

T.C.

**DİCLE ÜNİVERSİTESİ  
EN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

123522

## **KARMA DENEMELERDE MODEL SEÇİMİ**

Nurkut Nuray URGAN

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

(MATEMATİK ANABİLİM DALI)

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU  
DOKÜMANTASYON MERKEZİ

123522

**DİYARBAKIR  
AĞUSTOS-2002**

# İÇİNDEKİLER

|               |     |
|---------------|-----|
| ÖZGEÇMİŞ..... | iii |
| AMAÇ.....     | iv  |
| ÖZET.....     | v   |
| ABSTRACT..... | vi  |
| TEŞEKKÜR..... | vii |

## 1.BÖLÜM: GENEL BİLGİLER

|                            |   |
|----------------------------|---|
| 1.1.Karma Denemeler.....   | 1 |
| 1.2.Yanıt Yüzey.....       | 2 |
| 1.3.Önceki Çalışmalar..... | 5 |

## 2.BÖLÜM: KARMA DENEMELER İÇİN TASARIMLAR

|   |    |
|---|----|
| 2.1.Karma Denemeler için Deneysel Bölge Tasarımlar..... | 15 |
| 2.2.Simpleks Latis Tasarımı.....                        | 27 |
| 2.3.Simpleks Sentroit Tasarımı.....                     | 33 |
| 2.4.Uçdeğer Tasarımı.....                               | 36 |
| 2.5.Çiftli Latis Tasarımı.....                          | 38 |
| 2.6.Grafiksel Tasarım.....                              | 46 |

## 3.BÖLÜM: KARMA DENEMELER İÇİN MODELLER

|   |    |
|---|----|
| 3.1.Scheffé Karma Modeli.....                       | 51 |
| 3.2.Cox Karma Modeli.....                           | 59 |
| 3.3.Lineer, Kuadratik ve Kübik Karma Modelleri..... | 62 |
| 3.4.Becker Karma Modeli.....                        | 68 |

## 4.BÖLÜM: KARMA DENEMELERDE MODEL SEÇİMİ

|  |    |
|--|----|
| 4.1.Bir Deney İçin Model Seçimi.....   | 73 |
| 4.1.1.Kumaşın Boya Tutma Işık Haslığı Aynı<br>olan Boyaların Tutarlılık Testi..... | 81 |

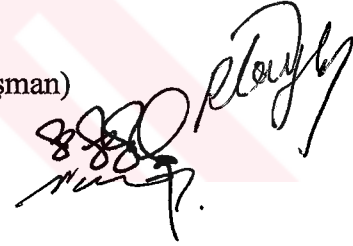
|                |    |
|----------------|----|
| KAYNAKLAR..... | 83 |
|----------------|----|

**T.C.**  
**DİCLE ÜNİVERSİTESİ**  
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğü  
**DİYARBAKIR**

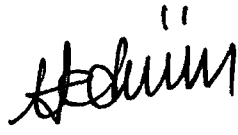
Bu çalışma jürimiz tarafından **MATEMATİK** Anabilim Dalı'nda  
**YÜKSEK LİSANS** tezi olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyesinin Ünvanı, Adı ve Soyadı

Başkan : Yrd. Doç.Dr. Pakize TAYLAN (Danışman)  
Üye : Prof. Dr. H.İlhan TUTALAR  
Üye : Doç. Dr. Sezai OĞRAŞ  
Yedek Üye : Yrd. Doç.Dr. Abdulkadir ERTAŞ



Yukarıdaki bilgilerin doğruluğunu onaylarım. 19./08/2002

11  
  
Doc. Dr. Necmettin PİRİNÇÇİOĞLU



## ÖZGEÇMİŞ

1977 yılında Tarsus'ta doğdum. İlk öğrenimimi Şehit İshak İlkokulu'nda, orta ve lise öğrenimimi Abdulkerim Bengi Tarsus Anadolu Lisesi'nde tamamladım. 1995 yılında Dicle Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Matematik Bölümünü kazandım ve 1999 yılında mezun oldum, aynı yıl D.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü'nde yüksek lisansı kazandım. 1999-2000 öğretim yılında Van'ın Edremit ilçesindeki Edremit İlköğretim Okulu ve Edremit Sarmansuyu İlköğretim Okulunda görev yaptım. 2000 yılında D.Ü. Fen Edebiyat Fakültesi Matematik Bölümünde araştırma görevlisi olarak göreve başladım. Halen aynı kurumda Araştırma Görevlisi olarak görev yapmaktayım.

NURKUT NURAY (SAZLI) URGAN

## AMAÇ

Günlük yařantıda çoęu kez, yapılan maddeleri çeřitli oranlarda karıřtırarak istenilen nitelikte ürün oluřturma “*Karma Deneme*” olarak adlandırılır.

Karma denemelerde amaç maddeleri çeřitli oranlarda karıřtırarak istenilen niteliklerde ve optimum ürünler oluřturma dır. Bir üretim formülü üzerinde çalışıldığında standart faktöriyel deneme tek başına yeterli deęildir. En iyi yada optimum üretim formülü için karma tasarımlara ihtiyaç vardır.

Bu nedenle bu çalışmanın amacı, kimya, endüstri ve zirai alanlarda sıkça kullanılan karma denemelerle ilgili tasarımları ve modelleri incelemek, ayrıca bir deney için model seçimi ve çözümünü sunmaktır.



## ÖZET

Karma denemeler, bir karışımı oluşturan maddelerin oranlarına bağlı olup denemedeki karışımın toplam miktarı sabit tutularak, bu maddelerin oranları toplamı 1 olma koşulu altında, maliyeti en az ama kalitesi en çok olan karmanın elde edildiği denemelerdir.

“Karma Denemelerde Model Seçimi” adlı bu çalışma üç bölümden oluşmaktadır.

Birinci bölümde, karma denemeler, karma denemelerin amacı ve karma denemelerin yanıt yüzeyi hakkında bilgi verilmektedir. Bunun yanı sıra karma denemeler ile ilgili günümüze kadar yapılmış olan çalışmalar ve içerikleri sunulmaktadır.

İkinci bölümde, karma denemelerde karışımı oluşturan maddelerin oranları toplamının 1 olma koşulunun sağlandığı veya sağlanmadığı durumlarda kullanılan tasarımlar hakkında bilgi verilmektedir.

Üçüncü bölümde, karma denemeler için modeller tanıtılmaktadır.

Son bölümde de, kimyasal bir deney için bu modellerden biri seçilip, uygun karışım bulunmuştur. Ayrıca aynı deneydeki karışım maddelerinin bir başka özelliği kullanılarak uç değer tasarımı ile tutarsızlığı gösterilmiştir.

## ABSTRACT

Experiments with mixtures, of which the property depends on the proportions of the components of mixture such that the sum of the components equal to one under the condition to fix the total amount of the mixture, is a mixture that has at the least cost price and at the most quality.

This study entitled as “Model Choice at Experiments with Mixtures” consists of three chapters.

In the first chapter, experiments with mixtures, the aim and the response surface of mixtures were given. In addition, the related papers published in the literature were given briefly.

In the second chapter, the designs which are used for the cases either the sum of the proportions of the components present in the blend equals to one or not.

In the third chapter, the models for experiments with mixtures were introduced.

Finally, a model chosen for a chemical experiment and a fitting blend is found for it in the last chapter. Also the extreme vertices designs applied by using another property taken from the same experiment were given.

## TEŞEKKÜR

Yüksek Lisans çalışmamda bana yardımcı olan, ilgisini ve desteğini esirgemeyen saygıdeğer danışman hocam

*Yrd. Doç. Dr. Pakize TAYLAN' a,*

teşekkür ve şükranlarımı sunarım.

Burada olmamasına rağmen her zaman yanımda hissettiğim, engin bilgileri ve görüşleriyle yol gösteren, çalışmalarımnda etkin katkısı bulunan, her yönüyle kendime örnek seçtiğim çok değerli hocam

*Prof. Dr. Müjgan TEZ' e*

saygılarımı sunarım.

Yüksek Lisans öğrenimim sırasında değerli bilgilerinden faydalandığım saygıdeğer hocam

*Doç. Dr. Sezai OĞRAŞ' a,*

ve tez yazımı sırasında göstermiş olduğu yardımlarından dolayı çalışma arkadaşım

*Arş. Gör. Bilal Çekiç' e*

teşekkürlerimi sunarım.

Bana her konuda emek, güven ve destek veren, sevgileri ile beni güçlendiren aileme özellikle anneme, bana katlanabilen ve benim en büyük yardımcım olan eşim Onur'a teşekkürlerimi sunarım.



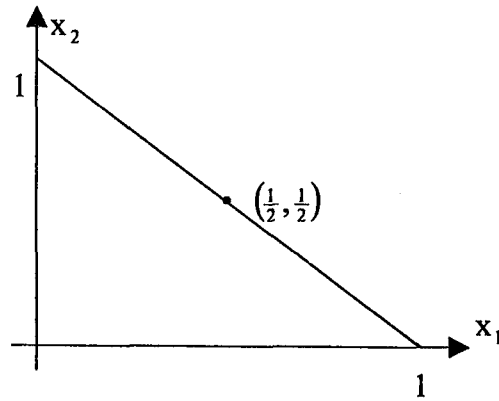
# 1.BÖLÜM

## GENEL BİLGİLER

*Bu bölümde karma denemeler ve özelliği, yanıt yüzeyi ve karma denemelerle ilgili daha önceki yapılan çalışmalardan bahsedilecektir.*

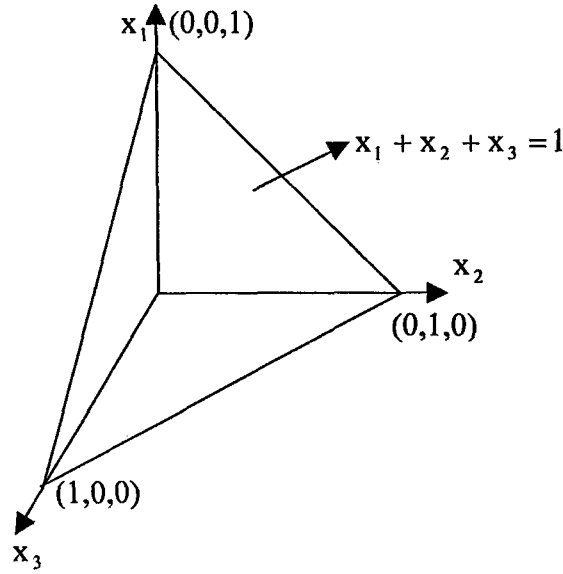
### 1.1.Karma Denemeler

Karma deneme, bir karışımın miktarına değil de, o karışımı oluşturan bileşenlerin oranlarına bağlı olan denemelerdir. Örneğin, bir kekin yumuşaklığı veya iyi kabarması gibi özellikler kek karışımını oluşturan yağ, un, şeker, süt, kabartma tozu... gibi maddelerin oranlarına; demiryolu ışıklandırmasının gücü ışıklandırmayı oluşturan sodyum nitrat, stronyum nitrat ve binder maddelerinin oranlarına; ananas, portakal ve greyfurt suyu ile yapılacak olan bir meyve suyunun tadı bu maddelerin oranlarına bağlıdır. Karma denemede amaç, bileşenlerin farklı oranlardaki karışımları, fiziksel, kimyasal ve ekonomik şartları göz önüne alınarak, ürünün kalitesini azaltmayan ve maliyeti artırıcı etkisi olmayan en iyi karmayı elde edebilmektir. Bu da bileşenler üzerinde bazı kısıtlamalara neden olur. Kısıtlama genellikle  $q$  karma denemedeki bileşen sayısı ve  $x_i$  i-inci bileşenin oranı olmak üzere, denemede karışımın toplam miktarı sabit tutulur ve bileşenlerin oranları toplamı  $\sum_{i=1}^q x_i = 1$  olacak şekilde değiştirilir. Örnek olarak iki maddenin karışımı ele alınırsa,  $x_1$  birinci madde,  $x_2$  ikinci maddenin oranı olmak üzere karışımları,  $x_1 + x_2 = 1$  ( $0 \leq x_1, x_2 \leq 1$ ) olmalı. Bu karışım, Şekil 1.1 deki gibi bir doğruyu belirtir. Bu iki maddenin tüm olası karışımları bu doğru üzerindedir.



Şekil 1.1:  $x_1 + x_2 = 1$  bir boyutlu karma deneme uzayı, iki boyutlu uzay içine gömülmüştür.

Eğer karma, üç maddenin birleşimiyle oluşursa, bu karışım Şekil 1.2 deki gibi bir eşkenar üçgen belirtir.



Şekil 1.2:  $x_1 + x_2 + x_3 = 1$  iki boyutlu karma deneme uzay, üç boyutlu uzay içine gömülmüştür.

## 1.2. Yanıt Yüzeyi

$q$  bileşenli bir karma deneme, beklenen yanıt  $x_1, x_2, \dots, x_q$  bileşen oranlarına bağlı olup, karışımın toplam miktarına bağlı değildir.

