnken σχεδιασμού είναι 0,9905. Οι Box – Behnken σχεδιασμοί για 4 και 7 παράγοντες, ωστόσο, είναι περιστρέψιμοι (δηλ., το $Q^*=1$), όπως κατασκευάζονται από ένα BIBD με $r/\lambda = 3$.

4.3 Η γενικευμένη Box-Behnken μέθοδος (Μέθοδος II)

Ο Box-Behnken σχεδιασμός με έξι παράγοντες γράφεται επίσης ως εξής:

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

όπου με -1, 0 και 1 συμβολίζουμε τα διανύσματα στήλης τεσσάρων -1, του 0 και του 1 αντίστοιχα, και $(\pm 1 \pm 1)$ αντιπροσωπεύει ένα 2^2 παραγοντικό σχεδιασμό. Από την παρατήρηση αυτή, μπορούμε να πούμε επίσης ότι ο παραπάνω σχεδιασμός Box και Behnken δομήθηκε από τον ακόλουθο $\frac{6}{2}$ αναλύσιμο IBD μεγέθους (6, 3, 6): (0 1 3), (1 2 4), (2 3 5), (3 0 4), (5 4 1), (5 0 2), (0 1 3), (1 2 4), (2 3 5), (3 4 0), (4 5 1), (5 0 2), όπου η πρώτη αγωγή στην πρώτη επανάληψη των μπλοκ (μπλοκ 1-6) αντιστοιχεί σε ένα διάνυσμα στήλης τεσσάρων -1 και η πρώτη αγωγή στη δεύτερη επανάληψη

των μπλοκ (μπλοκ 7-12) αντιστοιχεί σε ένα διάνυσμα στήλης τεσσάρων 1 ενώ η δεύτερη και τρίτη αγωγή σε κάθε μπλοκ αντιστοιχούν σε ένα 2^2 παραγοντικό σχεδιασμό. Αυτός ο IBD σχεδιασμός 6 παραγόντων ανήκει σε μία κατηγορία IBD που συμβολίζουμε σαν IBD*. Ορίζουμε IBD* ή RGD* ως ένα $r/2$ -αναλύσιμο IBD ή RGD που έχει την ιδιότητα ο αριθμός των φορών όπου η πρώτη αγωγή i σε ένα μπλοκ (ή σε πολλά μπλοκ) συνυπάρχει με τις υπόλοιπες αγωγές στο ίδιο(στα ίδια) μπλοκ των δύο επαναληπτικών συνόλων είναι ίσος. Για παράδειγμα, στην προαναφερθείσα IBD*, μπορούμε να δούμε ότι ο αριθμός όπου η αγωγή 0 συνυπάρχει με την αγωγή 3 στα μπλοκ 1-6 ισούται με τον αριθμό φορών όπου η αγωγή 0 συνυπάρχει με την αγωγή 3 στα μπλοκ 7-12. Αν αυτή η ιδιότητα δεν ισχύει, τότε η συνθήκη (i) για την περιστρεψιμότητα δε θα ισχύει όπως $\sum x_i x_j^2 \neq 0$

Ένας IBD* μεγέθους (v, k, r) μπορεί πάντα να σχηματίζεται από δύο αντίγραφα ενός IBD μεγέθους {v, k, r/2}. Ωστόσο, αυτό δεν είναι ο καλύτερος τρόπος για την

κατασκευή. Για παράδειγμα, το παραπάνω IBD* το οποίο περιέχει δύο αντίγραφα του RGD μεγέθους (6, 3,3) δεν αποτελεί RGD. Ο πίνακας NN' είναι:

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 & 2 & 4 & 2 & 2 \\ 2 & 6 & 2 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & 2 & 6 & 2 & 2 & 4 \\ 4 & 2 & 2 & 6 & 2 & 2 \\ 2 & 4 & 2 & 2 & 6 & 2 \\ 2 & 2 & 4 & 2 & 6 & 6 \end{pmatrix}$$

Τώρα, εξετάζουμε το ακόλουθο RGD*:(1 03), (4 12), (3 25), (3 04), (5 41), (2 50),(1 02), (1 43), (3 24), (3 05), (5 40), (2 51). Ο πίνακας NN' είναι:

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 & 2 & 3 & 2 & 3 \\ 2 & 6 & 3 & 2 & 3 & 2 \\ 2 & 3 & 6 & 2 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 2 & 6 & 3 & 2 \\ 2 & 3 & 2 & 3 & 6 & 2 \\ 3 & 2 & 3 & 2 & 2 & 6 \end{pmatrix}$$

Ο σχεδιασμός δεύτερης τάξης σε έξι παράγοντες που κατασκευάστηκε από RGD* είναι ο σχεδιασμός D636. Φαίνεται ότι το μπλοκ 1 του RGD* χρησιμοποιείται για την κατασκευή των εκτελέσεων 1-4 του SOD αυτού, κλπ. Αυτός ο SOD είναι σχεδόν-περιστρέψιμος με $\sum x_i^2 x_j^2 = 2^2 \lambda_{ij}$ όπου λ_{ij} είναι τα στοιχεία του (4). Έτσι, $\sum x_i^4 = 24$ για $\lambda_{ii} = r = 6$ και $\sum x_i^2 x_j^2 = 8$ και 12 για $\lambda_{ij} = 2$ και 3 αποδίδοντας $\sum x_i^4 / \sum x_i^2 x_j^2 = r / \lambda_{ij} = 3$ και 2, αντίστοιχα. Το μέτρο της περιστρεψιμότητας Q^* του SOD είναι 0,9959 το οποίο είναι ανώτερο του 0,9905 του αντίστοιχου σχεδιασμού Box και Behnken.

Η μέθοδος χρησιμοποίησης ενός IBD* μεγέθους (v, k, r) για την κατασκευή ενός SOD v παραγόντων θα αναφέρεται στην ενότητα αυτή ως η γενικευμένη Box- Behnken μέθοδος ή Μέθοδος II. Η μέθοδος αυτή αποτελείται από τα ακόλουθα βήματα:

1. Κατασκευάζουμε ένα (r/2-αναλύσιμο) IBD* του μεγέθους (v, k, r).
2. Υπερθέτουμε ένα διάνυσμα στήλη από 2^{k-1} στοιχεία με -1 επάνω στην πρώτη αγωγή στο μπλοκ του πρώτου συνόλου και ένα διάνυσμα στήλη από 2^{k-1} στοιχεία με 1 επάνω στην πρώτη αγωγή στο μπλοκ του δεύτερου συνόλου.

3. Υπερθέτουμε ένα 2^{k-1} παραγοντικό επάνω στις υπόλοιπες αγωγές σε κάθε μπλοκ.
4. Υπερθέτουμε ένα διάνυσμα στήλη από 2^{k-1} στοιχεία με 0 επάνω σε αγωγές που λείπουν σε κάθε μπλοκ.

Ως ένα επιπλέον παράδειγμα, ο σχεδιασμός D736 είναι ένας SOD με 7 παράγοντες που κατασκευάστηκε με τη Μέθοδο II από ένα BIBD* του μεγέθους (7, 3, 6): (0 24), (0 13), (5 06), (125), (6 14), (2 36), (3 45), (0 25), (0 13), (0 46), (1 24), (1 56), (2 36), (3 45). Όπως οι Box και Behnken σχεδιασμοί, όλοι οι SODs κατασκευάζονται με τη Μέθοδο II είτε είναι περιστέψιμοι ή σχεδόν- περιστέψιμοι, επίσης, είναι σφαιρικοί.

Παρατηρήσεις.

1. Ένας τριών επιπέδων SOD κατασκευασμένος από έναν IBD μεγέθους (v, k, r) χρησιμοποιώντας τη Μέθοδο I έχει $2^k b$ εκτελέσεις τέτοιες ώστε $\sum x_i^2 = \sum x_i^4 = 2^k r$ και $\sum x_i^2 x_j^2 = 2^k \lambda_{ij}$. Ένας τριών επιπέδων SOD κατασκευασμένος από ένα IBD* μεγέθους (v, k, r) χρησιμοποιώντας τη Μέθοδο II έχει $2^{k-1} b$ εκτελέσεις τέτοιες ώστε $\sum x_i^2 = \sum x_i^4 = 2^{k-1} r$ και $\sum x_i^2 x_j^2 = 2^{k-1} \lambda_{ij}$. Οπότε τα μη διαγώνια στοιχεία του πίνακα NN' των IBDS που χρησιμοποιούνται θα είναι μη μηδενικά. Διαφορετικά, κάποια $\sum x_i^2 x_j^2$ θα είναι μηδέν και ο X'X πίνακας του SOD θα είναι ιδιάζων. Επειδή ο $(X'X)^{-1}$ είναι συνάρτηση του $(NN)^{-1}$, μια επιπλέον απαραίτητη προϋπόθεση για αυτούς τους IBDS είναι να ισχύει $|NN| \neq 0$. Για παράδειγμα, ο ακόλουθος RGD* μεγέθους (8, 4, 6): (2 0 7 4), (5 4 6 3), (5 7 1 0), (2 6 1 5), (3 4 1 2), (3 7 0 6), (3 0 4 1), (5 6 4 0), (2 1 6 0), (2 7 5 4), (3 2 7 6), (7 5 3 1) αποτυγχάνει να κατασκευάσει ένα SOD 8 παράγοντων επειδή $|NN| = 0$.

2. Υπάρχει ένας καλός λόγος γιατί είναι σκόπιμο να περιοριστούμε σε αυτήν την κλάση από RGD κατά την επιλογή των IBDS για την κατασκευή SODs με τη μέθοδο II. Ανάμεσα σε όλους τους SODs κατασκευασμένους από IBD* μεγέθους (v, k, r) χρησιμοποιώντας τη Μέθοδο II, οι A-, D-, και E- optimal SODs πρέπει να προέρχονται από IBD* που είναι RGD. Αν e_1, e_2, \dots, e_p είναι οι μη μηδενικές ιδιοτιμές του X'X ενός SOD κατασκευασμένο από IBD* μεγέθους (v, k, r), τότε $\text{tr}(X'X) = \sum e_i$ η οποία είναι συνάρτηση του $\sum (\sum x_i^2 x_j^2) = 2^{k-1} \sum \lambda_{ij} vkr = \text{const}$.

Επίσης, $\text{tr}(X'X)^2 = \sum e_i^2$ η οποία είναι μια συνάρτηση του $\sum(\sum x_i^2 x_j^2) = 2^{k-1} \sum \lambda_{ij}^2$. Αυτή η ποσότητα ελαχιστοποιείται όταν ο IBD είναι RGD. Έχουμε τότε ένα σχεδιασμό του οποίου τα e_i είναι τόσο ίσα όσο είναι δυνατόν και ισχύει $\sum e_i^2 = \text{σταθερά}$. Κατά μία έννοια, αυτό είναι μια προσέγγιση του κριτηρίου A-βελτιστότητας, το οποίο απαιτεί την ελαχιστοποίηση του $\sum e_i^{-1}$ ή της D-βελτιστότητας, το οποίο απαιτεί τη μεγιστοποίηση του Pe_i^{-1} .

3. Ο πίνακας αγωγών ενός IBD ο οποίος έχει προκύψει από δύο αντίγραφα ενός άλλου IBD με πίνακα αγωγών τον NN' είναι $2NN'$. Αυτό σημαίνει ότι ο IBD αυτός δεν είναι απαραίτητα RGD. Το γεγονός αυτό εξηγεί πως οι επτά BB σχεδιασμοί που κατασκευάζονται από PBIBDs μπορούν να βελτιωθούν.

4. Τα RGD* δεν είναι πάντα διαθέσιμα για κάθε μέγεθος, όπως για παράδειγμα για τα μεγέθη (5, 3, 6), (9, 4, 8), (14, 4, 8) και (15, 4, 8).

4.4 Νέοι σχεδιασμοί δεύτερης τάξης

Ο γεννήτορας κάθε νέου SOD αποτελείται από τρεις αριθμούς οι οποίοι αντιστοιχούν στις τρεις παραμέτρους του προκύπτοντος IBD* μεγέθους (v, k, r). Εκτός από δύο SODs (D934 και D1645), ο αριθμός των κεντρικών σημείων n_0 που προστέθηκε σε κάθε νέο SOD είναι ο αριθμός που συνιστάται από τους Box και Behnken (1958, 1960). Οι καινούριοι SODs ανήκουν σε τρεις κατηγορίες: (i) αυτούς που λαμβάνονται από BIBDs, (ii) εκείνους που λαμβάνονται από τον IBD* με μπλοκ μεγέθους 3, και (iii) εκείνους που λαμβάνονται από IBD* με μπλοκ μεγέθους 4.

Ένα ισορροπημένο $k \times k$ μπλοκ είναι ένας επιλύσιμος BIBD μεγέθους $(k^2, k, k+1)$ με $\lambda = 1$. Ο Box και Behnken σχεδιασμός για 4 ($= 2^2$) παράγοντες δομήθηκε χρησιμοποιώντας τη Μέθοδο I σε ένα 2×2 ισορροπημένο μπλοκ (0 1), (2 3), (0 3), (1 2), (0 2), (3 1). Ομοίως, οι νέοι SODs για k^2 παράγοντες μπορούν να κατασκευασθούν από ένα $k \times k$ ισορροπημένο μπλοκ όπου το $k = 3, 4, 5, 7$ και 9. Ο SOD που προκύπτει έχει $\sum x_i^4 = 2^k(k+1)$ και $\sum x_i^2 x_j^2 = 2^k \lambda = 2^k$ όπου $\lambda = 1$. Έτσι, $\sum x_i^4 / \sum x_i^2 x_j^2 = k+1$. Η Μέθοδος I μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να δημιουργήσει

SODs με 9 και 16 παράγοντες (D934 και D1645) από $k \times k$ ισορροπημένα μπλοκ για $k = 3$ και 4. Η Μέθοδος I μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί για να δημιουργήσει έναν 13-παραγόντων SOD (D1344) από έναν BIBD μεγέθους (13,4, 4). Αυτός ο SOD 13 παραγόντων και οι σχεδιασμοί D934 και D1645 έχουν επίσης αναφερθεί ανεξάρτητα από τους Crosier (1991) και Mee (2000), αντιστοίχως.

Στο προηγούμενο τμήμα, η μέθοδος II χρησιμοποιήθηκε με IBD* με μπλοκ μεγέθους 3 για να δημιουργήσει το νέο 6 - και 7-παραγόντων SODs (D636 και D736). Αυτή η μέθοδος μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί με άλλα IBD* με μπλοκ μεγέθους 3 για να δημιουργηθούν νέοι SODs για 5 και 8 παράγοντες (D536, D8312 και D8318).

Η μέθοδος II μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί με IBD* με μπλοκ μεγέθους 4 για να δημιουργήσει νέα SODs για 8-12 παράγοντες (D848, D948, D1048, D1148 και D1248).