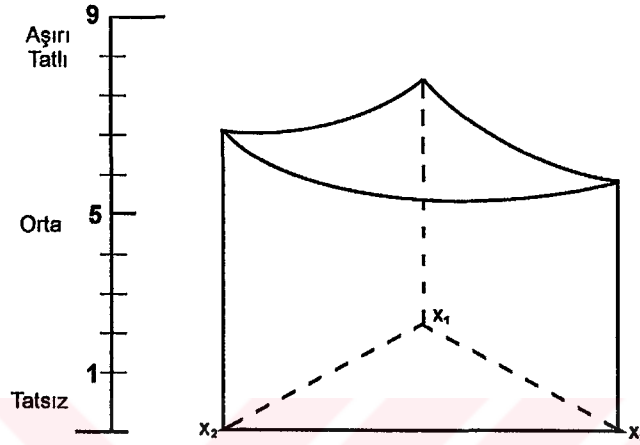
$n$  bileşenli karmadaki  $i$ . bileşenin oranı  $x_i$

$$\sum_{i=1}^q x_i = 1, \quad x_i \geq 0 \quad (1.1)$$

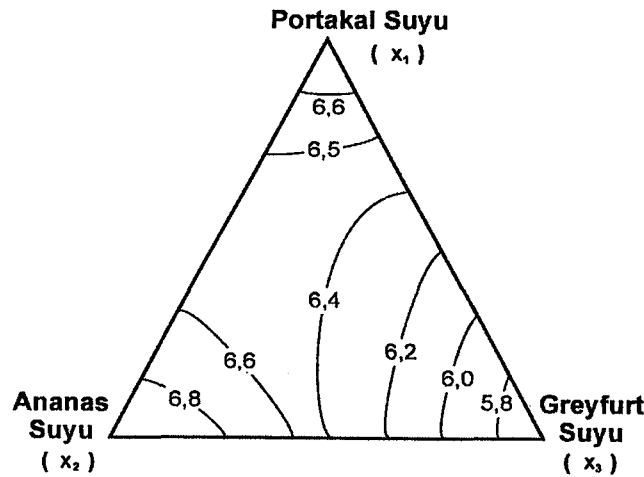
denklemini sağlar ve faktör uzayı bir simplekstir.  $(x_1, x_2, \dots, x_q) = x$  için beklenen yanıt  $\eta(x)$  ile gösterilir. (1.1) ile gösterilen denklem düzgün  $(n-1)$ \_boyutlu  $S$  simpleksi için deneysel bölge sınırlamasıdır. Buna göre,  $n=2$  için  $S$  bir düzgün doğru;  $n=3$  için  $S$  bir düzgün üçgen;  $n=4$  için  $S$  bir düzgün tetrahedron olur.  $S$ ,  $n$ -bileşenli karma denemelerin muhtemel bölgesi olarak adlandırılır.

Örneğin, portakal suyu( $x_1$ ), ananas suyu( $x_2$ ) ve greyfurt suyu( $x_3$ ) karışımıyla meyve suyu yapmak için, 1=tatsız, 5=orta ve 9=aşırı tatlı olsun. Bu olayda meyve

sularının herhangi bir karması için ölçülen tat oranı , ki artık buna yanıt denir, koordinatları üçgenin içinde ve sınırları üzerinde bulunan karmanın yukarısındaki bir dikey yükseklik ile gösterilebiliyorsa birli, ikili, üçlü meyve suyu karışımlarının tat değerlerinin bölgesi üçgen üzerindeki bir yüzey olarak göz önüne alınır. Bütün meyve sularının karışımı için sürekli olduğu düşünülen bu yüzey Şekil 1.3 ile gösterilir.



Tahmini tat yüzeyinin kontur haritası da Şekil 1.4 deki gibidir. Burada her kontur eğrisi yüzeyi özel bir yükselti boyunca kesen, üçgene paralel olan bir düzlemle oluşturulan tat yüzeyinin bir dik kesitinin üç bileşenli üçgen üzerine iz düşümüdür.



Şekil 1.4: Meyve suyu yüzeyinin sabit meyveli tat konturları.

Deneme polinom şeklinde yazılırsa (1.1) deki kısıtlama fazlalık gösterir, bu yüzden 1. dereceden polinom:

$$(\beta_0 - \lambda) + \sum_{i=1}^q (\beta_i + \lambda)x_i \quad (1.2)$$

denklemini tüm  $\lambda$  ' lar için S' de özdeşdir. Önerilen birinci ve ikinci dereceden polinom kanonik formda

$$\eta_1(x) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i \quad (1.3)$$

$$\eta_2(x) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^q \beta_{ij} x_i x_j \quad (1.4)$$

şeklindedir. Burada  $\beta_i$  ' ler tek bileşenli karmaların beklenen yanıtı,  $\beta_{ij}$  ' ler  $x_i = x_j = \frac{1}{2}$  ( $i \neq j$ ) ikili bileşenlerin beklenen yanıtıdır. Yüksek dereceli polinom eşitliklerini kullanmaktansa daha az terim içeren ve  $(\beta)$  parametrelerini tahmin etmede az sayıda gözlenen yanıt değerleri gereken düşük dereceli polinom eşitlikleri kullanmak daha uygundur.

N denemeden oluşan bir deneysel program esnasında  $\eta$  yanıtı gözlenirken, u. deneme için gözlenen değer  $y_u$  ( $u=1,2,\dots,N$ ), bir  $\sigma^2$  varyanslı  $\eta_u$  ' nun ortalaması civarında değişir. Gözlenen değer

$$y_u = \eta_u + \varepsilon_u, \quad 1 \leq u \leq N \quad (1.5)$$

dir. Burada  $\varepsilon_u$  deneysel hatadır. Deneysel hata ( $\varepsilon_u$ ), 0 ortalamalı ve  $\sigma^2$  varyanslı aynı dağılıma sahiptir. Hata için,

$$E(\varepsilon_u) = 0$$

$$E(\epsilon_u^2) = \sigma^2, \quad E(\epsilon_u \epsilon_{u'}) = 0 \quad u \neq u', \quad u, u' = 1, 2, \dots, N$$

dir. Bu nedenle gözlenen  $y_u$  için beklenen değer

$$E(y_u) = \eta_u, \quad \forall u = 1, 2, \dots, N$$

olur.

### 1.3. Önceki Çalışmalar

Scheffé (1958) ile başlayan makalelerin çoğu değişik detayları kapsar. Bunlar, orijinal karma problemler için tasarımlar ve modeller; simpleks bölgenin kısıtlı bölgeleri için tasarımlar; karma problemlerin genelleştirilmesi (burada büyük küçük bileşenlerin iki veya daha fazla farklı kategorilerden geldiği kabul edildi) gibi değişik modeller içeren çalışmalardır.

Daha özel olarak, Scheffé (1958) de simpleks-sentroit tasarımları ve simpleks-latis tasarımları içeren çalışmalar yaptı. Mclean ve Anderson (1966) kısıtlı bölgeler için uç düşey tasarımları inceledi.

Kurotori (1966) eksenler boyunca yanıtın platlanmasını ve tasarımın uygulamasını incelemek için pseudo-bileşenli roket hareket ettirme verilerini kullandı. Ayrıca çalışmasında 10 bileşenli benzin karması denemesi ve analizlerine yer verdi. Alt veya üst sınırların bileşenlerinin tümünün veya bazılarının üzerine yerleşmesi durumunda, uygun bölge, simpleksin sadece alt bölgesi olduğunda, araştırmacılar, alt bölgenin tepe noktalarının en iyi şekilde yerleştirildiği Snee ve Marquardt (1974) ın XVERT algoritmasını kullanırlar.

Murty ve Das (1968) simetrik-simpleks tasarımları; Thompson ve Myers (1968) karma denemeler için yanıt yüzeyi tasarımlarını ele aldı. Lambrakis (1969) karma denemeler üzerine yaptığı çalışmada çoklu latisleri, Cornell ve Good (1970) karma denemeler için dönüştürülebilir tasarımları inceledi. Nigam (1970) karmalar için sadece iki bloklü tasarımları göz önüne aldı.

Becker (1970) ayrıca bölge momentlerini tasarım momentlerine eşitlemenin yeterli koşullarını, Şekil 1.5b, genel bir  $q$  için mümkün olan kvadratik yüzey birinci dereceden modele uydurulduğunda, tasarım elde etmek için bazı diklik koşulları ile birlikte kullandı. Burada, ilgili bölge tam bir simplekstir ve optimal tasarımın seçimi için kriter  $V'$  yi minimize etmektedir,  $V$  simpleks üzerinde ortalama yanıtın tahmin

hatasının karesinin beklenen değerine katkıda bulunan varyanstır. Bu çalışmada beklendiği gibi, tasarımların çoğu (bunların çoğu aynı n merkezini kullanarak oluşturulur, burada n=3 veya 4'tür) simpleks için iç noktalara sahiptir ve sadece tam karmaların kullanımı önerilmektedir.

Cox (1971), olası Scheffé modellerini kullanmaktan başka daha uygun özel yorumlar ile parametreleri tanımlamaya çalışmakta, birinci ve ikinci dereceden polinomların sırasıyla,

$$E(y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i \quad (1.3.1)$$

$$E(y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \beta_{ij} x_i x_j, \quad (\beta_{ij} = \beta_{ji}) \quad (1.3.2)$$

biçiminde olmasını önermektedir. Burada (1.3.1) birinci dereceden polinomda parametreler üzerine kısıtlama yapıldı ve (1.3.2) de ise q+1 kısıtlama yapılmaktadır.

Paku, Manson ve Nelson (1971), q=4 ve q=3 bileşenli karmalar için, matematiksel olarak (q-1) bağımsız değişkeni kapsayan polinomsal yanıt yüzeyi için tasarımları göz önüne aldılar ve genel minimum yanlı tahmin problemini yeniden gözden geçirdiler.

Saxena ve Nigam (1973), simpleksin herhangi bir bölgesinde karma noktalarının seçimi ve herhangi sayıdaki blokların kullanımı için deneyciye seçenek tanıyan yöntemlerde blok tasarımlar sundular. Veri analizi, Murty ve Das (1968) tarafından kullanılan ve tasarım noktaları üzerinde kesin simetri koşulları gerektiren yöntemle yapıldı. Saxena ve Nigam, bileşen sayısının büyük olmasından dolayı blokların kullanılması gerekebileceğini ifade etti ve bu durum bir koruyucu silindir makinenin yapımında ortaya çıktı. Makinenin maddeleri; çürümeyi engelleyici bir bileşik madeni yağlama yağı, petrol mumu, petrol özü, dağıtıcı bir madde ve yapışkan bir madde kullanılmakta idi.

Farklı bileşenlerin oynadığı rollerin incelenmesi karma sistemin daha iyi anlaşılmasını sağlar. Snee (1973) pratikte faydalı olacak karma veriler için çeşitli tekniklere yer vermektedir. Buna göre, bir deneyci, öncelikle model denklemlerindeki terimlerin sayısını azaltarak analizi basitleştirmeye çalışmalıdır. Bu sadece baskın bileşenlerin (bu bileşenler önemsiz bileşenlerin elenmesi ile bulunur) çalışılması ile bu bileşenlerin birleştirilmesi ve büyüklükte eşit olan parametre kestirimlerinden

birinin seçilmesi ile yapılır. Bu son olaya bir örnek Snee tarafından sunulmuştur. Bu örnek 4 bileşenli birinci dereceden Scheffé modelini kullanarak 9 oktan yanıt değerlerini içerir. Bu model,

$$E(y) = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_4 \dots \quad (1.3.3)$$

şeklinde gösterilir.  $\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \hat{\beta}_3$  parametre kestirimleri yaklaşık olarak,

$$\hat{y} = \hat{\beta}_1 (x_1 + x_2 + x_3) + \hat{\beta}_4 x_4 \quad (1.3.4)$$

şeklinde basitleştirilmiş yanıt kestirimlerinden bulunabilir. (1.3.4) ifadesi (1.3.3) ifadesinden daha basittir. Sadece iki terimlidir, bu terimler  $(x_1 + x_2 + x_3)$  ve  $x_4$ 'tür. Bu örnekte Snee, bileşenler arasındaki ilişkiyi bulmak veya baskın bileşeni araştırmak için bireysel bileşenler yerine yanıt değerlerinin platlanmasını önermektedir.

(1.3.3)'deki Scheffé modelleri, sıklıkla, terimler arasında yüksek korelasyona sahip olabilmektedir. Korelasyonları indirgemek için  $\beta_0$  terimini kapsayan genel polinomda bileşenlerin oranları kullanılır. Oran modeli bir eğik yüzey tanımlar. Bununla beraber Becker (1968)'in homojen modellerinde olduğu kadar Scheffé'nin modellerinde de yüzeyin şekli farklıdır. Snee ve Marquardt (1974) doğrusal karma modelleri ele aldılar ve bu modeller için uç değer (extreme vertices) tasarımları incelediler.

Marquardt ve Snee (1974) karma modeller için test istatistiğini incelediler. Scheffé ve Becker tarafından önerilen modeller  $\beta_0$  terimini kapsamaz ve bu modellere sıklıkla sıradan uygunluğu elde etmek için "sabitsiz veya  $\beta_0 = 0$ " istatistikleri uygulanır. Bu durumda, Marquardt ve Snee (1974), sadece karelerin toplamının regresyonu için hesaplama formülleri ile değil ayrıca dolaylı olarak, karelerin toplamının regresyonu ve toplam kareler toplamı için belirlenen serbestlik derecesi ile de bir çelişki ortaya çıkacağını belirttiler. Polihedron üzerinde Scheffé 1.dereceden modelin uydurulması amacına yönelik olarak Mclean ve Anderson (1966) tarafından önerilen uç tepe değer algoritmasına bir alternatif olarak Snee ve Marquardt (1974) uç tepe değerlerin bir alt kümesini seçen bir algoritma önerdiler. Birinci dereceden modelin önemine yönelik bir örnek, optimum karma koşullarını

belirlemek amaçlı bir doğrusal programda yer alan karma benzin problemidir. Algoritma, XVERT olarak ifade edilir ve iki durum incelenir: XVERT tarafından seçilen tasarımların, diğer algoritmalar tarafından seçilen tasarımlardan daha küçük,  $\text{tr}(X'X)^{-1}$ , ize sahip olması ve XVERT tasarımları temel bir nokta üzerinde en az diğer tasarımlar kadar mevcut deneysel bölgenin büyük bir oranını kapsamasıdır. Burada ayrıntılı olarak üç tasarım kriteri tartışılmaktadır:

- i) minimum  $|(X'X)^{-1}|$
- ii) minimum  $\text{tr}(X'X)^{-1}$
- iii)  $\hat{y}(x)$ ' in maximum-minimum varyansı

Bileşenlerin biri veya daha fazlası için  $b_i - a_i$  küçük olduğunda yüksek derecede kısıtlı bölgede bir veya daha fazla orandaki küçük değişimlerin yanıt yüzeyinde bir eğrisel değişim yaratacağı doğru olabilir. Uç tepe noktaların bir alt kümesinden oluşan bir tasarıma 1.dereceden bir modelin uydurulmasında bu önerilmez.