4.5 Box –Behnken ορθογώνιοι κατά μπλοκ σχεδιασμοί και νέοι SODs

Οι απαιτήσεις των ορθογώνιων κατά μπλοκ πειραματικών σχεδιασμών έχουν δοθεί από τους Box και Hunter (1957) και τον Nguyen (2001). Οι Box και Behnken (1960) απαριθμούν καταστάσεις όπου μπορούν να κατασκευαστούν SODs με τη μέθοδο I οι οποίοι θα είναι ορθογώνιοι κατά μπλοκ με τη μέθοδο I:

- (i) όταν επαναληπτικά σύνολα μπορούν να βρεθούν στον προκύπτων IBD. Ο SOD κατασκευάζεται από $k \times k$ ισορροπημένα μπλοκ που εμπίπτουν σε αυτή την κατηγορία. Για παράδειγμα, κάθε αντιγραφή του 2×2 ισορροπημένου μπλοκ (0 1), (2 3),(0 3), (1 2),(0 2), (1 3) το οποίο χρησιμοποιήθηκε για την κατασκευή του 4-παραγόντων Box και Behnken σχεδιασμού αποτελεί έναν ορθογώνιο κατά μπλοκ σχεδιασμό.
- (ii) όταν η συνιστώσα 2^3 ή 2^4 παραγοντικό μπορεί να διαιρεθεί σε δύο ορθογώνιους κατά μπλοκ από την υψηλότερη σειρά αλληλεπίδρασης
- (iii) όταν αμφότερα τα (i) και (ii). Για παράδειγμα, το 3×3 ισορροπημένο μπλοκ που χρησιμοποιείται για την κατασκευή D934 έχει τέσσερις επαναλήψεις. Κάθε επανάληψη μπορεί να διαιρεθεί σε δύο ορθογώνια μπλοκ. Έτσι, αυτός ο SOD μπορεί να διαιρεθεί σε οκτώ ορθογώνια μπλοκ. Ομοίως, ο D1645 διαθέτει πέντε

επανάληψεις. Κάθε επανάληψη μπορεί να διαιρεθεί σε δύο ορθογώνια μπλοκ. Έτσι, αυτός ο SOD μπορεί να διαιρεθεί σε 10 ορθογώνια μπλοκ.

Οι ανωτέρω κατευθυντήριες γραμμές ισχύουν για όλους τους νέους SODs κατασκευασμένους με τη μέθοδο I(δηλαδή D934, D1344 και D1645). Δεν ισχύουν για τους νέους SODs που παράγονται από IBD* με μπλοκ μεγέθους 3, με τη μέθοδο II (δηλαδή D536, D636, D736, D8312 και D8318). Το D536, D636 και D736, ωστόσο, μπορεί να διαχωριστεί σε δύο ορθογώνια μπλοκ από τον CUT αλγόριθμο του Nguyen(2001)

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

Η μέθοδος του διαχωρισμού των SODs που δημιουργήθηκε από IBD* με μπλοκ μεγέθους 4 (δηλαδή D848, D948, D1048, D1148 και D1248) μπορεί να εξηγηθεί με ένα παράδειγμα. Εξετάζουμε τον σχεδιασμό D1148 ο οποίος περιέχει τα ακόλουθα οκτώ σημεία σχεδιασμού (που παράγεται από το μπλοκ (6 904)):

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

Τα σημεία 1,4, 6 και 7 περιλαμβάνουν ένα μισόκλάσμα του 2^3 παραγοντικού για παράγοντες 1,5 και 10. Τα υπόλοιπα τέσσερα σημεία περιλαμβάνουν το άλλο μισό-

κλάσμα. Μπορούμε να αντιστοιχήσουμε το προηγούμενο με το πρώτο μπλοκ και το τελευταίο με το δεύτερο μπλοκ.

4.6 Αποτελέσματα

Ο Πίνακας 1 συνοψίζει πληροφορίες σχετικά με την κατασκευή των IBDS και περιέχει μια σύγκριση των BB σχεδιασμών με τους αντίστοιχους νέους SODs σε μια σφαίρα ακτίνας 1 ως προς τα ακόλουθα κριτήρια:

(i) Q κριτήριο της περιστρεψιμότητας. Το Q^* είναι ένα στατιστικό R^2 για την παλινδρόμηση της δεύτερης και της τέταρτης τάξης του πίνακα ροπών $M = X'X/n$ επί των αντίστοιχων ροπών για έναν υποθετικό περιστρέψιμο SOD. Έτσι, αν ένας SOD είναι περιστρέψιμος, τότε $Q^*=1$, ενώ εάν ο SOD είναι σχεδόν περιστρέψιμος, τότε το Q^* θα είναι κοντά στο 1. Κατ'αναλογία, καθώς οι ιδιότητες περιστροφής γίνονται φτωχότερες, το Q^* θα προσεγγίσει το 0. Ο υπολογισμός του Q^* περιγράφεται στους Draper και Pukelsheim (1990). Το Q^* είναι αμετάβλητο όταν ένα ή περισσότερα κεντρικά σημεία προστίθενται στο σχεδιασμό (Khuri και Cornell) (1996)

(ii) $|M|$ όπου το M είναι ο πίνακας ροπών και η άμεσα συσχετιζόμενη D -αποδοτικότητα $D\text{-eff} = 100(|M|^{1/p})/n$ όπου το p είναι ο αριθμός των παραμέτρων του μοντέλου.

(iii) $G\text{-efficiency} = 100p/d_{\max}$, όπου d είναι η πρόβλεψη της κλιμακούμενης διακύμανσης στο σημείο (x_1, \dots, x_m) που υπολογίζεται ως $d = x'M^{-1}x$. Σημειώνεται ότι η χωρίς κλίμακα πρόβλεψη της διακύμανσης στο σημείο x είναι $d\sigma^2/n$. Η d_{\max} υπολογίζεται όχι για ολόκληρο το χώρο x του σχεδιασμού, αλλά πάνω από την ένωση των δύο συνόλων $A \cup B$ όπου το A είναι το σύνολο των σημείων $3^m(x_1, \dots, x_m)$ τέτοια ώστε $x_i = 0, \pm 1/\sqrt{m}$ για $i = 1, \dots, m$ και B είναι το σύνολο των σημείων (x_1, \dots, x_m) επί της επιφανείας του m -διαστάσεων έτσι ώστε οι i συντεταγμένες να είναι 0 και οι υπόλοιπες $m-i$ συντεταγμένες είναι $\pm 1/\sqrt{m-1}$. Αν ο χώρος του σχεδιασμού ήταν ένας υπερκύβος, θα αρκούσε να εξεταστούν μόνο τα παραγοντικά σημεία του συνόλου A , επειδή τα σημεία A υποστηρίζουν ένα βέλτιστο σχεδιασμό (Lucas, 1976). Ωστόσο, επειδή ο χώρος του σχεδιασμού είναι σφαιρικός, τα σημεία A δεν υποστηρίζουν απαραίτητα ένα βέλτιστο σχεδιασμό. Έτσι, η μέγιστη κλιμακούμενη εκτιμώμενη διακύμανση μπορεί πολύ πιθανόν να

συμβεί σε ένα σημείο επί της επιφανείας της σφαίρας και δεν περιέχεται στο σύνολο A. Αυτός είναι ο λόγος της αναζήτησης για το μέγιστο του d πάνω στο σύνολο B του οποίου όλα τα σημεία απλώνονται στην σφαιρική επιφάνεια.

Πίνακας 1
Συγκρίνοντας τους BB σχεδιασμούς και τους νέους SODs

m	ρ	Σχεδιασμός	(u, k, r)	r/λ_{ij}	$n+n_0$	Q^*	M	D-eff	G-eff	APV
5	21	BB	(5,2,4)	4(10)	40+6	0,9974	1,54E-27	77,30	83,00	14,97
		D536	(5,3,6)		40+6	0,9911	4,68E-28	73,04	43,48	17,60
6	28	BB ^C	(6,3,3)		48+6	0,9905	2,67E-41	76,73	62,22	22,46
		D636	(6,3,6)		48+6	0,9959	5,95E-41	78,95	70,71	21,27
7	36	BB	(7,3,3)	3(21)	56+6	1,0000	7,98E-57	83,88	92,90	26,59
		D736	(7,3,6)		56+6	1,0000	7,98E-57	83,23	92,90	26,59
8	45	D8312 ^a	(8,3,12)	4(16)3(12)	128+8	0,9983	5,64E-76	85,76	91,08	34,18
		D848	(8,4,8)		128+8	0,9974	3,71E-76	84,97	69,43	34,90
		BB ^{b, c}	(8,3,9)		192+16	0,9974	2,07E-76	83,88	71,01	35,27
		D8318 ^a	(8,3,18)		192+16	0,9993	4,26E-76	85,23	90,50	34,11
9	55	BB ^C	(9,3,5)	4(36)	120+10	0,9924	100	82,24	78,11	46,44
		D934	(9,3,4)		96+8	0,9985	6,50E-99	85,29	87,53	43,27
		BB ^{b, c}	(9,4,4)		144+10	0,9927	101	77,20	16,81	78,40
		D948	(9,4,8)		144+10	0,9982	7,84E-99	85,88	65,93	43,59
10	66	BB ^C	(10,4,4)	4(30)2(15)	160+10	0,9928	126	82,72	65,39	58,99
		D1048	(10,4,8)		160+10	0,9982	125	86,96	76,39	53,25
11	78	BB ^a	(11,5,5)		176+12	0,9996	154	88,32	76,60	62,84
		D1148	(11,4,8)		176+12	0,9977	154	86,80	77,20	64,93
12	91	BB ^b	(12,4,4)		192+12	0,9962	187	86,97	84,80	77,45
		D1248	(12,4,8)		192+12	0,9980	187	87,99	84,80	76,07
13	105	D1344	(13,4,4)	4(78)	208+12	0,9990	223	89,47	90,25	87,50
16	153	BB ^b	(16,4,6)	6(96)3(24)	384+12	0,9935	356	87,39	82,88	142,45
		D1645	(16,4,5)		5(120)	320+10	0,9974	354	90,82	88,84

^a Οι σχεδιασμοί αυτοί δεν μπορούν να είναι ορθογώνιοι

^b Αυτοί οι δυο Box και Behnken σχεδιασμοί είναι από τους Box και Behnken (1958)

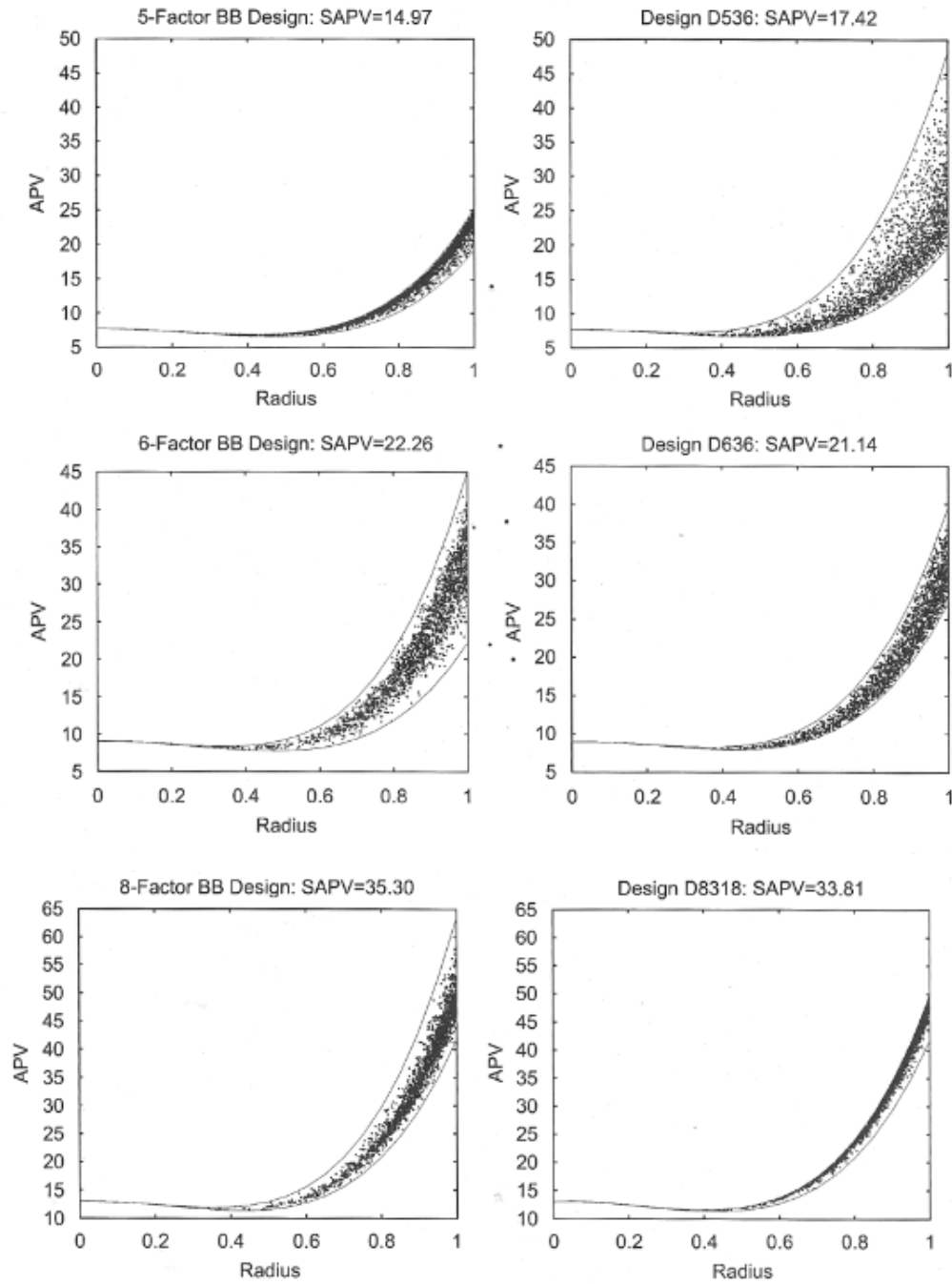
^c Αυτοί οι επτά σχεδιασμοί Box και Behnken (κατασκευασμένοι από PBIBDs) έχουν βελτιωθεί ως προς τα Q^* , |M| και G-αποδοτικότητα.