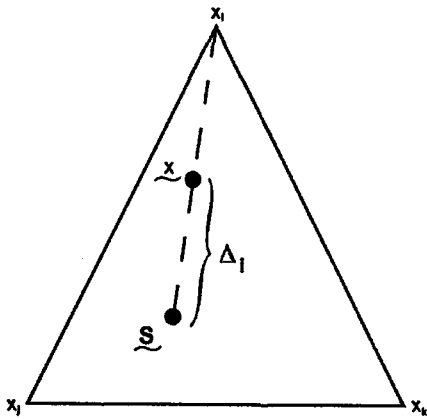
Bu durumda, modeli doğrulayabilen bir tasarıma uydurulan modelin eğriliğini hesaplamak için uygun yüksek dereceden bir model göz önüne alınmalıdır. Snee (1975) kısıtlı bölgelerde kuadratik bir modeli destekleyecek bir tasarım buldu. Snee, kısıtlı bölgelerde tasarımların oluşturulması için Wheeler (1972) tarafından yapılan bazı öneriler kadar Marquardt' ın bulduğu sonuçları göz önüne alarak, bileşenlerin bir dizisinin boyları kadar bileşenlerin sayısına bağlı tasarımlar için birkaç öneri yaptı. Kısaca,  $q=3$  ve  $q=4$  durumunda, kuadratik bir modelin uydurulması için yeterli tasarım noktaları, uç tepe değerlerin bir alt kümesi, bazı kısıtlı düzlemlerin merkezi veya kenarların merkezi ve bütün merkezlerden oluşur ( $q \geq 5$ ). Bu amaçlar için Wynn (1970) algoritması göz önüne alınabilir, ancak kısıtlı düzlem merkezleri, uç tepe değerlerden tasarım seçme ve bu gibi amaçlar için Wynn (1972) algoritması kullanılır.

Snee (1975) bileşen eksenlerinin sonuçlanan alt bölgenin merkezini kesmediği ve karma uzayın kısıtlandığı durumlarda gradientlerin hesaplanmasında bileşen eksenlerinin uygun olup olmadığı koşullarda gradient ölçülerinin yararlarını inceledi. Kısıtlı bölgeler için, ikisi de bölgenin merkezinden geçen, olası iki eksen kümesini de ele alan Snee, bir eksen kümesi, eksenleri, Cox (1971) tarafından önerilen iki yöntemle oluşturulurken, başka bir kümeyi orijinal eksenlere paralel olan eksenlerden

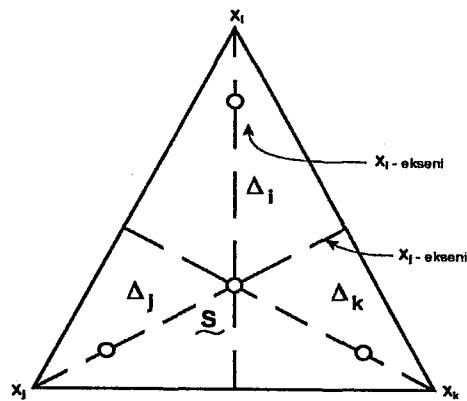


oluşturdu. Son yöntemde, tahmini olarak standart karma bölgenin merkezine yerleşecek veya merkez olarak belirecektir.

Cornell (1975), (1.3.1) ve (1.3.2)' deki bütün parametreleri eşzamanlı olarak kestirmek için, Scheffé simpleks latis tasarımlarının kullanılabilirliğini ve bu tasarımların, aynı sayıda noktalardan oluşan diğer tepe noktası olmayan sınırlı tasarımlar veya iç nokta tasarımları kullanılarak elde edilen kestirimlerden daha küçük varyanslı kestirimler verdiğini gösterdi. Standart karma simpleks'in merkezine yerleştiğinde, kestirilen parametre varyans matrisinin izi, birinci ve ikinci dereceden model için minimumdur. Burada  $(X'X)^{-1}\sigma^2$  matrisinin izi kestirilen varyansların toplamına eşittir. Özel bir bileşenin diğer bileşenlere göre etkinliğini ölçmek için bir eşit kopyalı simetrik tasarım üretilir, ve noktalar bileşen eksenleri üzerine yerleştirilir. Standart karma s, merkez değil de, i.bileşene karşılık gelen eksen üzerine yerleştirildiğinde; s, i. tepe noktasına yakın yerleştirilir. Diğer bileşenlerin kestirimlerine göre i.bileşen ile birleştirilen kestirimler daha kesin olacaktır. Benzer olarak, s, simpleksin merkezine yerleştirilirse ve  $\Delta_i$ , i.bileşen ekseninde s' den tasarım noktasına olan uzaklık olarak verilirse, (Şekil 1.5(b), q=3) birinci dereceden model için en büyük oranın,  $\Delta_i/\Delta_j$ , bir  $\Delta_j \leq (q-1)/q$  sabit değeri için küçük değeri  $\text{Var}(\hat{\beta}_i)/\text{Var}(\hat{\beta}_j)$  olacaktır. Burada  $\hat{\beta}_i$  ve  $\hat{\beta}_j$ , i. ve j. bileşenler ile birleştirilen parametrelerin kestirimleridir.



Şekil 1.5(a): r. bileşendeki  $\Delta_i$  artış değişimi



Şekil 1.5 (b): bileşen eksenleri boyunca  $\Delta_i$  ve  $\Delta_j$  arasındaki tasarım noktası

Cornell ve Ott (1975), Snee (1975), önemli bileşenler bulunmuş ve yüzey ikinci veya üçüncü dereceden polinomlar ile modellenmişken, bileşen eksenleri boyunca yüzeyin eğiminin belirlenmesi ile sonuçlanabilen yüzey eğiminin nasıl daha iyi anlaşılacağını gösterdiler. Buna göre, i. bileşen eksenleri boyunca ikinci dereceden yüzeyin eğiminin bir ölçümü, q-bileşenli ikinci dereceden Scheffé polinomu formunda olan aşağıdaki polinom ile elde edilebilmektedir.

$$E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j \quad (1.3.5)$$

Bir tasarım konfigrasyonunun seçimi, bir deneyci tarafından atılan ilk adımdır, daha sonra her tasarımda ne kadar gözlemin yerleştirileceği kararı gelir. Simpleks-latis tasarımları için özel kübik ve genel kübik modellerin uygunluğunu desteklemek için, Lake (1975), simpleks üzerinde tahmin edilen yanıtın birleştirilen varyansının minimize edilmesi kriterini göz önüne aldı. Gerekli olmayan bileşenlerin elenmesi veya kaldırılması, özellikle aday bileşenlerin sayısı ( $q \geq 6$ ) büyük olduğunda bileşenlerin sayısının indirgenmesini garanti edecek bir stratejidir. Çalışılacak gerekli bileşenlerin sayısını indirmek için, Snee ve Marquardt (1976) çalışmalarında, eşit etkiye sahip veya 0 etkiye sahip bileşenleri aramayı önerdiler. Scheffé modelini kullanarak i.bileşenin etkisi  $E_i$  olmak üzere bu etkiyi,

$$E_i = \hat{\beta}_i - (q-1)^{-1} \sum_{i \neq j} \hat{\beta}_j \quad (1.3.6)$$

şeklinde tanımladılar.  $E_i = 0$  ise yani  $\hat{\beta}_i$  modelde geri kalan kestirimlerin ortalaması ise,  $x_i$  aktif değildir ve  $\beta_i x_i$  modelden silinir.  $E_i$ ' lerin iki veya daha fazlası eşit olduğunda her bir  $\beta_i x_i$  terimleri indirgenmiş model formda birleştirilir.

Genellikle bileşenlerin elendiği simpleks bölgeye sahip olduğu durum için, Snee ve Marquardt simpleks elenmiş tasarımlar önerirler. Bu tasarımlar, aşağıdaki nokta sınıflarının tümünü veya bazılarını kapsar.

A: q tepe noktaları,  $x_i = 1$ ,  $x_j = 0$ ,  $\forall i \neq j$ ,

B: iç noktaları,  $x_i = q + 1/2q$ ,  $x_j = (2q)^{-1}$ ,  $\forall i \neq j$ ,

C: sentroit(merkez)  $x_i = q^{-1}$ ,  $\forall i = 1, 2, \dots, q$ ,

D: q, son eleman,  $x_i = 0, x_j = (q - 1)^{-1}, \forall i \neq j$

q bileşen eksenleri boyunca yanıtın platlanması istenirse A' dan D' ye dört sınıfın tamamı önerilmektedir.

Saxena ve Nigam (1977) ikinci dereceden Scheffé polinomunun uydurulması amacına ilişkin, kısıtlı faktör uzayının kapsayacağı bölge için bir yöntem sundular. Saxena ve Nigam tarafından sunulan iki örnekten biri Şekil 1.6(a) da gösterilen üç bileşenli problemdir. 6 tepe değerinde yerleşen tasarım noktalarının yerine 6 terimli ikinci dereceden modelin uydurulması için polihedronun merkezinde bir nokta fazla kabul edildi. Saxena ve Nigam 'ın tasarımı, Şekil 1.6(b) de görüldüğü gibi 9 noktadan oluşur. Rasgele bir gözlemci için, Şekil 1.6(b) deki tasarımı uç tepe değer tasarımından daha düzgün olarak bölgeyi kapsayacağı görünür ve ileri sürülen iddia; simetrik simpleks tasarımından sonuçlanan  $x_i$  'lerin her biri için düzeylerin sayısı en az uç tepe değer (extreme vertices) tasarımlar ile belirlenmiş olanlar kadar büyüktür.

Saxena ve Nigam'ın yönteminin cazibesi, aşırı olarak uç tepe değer (extreme vertices) tasarımlarda bile tasarım üreten bilgisayarlardan bağımsız olmasıdır. Bu bağımsızlığın eksikliği ve yöntemin göreceli olarak kolaylığı, tasarım üreten metotların tercih nedenleri ve yazarlar tarafından listelenen büyük avantajlardır. Buna rağmen, simetrik simpleks iç tasarımları Snee (1975) tarafından ileri sürülen sınırlı tasarımlarla karşılaştırıldığında, bu tasarımlarda nispeten yeterlilik kaybının olduğu ifade edilebilir.

Draper ve John (1977), Scheffé polinomlarında görülen terimlere ek olarak  $(1/x_i)$  ters terimlerini kullandı. Örneğin, çarpışan iki lokomotifin yanma performansı ölçüldüğünde veya çilekli kekin kabarıklılığını ve pasta hamurunda kabartma tozunun 0 olduğu kabarıklılığının ölçümü yapıldığında uç bir değişiklik mümkündür. İlgili deneysel bölge  $x_i = 0$  sınırına yakın bölgeyi kapsar ancak genellikle sınırı kapsamaz.

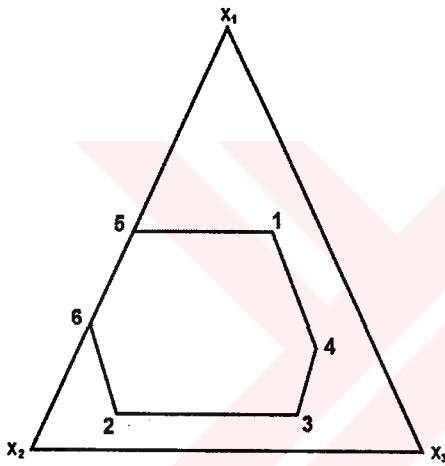
$1/x_i$  'nin Taylor açılımı:

$$\frac{1}{x_i} = 1 - (x_i - 1) + (x_i - 1)^2 - (x_i - 1)^3 + \dots$$

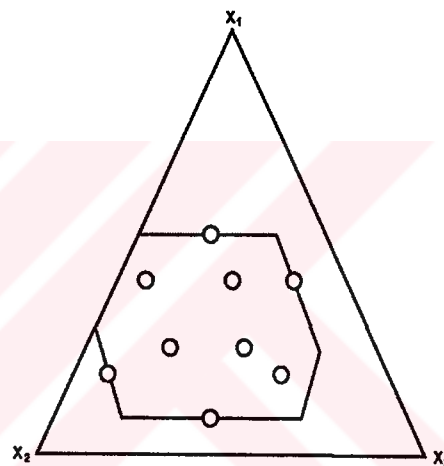
olduğundan ve  $1/x_i$ ;  $x_i, x_i^2, x_i^3, \dots$  terimlerini kapsadığından model, ters terimlerin dahil edilmesiyle Scheffé polinomunun bir açılımı olan bir modele dönüşür.

Draper ve St.John (1977) , üç ve dört bileşenli sistemler için yaklaşık olarak D-optimal ölçüm tasarımları ayrıca ters terimli modellere uygulamak için kullanılabilir.  $D_n$  optimal olabilen n-noktalı tasarımları ele aldılar ve tasarımların sınırlarda yerleşen noktalar kadar tepe noktalarına yakın şekildeki pozisyonda bulunan noktaları da kapsayabileceğini gösterdiler..

Scheffé modeli uygulandığında ve simpleks boyunca hata varyansının homojen olduğu kabulü şüphelidir, yeniden anlamlı deneysel sonuçları elde etmek için birkaç olasılık mevcuttur. Bu olasılıklardan birisi, Cornell (1977), tarafından ele alındı. Bu olasılık, birinci dereceden Scheffé modeli kullanıldığında Şekil 1.5 de görülen simetrik eksen tipindeki tasarımın kullanılabilmesidir.



Şekil 1.6(a): kısıtlı 6 tepe noktalı bölge



Şekil 1.6(b): Bir simetrik-simpleks iç tasarım

Galil ve Kiefer , bir  $(\chi, f)$  tasarımı belirledi, burada  $f, \chi$  kompakt simpleks üzerinde  $x_i$  ve  $x_i x_j$  ( $1 \leq i < j \leq q$ )  $q(q+1)/2$  fonksiyonlarının sütun vektörüdür.  $\chi$  uzayı üzerinde bir olasılık ölçüsü olarak bir tasarım tanımlayan, Galil ve Keifer (1977) simpleks'in kenarlarının orta noktaları ve tepe noktalarında eşit sayıda gözlemden oluşan, D-optimal tasarımının, hata karelerinin beklenen değeri anlamında Box ve Draper'in kriterlerini kullanan tasarımda olduğu gibi, yanlı olarak yönlendirilen tasarımdan daha iyi olduğunu gösterdiler. Sadece  $\chi$  üzerinde hata kriterlerinin beklenen değerinin ortalaması göz önüne alınmadı aynı zamanda hata karelerinin beklenen değerlerinin maximumu da çalışıldı.

Galil ve Keifer (1977), D, A ve E optimallik kriterlerine göre optimum olan tasarımları karşılaştırarak, tasarımı belirleyen hesaplama teknikleri geliştirdiler.

Ayrıca v-simetrik tasarımların özellikleri vurgulanarak optimum yapıların geometrisi tartışıldı.

Üç bileşenli karmalar için üçgenel bölgedeki yüzeyin biçiminin çalışılmasında konsantrik iç üçgenlerin bir kümesinin her bir üçgen üzerinde sabit varyansları içine alan tahmini bir yüzey olunması arzu edilir.

Cornell ve Khuri (1978), iki boyutlu konsantrik daireleri, konsantrik eşkenar üçgen üzerine dönüştüren bir dönüşüm fonksiyonu sundu. Bir komşu sistemdeki dairesel bölgede dönüştürülebilir bir tasarım kullanılarak ve kompleks dönüşüm fonksiyonuna uygulayarak aynı merkezli daireler ailesinin bir üyesi üzerinde sabit varyans özelliğinin dönüşüm altında korunduğunu dairenin dönüştüğü eşkenar üçgen üzerinde varyansın sabit olduğunu gösterdi.

Hare (1977), karma denemelerde değişken işlemleri bulunduğu faydalı olan bazı tasarım teknikleri sundu. İki değişken yöntemi, örneğin, kek formülü çalışmalarında zaman ve pişirme sıcaklığı... Hare, Li (1971) tarafından göz önüne alınan bazı fikirlerden yararlanılarak, bağımsız değişkenler metodu için kübik faktör uzayına birleştirilen karma uzayda yazılan ilgili kübik bölgede çalıştı. Karma bileşen oranlarının ekli kısıtlamalı veya ekli kısıtlamasız olduğu, ilgili bölgelerinin merkezi noktalı olduğu veya olmadığı üç ve dört bileşenli olan farklı sekiz deneysel olay için tasarımlar türeterek, iki ilginç nümerik örnek sundu.

Park (1978), Scheffé' nin modellerindeki bileşenlerin alt kümelerinin seçimi için farklı strateji sunan bir çalışma yaptı. Bu çalışmada parametreler üzerine lineer kısıtlamaların bir kümesi uygulanır ve simpleks bölge üzerinde integre edilen indirgenmiş modelin hata karelerinin beklenen değerinin minimum değeri araştırılır.

Bileşenlerden biri kendi karmaları ile olduğu kadar diğer bütün bileşenler ile doğrusal olarak bir sistemde karıştırıldığında ve geri kalan bileşenler doğrusal olmayacak şekilde karıştırıldığında, bir polinom model doğal bir şekilde başarısız olabilir. Ekli etkiyi bulmak için gerekli olan şey birinci dereceden homojen ve polinom olmayan modeldir.

Cornell ve Gorman (1978), sıradan polinomsal karma verinin sıradan polinomsal analizinde, daha basit polinom olmayan formun daha gerçekçi bir model olarak nasıl elde edilebileceğini gösterdi.

Bir karma denemenin k-ıncı bileşeni  $x_k$  ele alındığında,  $x_k$  'da ki değişimler herhangi bir şekilde yanıtı değiştirmiyorsa bu bileşenlere aktif olmayan bileşen denilmektedir. Becker (1978), k ıncı bileşen aktif değilse sistem için modelin geri

kalan q-1 cinsinden ifade edilebileceğini ifade etti ve 0. dereceden homojen bir modeli, örneğin, q=3 için

$$E(y) = \beta_0 + \frac{\beta_1 x_1}{x_1 + x_2} + \frac{\beta_2 x_2}{x_2 + x_3} + \frac{\beta_3 x_3}{x_3 + x_1} + \beta_{12} h_{12}(x_1, x_2) \\ + \beta_{13} h_{13}(x_1, x_3) + \beta_{23} h_{23}(x_2, x_3)$$

modelini ele aldı. Burada  $h_{ij}$ ,  $i < j$ , 0. dereceden homojen fonksiyonlardır.

Becker (1978),  $h(\cdot)$ 'nin değişik formlarını ele aldı. Bu formlardan birisi, ikili karmalar için oluşturulan,

$$h_{ij}(x_i, x_j) = \left( \frac{x_i}{x_i + x_j} \right)^i \left( \frac{x_j}{x_i + x_j} \right)^j, \quad i < j$$

şeklindedir.

Cornell (1979) da yaptığı bir çalışmada, Scheffé'nin kanonik polinomlarını, Draper ve Lawrence (1965)'in üç faktör için karma tasarımlarını ve (1977) dört faktör için karma tasarımlarını, Murty ve Das (1968)'in ve Cox (1971)'in standart polinomlarını, modellerde pseudo-bileşenlerin kullanımı ve birinci dereceden modellerde homojen olan Becker (1968)'in modellerini inceledi.

## 2.BÖLÜM

### KARMA DENEMELER İÇİN TASARIMLAR

*Bu bölümde, karma denemeler için deneysel bölge tasarımları, kısıtlı Bölge, tutarlı bölge ve tutarlı kısıtlı bölge hakkında bilgiler verilecektir. Ayrıca karmayı oluşturan maddelerin oranlarının toplamının bire eşit olduğu durumlarda kullanılan simpleks latis, simpleks sentroit ve çiftli latis tasarımları açıklanacaktır ve maddelerin oranlarının toplamın bire eşit olmadığı zamanlarda kullanılan uç değer tasarımları hakkında bilgi verilecektir.*

#### 2.1.Karma Denemeler İçin Deneysel Bölge Tasarımları

##### 2.1.1. Karma Denemeler İçin Kısıtlı Simpleks Bölge Tasarımı

$x_i$ , n bileşenli bir karmada i. bileşenin oranı olmak üzere

$$\sum_{i=1}^q x_i = 1, \quad 0 \leq x_i \leq 1 \quad (2.1.1)$$

idi. Karışımlardaki bazı bileşenlere birçok durumlarda

$$0 \leq a_i \leq x_i \leq b_i \leq 1 \quad (i=1,2,\dots,n) \quad (2.1.2)$$

kısıtlamalar yapılabilir. (2.1.2) deki eklenen sabitler sonucunda, simpleksin incelenilen bölgesi simplex içinde bir hiperpolihedrona dönüşür. Böyle sınırlı bölgeleri incelemek için McLean ve Anderson, (2.1.1) ve (2.1.2) yi sağlayan uçdeğer tasarımı(extrem vertices design, EVD) ileri sürmüştür. Bu tasarımdaki noktalar, tepeler ve hiperpolihedronun yüzünün orta noktalarıdır ve orta noktalar haricinde bölgenin içindeki hiçbir noktayı kapsamaz.

Saxena ve Nigam (1977), hiperpolihedronun içinde tasarım noktaları olan simpleksin bu gibi sınırlı incelemeleri için simetrik-simpleks tasarımlarından karma tasarımlar türetmişlerdir. Böyle tasarımlara Sınırlı Bölge Simpleks Tasarımı (restricted region simplex design, RRS) adı verilir. RRS nin bileşensel gösterimi

$$X = (x_{ui}) \quad u=1,2,\dots,N \quad i=1,2,\dots,n$$

bir karma tasarımının  $N \times n$  tipindeki matrisini gösterebilir ve  $W$  de  $N \times (n-1)$  tipinde (sürekli veya süreksiz) bir çarpansal düzen olmak üzere

$$X = (W : 0)M + Jx_0' \quad (2.1.3)$$

yazılabilir. Burada

$0$  :  $(N \times 1)$  0 vektörü

$M$  :  $(n \times n)$  ortogonal (dik) matris ( $M^1 M = I$ )

$J$  :  $N \times 1$  birim vektör.

$x_0'$ : (2.1.1) denklemini sağlayan karmanın bileşenlerinin  $(x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0n})$  oranlarının  $(1 \times n)$  tipinde vektörü olmak üzere

$$X = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & \dots & w_{1(n-1)} & ; & 0 \\ w_{21} & w_{22} & \dots & w_{2(n-1)} & ; & 0 \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & ; & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & ; & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & ; & \cdot \\ w_{N1} & w_{N2} & \dots & w_{N(n-1)} & ; & 0 \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & \dots & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \dots & m_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ m_{n1} & m_{n2} & \dots & m_{nn} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} j_{11} \\ j_{21} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ j_{N1} \end{bmatrix} \bullet [x_{01} \ x_{02} \ \dots \ x_{0n}]$$

$X$ ,  $(N \times n)$  tipinde bir matris olur.

Bileşensel plandaki bileşenlerin düzeyleri (2.1.1) denklemini sağlayan  $X$ 'deki sonuçlardan seçildi. Seçilen bu uygun düzey ( $M$ ),  $X$  tasarımındaki  $m_i = \min_u x_{ui}$  ve

$M_1 = \max_u x_{ui}$  ile sınırlanan bölgeyi inceler.

Fakat önerilen bu ortogonal(dik) matris  $X$  tasarımındaki tepelerin çok azını sağlar. Tasarımda bulunan sınırlı bölgenin daha fazla olması için simetrik fakat ortogonal olmayan ve  $M$ 'nin alternatif bir formu olan keyfi bir  $M_A$  matrisinin seçimi yanıt yüzeyinin bulunmasında daha uygun olur. Bu



$$M_A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ -1 & 2 & -1 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & -1 & 2 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & -1 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & \dots & 2 & -1 \\ \dots & \dots & 0 & \dots & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.1.4)$$

şeklinde bir matris olup bütün satırlarının ve bütün sütunlarının toplamı 0 dir.

Her  $(n-1)$  çarpanları  $s$  seviyede  $k_1, k_2, \dots, k_s$  ( $0 < k_1 < k_2 < \dots < k_s$ ) olan bir tam simetrik  $W$  çarpansal tasarımı alınırsa  $X_1$ ,

$$X_1 = \begin{bmatrix} k_1 & k_2 & \dots & k_{s-1} & k_s ; 0 \\ k_2 & k_3 & \dots & k_s & k_1 ; 0 \\ k_3 & k_4 & \dots & k_1 & k_2 ; 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots ; 0 \\ k_s & k_{s-1} & \dots & k_2 & k_1 ; 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.1.5)$$

olur. Seçilen  $M_A$  için ,  $X$  tasarımındaki  $m_i = \min_u x_{ui}$  ve  $M_i = \max_u x_{ui}$  ile sınırlanan bölge Tablo 2.1 ile gösterilir.

| <u>Sütun</u><br>(i) | <u>Maximum</u><br>( $M_i$ ) | <u>Minimum</u><br>( $m_i$ ) |
|---------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| 1                   | $k_s - k_1$                 | $k_1 - k_s$                 |
| 2                   | $2(k_s - k_1)$              | $2(k_1 - k_s)$              |
| $\vdots$            | $\vdots$                    | $\vdots$                    |
| $n - 2$             | $2(k_s - k_1)$              | $2(k_1 - k_s)$              |
| $n - 1$             | $2k_s - 1$                  | $2k_1 - k_s$                |
| $n$                 | $-k_1$                      | $-k_s$                      |

Tablo 2.1:  $M_A$  için ,  $X$  tasarımındaki  $m_i = \min_u x_{ui}$  ve  $M_i = \max_u x_{ui}$  ile sınırlı bölge.

X matrisini  $n \times 1$  tipindeki bir C vektörü ile çarpalım. C vektörünün  $c_i$  bileşenleri aşağıdaki denklemlerle bulunur

$$\frac{m_i + c_i}{\sum_{i=1}^n c_i} = a_i \quad \text{ve} \quad \frac{M_i + c_i}{\sum_{i=1}^n c_i} = b_i, \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

$$\begin{bmatrix} A & J^1 & \dots & I \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ B & J^1 & \dots & I \end{bmatrix} C = \begin{bmatrix} m \\ \vdots \\ M \end{bmatrix} \quad (2.1.6)$$

A :  $(a_1, a_2, \dots, a_n)$

B :  $(b_1, b_2, \dots, b_n)$

C :  $(c_1, c_2, \dots, c_n)$

$J^1$  :  $(1, 1, 1, \dots, 1, 1, 1)$

m :  $(m_1, m_2, \dots, m_n)$

M :  $(M_1, M_2, \dots, M_n)$

I :  $n \times n$  birim matris

Ve  $X_i$ ' in i.sütunundaki bütün elemanları için (2.1.6) daki denklemlerin çözümü ile bulunan  $c_i$  değerleri eklenirse X matrisi:

$$X = \left( \sum_{i=1}^n c_i \right)^{-1} \left[ (W : 0) M_A + J_{n1} C^1 \right] \quad (2.1.7)$$

olur. Bu X matrisi (2.1.2) sınırlı bölgeyi açıklayan RRSD matrisidir.