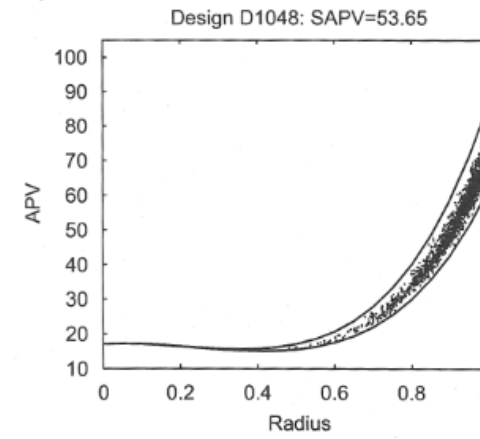
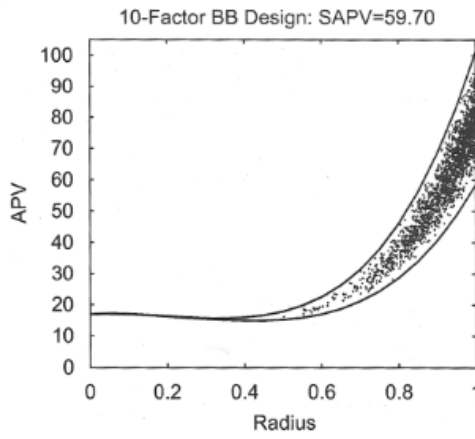
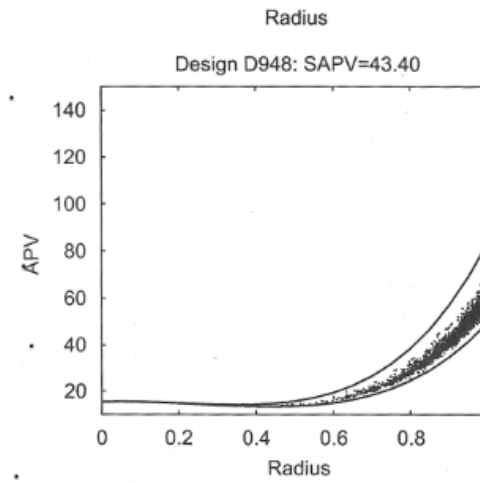
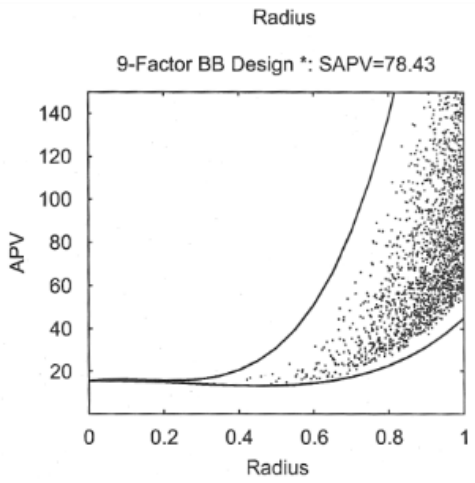
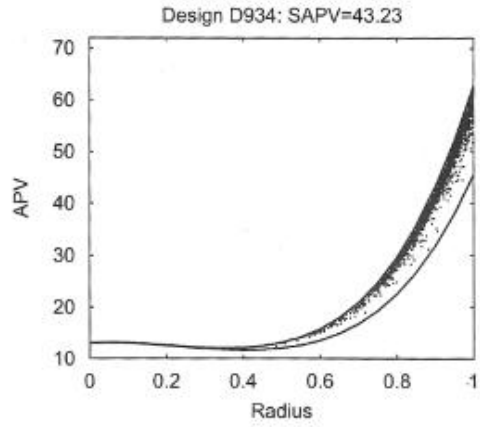
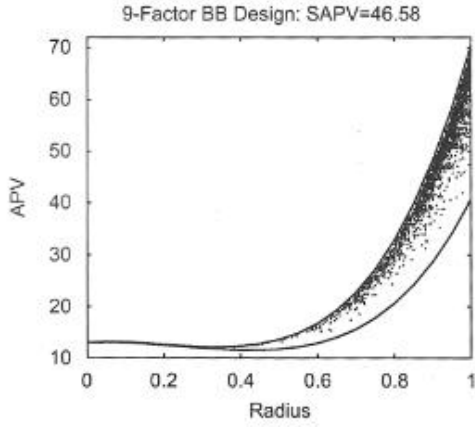
(iii) APV= η μέση διακύμανση κλιμακούμενη πρόβλεψης. Δηλαδή, το APV είναι ο μέσος όρος του d όλων των σημείων στη μοναδιαία σφαίρα. Ο υπολογισμός του κάθε APV περιλαμβάνει αριθμητική εκτίμηση του καταλλήλου πολλαπλού ολοκληρώματος που περιλαμβάνει το μετασχηματισμό σε υπερσφαιροειδείς συντεταγμένες (βλ. Borkowski, 1995α, 1995β, 2003).

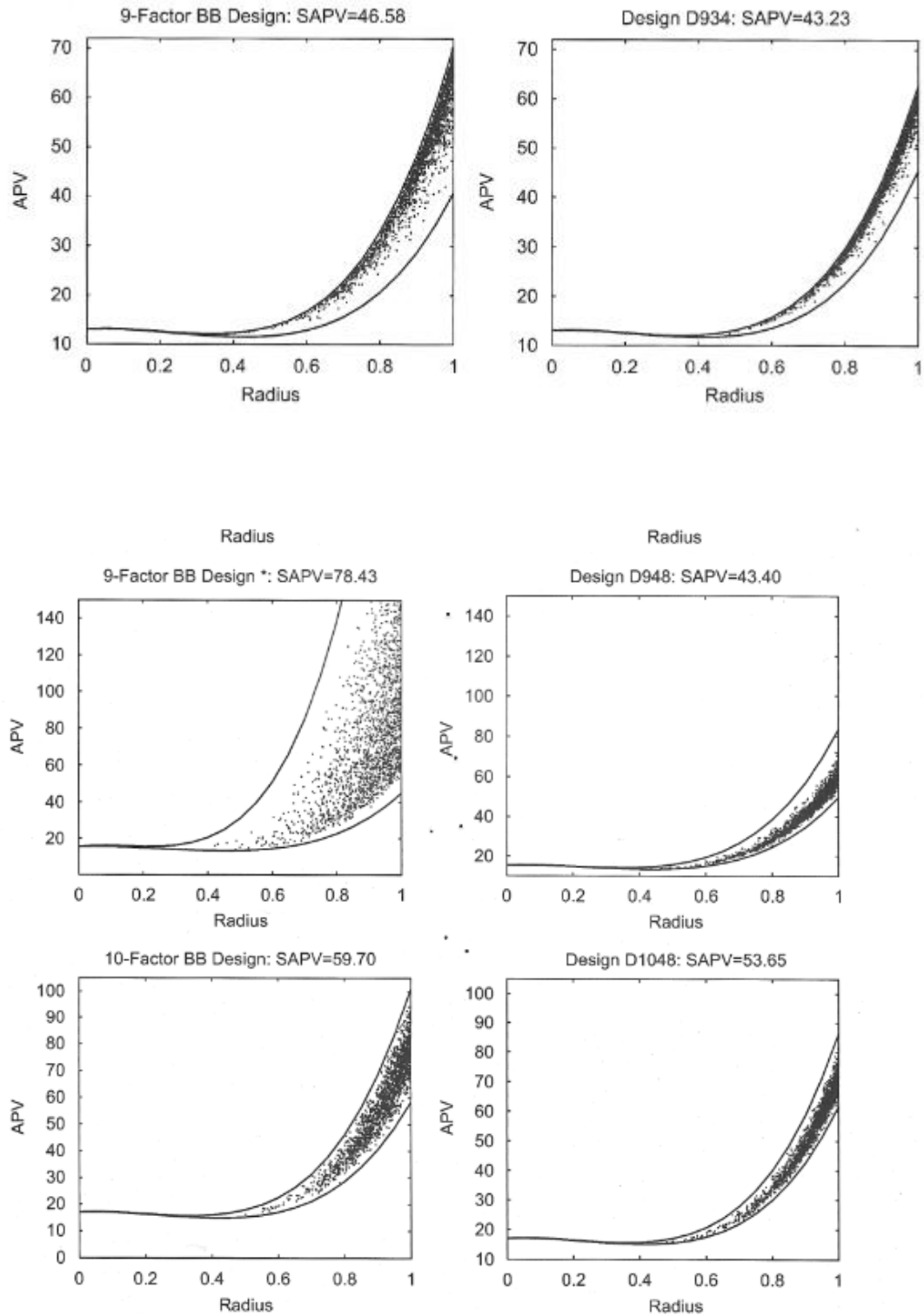
Όπως όλες οι Q^* τιμές του Πίνακα 1 δείχνουν τόσο κοντά στο 1, είναι δύσκολο να δούμε μια βελτίωση που αντιπροσωπεύεται από την αύξηση Q^* από 0,9905 σε 0,9959. Το Σχήμα 1 παρέχει γραφήματα που δείχνουν την αστάθεια των προβλέψεων των αποκλίσεων των επιλεγμένων σχεδιασμών Box-Behnken και των νέων SODs. Κάθε γράφημα είναι μία γραφική παράσταση των ακτινών 2000 τυχαίων σημείων στην m -διαστάση μοναδιαίας σφαίρας επί των κλιμακωτών προβλεπόμενων διασπορών. Ο μέσος όρος των διακυμάνσεως πρόβλεψης του δείγματος (SAPVs) υπολογίζεται από αυτά τα 2000 σημεία τα οποία εμφανίζονται επίσης στο σχήμα. 1. Αυτή η Monte Carlo μέθοδος έχει προταθεί από τον Borkowski(2003) για να εκτιμηθεί η ακριβής αξιολόγηση των τιμών APV για τα σχέδια ως απάντηση για τον υπερκύβο. Όπως αναμενόταν, οι SAPVs είναι πολύ κοντά στις ακριβείς τιμές APV που δίδονται στον Πίνακα 1.

Η μέθοδος Monte Carlo είναι επίσης χρήσιμη για τη γραφική μελέτη των ιδιοτήτων της δυνατότητας περιστρεψιμότητας ενός σχεδιασμού. Συγκεκριμένα, η γραφική παράσταση ενός πιο περιστρέψιμου σχεδιασμού θα είναι λιγότερο απότομη από τη γραφική παράσταση ενός λιγότερο περιστρέψιμου σχεδιασμού. Φυσικά, το γράφημα ενός περιστρέψιμου σχεδιασμού είναι απλά μια καμπύλη, επειδή η διακύμανση πρόβλεψης είναι σταθερή για κάθε ακτίνα. Επάνω σε όλα τα γραφήματα στο σχήμα 1 είναι τα διαγράμματα διασποράς διακύμανσης (VDGs) για την ελάχιστη και μέγιστη κλίμακα πρόβλεψης των διακυμάνσεων που σχετίζονται με κάθε τιμή της ακτίνας. Οι VDGs, ως εκ τούτου, παρέχουν ανώτερα και κατώτερα όρια για τη μεταβλητότητα της κλίμακας των διακυμάνσεων. Το S_m υποδηλώνει την m -διάστατη στη μοναδιαία σφαίρα. Έπειτα, η αναλογία του όγκου του S_m που περιέχεται στην υπο-σφαίρα ακτίνας ρ ($0 \leq \rho \leq 1$) είναι απλά ρ^m . Έτσι, για $m = 12$, θα περιμέναμε 99% (99,9%) τυχαία σφαιρικά σημεία να έχουν $\rho > .68$ (.56), και για το $m = 16$, θα περιμέναμε το 99% (99,9%) των τυχαίων σφαιρικών σημείων να έχουν $\rho > .75$ (.65). Αυτό αντικατοπτρίζεται στον 12 - και 16-παράγοντα στο Σχήμα. 1. Έχοντας τα VDGs

παρέχουν πληροφορίες σχετικά με τα όρια για τη μικρότερη ακτίνα που δεν παρατηρήθηκαν στα τυχαία δείγματα των 2.000 σημείων.







Σχήμα. 1. Διαγράμματα που δείχνουν την ελάχιστη, τη μέγιστη και την μεταβλητότητα της πρόβλεψης των διακυμάνσεων ορισμένων BB σχεδιασμών και των νέων SODs.

Μπορεί να φανεί από τον Πίνακα 1 και το Σχήμα. 1 ότι D636, D8318, D934, D948, D1048, D1248 και D1645 είναι καλύτεροι από τους αντίστοιχους σχεδιασμούς

Box-Behnken (εκείνοι που κατασκευάζονται από PBIBDs) από την άποψη της δυνατότητας περιστρεψιμότητας καθώς και των APV, D-και G-efficiency.

Μπορεί επίσης να φανεί από τον Πίνακα 1 ότι η τιμή Q^* του παραγόμενου SOD είναι κοντά στο 1, εάν οι r / λ_{ij} τιμές των IBD είναι κοντά στο 3 και γίνονται 1 αν όλες οι r / λ_{ij} τιμές γίνονται 3 όπως στην περίπτωση του 7-παραγόντων Box-Behnken σχεδιασμού και D736. Οι SODs δημιουργούνται από IBDS με υψηλή τιμή του r / λ_{ij} (κάτι που συμβαίνει όταν το k είναι μικρό σε σχέση με το v), όπως ο 5-παραγόντων Box-Behnken σχεδιασμός, D934, D1344 και D1645 θα πρέπει να χρησιμοποιούνται με προσοχή. Ο ακόλουθος πίνακας δίνει την κατανομή των επιπέδων του παράγοντα του κάθε ζεύγους των παραγόντων για τους τέσσερις αυτούς σχεδιασμούς.

BB Σχεδιασμός
(5-παραγόντες)

level	-1	0	1
-1	1	6	1
0	6	18	6
1	1	6	1

D934 (9-παραγόντες)

level	-1	0	1
-1	2	12	2
0	12	48	12
1	2	12	2

D1344 (13-παραγόντες)

level	-1	0	1
-1	4	24	4
0	24	108	14
1	4	24	4

D1645
(16-παραγόντες)

level	-1	0	1
-1	4	32	4
0	4	186	4
1	4	32	4

Αυτές οι κατανομές είναι πολύ ανομοιογενείς, λόγω του υψηλού ποσοστού των 0 για κάθε παράγοντα. Ως εκ τούτου, οι πειραματιστές θα πρέπει να εξετάσουν μόνο αυτούς τους τέσσερις σχεδιασμούς κατά τη μελέτη αλληλεπιδράσεων. Εναλλακτικές λύσεις για τον 5-παραγόντων Box - Behnken σχεδιασμό, D934, D1344 και D1645 που θα μπορούσαν να εξεταστούν είναι ο D536 (παρά το χαμηλότερο Q^* σε σύγκριση με το σχεδιασμό 5-παραγόντων BB), ο D948 και οι 13 και 16-παραγόντων SODs (κατασκευασμένοι από συμμετρικά RGDs με μπλοκ μεγέθους 5).

4.7 Συμπερασματικές παρατηρήσεις

Η παραπάνω διαδικασία αναφέρει 13 νέους SODs με 5-16 παράγοντες. Έντεκα από τους 13 νέους SODs (συμπεριλαμβανομένου εκείνου με 11 παράγοντες) μπορούν να είναι ορθογώνιοι κατά μπλοκ. Όλοι οι επτά σχεδιασμοί Box-Behnken κατασκευάστηκαν από PBIBDs (Βλέπε Πίνακα 1) έχουν βελτιωθεί από νέους SODs ως προς τη δυνατότητα περιστρεψιμότητας καθώς και στις APV, D -και G-efficiency. Τόσο οι νέοι SODs όσο και οι Box και Behnken σχεδιασμοί μοιράζονται έναν αριθμό ιδιοτήτων που θεωρείται επιθυμητό για ένα σχεδιασμό αποκριτικής επιφάνειας το

οποίο απαιτεί μόνο έναν ελάχιστο αριθμό επιπέδων για κάθε παράγοντα, έχοντας απλές μορφές δεδομένων, που μπορεί να είναι περιστρεψιμός ή σχεδόν-περιστρεψιμός, με την ικανότητα να είναι ορθογώνιος κατά μπλοκ, εξασφαλίζοντας την απλότητα του υπολογισμού.

Έντεκα από τους 13 νέους SODs και όλοι οι σχεδιασμοί Box- Behnken εκτός από ένα για τον 11-παραγόντων μπορεί να είναι ορθογώνιοι. Όταν ο ορθογώνιος κατά μπλοκ σχεδιασμός δεν είναι κρίσιμης σημασίας, όπως στην περίπτωση των πειραμάτων σχετικά με τα υπολογιστικά μοντέλα που περιλαμβάνουν ένα μεγάλο αριθμό παραγόντων, οι πειραματιστές ενθαρρύνονται να χρησιμοποιούν το Box- Behnken σχέδιασμό με 11 παράγοντες και άλλους τύπους Box- Behnken σχεδιασμών.