Eğer  $(b_i - a_i)$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) dizileri 2:4:...:4:3:1 oranlı ise C'nin tek çözümü vardır ve

$$C = (BJ^1 - I)^{-1} \cdot M = (AJ^1 - I)^{-1} \cdot m$$

$$(BJ^1 - I)^{-1} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n b_i - 1} \left[ BJ^1 + \left( 1 - \sum_{i=1}^n b_i \right) I \right]$$

$$(AJ^I - I)^{-1} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n a_i - 1} \left[ AJ^I + \left( 1 - \sum_{i=1}^n a_i \right) I \right]$$

dir. Buradan  $c_i$  değerleri:

$$c_1 = \frac{(2n-3)b_1(k_s - k_1) + (1 - \sum_{i=1}^n b_i)M_1}{\sum_{i=1}^n b_i - 1}$$

$$c_2 = \frac{(2n-3)b_2(k_s - k_1) + (1 - \sum_{i=1}^n b_i)M_2}{\sum_{i=1}^n b_i - 1}$$

$$c_n = \frac{(2n-3)b_n(k_s - k_1) + (1 - \sum_{i=1}^n b_i)M_n}{\sum_{i=1}^n b_i - 1}$$

şeklinde bulunur.

**2.1.1.Tanım:** (2.1.7) denklemindeki X tasarım matrisinin sırasıyla (1,2,...,n) bireysel bileşenlerinin oranlarının maksimum ( $b_i$ ) ve minimum ( $a_i$ ) 'lerin var olduğu iki bileşim tipi vardır, bunlar:

$$\begin{array}{cccc} b_1 & a_2 & b_3 & a_4 & \dots \\ a_1 & b_2 & a_3 & b_4 & \dots \end{array}$$

ise böyle bileşimlere “*zorunlu bileşimler*” denir.

**2.1.1.Örnek:** -a, 0, a ile bir  $n=3$  çarpansalın,

$$M_A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \text{ ve } \begin{array}{l} 0.30 \leq x_1 \leq 0.50 \\ 0.20 \leq x_2 \leq 0.50 \\ 0.20 \leq x_3 \leq 0.30 \end{array}$$

ile sınırlanan bölgeyi incelemek için  $c_1 = 8a$ ,  $c_2 = 7a$ ,  $c_3 = 5a$  verildiğinde Tablo 2.2 de gösterilen ve ( $E_1$ ) ve ( $E_2$ ) ile adlandırılan X' deki ( $a_1, b_2, a_3$ ) ve ( $b_1, a_2, b_3$ ) bileşenleri “zorunlu bileşimlerdir”.

| W : 0 |    |   | $X_1 = (W : 0)$ |     |    | $X = \frac{1}{20a} [X_1 + J(8a7a5a)]$ |      |               |
|-------|----|---|-----------------|-----|----|---------------------------------------|------|---------------|
| -a    | -a | 0 | 0               | -a  | a  | 0.4                                   | 0.3  | 0.3           |
| -a    | 0  | 0 | -a              | a   | 0  | 0.35                                  | 0.4  | 0.25          |
| -a    | a  | 0 | -2a             | 3a  | -a | 0.3                                   | 0.5  | 0.2 ( $E_1$ ) |
| 0     | -a | 0 | a               | -2a | a  | 0.45                                  | 0.25 | 0.3           |
| 0     | 0  | 0 | 0               | 0   | 0  | 0.4                                   | 0.35 | 0.25          |
| 0     | a  | 0 | -a              | 2a  | -a | 0.35                                  | 0.45 | 0.2           |
| a     | -a | 0 | 2a              | -3a | a  | 0.5                                   | 0.2  | 0.3 ( $E_2$ ) |
| a     | 0  | 0 | a               | -a  | 0  | 0.45                                  | 0.3  | 0.25          |
| a     | a  | 0 | 0               | a   | -a | 0.4                                   | 0.4  | 0.2           |

Tablo 2.2: 8a, 7a, 5a değerleri için ( $E_1$ ) ve ( $E_2$ ) zorunlu bileşimleri.

### 2.1.2.Karma Denemelerde Tutarlı Kısıtlı Bölge

$x_i$ , (2.1.1) denklemindeki kısıtlamaları fiziksel, teorik ve ekonomik nedenlerden dolayı sağlamayabilir. Bu durumlarda bileşenlerin alt ve üst sınırlarında

$$a_i \leq x_i \leq b_i \quad (2.1.8)$$

veya bileşenlerin lineer bileşimlerinde

$$c_j \leq A_{1j}x_1 + A_{2j}x_2 + \dots + A_{qj}x_q \leq d_j \quad (2.1.9)$$

ek kısıtlamalar yapılır.

#### 1-Tutarlı Kısıtlamalar

Karma denemelerde (2.1.8) ve (2.1.9) kısıtlamalarının tutarlı olmasını beklenir. R; (2.1.1), (2.1.8) ve (2.1.9) ile tanımlanan kısıtlı bölgedeki noktalar kümesi olsun.  $x_i = a_i$ ,  $x_i = b_i$ ,  $i=1, \dots, q$  gibi R' de  $x=(x_1, x_2, \dots, x_q)$  noktaları bulunuyorsa (2.1.8) formunun sınırları tutarlı olur.

Ayrıca (2.1.9) formunun sınırları eğer  $R$ 'de her  $j$  için  $y_j = c_j$ ,  $y_j = d_j$ ,  $y_j = A_{1j}x_1 + A_{2j}x_2 + \dots + A_{qj}x_q$  olacak şekilde  $x$  noktalarını bulunduruyorsa, tutarlı olur. (2.1.8) formunun sınırları (2.1.1)'i, (2.1.9) formunun sınırları (2.1.1) ve (2.1.8)'i sağlamalı.

## 2-Bireysel Bileşen Kısıtlamaları

Bireysel bileşenler üzerinde alt ve üst sınır kısıtlamaları yapılırken

$$\sum_{i=1}^q a_i \leq 1 \quad \text{ve} \quad \sum_{i=1}^q b_i \geq 1 \quad (2.1.10)$$

kriterleri kullanılır. Bu kriterlerle kısıtlı bölgedeki karmalar kümesinin boş olmadığı da gösterilmiş olur. Eğer (2.1.10)'deki her iki durumda sağlanmazsa, karma sınırını

$\sum_{i=1}^q x_i = 1$ 'de tutmak olanaksızdır.

(2.1.7) formunun kısıtlamalarını gösterirken, (2.1.10)deki kısıtlamaların büyük tutarsızlıklarının sağlanmamasına dikkat edilmelidir. Tutarsızlığın kolayca gösterilemeyen başka formları da vardır. Örneğin: McLean ve Anderson'un 4-bileşenli flare denemeleri için sınırlar,

$$\begin{aligned} 0.40 &\leq x_1 \leq 0.60 \\ 0.10 &\leq x_2 \leq 0.50 \\ 0.10 &\leq x_3 \leq 0.50 \\ 0.03 &\leq x_4 \leq 0.08 \end{aligned} \quad (2.1.11)$$

olup bu kısıtlamalar tutarsızdır, çünkü sınırlı  $R$  bölgesinde  $x_2 = 0.50$  veya  $x_3 = 0.50$  gibi hiçbir  $x$  noktası yoktur ve  $R$ 'deki  $x_2$  veya  $x_3$  noktalarından herhangi birinin en yüksek noktası 0.47'dir.

Tutarsızlığın bir başka çeşidi de aşağıdaki 3-bileşen üzerindeki kümede görülür.

$$\begin{aligned} 0.0 &\leq x_1 \leq 0.1 \\ 0.1 &\leq x_2 \leq 0.2 \\ 0.6 &\leq x_3 \leq 0.8 \end{aligned}$$

Burada  $x_3 = 0.6$  olacak bir nokta yoktur ve  $x_3$ 'ün alabileceği en küçük değer 0.7 dir.

Birinci tip tutarsızlık,

$$b_i + \sum_{i \neq j}^q a_j > 1, \quad i=1,2,\dots,q \quad (2.1.12)$$

durumu , ikinci tip tutarsızlık,

$$a_i + \sum_{i \neq j}^q b_j < 1, \quad i=1,2,\dots,q \quad (2.1.13)$$

durumu oluştuğunda meydana gelir. (2.1.12) ve (2.1.13)' e denk ölçütler:

$$R_i^! > 1 \quad i = 1,2,\dots,q \quad (2.1.14)$$

ve

$$\sum_{i \neq j}^q R_j^! < 1 \quad i = 1,2,\dots,q \quad (2.1.15)$$

dir, burada

$$R_j^! = \frac{(b_j - a_j)}{\left(1 - \sum_{k=1}^q a_k\right)}$$

şeklindedir ve  $j$  bileşenin “*pseudo-bileşen*” dizisidir. (2.1.14) ve (2.1.15) denklemlerinin kullanılması ile kısıtlı tutarsızlıklar daha kolay bir şekilde saptanır. Bu nedenle (2.1.14) ve (2.1.15) kendilerine karşılık gelen (2.1.12) ve (2.1.13)'e tercih edilir. Buna göre 4-bileşenli flare denemesi için,

$$R_2^1 = R_3^1 = \frac{(0.50 - 0.10)}{(1 - 0.63)} \\ = 1.08 > 1$$

ve benzer olarak (2.1.15) için 3-bileşen örneğinde

$$R_3^1 = \sum_{i \neq j} R_j^1 = R_1^1 + R_2^1 = \frac{0.1 - 0}{1 - 0.7} + \frac{0.2 - 0.1}{1 - 0.7} = \frac{2}{3} < 1$$

olur. (2.1.14) ve (2.1.15) ifadeleri, kısıtlı tutarsızlıkların bulunması için tercih edilirken (2.1.12) ve (2.1.13) ifadeleri tutarsızlıkları düzeltmek için kullanılır. (2.1.12) ve (2.1.13) sınırlı tutarsızlıkların düzeltilmesi için alt veya üst sınırlar artırılır veya azaltılır. Böylece:

$$b_i + \sum_{i \neq j} a_j = 1$$

veya

$$a_i + \sum_{i \neq j} b_j = 1$$

olur. Örneğin; McLean ve Anderson'un flare denemelerinden 2 veya 3-bileşenleri gözönüne alınırsa:  $b_2 = 0.50$  ve  $b_3 = 0.50$  almak gerekmiyorsa (2.1.11) sınırları  $b_2$  ve  $b_3$ 'ün 0.47 ile değiştirilmesiyle tutarlı yapılabilir. Fakat  $b_2 = 0.50$  sınırını almak önemli olduğunda  $a_1, a_3$  ve  $a_4$  sınırlarından herhangi biri veya hepsi düzeltilmeli ve böylece  $b_2 + a_1 + a_3 + a_4 = 1$  olmalıdır.

### 3-Bileşenlerin Lineer Kombinasyonları Üzerindeki Kısıtlamalar

(2.1.9) formundaki kısıtlamalar yapıldığında kısıtlamaların bir kümesinin uygunluğunun kontrolü zor olduğundan, bu kısıtlamaların ayrık olduğu ve  $A_{ij} = 0$  veya  $A_{ij} = 1$  olan basit durumlar bulunur.

$A_{ij} = 0$  veya  $A_{ij} = 1$  ( $i=1,2,\dots,q$ ,  $j=1,2,\dots,k$ ) olduğu ve (2.1.9) formunun ayrık  $k$  ( $k \leq \frac{q}{2}$ ) kısıtlamalar dizisini ele alalım. Genellik bozulmadan, "k" kısıtlamalar dizisi  $q$  bileşenlerinin tamamlayıcısı olsun.

$$c_j < A_{1j}a_1 + A_{2j}a_2 + \dots + A_{qj}a_q \quad (2.1.16)$$

$$d_j < A_{1j}b_1 + A_{2j}b_2 + \dots + A_{qj}b_q \quad (2.1.17)$$

$$d_j + \sum_{\ell \neq j}^k c_\ell > 1 \quad (2.1.18)$$

$$c_j + \sum_{\ell \neq j}^k d_\ell > 1 \quad (2.1.19)$$

durumlarından herhangi biri  $j=1,2,\dots,k$ 'nin herhangi biri için oluşursa, (2.1.9) formunun kısıtlamalarının dizisi tutarsızdır. (2.1.16) ve (2.1.17) durumları sadece ilgisiz kısıtlamaları (kısıtlı bölgeyi ileri derecede sınırlamayan kısıtlamalar) ortaya çıkarır. (2.1.18) ve (2.1.19) durumları da bireysel bileşen kısıtlamaları olan (2.1.12) ve (2.1.13) durumlarına benzerdir. (2.1.18) ve (2.1.19) durumlarını hesaplama bakımından uygun olan

$$Q_j^1 > 1 \quad (2.1.20)$$

$$\sum_{\ell \neq j}^k Q_\ell^1 < 1 \quad (2.1.21)$$

koşulları ile yer değiştirebilir. Burada

$$Q_j^1 = \frac{(d_j - c_j)}{(1 - \sum_{h=1}^k c_h)} \quad (2.1.22)$$

dir. (2.1.22) denklemini  $j$ . "orta karma bileşen"  $A_{1j}x_1 + A_{2j}x_2 + \dots + A_{qj}x_q$  terimin pseudo-bileşen dizisi olarak göz önüne alınabilir. (2.1.16) den (2.1.21)' e kadar numaralanan durumların kullanımını açıklamak için Piepel (1982a)' in yedi bileşenli örneğinden yararlanırsak, bu örnek için verilen sınırlar,



$$\begin{aligned}
0.41 \leq X_1 \leq 0.60 & & 0 \leq X_7 \leq 0.065 \\
0.055 \leq X_2 \leq 0.15 & & 0 \leq X_8 \leq 0.080 \\
0 \leq X_3 \leq 0.16 & & 0 \leq X_9 \leq 0.035 \\
0 \leq X_4 \leq 0.14 & & 0 \leq X_{10} \leq 0.035 \\
0 \leq X_5 \leq 0.09 & & 0 \leq X_{11} \leq 0.035 \\
0.09 \leq X_6 \leq 0.17 & & 
\end{aligned} \tag{2.1.23}$$

ve

$$\begin{aligned}
0.54 \leq X_1 + X_2 + X_3 \leq 0.80 \\
0.13 \leq X_4 + X_5 + X_6 \leq 0.35
\end{aligned} \tag{2.1.24}$$

olur. Burada (2.1.23)' deki sınırların tutarlı olduğu rahatlıkla görülebilir.

$$0 \leq X_7 + X_8 + X_9 + X_{10} + X_{11} \leq 0.25$$

ile sınırlı (2.1.24) ifadesinin sınırlarının arttırılmasıyla  $X_i$ ' nin ayrık sınırlarının tamamının bir kümesini oluşturursak, bu sınırlama yetersizdir çünkü  $X_7, X_8, \dots, X_{11}$ ' i (2.1.23)' deki sınırlarda olduğundan daha ileri derecede kısıtlanamaz. Bununla birlikte (2.1.16)' den (2.1.21)' e kadar numaralanan durumların kontrol yapısını tamamlar. Kontroller için (2.1.22) denkleminde faydalanılarak hesaplar yapılırsa, bu hesaplar Tablo 2.3 deki gibi bulunur.

| (2.1.16) durumu için<br>test |       |                              | (2.1.17) durumu için<br>test |                              | (2.1.20) durumu için<br>test | (2.1.21) durumu için<br>test    |
|------------------------------|-------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|---------------------------------|
| $j$                          | $c_j$ | $\sum_{i=1}^{11} A_{ij} a_i$ | $d_j$                        | $\sum_{i=1}^{11} A_{ij} b_j$ | $Q_j^1$                      | $\sum_{\ell \neq j}^3 Q_\ell^1$ |
| 1                            | 0.54  | 0.465                        | 0.80                         | 0.91                         | 0.7879                       | 1.4243                          |
| 2                            | 0.13  | 0.09                         | 0.35                         | 0.40                         | 0.6667                       | 1.5455                          |
| 3                            | 0     | 0                            | 0.25                         | 0.25                         | 0.7576                       | 1.4546                          |

Tablo 2.3: (2.1.16), (2.1.17), (2.1.20), (2.1.21) durumları için test hesapları.

(2.1.24) kısıtlamaları (2.1.16), (2.1.17), (2.1.20) veya (2.1.21)'e uymadığından tutarlıdır. Şimdi ayrık olmayan veya/ve  $A_{ij} \neq 0$  veya  $A_{ij} = 1$  değerlerine sahip olan (2.1.9) formunun bir kümesinin tutarlılık testi ele alınırsa,

(2.1.16) ve (2.1.17) durumları yetersiz sınırları aramaya devam edecektir, bununla birlikte (2.1.18) ve (2.1.19) durumları bu tip kısıtlamalar için uygulanabilir değildir.

(2.1.9) formunun kısıtlamaları için kısıtlamalar kümesi tutarlı olmasına rağmen, arzu edilenden farklı biçimde kısıtlı bölgeyi değiştirebilirler. Bileşenlerin sınırlı kısıtlanmış bir lineer bileşimde, ayrıca çeşitli şekillerde her bir bireysel bileşenlerde kısıtlanabilir. (2.1.9) formundaki kısıtlamalar oluştuğunda, araştırmacı, verilen bireysel kısıtlamalardan haberdar olmalıdır. Özel olarak ilgilenilen, bileşenlerin her birinin alt ve üst sınırlarının çalışılmasına izin vermeyen kısıtlamalardır. Bu konular aşağıdaki gibi özetlenir.

(2.1.9) formunun bir kısıtlamasını ve kısıtlaması  $A_{\ell j} \neq 0$  olacak şekilde bir  $X_{\ell}$  bileşeni ele alalım. Eğer

$$A_{\ell j} a_{\ell} + \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq \ell}}^q A_{ij} b_i < c_j \quad (2.1.25)$$

ise bu kısıtlama  $X_{\ell}$ 'nin  $a_{\ell}$  alt sınırına yaklaşmasına izin vermez. Bu durumlarda etkili alt ve üst sınırlar sırayla,

$$X_{\ell} \leq \frac{1}{A_{\ell j}} \left[ d_j - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq \ell}}^q A_{ij} a_i \right] \quad (2.1.26)$$

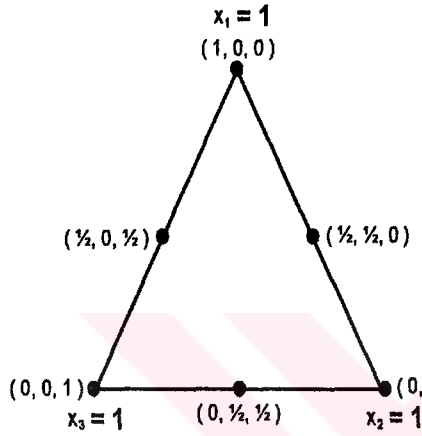
ve

$$X_{\ell} \geq \frac{1}{A_{\ell j}} \left[ c_j - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq \ell}}^q A_{ij} b_i \right] \quad (2.1.27)$$

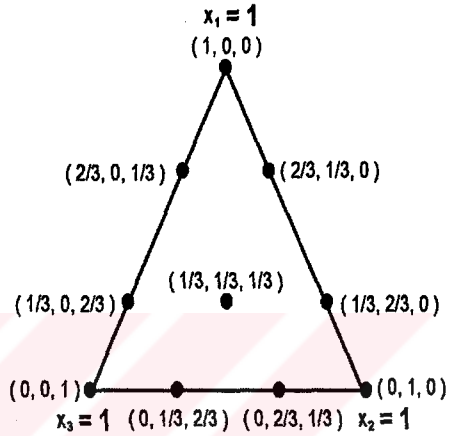
olur. Eğer (2.1.9) formunun kısıtlamalarının kümesi ayrık ise bu sınırlar  $X_{\ell}$  için etkin olan son alt ve üst sınırlardır.

## 2.2- Simpleks-Latis Tasarımı

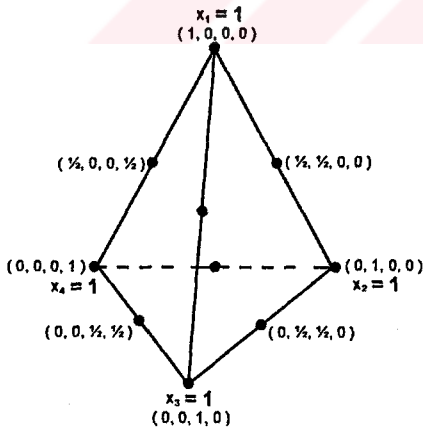
Simpleks üzerinde noktaların düzenli dağılımlarının meydana getirdiği yerleşim düzenine latis denir. Latis terimi noktaların sıralanışıyla ilgi kurmakta kullanılır. Burada her faktör için kullanılan oranlar 0'dan 1'e "m+1" eş uzaylı değerlere,  $x_i = 0, \frac{1}{m}, \frac{2}{m}, \dots, 1$ , sahiptir.



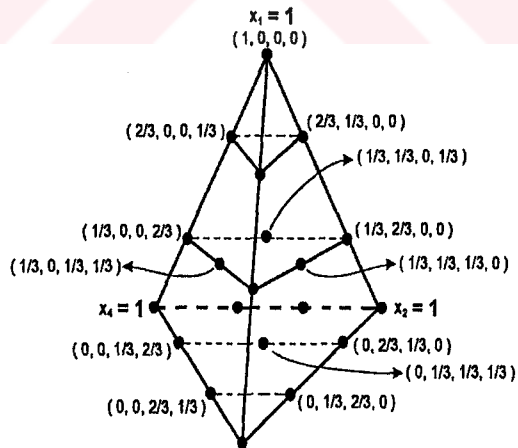
{3,2} simpleks-latis



{3,3} simpleks-latis



{4,2} simpleks-latis



{4,3} simpleks-latis

Şekil 2.1: Bazı  $\{q, m\}$  latisleri

Bu tasarımdaki noktaların sayısı,  $\{q, m\}$  latis noktalarının koordinatlarının  $m$  ile çarpımının sonucunda ortaya çıkan  $\{q, m\}'$  latisi olsun, bu latis  $(x_1, x_2, \dots, x_q)$  noktalarını içerir ve

$$x_i = 0, 1, \dots, m$$

$$x_1 + x_2 + \dots + x_q = m$$

dir.  $\{q, m\}'$  latisindeki noktaların sayısını ortaya çıkarmak için bütün noktalara 0 ve 1 den oluşan bir kod sayısı verilirse,  $(x_1, x_2, \dots, x_q)$  noktaları ardışık rakamları  $x_1$  bir ve sıfır,  $x_2$  bir ve sıfır,  $\dots, x_{q-1}$  bir ve sıfır,  $x_q$  bir olan kod sayılarına sahiptir.  $m$  tane 1 ve  $q-1$  tane 0'dan oluşan rakam sayısı  $(m+q-1)$  ile latis noktaları arasında 1-1 bir ilişki vardır. Bu şekilde

$$\binom{m+q-1}{m}$$

$(x_1, \dots, x_q)$  noktası yazılabilir. Bu da  $\{q, m\}$  simpleks-latis bileşenlerinin kombinasyon sayısıdır. Örneğin:  $q=3$  ve  $m=2$  için  $(i=1,2,3)$   $x_i=0,1/2,1$   $\{3,2\}$  simpleks-latisin üçgensel çarpım uzayının sınırlarında 6 nokta hesaplanır. Tablo 2.4,  $3 \leq q \leq 10$  ve  $1 \leq m \leq 4$   $q$  ve  $m$  değerleri için bir  $\{q, m\}$  simpleks-latisdeki noktaların sayısını gösterir.

| Modelin derecesi |     | Bileşenlerin sayısı |    |    |     |     |     |     |     |
|------------------|-----|---------------------|----|----|-----|-----|-----|-----|-----|
| (m)              | q = | 3                   | 4  | 5  | 6   | 7   | 8   | 9   | 10  |
| 1                |     | 3                   | 4  | 5  | 6   | 7   | 8   | 9   | 10  |
| 2                |     | 6                   | 10 | 15 | 21  | 28  | 36  | 45  | 55  |
| 3                |     | 10                  | 20 | 35 | 56  | 84  | 120 | 165 | 220 |
| 4                |     | 15                  | 35 | 70 | 126 | 210 | 331 | 495 | 715 |

Tablo 2.4:  $q$  ve  $m$  değerleri için  $\{q, m\}$  simpleks-latisdeki noktaların sayısı

### 2.2.1. Simpleks- Latis Üzerindeki Polinomlar

$x_1, x_2, \dots, x_q$  bileşenleri için  $q$  değişkenli  $n$ .dereceden polinom

$$\eta = \beta_0 + \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i \leq j \leq q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leq i \leq j \leq k \leq q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \dots + \sum_{1 \leq i_1 \leq i_2 \leq \dots \leq i_n \leq q} \beta_{i_1 i_2 \dots i_n} x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_n} \quad (2.2.1)$$

şeklindedir. Burada  $x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1$  olacak şekilde  $x_i \geq 0$  ve  $\beta$  katsayıları sabittir. Bu polinom  $\{q, n\}$  polinomu olarak adlandırılır. (2.2.1) deki katsayıların

sayısı  $\binom{n+q}{n}$  tanedir. (2.2.1) denkleminde  $x_q$  yerine

$$x_q = 1 - \sum_{i=1}^{q-1} x_i \quad (2.2.2)$$

yazılırsa, aynı fonksiyon  $x_1, x_2, \dots, x_{q-1}$   $q-1$  değişkenli bir polinom olur. Bu sadece

$\binom{n+q-1}{n}$  katsayı içerir. Bu sayı  $\{q, n\}$  sayısı ile aynıdır, bu da polinom regresyon

modellerinin simpleks latis tasarımına ve onun değişimlerine iyi uygulanabildiğini

gösterir.  $q$  değişkenli  $n$ .dereceden en genel polinom  $x_i \geq 0$ ,  $x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1$

olacak şekilde  $x_i \geq 0$  koşuluyla

$n=1$  için (lineer form)

$$\eta = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i x_i \quad (2.2.3a)$$

$n=2$  için (kuadratik form)

$$\eta = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i \leq j \leq q} \beta_{ij} x_i x_j \quad (2.2.3b)$$

$n=3$  için (kübik form)

$$\eta = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k \quad (2.2.3c)$$

olarak yazılabilir.  $\beta_{ijj} + \beta_{jij} = 0$ ,  $\beta_{ijj} x_i^2 x_j + \beta_{jij} x_i x_j^2$  formundaki  $\gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)$  ifadesinin yazılmasıyla (2.2.3c) deki notasyon daha simetrik yapılır. (2.2.3b) ve

(2.2.3c) deki  $\beta_{ij}$  katsayılarının sayısı  $\frac{(q-1)q}{2}$  dir. (2.2.3c) deki  $\gamma_{ij}$  katsayısının

sayısı da aynıdır ve (2.2.3c) deki  $\beta_{ijk}$  katsayısının sayısı  $\frac{q(q-1)(q-2)}{6}$  dir.