Η μέθοδος II που χρησιμοποιήθηκε για να παράγει περισσότερους από τους νέους SODs είναι αρκετά γενική και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να παράγει SODs για άλλους αριθμούς των παραγόντων. Το RGD* μεγέθους (6, 4, 8), (7, 4, 8) και (8, 4, 10) λαμβάνεται για να χρησιμοποιηθεί για τη δημιουργία συμπληρωματικών SODs. Φυσικά, αυτοί οι SODs απαιτούν περισσότερες εκτελέσεις από ό, τι οι D636, D736 και D848. Στην παρούσα εργασία, έχουμε διερευνήσει εν μέρει τη χρήση των IBDS στην κατασκευή SOD. Αναμένουμε την ανάγκη για περαιτέρω έρευνα για τη μελέτη:

- (i) των ιδιοτήτων των RGD* και τη μέθοδο κατασκευής τους, συνδυαστικά καθώς και αλγοριθμικά. Το ερώτημα σχετικά με την ύπαρξη του RGD* του μεγέθους (u, k, r) με $r < 2k$ και $|NN'| \neq 0$ παραμένει αναπάντητο.
- (ii) τη χρήση των άνισων επαναλαμβανόμενων IBDS στην κατασκευή SOD. Η RGD* του μεγέθους (8, 4, 6), του οποίου $|NN'| = 0$ μπορεί στην πραγματικότητα να αυξηθεί με ένα επιπλέον μπλοκ (0 2 3 5). Το αποτέλεσμα IBD έχει $|NN'| \neq 0$ και εξακολουθεί να έχει δύο διαφορετικές αγωγές. Θα μπορούσε κανείς να κατασκευάσει έναν SOD από το αναφερόμενο RGD* με τη Μέθοδο II και να προστεθούν σε αυτόν τον SOD 16 εκτελέσεις που αντιστοιχούν στο πρόσθετο μπλοκ.
- (iii) τη χρησιμοποίηση των κλασματικών παραγοντικών με RGD* στην κατασκευή SOD. Σημειώνεται ότι ένα 2^{4-1} κλάσμα με BIBD* του μεγέθους (11, 5, 10), το οποίο αποτελείται από δύο αντίγραφα του BIBD μεγέθους (11, 5, 5), θα οδηγήσει στον 11-παραγόντων Box - Behnken σχεδιασμό.
- (iv) τη σχέση μεταξύ IBDS με άνισα μεγέθη μπλοκ και άλλων SODs. Μπορεί εύκολα να φανεί ότι το επαυξημένο ζεύγος για τον 5-παραγόντων στον πίνακα 1

του Morris (2000) σχετίζεται με τον ακόλουθο IBD: (3), (0 1), (4 0), (1 2), (2 4), (0 2 3) και (2 1 4). Αυτός ο IBD έχει $r = 3$ και $\lambda_{ij} = 1$.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

ΒΕΛΤΙΣΤΟΙ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΙ ΤΡΙΩΝ ΕΠΙΠΕΔΩΝ ΓΙΑ ΤΗ ΜΕΛΕΤΗ ΑΠΟΚΡΙΤΙΚΩΝ ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ

5.1 Βέλτιστοι σχεδιασμοί τριών επιπέδων για αποκριτική επιφάνεια σε σφαιρικές πειραματικές περιοχές

Οι Box και Behnken (1958, 1960) πρότειναν τη χρήση σχεδιασμών τριών επιπέδων για την εκτίμηση του μοντέλου δεύτερης τάξης με τρεις ή περισσότερους παράγοντες. Τα εκατοντάδες τεχνικά άρθρα σε περιοδικά που έχουν χρησιμοποιήσει πιστοποιούν τη δημοτικότητά τους. Ωστόσο, η βιβλιογραφία προσφέρει λίγη καθοδήγηση σχετικά με την προσαρμογή αυτών των σχεδιασμών για εφαρμογές με μίγμα επιπρόσθετων παραγόντων ή ποιοτικών μεταβλητών. Στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιάσουμε την απλότητα και την ευελιξία που παρέχουν οι σχεδιασμοί τριών επιπέδων για την προσαρμογή ενός μοντέλου δεύτερης τάξης σε διάφορες πειραματικές καταστάσεις όπως παρουσιάστηκε στην εργασία του Robert W. Mee με τίτλο “Optimal Three-Level Designs For Response Surfaces In Spherical Experimental Regions”, 2007.

Σε αντικατάσταση της μείωσης του εύρους των επιπέδων για κάθε παράγοντα και της εξερεύνησης ενός μικρότερου υπερκύβου χαραγμένου σε μία υπερσφαίρα, υποθέτουμε μια σφαιρική περιοχή σχεδίασης, η οποία επιτρέπει την εξερεύνηση κάθε παράγοντα με ασφάλεια σε ευρύτερο φάσμα.

Η κατασκευή αυτών των σχεδιασμών θα βασίζεται στη βέλτιστη σχεδίαση των υπάρχουσων αλγορίθμων που χρησιμοποιούν ένα αρχικό σύνολο υποψηφίων που παρέχονται από το χρήστη. Τα SAS’s ProcOptex, Design expert και Minitab είναι όλα κατάλληλα για το έργο, καθώς επίσης και οι εξειδικευμένοι βέλτιστοι αλγοριθμικοί σχεδιασμοί των Goos και Vandebroek (2001, 2003, 2004). Κατά την κατασκευή D-optimal σχεδιασμών, για μία σφαιρική περιοχή, το υποψήφιο σετ δεν θα πρέπει να είναι πλήρες 3^t παραγοντικό, όπου το t συμβολίζει τον αριθμό των παραγόντων, αλλά μάλλον μια ιδιαίτερη υποομάδα (τροχιά) όλων των σημείων στην ίδια απόσταση από το κέντρο. Η επόμενη παράγραφος θα δείξει ποιες ομάδες είναι οι καλύτεροι υποψήφιοι για 4-12 παράγοντες.

Το D-Optimality κριτήριο τονίζει με ακρίβεια τους εκτιμώμενους συντελεστές του θεωρητικού πρότυπου και μπορεί να παραμελήσει σοβαρά χαρακτηριστικά άλλων

σημαντικών σχεδιασμών. Εναλλακτικά κριτήρια βελτιστοποίησης ελαχιστοποιούν είτε τη βέλτιστη πρόβλεψη του μέσου όρου διακύμανσης (I-optimality) ή τη μέγιστη διακύμανση πρόβλεψης πάνω από την περιοχή σχεδίασης (G-optimality). Οι Box και Behnken (1960, σελ.. 472f.) σαφώς ενδιαφέρονταν για την πρόβλεψη της συνοχής της διακύμανσης πάνω από την περιοχή σχεδίασης. Πρότειναν ο αριθμός των κεντρικών σημείων να είναι τέτοιος ώστε να επιτυγχάνεται ομοιόμορφη ακρίβεια καθώς και να γίνεται αξιολόγηση των σχεδιασμών δεύτερης τάξης (βλ. Myersetal (1992)). Συνήθως οι I-optimal σχεδιασμοί απαιτούν περισσότερα κεντρικά σημεία απ'ότι οι D-optimal. Παρά τον τίτλο του, ο Bisgaard (1997) δεν είναι κριτικός του σχεδιασμού των τριών επιπέδων. Αντίθετα, κριτικάρει την αναποτελεσματικότητα :

(i) του να χρησιμοποιούνται 3^t παραγοντικοί σχεδιασμοί και 3^{t-s} κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί για την εκτίμηση πρώτης και δεύτερης τάξης μοντέλων και

(ii) της διεξαγωγής μεγάλων πειραμάτων αντί μια σειρά από μικρότερα πειράματα. Για τους σκοπούς της διαλογής, κορεσμένοι πρώτης τάξεως, τριών επιπέδων ορθογώνιοι σχεδιασμοί υπάρχουν για κάθε t , (βλ. Mee (2002)), ενώ κορεσμένοι ορθογώνιοι σχεδιασμοί, δύο επιπέδων υπάρχουν μόνο για $t = 3, 7, 11, \dots$. Έτσι, οι τριών επιπέδων σχεδιασμοί παρέχουν πλήρως αποτελεσματικούς σχεδιασμούς για να καθορίσουν την κατεύθυνση της πιο απότομης ανόδου. Επίσης, όπως δείχνει αυτό το άρθρο, οι τριών επιπέδων σχεδιασμοί για τον υπολογισμό ενός δεύτερης τάξης μοντέλου σε μία σφαιρική περιοχή μπορεί να κατασκευαστούν για οποιοδήποτε αριθμό παραγόντων t και μέγεθος μεταβλητής, εφόσον το n είναι μεγαλύτερο ή ίσο προς τον αριθμό των παραμέτρων που εκτιμώνται.

5.2 Βασικές έννοιες για τους βέλτιστους σχεδιασμούς

Οποιοσδήποτε σχεδιασμός δεύτερης τάξης D-optimal για t παράγοντες σε μία σφαιρική περιοχή πρέπει να ορίζεται εξ'ολοκλήρου από τη δεσμευμένη υπερσφαίρα και το κέντρο, χωρίς άλλα εσωτερικά σημεία. Η D-efficiency είναι υπολογισμένη χρησιμοποιώντας τον τύπο:

$$D - \text{efficiency} = [|X'X/n| / D_{\infty}]^{1/p},$$

όπου το X υποδηλώνει τον $n \times p$ δεύτερης τάξης πίνακα μοντέλο για έναν t παραγοντικό σχεδιασμό D ο οποίος περιορίζεται στη μοναδιαία υπερσφαίρα (δηλ., τα διαγώνια στοιχεία της $(DD' \leq 1)$, $p = (t + 1)(t + 2) / 2$, και

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

(Hardin και Sloane (1993)).

Η ελαχιστοποίηση της μέσης πρόβλεψης διακύμανσης είναι ένα κρίσιμο κριτήριο για τη βέλτιστη αποκριτική επιφάνεια των εφαρμογών. Το κριτήριο αυτό είναι γνωστό από πολλές συνώνυμες ονομασίες, συμπεριλαμβανομένων I-, IV-, Q-, και V-optimality. Η I-efficiency για δεύτερης τάξης σχεδιασμούς με $\langle DD' \leq 1$ υπολογίζεται ως I-efficiency = $I_{\infty} / \text{trace}[M(X'X)^{-1}n]$ όπου

$$I_{\infty} = \frac{(t-1)^2(t+2)(t^2+4t+8)^2}{2(t+4)\{t\sqrt{t^2+5t+10}-4\}^2}$$

και M είναι ο πίνακας $p \times p$ για την σφαίρα (Hardin και Sloane (2001)).

Της ίδιας μορφής σχεδιασμοί όπως οι D-Optimal είναι κατ'ουσία και I-Optimal (Hardin και Sloane (1993, 2001)), με τη μόνη διαφορά να είναι η αναλογία των κεντρικών εκτελέσεων. Αφήνουμε το n_B (n_c) να χαρακτηρίζει τον αριθμό των σημείων του σχεδιασμού για το όριο (το κέντρο), έτσι ώστε η $n = n_B + n_c$. Ο βέλτιστος n_c εξαρτάται από τον αριθμό των παραμέτρων $p = (t + 1)(t + 2) / 2$. Ο D- optimal απαιτεί $n_c = n/p$, ή ισοδύναμα $n_c = n_B / (p-1)$, ενώ οι Hardin και Sloane (2001) έδειξαν ότι η I-efficiency είναι υψηλότερη όταν:

$$n_c = \frac{4t\sqrt{t^2+5t+10}-16}{(t-1)(t+2)(t^2+4t+8)} n \approx 2.06n_B/(p-1)$$

Η στενή σχέση μεταξύ D-Optimal και I-Optimal εδώ υποδηλώνει ότι οι I-efficient σχεδιασμοί μπορούν να ληφθούν από την αναζήτηση για ένα D- Optimal σχεδιασμό και στη συνέχεια ρυθμίζοντας τον αριθμό των επαναλήψεων του κεντρικού σημείου.

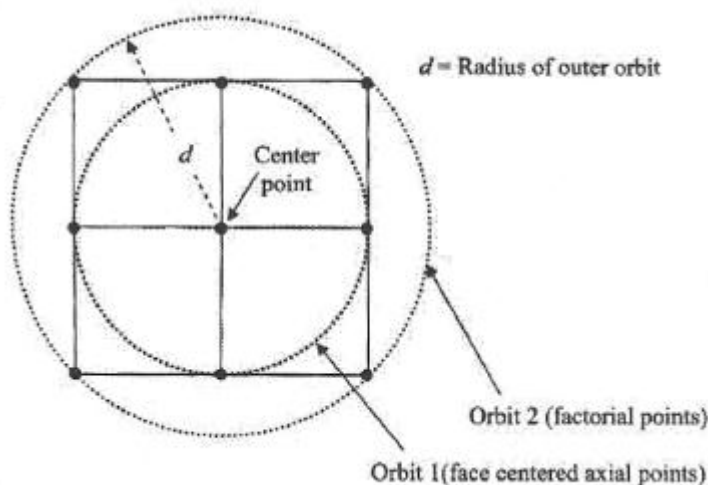
Στο κεφάλαιο αυτό θεωρούμε D-Optimal και I-Optimal σχεδιασμούς ως σχεδιασμούς δεύτερης τάξης σε μία σφαιρική περιοχή υπό τη συνθήκη ότι κάθε παράγοντας είναι σε τρία επίπεδα. Σε πολλές εφαρμογές, η προστιθέμενη ευκολία του περιορισμού του αριθμού των επιπέδων για κάθε παράγοντα θα αντισταθμίσουν την απώλεια της αποτελεσματικότητας της διακύμανσης που προκύπτει από τον περιορισμό αυτό. Οι Mitchel και Bayne (1978) διερεύνησαν τους σχεδιασμούς δεύτερης τάξης D-optimal τριών επιπέδων για τις περιοχές υπερκύβου. Τα αποτελέσματα εδώ διαφέρουν και

είναι απλούστερα εξαιτίας του σχήματος της πειραματικής περιοχής. Όπως στους Mitchel και Bayne, είναι χρήσιμο να διαιρεθούν οι 3^t συνδυασμοί αγωγών στον πλήρη παραγοντικό σε τροχιές των διάφορων ακτίνων. Μία τροχιά περιέχει όλα τα σημεία στην ίδια απόσταση από το κέντρο. Για παράδειγμα, για $t = 2$, υπάρχουν δύο τροχιές, η καθεμία με τέσσερα σημεία (βλέπε Σχήμα 5.1). Για $t = 3$, υπάρχουν τρεις τροχιές: η πρώτη τροχιά αποτελείται από έξι αξονικά σημεία, η δεύτερη τροχιά από 12 πλευρικά σημεία και η τρίτη τροχιά από οκτώ παραγοντικά γωνιακά σημεία. Γενικά για t , η διωνυμική επέκταση

$$3^t = (1+2)^t = 1 + \sum_{k=1}^t \binom{t}{k} 2^k$$

αποκαλύπτει ότι, επιπροσθέτως προς το μοναδικό σημείο στο κέντρο, υπάρχουν t τροχιές, με $\binom{t}{k} 2^k$ σημεία στην k -τροχιά ($k = 1, 2, \dots, t$). Για κάθε $k = 2, \dots, t - 1$, τα σημεία στην k -τροχιά συν το κεντρικό σημείο αντιγράφουν φόρμες δεύτερης τάξης σχεδιασμού που ικανοποιεί προφανώς την προϋπόθεση, ότι όλα τα σημεία βρίσκονται στο όριο ή στο κέντρο, με την προϋπόθεση ότι τα επίπεδα του παράγοντα κλιμακώνονται, έτσι ώστε η k -τροχιά να είναι στο όριο του σχεδιασμού της περιφέρειας. Εκτός από τα μικρά t , λαμβάνοντας όλα τα σημεία στην k -τροχιά απαιτεί υπερβολικά μεγάλο n_b . Η επόμενη παράγραφος σχολιάζει πώς οι Box και Behnken (1960) πρότειναν τη λήψη ενός υποσυνόλου των σημείων στην k -τροχιά.