### 2.2.2. Polinom Katsayılarının Tespiti

Bu polinomlardaki katsayıları yorumlamak için yanıt fonksiyonunun  $\eta$  ile verildiğini ve (2.2.3a), (2.2.3b) ve (2.2.3c) formunda olduğunu kabul edelim. Tek indisli  $i$  katsayıları  $i$ -inci saf bileşenin yanıtının terimlerine göre,  $i$  ve  $j$  indisli katsayılar  $i$  ve  $j$  bileşenlerinin ikili karmalarının yanıtının terimlerine göre,  $i, j$  ve  $k$  indisli katsayılar  $i, j$  ve  $k$  bileşenlerinin üçlü karmalarının yanıtın terimlerine göre yorumlanabilir.  $i$ -inci saf bileşen için yanıtı  $\eta_i$  ile verilsin. ve (2.2.3a), (2.2.3b) ve (2.2.3c) denklemlerinin herhangi birinde  $x_i = 1$  ( $x_j = 0, i \neq j$ ) ve  $\eta = \eta_i$  alınırsa

$$\beta_i = \eta_i$$

bulunur.  $\beta_i$  katsayıları saf bileşenler için yanıttır. Eğer (2.2.3a) lineer form kullanılırsa yanıt,

$$\sum_{i=1}^q \beta_i x_i = \sum_{i=1}^q x_i \eta_i$$

olur. Bu lineer karışım veya lineer karma değeri üzerindeki yanıtın fazlalığı  $x_i$  oranlarından hesaplanır ve saf bileşene bağlı  $\eta_i$  yanıtları çeşitli alanlarda karmanın sinercimsi olarak adlandırılır. Bu negatif ise karmanın antoganzimi olarak

adlandırılır.  $i$  ve  $j$  bileşenlerinin ikili karması için yanıt (2.2.3b) quadratik formu ile verilen

$$\beta_i x_i + \beta_j x_j + \beta_{ij} x_i x_j$$

dir.

$\beta_{ij} x_i x_j$  ikili karmanın sinercimsi,  $\beta_{ij}$  katsayısı da  $i$  ve  $j$  bileşenlerinin ikili sinercisiminin quadratik katsayısıdır. (2.2.3c) kübik formda, ikili karmanın sinercismi  $\gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)$ ,  $\gamma_{ij}$  katsayısı da  $i$  ve  $j$  bileşenlerinin ikili sinercisiminin katsayısıdır. (2.2.3c) denkleminde  $i$ ,  $j$  ve  $k$  bileşenlerinin üçlü karmalarının sinercismi ise

$$\begin{aligned} & [\beta_{ij} x_i x_j + \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)] + [\beta_{ik} x_i x_k + \gamma_{ik} x_i x_k (x_i - x_k)] + [\beta_{jk} x_j x_k + \gamma_{jk} x_j x_k (x_j - x_k)] \\ & + \beta_{ijk} x_i x_j x_k \end{aligned}$$

dir.  $i$  saf bileşeninin yanıtı  $\eta_i$ ,  $i$  ve  $j$  bileşenlerin 1:1 (birebir) ikili karmalarının yanıtı  $\eta_{ij}$ ,  $i$ ,  $j$  ve  $k$  bileşenlerinin 1:1:1 üçlü karmalarının yanıtı  $\eta_{ijk}$ ,  $i$  ve  $j$  bileşenlerinin 2:1 ve 1:2 ikili karmaları için yanıt sırayla  $\eta_{ijj}$  ve  $\eta_{iij}$  dir. {q,2}

latisindeki  $\beta_{ij}$  terimini elde etmek için,  $x_i = x_j = \frac{1}{2}$  ve  $\eta = \eta_{ij}$  ifadelerini (2.3)

formlarında yerine yazılır ve

$$\eta_{ij} = \beta_i x_i + \beta_j x_j + \beta_{ij} x_i x_j = \frac{1}{2} \beta_i + \frac{1}{2} \beta_j + \frac{1}{4} \beta_{ij} \quad (2.2.4)$$

$$\beta_{ij} = 4\eta_{ij} - 2\eta_i - 2\eta_j$$

olarak bulunur. {q,3} latisinde  $\beta_{ij}$  terimini elde etmek için (2.3c) de

$x_i = \frac{2}{3}$ ,  $x_j = \frac{1}{3}$ ,  $\eta = \eta_{ijj}$  yazılır ve

$$\eta_{ijj} = \beta_i x_i + \beta_j x_j + \beta_{ij} x_i x_j + \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)$$

$$\eta_{ijj} = \frac{2}{3} \beta_i + \frac{1}{3} \beta_j + \frac{2}{9} \beta_{ij} + \frac{2}{27} \gamma_{ij} \quad (2.2.5)$$

elde edilir. Aynı denklemde  $x_i = \frac{1}{3}$ ,  $x_j = \frac{2}{3}$ ,  $\eta = \eta_{ij}$  yazılırsa,

$$\eta_{ij} = \frac{1}{3}\beta_i + \frac{2}{3}\beta_j + \frac{2}{9}\beta_{ij} - \frac{2}{27}\gamma_{ij} \quad (2.2.6)$$

elde edilir. Bu iki denlemin toplamından

$$\begin{aligned} \eta_{ij} + \eta_{ij} &= \beta_i + \beta_j + \frac{4}{9}\beta_{ij} = \eta_i + \eta_j + \frac{4}{9}\beta_{ij} \\ \beta_{ij} &= \frac{9}{4}(\eta_{ij} + \eta_{ij} - \eta_i - \eta_j) \end{aligned} \quad (2.2.7)$$

elde edilir. (2.2.5) denkleminde (2.2.4) denklemi çıkarılırsa

$$\gamma_{ij} = \frac{9}{4}(3\eta_{ij} - 3\eta_{ij} - \eta_i + \eta_j) \quad (2.2.8)$$

elde edilir.  $\beta_{ijk}$  için,  $x_i = x_j = x_k = \frac{1}{3}$  ve (2.2.3c) denkleminde  $\eta = \eta_{ijk}$  yazılırsa

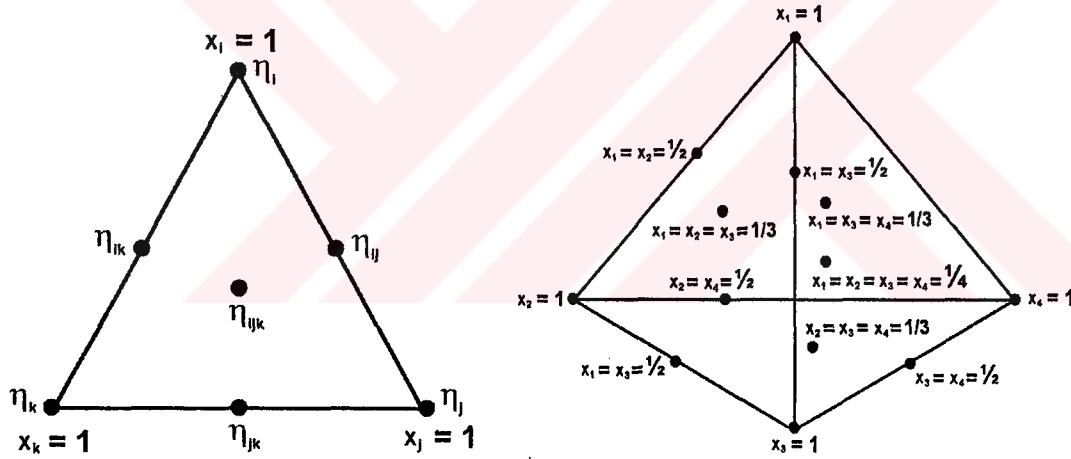
$$\begin{aligned} \eta &= \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k \\ \eta_{ijk} &= \sum_{1 \leq i \leq q} \frac{1}{3} \beta_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \frac{1}{9} \beta_{ij} + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} \gamma_{ij} \frac{1}{9} \left( \frac{1}{3} - \frac{1}{3} \right) + \sum \beta_{ijk} \frac{1}{27} \\ \eta_{ijk} &= \frac{1}{3}(\eta_i + \eta_j + \eta_k) + \frac{1}{9}(\beta_{ij} + \beta_{ik} + \beta_{jk}) + \frac{1}{27}\beta_{ijk} \\ \beta_{ijk} &= 27\eta_{ijk} - 9(\eta_i + \eta_j + \eta_k) - 3[(4\eta_{ij} - 2\eta_i - 2\eta_j) + (4\eta_{ik} - 2\eta_i - 2\eta_k) \\ &\quad - 3(4\eta_{jk} - 2\eta_j - 2\eta_k)] \\ \beta_{ijk} &= 27\eta_{ijk} - 3(\eta_i + \eta_j + \eta_k) - 12(\eta_{ij} + \eta_{ik} + \eta_{jk}) \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

bulunur.



## 2.3.Simpleks-Sentroit Tasarım

Bir  $q$  bileşenli simpleks –sentroit tasarımında ayırık noktaların sayısı  $2^q - 1$  dir. Bu gözlemler,  $q$  saf-bileşen, eşit oranlı  $\binom{q}{2}$  ikili karma, eşit oranlı  $\binom{q}{3}$  üçlü karma, ..., eşit oranlı  $q$ -lu karmadır. Bu  $(1,0,0,\dots,0)$ ' in  $q$  permutasyonu,  $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0,\dots,0)$ ' in  $\binom{q}{2}$  permutasyonu,  $(\frac{1}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3},0,\dots,0,0)$ ' in  $\binom{q}{3}$  permutasyonu, ..., sonuç olarak hepsinin merkez noktası  $(\frac{1}{q},\frac{1}{q},\frac{1}{q},\dots,\frac{1}{q},\frac{1}{q})$ ' in  $q$ -lu karma sayısıdır. Yani simpleks-sentroit tasarım tüm bileşenlerin eşit değerler aldığı tasarım noktalarını içinde bulunduran tasarımlardır. Böyle tasarımlar  $(q-1)$ -boyutlu simpleksin merkezinde ve  $(q-1)$ -boyutlu simpleksi kapsayan bütün çok-boyutlu simplekslerin merkezine yerleşir. Şekil 2.2 de 3-bileşenli ve 4-bileşenli simpleks–sentroit tasarımlar gösterilmiştir.



(a) 3-bileşenli simpleks-sentroit

(b) 4-bileşenli simpleks-sentroit

Şekil 2.2: (a) ve (b), 3-bileşenli ve 4-bileşenli simpleks-sentroit tasarımıdır.

Yanıt üzerindeki veriler simpleks-sentroit tasarımının noktalarında toplanmıştır. Bu noktalara karşılık gelen polinomun denklemi,

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j<k} \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \dots + \beta_{12\dots q} x_1 x_2 \dots x_q \quad (2.3.1)$$

dir. Eğer yanıt  $\eta$ , (2.3.1) denklemini gerektirirse,  $\beta$  katsayıları simpleks-sentroit tasarımının  $2^q - 1$  noktalarındaki  $\eta$ ' nün değerleriyle belirlenir. (2.3.1) denklemdeki  $\beta_i$  parametresi saf bileşene göre beklenen değeri gösterir ve  $i$  bileşenin lineer karışım değeridir. Denklemin kalan kısmı da sinercisim olarak adlandırılır. (2.3.1) denklemde  $\beta_{ij}$ ,  $i$  ve  $j$  bileşenleri için ikili sinercisim kuadratik katsayısı,  $\beta_{ijk}$ ,  $i, j$  ve  $k$  bileşenleri için üçlü sinercisim kübik katsayısıdır.

Simpleks-sentroit tasarımı üzerindeki, (2.3.1) yanıt denkleminin bireysel terimlerini açıklamanın başka bir yolu,  $\beta_i x_i$ 'nin  $i$ .saf bileşenin yanıtını veren  $i$ .terimden başka simpleksin köşe noktasındaki yanıtı etkilemediğini göstermek;  $\beta_{ij} x_i x_j$  teriminin, gerekli sinercimsi veren, orta noktadaki yanıtı ayarlayan  $i$ . ve  $j$ . köşeleri birleştiren kenar haricindeki hiçbir kenar üzerindeki yanıtı etkilemediğini göstermek;  $\beta_{ijk} x_i x_j x_k$  teriminin 1. ve 2. derece terimlerle ortaya çıkmayan parçaları veren merkezdeki yanıtı ayarlayan  $i, j$ . ve  $k$ . köşelerle ölçülen yüzün dışında hiçbir iki boyutlu yüzey üzerindeki yanıtı etkilemediğini göstermektir.

(2.3.1) denkleminde bir  $\beta_0$  sabit katsayı eklenirse, elde edilen denklem  $2^q$  gözlemlili olur.  $\beta_0 = \beta_0(x_1 + x_2 + \dots + x_q)$  karma denemede lineer terimleri içine alır ve böylece  $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_q$  katsayıları regresyon denkleminde

$$\sum_{1 \leq i \leq q} (\beta_0 + \beta_i) x_i$$

şeklinde olur. (2.3.1) denklemdeki  $(2^q - 1)$  tane  $\beta$  katsayısı simpleks-sentroit tasarımındaki  $(2^q - 1)$  noktadaki yanıtlarla belirtilir.