Σχήμα 5.1



Ένας απλός 3^2 Σχεδιασμός που δείχνει τις δύο τροχιές των σημείων.

Οι κεντρικοί σύνθετοι σχεδιασμοί (CCDs) είναι βασισμένοι στην πρώτη και στην t -τροχιά (δηλαδή, 2^t αξονικά και 2^t παραγοντικά σημεία) συν τις επαναλήψεις στο κεντρικό σημείο. Αυτοί οι σχεδιασμοί δεν πληρούν τις προϋποθέσεις για την D-optimality και προσφέρουν πολύ κακή ακρίβεια για καθαρούς τετραγωνικούς συντελεστές εκτός εάν επαναληφθούν τα αξονικά σημεία. Ομοίως, ο Morris (2000) πρότεινε μια σειρά τριών επιπέδων δεύτερης τάξης σχεδιασμών που αποτελούνται από ένα αρχικό κλάσμα του 2^t , συν τα επαυξημένα ζευγάρια των σημείων που βρίσκονται σε διάφορες εσωτερικές τροχιές. Ενώ οι σχεδιασμοί του είναι κατάλληλοι για διαδοχικό πειραματισμό σε μία περιοχή υπερκύβου, δεν είναι αποτελεσματικοί για τον υπολογισμό των παραμέτρων ή την πρόβλεψη της απόκρισης για σφαιρικές περιοχές. Εάν η περιοχή που μας ενδιαφέρει είναι σφαιρική, οι σχεδιασμοί τριών επιπέδων που περιλαμβάνουν τα παραγοντικά σημεία στην k -τροχιά πρέπει να αποφεύγονται.

5.3 Σχεδιασμοί Box-Behnken

Οι Box και Behnken (BB) (1958, 1960) πρότειναν 17 σχεδιασμούς τριών επιπέδων για την εκτίμηση ενός μοντέλου δεύτερης τάξης με t παράγοντες. Για 3-5 παράγοντες, οι σχεδιασμοί των Box και Behnken περιλαμβάνουν όλα τα $\binom{t}{2} 2^2$ σημεία από τη δεύτερη τροχιά. Για έξι ή περισσότερους παράγοντες, κάθε σχεδιασμός περιέχει μόνο ένα υποσύνολο της k -τροχιάς, με $k > 2$:

- Οι Box και Behnken χρησιμοποίησαν ατελείς μπλοκ σχεδιασμούς (IBD) με μπλοκ μεγέθους k για να επιλέξουν ένα υποσύνολο των $\binom{t}{k}$ συνδυασμών. Οποτε ήταν δυνατόν, οι Box και Behnken χρησιμοποίησαν ισορροπημένο IBD. Σε άλλες περιπτώσεις, χρησιμοποίησαν κανονικά γραφήματα σχεδιασμών IBD όπου όλα τα ζεύγη των επιπέδων της αγωγής εισέρχονται μαζί σε ένα μπλοκ είτε για λ ή για $\lambda + 1$ μπλοκ (John Mitchell και (1977)).
- Για Box και Behnken σχεδιασμούς με $k \geq 5$ (δηλαδή, $t = 11$ και 16), μόνο ένα μισό κλάσμα του κάθε σετ 2^k εκτελέσεων χρησιμοποιήθηκε.

Για παράδειγμα, για $t = 11$, η πλήρης 5η τροχιά περιέχει $\binom{11}{5} 2^5 = 462 \cdot 2^5 = 14,784$ σημεία, ενώ ο αντίστοιχος σχεδιασμός Box και Behnken απαιτεί μόνο $n_B = 11 \cdot 2^{5-1} = 176$ σημεία. Ο Crossier (1991) προσθέσει επιπλέον δύο σχεδιασμούς τύπου Box- Behnken για $t = 9$ και 13 που χρησιμοποιούν ισορροπημένο IBD. Ο πίνακας 5.1 παρουσιάζει μια περίληψη όλων των σχεδιασμών Box-Behnken και Crossier καθώς και την αποτελεσματικότητά τους. Σε κάθε περίπτωση, το D-Optimality και το I-Optimality του n_c αντιστοιχούν σε στρογγυλοποιήσεις $n_B / (p-1)$ και $2.06n_B / (p-1)$, αντίστοιχα, προς τον πλησιέστερο ακέραιο αριθμό. Αξίζει να σημειωθούν οι υψηλές αποδόσεις για αυτούς τους σχεδιασμούς. Αυτό σημαίνει ότι, για αυτά τα μεγέθη σχεδιασμού, ο περιορισμός των σχεδιασμών τριών επιπέδων δεν έχει επηρεάσει ουσιαστικά είτε ούτε τη D- ούτε την I-efficiency.

ΠΙΝΑΚΑΣ 5.1

Περίληψη της θέσης των Box και Behnken (1958, 1960) και των σχεδιασμών του Crossier (1991). Σχεδιασμοί, με D-Optimal και I-Optimal αριθμό κεντρικών εκτελέσεων σε επαναλήψεις

t	Design structure	p	Number of runs		Efficiency (%)	
			n_B	n_c	D-eff.	I-eff.
3	BIB: 3×2^2	10	12	1	97.00	82.64
				3	93.82	95.25
4	BIB: 6×2^2	15	24	2	99.92	93.36
				4	97.17	99.83
5	BIB: 10×2^2	21	40	2	98.83	93.83
				4	97.50	99.02
6	RG: 6×2^3	28	48	2	94.61	88.82
				4	93.25	89.83
				3	99.48	95.71
7	BIB: 10×2^3	28	80	6	98.41	98.99
				3	99.93	98.67
8	BIB: 7×2^3	36	56	3	99.35	99.95
				4	97.91	93.37
9	RG: 24×2^3	45	192	9	97.21	95.92
				5	99.06	95.82
				10	98.45	98.08
9	BIB: 14×2^4	45	224	2	98.93	96.91
9	BIB: 12×2^3	55	96	2	98.93	96.91

				4	98.18	98.11
	RG: 15×2^3	55	120	2	95.06	89.62
				4	94.72	91.55
	RG: 9×2^4	55	144	3	92.96	84.71
				5	92.56	85.49
	BIB: 18×2^4	55	288	5	99.81	97.40
				11	99.22	99.62
10	RG: 10×2^4	66	160	2	93.56	85.46
				5	93.04	87.31
	BIB: 15×2^4			4	100.00	98.75
				8	99.42	99.99
11	BIB: $11 \times 2^{5-1}$	78	176	2	99.57	97.26
				5	99.08	99.12
12	RG: 12×2^4	91	192	2	97.12	94.01
				4	96.86	95.21
13	BIB: 13×2^4	105	208	2	99.11	97.46
				4	98.82	98.42
16	RG: 24×2^4	153	384	3	93.83	89.38
				5	93.66	89.64
	BIB: $16 \times 2^{6-1}$	153	512	3	100.00	99.05
				7	99.78	100.00

Ο πρώτος σχεδιασμός για κάθε t (εκτός από t = 8, 9, και 13) εμφανίζεται από τους Box και Behnken(1960). Οι πρώτοι σχεδιασμοί για t=9 και t=13 είναι από τον Crossier(1991). Όλοι οι άλλοι σχεδιασμοί εμφανίζονται από τους Box και Behnken(1958). Η πρώτη (δεύτερη) αξία n_c που αναφέρεται εδώ για κάθε σχεδιασμό είναι D-Optimal (I-Optimal). BIB=ισορροπημένο ατελές μπλοκ. RG=κανονικό γράφημα.

Οι σχεδιασμοί Box και Behnken βασισμένοι σε κανονικό γράφημα LBD έχουν χαμηλότερη απόδοση από ό, τι οι σχεδιασμοί με βάση ισορροπημένο IBD επειδή παρέχουν άνιση (και κατά μέσο όρο χαμηλότερη) ακρίβεια για την εκτίμηση του συντελεστή αλληλεπίδρασης. (Αυτό είναι ένα ιδιαίτερο μειονέκτημα για τις εφαρμογές των εύρωστων παραμετρικών σχεδιασμών όπου μας ενδιαφέρουν οι αλληλεπιδράσεις ελέγχου θορύβου. Για τους Box και Behnken σχεδιασμούς με γνώμονα τον ισορροπημένο IBD, ο σχεδιασμός είναι περιστρέψιμος, αν και μόνο αν $k = (t + 2) / 3$ (βλέπε Box και Behnken, (1960, σελ.. 472)). Έτσι, οι Box και Behnken σχεδιασμοί με βάση τον ισορροπημένο IBD με $(t = 4, k = 2)$, $(t = 7, k = 3)$, $(t = 10, k = 4)$, και $(t = 16, k = 6)$ είναι βέλτιστοι σχεδιασμοί, αν και οι σχεδιασμοί για $t = 10$ και 16 απαιτούν πάρα πολλές εκτελέσεις για να είναι χρήσιμοι.

Ενώ δεν υπάρχει κανένας περιστρεψιμός σχεδιασμός τριών επιπέδων όταν $(t+2) / 3$ δεν είναι ακέραιος, με τη χρήση ενός ισορροπημένου IBD με $k = (t + 2) / 3$ για να προσδιορίσει το υποσύνολο των σημείων ορίου πάντα παράγει ένας BB σχεδιασμός με πολύ υψηλή απόδοση. Το κύριο μειονέκτημα αυτών των σχεδιασμών είναι η ακαμψία του μεγέθους του σχεδιασμού.

5.4 D-Optimal σχεδιασμοί τριών επιπέδων

Ερευνούμε τώρα το βέλτιστο για τους σχεδιασμούς τριών επιπέδων μεγέθους n από p στο $2p$ ή μεγαλύτερο. Η υπόθεση με τέσσερις παράγοντες εξηγείται λεπτομερώς. Για $t = 5-11$ παράγοντες, αναφέρουμε απλά την καλύτερη επιλογή για το υποψήφιο σετ D-efficiencies για την εκτέλεση διαφόρων μεγεθών.

5.4.1 D-Optimal σχεδιασμοί για $t = 4$ παράγοντες

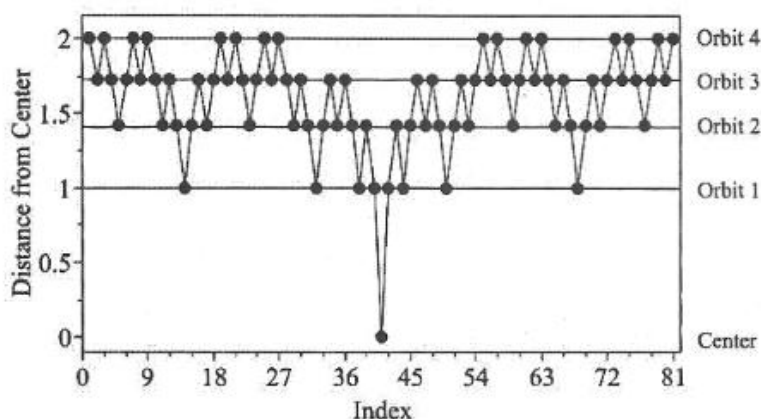
Ο 3^4 πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός αποτελείται από 81 σημεία. Τα x_1, x_2, x_3, x_4 υποδηλώνουν τους τέσσερις παράγοντες. Αν τα επίπεδα επικεντρώνονται περίπου στο μηδέν, η απόσταση ενός σημείου στον σχεδιασμό από το κέντρο δίνεται από $d = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2}$. Τυπικά, τα επίπεδα κωδικοποιούνται $(-1, 0, 1)$. Χρησιμοποιώντας αυτή την κωδικοποίηση, η απόσταση από το κέντρο σχεδιασμού δείχνεται για κάθε ένα από τα 81 σημεία του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού στο Σχήμα 5.2. Βλέπουμε ότι τα σημεία διανέμονται στο κέντρο και σε τέσσερις τροχιές σε αποστάσεις $1, \sqrt{2}, \sqrt{3}$, και $\sqrt{4}(=2)$, με 8, 24, 32, και 16 σημεία για κάθε μία, αντίστοιχα.

Για να προσδιοριστεί ένας D-optimal σχεδιασμός τριών επιπέδων με ένα δεδομένο αριθμό εκτελέσεων n , αρχίζει με ένα (μεγαλύτερο) σύνολο υποψήφιων σημείων από τα οποία έχουν επιλεγεί τα βέλτιστα υπομήματα. Για παράδειγμα, θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε όλα τα σημεία από τις τροχιές 1 και 2 και το κεντρικό σημείο, σαν υποψήφιο σετ σημείων. Αυτό θα έδινε ένα υποψήφιο σετ 33 σημείων. Αυτό είναι ένα από τα τρία εναλλακτικά υποψήφια σετ που αναφέρονται παρακάτω. Για τη σύγκριση των «βέλτιστων» σχεδιασμών που βρέθηκαν από διαφορετικά υποψήφια σύνολα, είναι αναγκαίο να προσαρμόσουμε την κλίμακα των επιπέδων έτσι ώστε τα σημεία να βρίσκονται στο εσωτερικό ή στο σύνορο της

υποτιθέμενης περιοχής του σφαιρικού σχεδιασμού. Αν πάρουμε την περιοχή σχεδίασης μιας υπερσφαίρας με ακτίνα 1, τότε τα υποψήφια 33-σημεία που αποτελούνται από σημεία του κέντρου, της τροχιάς 1, και της τροχιάς 2 κλιμακώνονται έτσι ώστε τα χαμηλά, μεσαία, και υψηλά επίπεδα είναι $-\sqrt{\frac{1}{2}}$, 0 και $\sqrt{\frac{1}{2}}$ αντίστοιχα. Σε κάθε περίπτωση, η κλιμάκωση διαβεβαιώνει ότι τα στοιχεία από την εξωτερική τροχιά βρίσκονται σε κάθε υποψήφιο σύνολο για τη μοναδιαία σφαίρα και τα υπόλοιπα σημεία που βρίσκονται όλα μέσα στη μοναδιαία σφαίρα.

Σχήμα 5.2

Τροχιές για ένα πλήρη 3^4 παραγοντικό σχεδιασμό με τα επίπεδα (-1, 0, 1).



Τα τρία υποψήφια σετ για $t = 4$ παράγοντες είναι:

1. Οι τροχιές 2 και 1, καθώς και το κέντρο (33 σημεία). Τα επίπεδα είναι κωδικοποιημένα σαν 0 και $\pm \sqrt{1/2}$.
2. Οι τροχιές 3, 2, και 1, συν το κέντρο (65 σημεία). Τα επίπεδα είναι κωδικοποιημένα σαν 0 και $\pm \sqrt{1/3}$.
3. Ο πλήρης 3^4 (81 σημεία). Τα επίπεδα είναι κωδικοποιημένα σαν 0 και $\pm \sqrt{1/4}$, έτσι ώστε η τέταρτη τροχιά να βρίσκεται στη μοναδιαία σφαίρα και όλα τα άλλα σημεία είναι εσωτερικά.

Για την εκτέλεση ενός δεδομένου υποψηφίου σετ και ενός σχεδιασμού n μεγέθους, κάποιος μπορεί να χρησιμοποιήσει τη μέθοδο Fedorov όπως εφαρμόζεται στην SAS's (2004) ProcOptex, ή κάποιο παρόμοιο αλγόριθμο, για να βρει το

καλύτερο υποσύνολο. Για παράδειγμα, με το 33-σημείων υποψήφιο σετ και $n = 26$, η έξοδος για τον καλύτερο σχεδιασμό εμφανίζεται στον Πίνακα 5.2. Η τελευταία στήλη δείχνει την συχνότητα για κάθε υποψήφιο σημείο στον βέλτιστο σχεδιασμό του μεγέθους 26 εκτελέσεων. Σημειώνεται ότι, για την βελτιστοποίηση του σχεδιασμού, 24 σημεία (ολόκληρη η δεύτερη τροχιά) εμφανίζονται κάθε φορά, και το κεντρικό σημείο έχει συχνότητα 2.

Για κάθε υποψήφιο σύνολο και αριθμό εκτελέσεων n (εδώ και αργότερα), το πιο αποτελεσματικό D-υποσύνολο εντοπίστηκε χρησιμοποιώντας ProcOptex με τη μέθοδο Fedoron και 100 ή περισσότερες επαναλήψεις. Το Σχήμα 5.3 δείχνει την D-efficiency για $n = 15$ (κορεσμένος σχεδιασμός) έως $n = 34$ για κάθε υποψήφιο σετ. Οι D-efficiencies υπολογίστηκαν σε σχέση με το θεωρητικό άνω φράγμα (1) που δεν είναι συνήθως επιτεύξιμο για ένα συγκεκριμένο n .

Για το 33-σημείων υποψήφιο σετ και $n = 26$, ο D-optimal σχεδιασμός είναι ο σχεδιασμός Box-Behnken με $n_c = 2$ και απόδοση = 99,92% (βλέπε Πίνακα 5.2). Για το ίδιο σύνολο υποψηφίων και $n < 26$, ο D-optimal σχεδιασμός είναι πάντα ένα υποσύνολο του σχεδιασμού Box-Behnken, ενώ για $n > 26$, ο σχεδιασμός περιλαμβάνει διπλότυπα των σημείων Box-Behnken. Δηλαδή, για σύνολο υποψηφίων 1, το βέλτιστο υποσύνολο περιλαμβάνει μόνο βαθμούς από τη δεύτερη τροχιά και το κέντρο. Αν και δεν φαίνεται στο Σχήμα 5.3, από $n = 35$ έως 51, η D-efficiency αυξάνει στο $n=51$, ο σχεδιασμός του D-optimal είναι μια πλήρης αντιγραφή της δεύτερης τροχιάς συν 3 εκτελέσεις στο κέντρο.

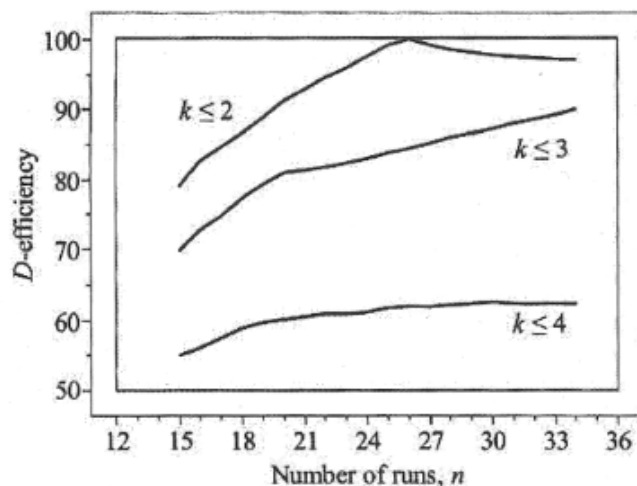
Για το υποψήφιο σετ 2 με 65 σημεία, η υψηλότερη D-efficiency εμφανίζεται για $n = 34$. Αυτός ο σχεδιασμός αποτελείται από το σύνολο της τρίτης τροχιάς συν $n_c = 2$. Κάθε μικρότερος σχεδιασμός που έχει επιλεγεί από αυτό το υποψήφιο σύνολο είναι ένα υποσύνολο αυτού του σχεδιασμού. Στο σχεδιασμό δεν περιλαμβάνονται στοιχεία από εσωτερικές τροχιές. Για $n > 34$, οι D-efficiencies αρχικά μειώνονται όσο τα σημεία της τρίτης τροχιάς διπλασιάζονται.

Για το πλήρες 3^4 υποψήφιο σετ, οι σχεδιασμοί απαραίτητως περιλαμβάνουν τα σημεία από πολλαπλές τροχιές, διότι η εξωτερική τροχιά περιέχει μόνο δύο επίπεδα για κάθε παράγοντα. Όπως φαίνεται από το Σχήμα 5.3, όλοι οι σχεδιασμοί που λαμβάνονται από αυτό το σύνολο υποψηφίων έχουν κατώτερες D-efficiencies. Περιληπτικά, ο D-optimal τεσσάρων παραγόντων, σχεδιασμός τριών επιπέδων για $n <$

26 είναι υποσύνολο του σχεδιασμού Box-Behnken, και για $n > 26$, συνεπάγεται την επανάληψη των ίδιων σημείων.

Σχήμα 5.3

D-Efficiencies σχεδιασμός τριών επιπέδων για τέσσερις παράγοντες
Κατασκευασμένο από τα υποψήφια σετ, αποτελείται από σημεία πάνω από τις τροχιές $k = 2, 3$, και 4 .



5.4.2 D-optimal σχεδιασμοί για $t = 5-12$ παράγοντες

Εκτεταμένες έρευνες έγιναν για να προσδιοριστεί το καλύτερο υποψήφιο σετ που θα χρησιμοποιηθεί για το σχεδιασμό τριών επιπέδων μέχρι και 12 παράγοντες. Επειδή ο σχεδιασμός D-optimal αποτελείται πάντοτε από εκτελέσεις μίας ενιαίας τροχιάς σημείων, συν τις επαναλήψεις του κεντρικού σημείου, η κατασκευή αυτών των σχεδιασμών από επαγγελματίες απλοποιείται με τον περιορισμό του υποψήφιου σετ που έχει οριστεί σε μια ενιαία τροχιά, συν το κεντρικό σημείο. Το προτιμώμενο υποψήφιο σετ καθορίζεται στον πίνακα 5.3 για $t = 5-12$ παράγοντες. Για $t = 5$ παράγοντες, η προτιμώμενη τροχιά για το σύνολο υποψηφίων εξαρτάται από το μέγεθος των εκτελέσεων. Για $n = 42$, ο σχεδιασμός Box-Behnken, ο οποίος αποτελείται από ολόκληρη τη δεύτερη τροχιά, είναι D-optimal. Για $32 \leq n \leq 41$, ο σχεδιασμός D-optimal αποτελείται από ένα υποσύνολο της δεύτερης τροχιάς. Ωστόσο, για $n \leq 31$, οι σχεδιασμοί D-optimal αποτελούνται από σημεία της τρίτης τροχιάς.

Πίνακας 5.2

D-Optimal σχεδιασμός με εκτελέσεις μεγέθους $n = 26$ κατασκευασμένο από ένα υποψήφιο σετ των 33 σημείων

Candidate point no	x_1	x_2	x_3	x_4	Frequency
1	-0.70711	-0.70711	0	0	1
2	-0.70711	0	-0.70711	0	1
3	-0.70711	0	0	-0.70711	1
4	-0.70711	0	0	0	0
5	-0.70711	0	0	0.70711	1
6	-0.70711	0	0.70711	0	1
7	-0.70711	0.70711	0	0	1
8	0	-0.70711	-0.70711	0	1
9	0	-0.70711	0	-0.70711	1
10	0	-0.70711	0	0	0
11	0	-0.70711	0	0.70711	1
12	0	-0.70711	0.70711	0	1
13	0	0	-0.70711	-0.70711	1
14	0	0	-0.70711	0	0
15	0	0	-0.70711	0.70711	1
16	0	0	0	-0.70711	0
17	0	0	0	0	2
18	0	0	0	0.70711	0
19	0	0	0.70711	-0.70711	1
20	0	0	0.70711	0	0
21	0	0	0.70711	0.70711	1
22	0	0.70711	-0.70711	0	1
23	0	0.70711	0	-0.70711	1
24	0	0.70711	0	0	0
25	0	0.70711	0	0.70711	1
26	0	0.70711	0.70711	0	1
27	0.70711	-0.70711	0	0	1
28	0.70711	0	-0.70711	0	1
29	0.70711	0	0	-0.70711	1
30	0.70711	0	0	0	0
31	0.70711	0	0	0.70711	1
32	0.70711	0	0.70711	0	1
33	0.70711	0.70711	0	0	1

Για $t = 6-10$ παράγοντες, ο σχεδιασμός D-optimal είναι ένα υποσύνολο της τρίτης τροχιάς, τουλάχιστον για εκτελέσεις μεγέθους μέχρι το διπλάσιο του μεγέθους του κορεσμένου σχεδίου. (δηλ., $n \leq 2p$). Οι D- efficiencies επιτυγχάνονται για διαφορετικά μεγέθη εκτελέσεων όπως φαίνονται στο Σχήμα 5.4. Ακόμη και για $t = 11$ παράγοντες, ο $k = 3$ προτιμάται για $n \leq 110$, ενώ για n μεταξύ 120 και 150, υπάρχει

μικρή διαφορά στις D-efficiencies για βέλτιστα υποσύνολα από την τρίτη και τέταρτη τροχιά. Για $n > 150$, χρησιμοποιείται $k = 4$, ή ακόμη και $k = 5$ για n κοντά στο 178 (αν και η επαρκής αναζήτηση μεγάλων υποψήφιων συνόλων που αποτελούνται από τα σημεία της τροχιάς 4 ή 5 θα απαιτήσει περισσότερο χρόνο). Για $t = 12$, η τέταρτη τροχιά παράγει πιο αποδοτικούς σχεδιασμούς από την τρίτη τροχιά. Οι D-efficiencies χρησιμοποιώντας το $k = 4$ κυμαίνονταν από 72,2% για τον κορεσμένο σχεδιασμό έως 92,5% σε $n = 160$.

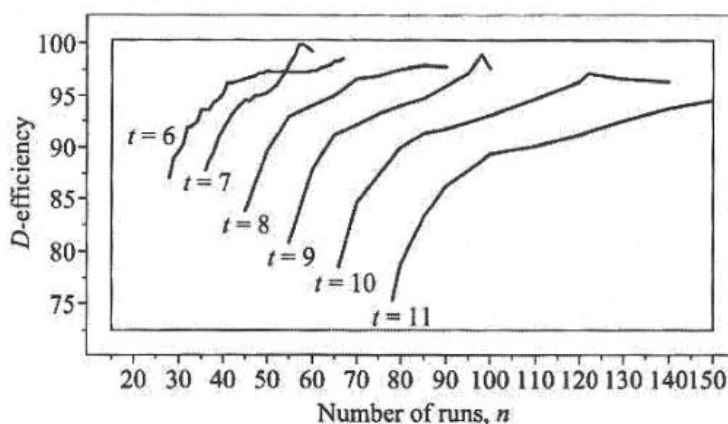
Πίνακας 5.3.

Προτεινόμενες τροχιές υποψήφιων σετ για D-Optimal σχεδιασμό τριών επιπέδων, μεγέθους n

t	k=2	k=3	k=4
3	$n \geq 10$		
4	$n \geq 15$		
5	$n \geq 32$	$21 \leq n \leq 31$	
6		$n \geq 28$	
7		$n \geq 36$	
8		$n \geq 45$	
9		$n \geq 55$	
10		$66 \leq n \leq 140$	
11		$78 \leq n \leq 110$	(see text)
12			$n \geq 91$
13-15			(see text)

Σχήμα 5.4

D-Efficiencies σχεδιασμοί τριών επιπέδων για $t = 6-11$ παράγοντες κατασκευασμένο από τα υποψήφια σετ αποτελούμενο από σημεία της $k=3^{ns}$ τροχιάς.



5.5 Μεροληψία από τρίτης-τάξης όρους και έλεγχος έλλειψης προσαρμογής

Εάν ένας σχεδιασμός δεν είναι κορεσμένος, τότε οι βαθμοί ελευθερίας του σφάλματος μπορεί να χρησιμοποιηθούν για να διερευνηθεί η επάρκεια του μοντέλου και ίσως ακόμη και να εκτιμηθούν κάποιοι πρόσθετοι όροι. Αν έχουμε επανάληψη, τότε μπορεί να εκτελεστεί ένας τυπικός έλεγχος έλλειψης προσαρμογής, μολονότι η κατανομή της D -optimal $n_c = n / p$ εφοδιάζει γενικά πολύ μικρή επανάληψη για να είναι χρήσιμη. Όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή, οι I -optimal σχεδιασμοί είναι καλύτεροι στον τομέα αυτό. Έτσι, ποιοί τύποι μπορεί να ανιχνευθούν; Ο έλεγχος για την έλλειψη προσαρμογής του μοντέλου της δεύτερης τάξης βασίζεται συνήθως στην εξέταση της ανάγκης για τρίτης τάξης όρους, δηλαδή, x_i^3 , $x_i^2 x_j$, και $x_i x_j x_l$ όρους (Draper et al. (1994)). Οι σχεδιασμοί τριών επιπέδων δεν έχουν καμία δυνατότητα να ανιχνεύουν καθαρά κυβικούς όρους, με $(-1, 0, 1)$ κωδικοποίηση $x_j^3 = x_j$. Η κατάσταση είναι καλύτερη για τους όρους της τρίτης τάξης που αφορούν αλληλεπιδράσεις. Η στήλη $x_i^2 x_j$ συσχετίζεται θετικά με τη x_j , αλλά η παρουσία των εκτελέσεων για τις οποίες $x_j^3 \neq x_j$ παρέχει κάποια ικανότητα στην ανίχνευση τέτοιων αλληλεπιδράσεων. Δηλαδή, εάν ένας τετραγωνικός όρος με γραμμική αλληλεπίδραση υπάρχει αλλά παραλείπεται από το μοντέλο μας, θα μεροληπτήσει στη γραμμική εκτίμηση αποτελέσματος για τον παράγοντα j στη νιοστή. Ωστόσο, συμπεριλαμβανομένης της στήλης $x_i^2 x_j$ για διάφορες (i, j) , μπορεί να θεωρηθούν ως αποδείξεις.

Τελικά, ένας σχεδιασμός τριών επιπέδων κατασκευασμένος από την τροχιά k - για $k \geq 3$ μπορεί να ανιχνεύσει την παρουσία κάποιου παράγοντα τριών αλληλεπιδράσεων. Υπολογίζοντας τον ταυτόσημο του πίνακα (όπως ο Draper (1994)) δείχνει σαφώς την πιθανή μεροληψία από κάθε όρο της τρίτης τάξης.

Ο Srinivas (1995) αναφέρει ένα πείραμα βασισμένο σε έξι παράγοντες σχεδιασμού με $n_B = 48$ και $n_C = 6$. Έξι επαναλαμβανόμενα κεντρικά σημεία είναι περισσότερα απ'όσα οι D - optimality ή I -optimality απαιτούν, όμως είναι ευεργετικά για τον έλεγχο έλλειψης προσαρμογής. Το πείραμα περιγράφει μια διαδικασία ζύμωσης για την παραγωγή αιθανόλης. Ο κύριος σχεδιασμός περιλάμβανε έξι μεσαίες συνιστώσες που μελετήθηκαν στις 54 εκτελέσεις από ένα σχεδιασμό Box-Behnken. Για κάθε μία από αυτές τις 54 εκτελέσεις, η ανταπόκριση ήταν η μέγιστη παρατηρούμενη

παραγωγή αιθανόλης που επιτεύχθηκε σε ένα μικρό πείραμα στο pH και τη θερμοκρασία.

Φαίνεται να υπάρχουν σφάλματα σε έξι συνδυασμούς αγωγών 3, 19, 23, 26, 33, και 43 του Srinivas. Εξαλείφοντας αυτές τις έξι γραμμές και την πρώτη εκτέλεση του κεντρικού σημείου (γραμμή 49), η οποία είναι μια ακραία τιμή, παραμένει ένας μη ισορροπημένος σχεδιασμός με $n_B = 42$ και $n_c = 5$. Στην τοποθέτηση μιας δεύτερης τάξης μοντέλου με τις 47 εκτελέσεις, παρατηρούμε σημαντική έλλειψη προσαρμογής (βλ. Πίνακα 5.4). Αυξάνοντας ένα μοντέλο δεύτερης τάξης με τη χρήση της προς τα εμπρός επιλογής, υπολογίζοντας όλους τους επιλέξιμους όρους της τρίτης τάξης που είναι υπολογισμένοι από αυτό το σχεδιασμό, πέντε όροι προστέθηκαν: $x_1x_4x_5$, $x_4^2x_6$, $x_1^2x_5$, $x_5x_1^2$, $x_3^2x_4$. Αυτό το μοντέλο έχει $R^2 = 95,3\%$ και έλλειψη προσαρμογής $F = 3,48$ ($p\text{-value} > 0.05$). Εξαιτίας του ότι είναι ταυτόσημες των τεσσάρων περιλαμβανομένων $x_i^2x_j$ όρων με τους όμοιους όρους που δεν περιλαμβάνονται, και προσθέτοντας τους περισσότερους όρους τρίτης τάξης, υπάρχει μεγάλη ασάφεια σχετικά με το σωστό μοντέλο.

Πίνακας 5.4

Μοντέλο δεύτερης τάξης, με 47 εκτελέσεις από Srinivas (1995)

Source	DF	Sum of	Mean	F ratio	Prob > F
Analysis of variance					
Model	27	0.02204393	0.000816	1.8212	0.0897
Error	19	0.00851756	0.000448		
C. Total	46	0.03056149			
Lack Of Fit					
Lack Of Fit	15	0.00837036	0.000558	15.1637	0.0088
Pure Error	4	0.00014720	0.000037		
Total Error	19	0.00851756			

Πίνακας 5.5

Απώλεια της D-Efficiency από τους περιοριστικούς παράγοντες τριών επιπέδων

t	n = p			n = p + 5		
	D-eff for 3-level design	D-eff for many-level design	Efficiency ratio	D-eff for 3-level design	D-eff for many-level design	Efficiency ratio
4	0.7923	0.9707	0.82	0.9126	0.9972	0.92
5	0.8281	0.9747	0.85	0.8853	0.9979	0.89
6	0.8703	0.9994	0.87	0.9208	0.9968	0.92
7	0.8780	0.9737	0.90	0.9244	0.9444	0.98

Ακόμα κι έτσι, αυτός ο σχεδιασμός αποκαλύπτει ότι το μοντέλο δεύτερης τάξης είναι ελλιπές και μερικοί όροι τρίτης τάξης της μορφής $x_i x_j^2$ θα μπορούσαν να βελτιώσουν το μοντέλο. Μαθαίνοντας περισσότερα θα απαιτούσε πρόσθετα δεδομένα.

Σε περιπτώσεις όπως αυτή με σοβαρή έλλειψη προσαρμογής, μπορεί κανείς να χρειαστεί ένα σχεδιασμό τρίτης τάξης. Οι D-optimal σχεδιασμοί τρίτης τάξης αποτελούνται από σημεία στις δύο σφαίρες, με την εσωτερική σφαίρα να έχει ακτίνα το 50-60% της ακτίνας του ορίου της σφαίρας (Farrell (1967)). Η βέλτιστη αύξηση ενός Box-Behnken σχεδιασμού ή ενός CCD μπορεί να αντιμετωπιστεί χρησιμοποιώντας εμπορικά διαθέσιμο λογισμικό.

5.6 Απώλεια της απόδοσης λόγω του περιορισμού των σχεδιασμών τριών επιπέδων

Αν και οι σχεδιασμοί τριών επιπέδων είναι δημοφιλείς, αν αναλογιστεί κανείς τους σχεδιασμούς με περισσότερα επίπεδα, μπορούμε να επιτύχουμε υψηλότερες αποδόσεις, ειδικά για σχεδόν κορεσμένους σχεδιασμούς. Για να εκτιμηθεί η απώλεια της απόδοσης από τον περιορισμό, είναι απαραίτητο να ψάξουμε για D-optimal και I-optimal σχεδιασμούς μέσα στη σφαίρα και στη συνέχεια να συγκρίνουμε τις αποτελεσματικότητες σχεδιασμών τριών επιπέδων και πολλών επιπέδων. Ο Πίνακας 5.5 συνοψίζει τα αποτελέσματα. Η σχετική D-efficiency, υπολογίζεται ως η αναλογία των δύο D-efficiencies, όπου αντανακλά την απώλεια της αποτελεσματικότητας λόγω του περιορισμού τριών επιπέδων.

Ο κορεσμένος σχεδιασμός με $t = 4$ έχει τη χειρότερη απόδοση αποτελεσματικότητας στον Πίνακα 5.5. (Το σχήμα 5.4 δείχνει ότι χειροτερεύει η αναποτελεσματικότητα για κορεσμένο σχεδιασμό $t > 7$.) Ευτυχώς, η απώλεια της

αποτελεσματικότητας των σχεδιασμών τριών επιπέδων μειώνεται καθώς ο αριθμός των επιπλέον εκτελέσεων $n-p$ αυξάνεται. Για παράδειγμα, σε $t = 7$ και $n = 41$ ($= p + 5$), η απώλεια της αποτελεσματικότητας είναι μόνο 2%. Καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι οι σχεδιασμοί τριών επιπέδων δεύτερης τάξης μπορεί να είναι αρκετά αποτελεσματικοί, εφόσον ο σχεδιασμός δεν είναι σχεδόν κορεσμένος.

Ο I-efficiency σχεδιασμός τριών επιπέδων σε σχέση με τον καλύτερο σχεδιασμό JMP εμφανίζεται στον Πίνακα 5.6. Οι σχεδιασμοί τριών επιπέδων στους οποίους ο Πίνακας 5.6 βασίζεται, λήφθηκαν με την προσθήκη μιας εκτέλεσης σε καθένα από τους D-optimal σχεδιασμούς τριών επιπέδων και αντιπροσωπεύονται στον Πίνακα 5.5 [εκτός από την περίπτωση του ($t = 4, n = 21$), όπου ($n_B = 18, n_C = 3$) είναι I-optimal. Εκεί προσθέσαμε δύο εκτελέσεις στη 19η εκτέλεση D-optimal σχεδιασμού]. Αυτό έγινε επειδή δεν έχουμε βολικό τρόπο για την αναζήτηση σφαιρικών σχεδίων I-optimal από ένα σύνολο υποψήφιων σετ.

Πίνακας 5.6

Απώλεια I-Efficiency από τους περιοριστικούς παράγοντες σε τρία επίπεδα

t	n = p + 1			n = p + 6		
	I-eff for 3-level design	I-eff for many-level design	Efficiency ratio	I-eff for 3-level design	I-eff for many-level design	Efficiency ratio
4	0.3727	0.9429	0.40	0.7628	0.7628	0.79
5	0.6658	0.9488	0.70	0.7823	0.7823	0.79
6	0.7443	0.9999	0.74	0.8408	0.8408	0.84
7	0.7471	0.9487	0.89	0.8510	0.8510	0.86

Οι αποδοτικοί αυτοί σχεδιασμοί συγκρίνονται με σφαιρικούς βέλτιστους σχεδιασμούς δεύτερης τάξης που έχουν βρεθεί. Μολονότι οι I-efficiencies στον Πίνακα 5.6 είναι πολύ μικρότερες από τις D-efficiencies στον Πίνακα 5.5, το συνολικό σχήμα είναι το ίδιο. Η απώλεια της αποτελεσματικότητας είναι μεγαλύτερη (60%) για το μικρότερο σχεδιασμό ($t = 4, n = 16$), αλλά μόνο 14% για το μεγαλύτερο σχεδιασμό ($t = 7, n = 42$) όπως παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.6. Οι αποδόσεις για πραγματικά I-optimal σχεδιασμούς τριών επιπέδων μπορεί να είναι καλύτεροι από ό, τι ο Πίνακας 5.6 δείχνει γιατί έχουμε βασιστεί σε μια D-optimal αναζήτηση διαδικασίας για την απόκτηση οριακών σημείων για αυτούς τους σχεδιασμούς τριών επιπέδων. Ομοίως, η βελτίωση της αποτελεσματικότητας για τους σχεδιασμούς πολλών επιπέδων μπορεί

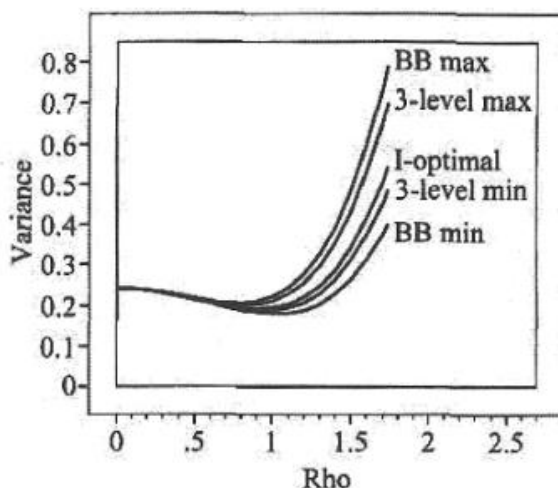
επίσης να υποτιμηθεί ελαφρώς, διότι περαιτέρω έρευνα μπορεί να επιτύχει καλύτερα αποτελέσματα από ό, τι αυτά που έχουν βρεθεί.

Κάποιος μπορεί επίσης να χρησιμοποιήσει ένα γράφημα διασποράς διακύμανσης για να εκτιμήσει τη συνέπεια του περιορισμού σε ένα σχεδιασμό τριών επιπέδων. Το Σχήμα 5.5 συγκρίνει τρεις σχεδιασμούς για $t = 6$ παράγοντες με $n_B = 48$ και $n_c = 4$, οι οποίοι είναι η κατανομή του I-optimal για $n = 52$. Ο σχεδιασμός Box-Behnken, με I-efficiency = 89,83% (βλέπε Πίνακα 5.1), είναι ο φτωχότερος από τους τρεις, με μια ευρύτερη περιοχή για τη διακύμανση σε κάθε ακτίνα. Ένας πιο αποτελεσματικός σχεδιασμός τριών επιπέδων ελήφθη από την αναζήτηση για ένα D-optimal σχεδιασμό με $n = 50$ και κατόπιν την προσθήκη δύο επιπλέον εκτελέσεων κεντρικού σημείου. Αυτός ο σχεδιασμός έχει I-efficiency = 94,75% και η μέγιστη διακύμανση της είναι 11% χαμηλότερη από την σχεδίαση Box-Behnken, κοντά στο όριο του σχεδιασμού. Ο πιο I-optimal σχεδιασμός έχει ένα εύρος διακύμανσης (μέγιστη διακύμανση-ελάχιστη διακύμανση) ο οποίος είναι κατά 45% μικρότερος από το εύρος για το σχεδιασμό Box-Behnken σε κάθε ακτίνα. Ωστόσο, εάν κάποιος δε θέσει περιορισμούς σχετικά με τον αριθμό των επιπέδων για κάθε παράγοντα, ένας I-optimal σχεδιασμός μπορεί να βρεθεί ότι είναι περιστρέψιμος. Ο σχεδιασμός τριών επιπέδων I-efficient έχει 29% υψηλότερη μέγιστη διακύμανση (και 6,2% υψηλότερη μέση διακύμανση) στο όριο ακτίνας του $\sqrt{3}$, από ότι ο περιστρέψιμος I-optimal σχεδιασμός. Νωρίτερα αναφέρθηκε ότι οι Box-Behnken σχεδιασμοί δεν βασίζονται στο ότι οι ισορροπημένοι ατελείς σχεδιασμοί κατα μπλοκ έχουν άνιση ακρίβεια στις αλληλεπιδράσεις. Γι' αυτόν τον Box-Behnken σχεδιασμό, $Var(b_{ij}) = \sigma^2 / 8$ για τις 12 αλληλεπιδράσεις και $\sigma^2 / 16$ για τις άλλες τρεις. Ο πιο αποτελεσματικός σχεδιασμός τριών επιπέδων έχει μικρότερη διαφορά, με $Var(b_{ij}) = \sigma^2 / 8$ για 9 αλληλεπιδράσεις και $\sigma^2 / 12$ για τις άλλες έξι. Ο I-optimal σχεδιασμός έχει $Var(b_{ij}) = \sigma^2 / 9$ για όλες τις 15 αλληλεπιδράσεις, ενώ ένας τέτοιος σχεδιασμός είναι θεωρητικά βέλτιστος. Λίγοι πειραματιστές θα χρησιμοποιήσουν έναν σχεδιασμό που απαιτεί δεκάδες επίπεδα για κάθε παράγοντα.

Από τις συγκρίσεις αυτές προκύπτει ότι οι κορεσμένοι σχεδιασμοί σχεδόν υποφέρουν περισσότερο από την αναποτελεσματικότητα επιβολής περιορισμού του παράγοντα τριών επιπέδων.

Σχήμα 5.5

Γράφημα διακύμανσης διασποράς για τρεις 6-παραγόντων σχεδιασμούς μεγέθους $n = 52$: Box-Behnken σχεδιασμός, I-Efficiency τριών επιπέδων σχεδιασμός, I-Optimal σχεδιασμός.



Μικροί σχεδιασμοί τριών επιπέδων με έξι ή επτά παράγοντες πηγαίνουν καλύτερα από εκείνους με $t \leq 5$. Ωστόσο, ακόμη και με μεγαλύτερα t και n , όπως στο σχήμα 5.5, η έλλειψη δυνατότητας περιστροφής για σχεδιασμούς τριών επιπέδων γενικά θα αυξήσουν την μέση διακύμανση ελαφρά και τη μέγιστη διακύμανση κυρίως.

5.7 Παραδείγματα για σχεδιασμούς τριών επιπέδων για πιο σύνθετες εφαρμογές

Ο βέλτιστος σχεδιασμός αλγορίθμων παρέχει ένα πρακτικό μέσο για την κατασκευή του σχεδιασμού σε ρυθμίσεις όχι συνηθισμένες. Ο περιορισμός παραγόντων σε τρία επίπεδα προσθέτει απλότητα στην εφαρμογή του σχεδιασμού, συχνά χωρίς να επηρεάζει σοβαρά την αποδοτικότητα. Σε αυτή την παράγραφο, παρουσιάζονται δύο εφαρμογές. Η πρώτη έχει ληφθεί από τον Vuchkov (1981) και περιλαμβάνει τρεις ποσοτικούς παράγοντες συν τρεις ανάμεικτους παράγοντες. Και το δεύτερο παράδειγμα περιλαμβάνει τόσο ποιοτικούς όσο και ποσοτικούς παράγοντες.

5.7.1 Παράδειγμα με διεργασία και μείγμα παραγόντων

Το πείραμα των Vuchkovetal. (1981) αφορά την επιλογή ενός σχεδιασμού δεύτερης τάξης με 30 εκτελέσεις για: τρεις μεικτούς παράγοντες και τρεις των οποίων τα επίπεδα θα μπορούσαν να οριστούν ανεξάρτητα. Ο περιορισμός $x_1+x_2+x_3 = 1$ παράγει τόσο πολλές ιδιαιτερότητες για το συνηθισμένο δεύτερης τάξης μοντέλο.

Πίνακας 5.7

D-Optimal τριών επιπέδων δεύτερης τάξης σχεδιασμός για 3 ανάμεικτους παράγοντες και 3 άλλους παράγοντες

Point	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
1	0.0	0.0	1.0	0.000	-0.707	-0.707
2	0.0	0.0	1.0	0.000	-0.707	0.707
3	0.0	0.0	1.0	-0.707	0.000	0.707
4	0.0	0.0	1.0	0.707	0.000	-0.707
5	0.0	0.0	1.0	-0.707	0.707	0.000
6	0.0	0.0	1.0	0.707	0.707	0.000
7	0.0	0.5	0.5	0.000	0.000	0.000
8	0.0	0.5	0.5	0.000	-0.707	0.707
9	0.0	0.5	0.5	0.707	0.000	0.707
10	0.0	0.5	0.5	-0.707	-0.707	0.000
11	0.0	1.0	0.0	0.000	-0.707	-0.707
12	0.0	1.0	0.0	0.000	-0.707	0.707
13	0.0	1.0	0.0	0.000	0.707	0.707
14	0.0	1.0	0.0	-0.707	0.000	-0.707
15	0.0	1.0	0.0	0.707	0.000	-0.707
16	0.0	1.0	0.0	-0.707	0.707	0.000
17	0.0	1.0	0.0	0.707	0.707	0.000
18	0.5	0.5	0.5	0.000	0.000	0.000
19	0.5	0.5	0.5	0.000	0.707	0.707
20	0.5	0.5	0.5	-0.707	0.000	-0.707
21	0.5	0.5	0.5	0.707	-0.707	0.000
22	0.5	0.5	0.0	0.000	0.707	-0.707
23	0.5	0.5	0.0	-0.707	0.000	0.707
24	0.5	0.5	0.0	0.707	-0.707	0.000
25	0.5	0.0	0.0	0.000	-0.707	-0.707
26	1.0	0.0	0.0	0.000	-0.707	0.707
27	1.0	0.0	0.0	0.707	0.000	-0.707
28	1.0	0.0	0.0	0.707	0.000	0.707
29	1.0	0.0	0.0	-0.707	0.707	0.000
30	1.0	0.0	0.0	0.707	0.707	0.000

Ένα μέσο για την αποφυγή αυτών των μοναδικοτήτων είναι να γράψουμε το μοντέλο σε πέντε μόνο παράγοντες, για παράδειγμα x_2, \dots, x_6 , εξαιτίας του επιπέδου του $x_1=1 - x_2 - x_3$. Αντ'αυτού, ο Vuchkovetal. (1981) απέφυγε αυτές τις ιδιομορφίες με εξαίρεση το σημείο τομής, με καθαρά τετραγωνικούς όρους για τους ανάμεικτους παράγοντες, και τους γραμμικούς όρους για τους άλλους παράγοντες. Η προκύπτουσα (Scheffe κανονική) μορφή για το δεύτερης τάξης μοντέλο είναι

$$E(y) = \sum_{i=1}^3 \beta_i x_i + \sum_{i=4}^6 \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^5 \sum_{j=i+1}^6 \beta_{ij} x_i x_j$$

Το υποψήφιο σύνολο περιλαμβάνει το γινόμενο του σχεδιασμού του lattice δεύτερης τάξης έξι σημείων για τους μεικτούς παράγοντες $\{(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1), (.5, .5, 0), (.5, 0, .5), (0, .5, 5)\}$ for the rubber factors και 3^3 παραγοντικό για τα άλλα συστατικά. Θα αναθεωρηθεί το υποψήφιο σετ με εξαίρεση την τρίτη τροχιά του 3^3 και θα ανακλιμακωθεί έτσι ώστε η δεύτερη τροχιά να ταιριάζει με την μοναδιαία σφαίρα. Αυτό το υποψήφιο σετ διαθέτει $6 \times 19 = 114$ συνδυασμούς αγωγών. Ο D-optimal με 30-εκτελέσεις, σχεδιασμός τριών επιπέδων με $x_4^2 x_5^2 x_6^2 \leq 1$ φαίνεται στον Πίνακα 5.7 και αποτελείται από:

- Μεικτό συνδυασμό παραγόντων: 19 καθαρά μίγματα και 11 μίγματα 50/50, τα οποία είναι παρόμοια με τα 20 καθαρά και 10 δυαδικά μίγματα για τον Vuchkovetal.
- Διαδικασία συνδυασμού παραγόντων: 28 πόντους από τη δεύτερη τροχιά και επαναλήψεις σε δύο κεντρικά σημεία. Όπως ήταν αναμενόμενο, δεν υπάρχουν σημεία από την πρώτη τροχιά.

Ας υποθέσουμε αντ' αυτού ότι ένας χρησιμοποιεί το ίδιο ($6 \times 27 = 162$ εκτελέσεις) υποψήφιο σύνολο όπως των Vuchkon et al (1981), με τη διεργασία παραγόντων να κλιμακώνονται για να έχουν επίπεδα $\pm\sqrt{1/3}$ και 0.Ο καλύτερος σχεδιασμός ProcOptex βρίσκει να έχει D-efficiency:

- 3% υψηλότερο από ό, τι διαδοχικά καθορίζει ο σχεδιασμός. Όπως ήταν αναμενόμενο, είναι ελαφρώς καλύτερα να επιλέξουμε ένα optimal σχεδιασμό με 30 εκτελέσεις από του να χρησιμοποιηθεί τον ακολουθιακό σχεδιασμό μεγέθους 30 των Vuchkovetal. (1981).
- 21% χαμηλότερη από την D-optimal τριών επιπέδων, σχεδιασμός στον Πίνακα 5.7.

Έτσι, μια σφαιρική περιοχή, με εξαίρεση την τρίτη τροχιά παράγει έναν πιο αποτελεσματικό σχεδιασμό. Το D-optimal τριών επιπέδων είναι περισσότερο από 99% αποτελεσματικό σε σύγκριση με το D-optimal σχεδιασμό που βρέθηκε χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα JMP περιορισμένο από $x_4^2 x_5^2 x_6^2 \leq 1$, αλλά δεν περιορίζεται σε τρία επίπεδα.

5.7.2 Παράδειγμα της διαδικασίας και με ποιοτικούς παράγοντες

Αρκετές εργασίες έχουν γραφτεί για την κατασκευή σχεδιασμών αποκριτικής επιφάνειας όταν πρέπει να περιλαμβάνονται κάποιοι ποιοτικοί παράγοντες. Ο βέλτιστος σχεδιασμός είναι ιδιαίτερα χρήσιμος εδώ επειδή τα μοντέλα για να εκτιμηθούν εξαρτώνται όχι μόνο από τον αριθμό των ποσοτικών και ποιοτικών παραγόντων, αλλά και από τους τύπους αλληλεπίδρασης των όρων που περιλαμβάνονται. Το μοντέλο δεύτερης τάξης είναι:

$$E(y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^5 \beta_i x_i + \sum_{i=1}^4 \sum_{j=i+1}^5 \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^4 \beta_{ii} x_i^2$$

με 20 όρους, και το σύνολο των υποψηφίων τους σετ έχει 50 σημεία το περιστρέψιμο CCD σε κάθε επίπεδο του x_5 . Υπάρχουν μερικοί 24-εκτελέσεων σχεδιασμοί με ισοδύναμες D-efficiencies. Κάθε παράλειψη αφορά ένα σημείο, από το CCD, με 8 σημεία στο ένα επίπεδο για x_5 και για 16 σημεία στα άλλα επίπεδα.

Για ένα βέλτιστο σχεδιασμό τριών επιπέδων, αποκλείουμε την τρίτη και την τέταρτη τροχιά και να αποκτούμε ένα σχεδιασμό με την ίδια αποτελεσματικότητα όπως το κλάσμα του CCD που βρέθηκε από τους Myers και Montgomery. Αυτό συμβαίνει επειδή ο 25 εκτελέσεων CCD και ο Box-Behnken σχεδιασμός είναι ισοδύναμοι για $t = 4$ με $n = 24$, και ένα σημείο μπορεί να διαγραφεί. Όπως και με τον CCD, αυτός ο D-optimal σχεδιασμός διαχωρίζει τα σημεία, οκτώ προς ένα επίπεδο και 16 προς το άλλο.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Albert, I. and Gauchi, J. P. (2002). "Sensitivity Analysis for High Quantiles of Ochratoxin A Exposure Distribution". *International Journal of Food Microbiology* 75, pp. 143-155.
- Atkinson, A. C. (1996). "The Usefulness of Optimum Experimental Designs". *Journal of the Royal Statistical Society, Series B* 58, pp. 59-76.
- Atkinson, A. C. and Donev, A. N. (1992). *Optimum Experimental Designs*. Clarendon Press, Oxford, UK.
- Borkowski, J.J., 1995a. Minimum, maximum, and average spherical prediction variances for central composite and Box–Behnken designs. *Commun. in Statist. Theory Methods* 24, 2581–2600.
- Borkowski, J.J., 1995b. Spherical prediction variance properties of central composite and Box–Behnken designs. *Technometrics* 37, 399–410.
- Borkowski, J.J., 2003. A comparison of prediction variance criteria for response surface designs. *J. Quality Technol.* 35, 70–77.
- Borkowski, J.J., 2006. Book chapter: graphical methods for assessing the prediction capability of response surface designs. In: Khuri, A. (Ed.), *Response Surface Methodology and Related Topics*. World Scientific, Singapore, pp. 349–378 (Chapter 14).
- Box, G.E.P., Behnken, D.W., 1958. Some new three level designs for the study of quantitative variables. *Technometrics* 2, 455–475.
- Box, G.E.P., Behnken, D.W., 1958. Some new three level second-order designs for surface fitting. *Statistical Technical Research Group Technical Report No. 26*. Princeton University, Princeton, NJ.
- Box, G.E.P., Behnken, D.W., 1960. Some new three level designs for the study of quantitative variables. *Technometrics* 2, 455–475.
- Box, G.E.P., Draper, N.R., 1975. Robust designs. *Biometrika* 62, 347–352.
- Box, G.E.P., Draper, N.R., 1987. *Empirical Model-Building and Response Surfaces*. Wiley, New York.
- Box, G.E.P., Hunter, J.S., 1957. Multifactor experimental designs for exploring response surfaces. *Ann. Math. Statist.* 28, 195–241.
- Box, G.E.P., Wilson, K.B., 1951. On the experimental attainment of optimum conditions. *J. R. Stat. Soc. Ser. 13*, 1–45.
- Crosier, R.B., 1991. Some new three-level response surface designs. *Technical report*
- Draper, N.R., 1985. Small composite designs. *Technometrics* 27, 173–180.
- Draper, N.R., Pukelsheim, F., 1990. Another look at rotatability. *Technometrics* 32, 195–202.
- Draper, N.R., Lin, D.K.J., 1990. Small response surface designs. *Technometrics* 32, 187–194.
- Draper, N.R., Lin, D.K.J., 1996. Response Surface Designs. In: *Handbook of Statist.*, vol. 13. pp. 343–375.
- Giovannitti-Jensen, A., Myers, R.H., 1989. Graphical assessment of the prediction capability of response surface designs. *Technometrics* 31,
- Jensen, D.R., 1994. Efficiencies of some small second-order designs. *Statist. Probab. Lett.* 21, 255–261.
- Goos, P. (2002). *The Optimal Design of Blocked and Split-Plot Experiments*. Springer, New York, NY.

- Goos, P. and Vandebroek, M. (2001). "Optimal Split Plot Designs". *Journal of Quality Technology* 33, pp. 436-450.
- Goos, P. and Vandebroek, M. (2003). "D-Optimal Split Plot Designs with Given Numbers of Sizes and Whole Plots". *Technometrics* 45, pp. 235-245.
- Goos, P. and Vandebroek, M. (2004). "Outperforming Completely Randomized Designs". *Journal of Quality Technology* 36, pp. 12-26.
- John, J.A., Mitchell, T.J., 1977. Optimal incomplete block designs. *J. Roy. Statist. Soc. Ser. B* 39, 39–43.
- John, J.A., Williams, E.R., 1995. *Cyclic Designs and Computer-Generated Designs*. Chapman & Hall, London.
- Khuri, A.I., Cornell, J.A., 1996. *Response Surfaces*, second ed. Dekker, Inc., New York.
- Kiefer, J., 1960. Optimum experimental designs V, with applications to systematic and rotatable designs. In: *Proc. 4th Berkeley Symp.* 1. pp. 381–405.
- Κουκουβίνος, Χρ. Γραμμικά Μοντέλα και Σχεδιασμοί, 2005, Αθήνα.
- Κουκουβίνος, Χρ. Στατιστικός Έλεγχος Ποιότητας, 2005, Αθήνα.
- Κουκουβίνος, Χρ. Στατιστικοί Σχεδιασμοί, 2005, Αθήνα.
- Kowalski, S.; Cornell, J. A.; and Vining, G. G. (2000). "A New Model and Class of Designs for Mixture Experiments with Process Variables". *Communications in Statistics-*
- Lucas, J.M., 1976. Which response surface design is best. *Technometrics* 18, 411–417.
- Mee, R.W., 2000. *New Box–Behnken designs*. University of Tennessee, Department of Statistics Technical Report 2000-4.
- Mee, R.W., 2007 *Optimal Three-Level Designs For Response Surfaces In Spherical Experimental Regions.*
- Morris, M.D., 2000. A class of three-level experimental designs for response surface modeling. *Technometrics* 42, 111–121.
- Myers, R.H., Montgomery, D.C., Anderson-Cook, C.M., 2009. *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments*. Wiley, New York.
- Nguyen, N.-K., 1994. Construction of optimal incomplete block designs by computer. *Technometrics* 36, 300–307.
- Nguyen, N.-K., 1996. An algorithmic approach to constructing supersaturated designs. *Technometrics* 38, 69–73.
- Nguyen, N.K., Borkowski, J.J., 2008. New 3-level response surface designs constructed from incomplete block designs. *J. Statist. Plann. Inference* 138 159–171.
- Nguyen, N.-K., 2001. Cutting experimental designs into blocks. *Austral. & New Zealand J. Statist.* 43, 367–374.
- Tian-Fang Zhang, Jian-Feng Yang, Dennis J. K. Lin. *Small Box-Behnken Designs.*, 2011
- Vining, G.G., Myers, R.H., 1991. A graphical approach for evaluating response surface designs in terms of the mean squared error of prediction. *Technometrics* 33, 315–326.