$i$ .saf bileşen için yanıt  $\eta_i$  ise

$$\eta = \eta_i, \quad x_i = 1, \quad x_j = 0 \quad i \neq j \quad (2.3.2)$$

$i$  ve  $j$  bileşenlerinin eşit oranlı ikili karmaları için yanıt  $\eta_{ij}$  ise

$$\eta = \eta_{ij}, \quad x_i = x_j = \frac{1}{2}, \quad x_k = 0, \quad k \neq i, j \quad (2.3.3)$$

$i, j$  ve  $k$  bileşenlerinin eşit oranlı üçlü karmaları için yanıt  $\eta_{ijk}$  ise

$$\eta = \eta_{ijk} \quad x_i = x_j = x_k = \frac{1}{3}, \quad x_m = 0, \quad m \neq i, j, k \quad (2.3.4)$$

şeklindedir. Genel olarak  $i_1, i_2, \dots, i_r$  bileşenlerinin eşit oranlı karmaları için yanıt  $\eta_{i_1 i_2 \dots i_r}$  ise

$$\eta = \eta_{i_1 i_2 \dots i_r} \quad x_{i_1} = x_{i_2} = \dots = x_{i_r} = \frac{1}{r}, \quad x_i = 0, \quad i \neq i_1, i_2, \dots, i_r \quad (2.3.5)$$

şeklinde yazılır. (2.3.2) eşitliği (2.3.1) de yerine yazıldığında

$$\beta_i = \eta_i \quad (2.3.6)$$

ve (2.3.3) eşitliği (2.3.1) de yerine yazıldığında

$$\begin{aligned} \eta &= \sum \beta_i x_i + \sum \beta_{ij} x_i x_j \\ &= \beta_i x_i + \beta_j x_j + \beta_{ij} x_i x_j \\ \eta_{ij} &= 2^{-1}(\beta_i + \beta_j) + 2^{-2} \beta_{ij} \\ \eta_{ij} &= 2^{-1}(\eta_i + \eta_j) + 2^{-2} \beta_{ij} \\ \beta_{ij} &= 2 \{ 2^1 \eta_{ij} - 1^1 (\eta_i + \eta_j) \} \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

olur. (2.3.4) eşitliği (2.3.1) de yerine yazıldığında da

$$\begin{aligned} \eta &= \sum \beta_i x_i + \sum \beta_{ij} x_i x_j + \sum \beta_{ijk} x_i x_j x_k \\ \eta_{ijk} &= 3^{-1}(\beta_i + \beta_j + \beta_k) + 3^{-2}(\beta_{ij} + \beta_{ik} + \beta_{jk}) + 3^{-3} \beta_{ijk} \\ \eta_{ijk} &= 3^{-1}(\eta_i + \eta_j + \eta_k) + 3^{-2} 4(\eta_{ij} + \eta_{ik} + \eta_{jk}) - 3^{-2} 4(\eta_i + \eta_j + \eta_k) \\ &\quad + 3^{-3} \beta_{ijk} \\ 3^{-3} \beta_{ijk} &= \eta_{ijk} - (3^{-1} - 3^{-2} 4(\eta_i + \eta_j + \eta_k)) - 3^{-2} 4(\eta_{ij} + \eta_{ik} + \eta_{jk}) \\ \beta_{ijk} &= 3 \{ 3^2 \eta_{ijk} - 2^2 (\eta_{ij} + \eta_{ik} + \eta_{jk}) + 1^2 (\eta_i + \eta_j + \eta_k) \} \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

elde edilir.

$S_r$ ,  $\{1,2,\dots,q\}$  kümesinin  $r$  elemanının  $\{i_1, i_2, \dots, i_r\}$  kümelerinden herhangi birini göstermek üzere,  $\ell(S_r)$ ,  $S_r$ 'deki  $r$  bileşenden eşit oranlı  $t$ -li  $\binom{r}{t}$  karmanın bütün yanıtlarının toplamı olsun. Buna göre genel denklem:

$$\begin{aligned} \beta_{S_r} &= r\{r^{-1}\ell(S_r) - (r-1)^{r-1}\ell_{r-1}(S_r) + (r-2)^{r-1}\ell_{r-2}(S_r) - \dots \\ &\quad + (-1)^{r-1}1^{r-1}\ell_1(S_r)\} \\ \beta_{S_r} &= r\sum_{t=1}^r (-1)^{r-t} t^{r-1} \ell_t(S_r) \end{aligned} \quad (2.3.9)$$

şeklinde olacaktır.

#### 2.4. Ekstrem Vertiks Tasarım (Uçdeğer Tasarım)

Uç değer tasarımı, simpleks içinde daha küçük bir uzay içeren karma tasarımıdır. Eğer karma içinde bulunan bileşenlerin alt ve üst sınırlarında ek kısıtlamalar varsa bu tasarım kullanılır. Bileşenler üzerinde alt veya üst sınır kısıtlaması veya hem alt hem üst sınır kısıtlaması bulunabilir.  $i$ . bileşen üzerindeki kısıtlamalarda, alt sınır  $L_i$ , üst sınır  $U_i$  olmak üzere bu kısıtlama:

$$L_i \leq x_i \leq U_i, \quad i=1,2,\dots,q \quad (2.4.1)$$

şeklindedir. Kısıtlamalarla oluşan yeni bölge simpleks olacağından yeni bölge üzerinde 0 ile 1 arasında değerler alan yeni bileşenler tanımlamak mümkündür. Bu yeni bileşenlere pseudo-bileşenler denir ve bu bileşenler,

$$\begin{aligned} R'_i &> 1 & i=1,2,\dots,q \\ \sum_{i \neq j}^q R'_j &< 1 & i=1,2,\dots,q \end{aligned}$$

$$R'_j = \frac{(U_j - L_j)}{\left(1 - \sum_{k=1}^q L_k\right)} \quad (2.4.2)$$

şeklinde tanımlanır.

Örneğin alttan sınırlı 4-bileşen,

$$\sum_{i=1}^q x_i = 1 \text{ ve } L_i \leq x_i \leq 1, \quad i=1,2,\dots,q \text{ için}$$

$$0.23 \leq x_1, \quad 0.10 \leq x_2, \quad 0.05 \leq x_3, \quad 0.08 \leq x_4$$

olsun. Bunların pseudo-bileşenleri:

$$x_1^* = \frac{x_1 - L_1}{1 - \sum_{i=1}^q L_i} = \frac{x_1 - 0.23}{1 - 0.46} = \frac{x_1 - 0.23}{0.54}$$

$$x_2^* = \frac{x_2 - 0.10}{0.54}, \quad x_3^* = \frac{x_3 - 0.05}{0.54}, \quad x_4^* = \frac{x_4 - 0.08}{0.54}$$

şeklindedir. Tasarım pseudo-bileşenler cinsinden de kurulabilir, bu nedenle  $x_i$  tasarım noktalarını  $x_i^*$  terimleri olarak yazılarak,

$$x_i = L_i + \left(1 - \sum_{i=1}^q L_i\right)x_i^* \quad (2.4.3)$$

dönüşümü kullanıldığında orijinal bileşenlere dönüşüm yapılır.

## 2.5.Çiftli -Latis

**Tanım 2.5.1:** İlk olarak  $x_1, x_2, \dots, x_p$  bileşenlerinin kümesinin simpleks-latisi ve ikinci olarak  $z_1, z_2, \dots, z_p$  bileşenlerinin kümesinin simpleks-latisi seçildiğinde, sırayla  $c_1$  ve  $c_2$  oranlı birinci simpleks-latisin ve ikinci simpleks-latisin tüm karmalarının karışımlarıyla üretilebilen karışımlar varsa, bunlar “*çiftli- latis*” olarak adlandırılır.

Örneğin, birinci bileşenlerin kümesi için  $\{p,3\}$  simpleks-latisinden ve ikinci bileşenler kümesi için  $\{q,2\}$  simpleks-latisinden  $\{p,q;3,2\}$  çiftli-latis elde edilir.

$\{p,3\}$  simpleks-latisi,  $x_i=1$  oranlı  $p$  saf karmaları  $\eta_{iii}$  ( $1 \leq i \leq p$ ),  $x_i = \frac{2}{3}$ ,  $x_j = \frac{1}{3}$  oranlı  $\binom{p}{2}$  ikili  $\eta_{ijj}$ ,  $\eta_{jij}$  ( $1 \leq i < j \leq p$ ) ve  $x_i = x_j = x_k = \frac{1}{3}$  oranlı  $\binom{p}{3}$  üçlü karmaları  $\eta_{ijk}$  ( $1 \leq i < j < k \leq p$ ) kapsar.  $\{q,2\}$  simpleks-latis,  $z_i$  oranlı  $q$  saf karmaları,  $z_i = z_j = \frac{1}{2}$  oranlı  $\binom{q}{2}$  ikili karmaları kapsar. Sırayla  $\alpha_1$  ve  $\alpha_2$  oranlı  $\{p,3\}$  simpleks-latisin ve  $\{q,2\}$  simpleks-latisin tüm karmaları karıştırıldığında yeni karışım olan  $\{p,q;3,2\}$  çiftli-latisi için Tablo 2.5’ deki karmaları elde edilir.

| Karma sayısı                | Karmaların Yanıtı  | Karmaların Bileşenlerinin Oranları  |
|-----------------------------|--|---|
| $pq$                        | $\eta_{iii,jj}$ , ( $1 \leq i \leq p, 1 \leq j \leq q$ )             | $X_i = c_1 (x_i = 1), Z_j = c_2 (z_j = 1)$  |
| $p \binom{q}{2}$            | $\eta_{iii,jk}$ , ( $1 \leq i \leq p, 1 \leq j < k \leq q$ )         | $X_i = c_1 (x_i = 1), Z_j = c_2 = Z_k (z_j = z_k = \frac{1}{2})$  |
| $\binom{p}{2} q$            | $\eta_{ijj,kk}$ , ( $1 \leq i < j \leq p, 1 \leq k \leq q$ )         | $X_i = c_1 (x_i = \frac{2}{3}), X_j = c_1 (x_j = \frac{1}{3}), Z_k = c_2 (z_k = 1)$                       |
| $\binom{p}{2} q$            | $\eta_{jij,kk}$ , ( $1 \leq i < j \leq p, 1 \leq k \leq q$ )         | $X_i = c_1 (x_i = \frac{1}{3}), X_j = c_1 (x_j = \frac{2}{3}), Z_k = c_2 (z_k = 1)$                       |
| $\binom{p}{2} \binom{q}{2}$ | $\eta_{ijj,kl}$ , ( $1 \leq i < j \leq p, 1 \leq k < l \leq q$ )     | $X_i = c_1 (x_i = \frac{2}{3}), X_j = c_1 (x_j = \frac{1}{3}), Z_k = Z_l = c_2 (z_k = z_l = \frac{1}{2})$ |
| $\binom{p}{2} \binom{q}{2}$ | $\eta_{jij,kl}$ , ( $1 \leq i < j \leq p, 1 \leq k < l \leq q$ )     | $X_i = c_1 (x_i = \frac{1}{3}), X_j = c_2 (x_j = \frac{2}{3}), Z_k = Z_l = c_2 (z_k = z_l = \frac{1}{2})$ |
| $\binom{p}{3} q$            | $\eta_{ijk,ll}$ , ( $1 \leq i < j < k \leq p, 1 \leq l \leq q$ )     | $X_i = X_j = X_k = c_1 (x_i = x_j = x_k = \frac{1}{3}), Z_l = c_2 (z_l = 1)$                              |
| $\binom{p}{3} \binom{q}{2}$ | $\eta_{ijk,lm}$ , ( $1 \leq i < j < k \leq p, 1 \leq l < m \leq q$ ) | $X_i = X_j = X_k = c_1 (x_i = x_j = x_k = \frac{1}{3})$<br>$Z_l = Z_m = c_2 (z_l = z_m = \frac{1}{2})$    |

Tablo 2.5:  $\{p,q;3,2\}$  çiftli-latisi için karmalar

### 2.5.1.Çiftli-Latis Polinomları

Burada çiftli-latis için uygun regresyon fonksiyonu bulmak gerekir. Uygun regresyon fonksiyonu, çiftli latis noktalarıyla aynı katsayıya sahip bir regresyon olmalı, ve çiftli-latisteki her karma için yanıtın deneysel ortalamasının kullanılmasıyla regresyon fonksiyonundaki katsayıların bir tek tahminini elde etmek mümkün olmalıdır. Çiftli-latisi kapsayan simpleks-latislere benzer kanonik polinomların çarpımlarından elde edilen uygun regresyon fonksiyonu kestirilir. Örneğin:  $\{p,q;3,2\}$  çiftli-latisi için uygun regresyon fonksiyonu sırayla  $\{p,3\}$  simpleks-latis ve  $\{q,2\}$  simpleks-latisine uygun kanonik polinomların çarpımlarından elde edilir.  $\{p,3\}$  simpleks-latisine uygun kanonik polinom,

$$\eta = \sum_{i=1}^p \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq p} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leq i < j \leq p} \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{1 \leq i < j < k \leq p} \beta_{ijk} x_i x_j x_k \quad (2.5.1)$$

şeklindedir. Katsayıların tahmin edilmesiyle polinom

$$\tilde{\eta} = \sum_{i=1}^p a_{iii} \hat{\eta}_{iii} + \sum_{1 \leq i < j \leq p} (a_{ijj} \hat{\eta}_{ijj} + a_{jij} \hat{\eta}_{jij}) + \sum a_{ijk} \hat{\eta}_{ijk}$$

şeklinde yazılır. Burada

$$a_{iii} = \frac{1}{2} x_i (3x_i - 2)(3x_i - 1)$$

$$a_{ijj} = \frac{9}{2} x_i x_j (x_i - 1)$$

$$a_{jij} = \frac{9}{2} x_i x_j (x_j - 1)$$

$$a_{ijk} = 27 x_i x_j x_k$$

(2.5.2)

dir.

$\{q,2\}$  simpleks-latise uygun polinom

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i z_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} z_i z_j \quad (2.5.3)$$

olup katsayılar tahmininden sonra denklem,

$$\tilde{\eta} = \sum_{i=1}^q b_{ii} \hat{\eta}_{ii} + \sum_{1 \leq i < j \leq q} b_{ij} \hat{\eta}_{ij} \quad (2.5.4)$$

şeklinde yazılır. Burada  $b_{ii} = z_i(2z_i - 1)$ ,  $b_{ij} = 4z_i z_j$  şeklindedir. (2.5.1) ve (2.5.3) polinomlarının çarpılmasıyla ve katsayı sonuçlarının basit katsayılarla değiştirilmesiyle,  $\{p,q;3,2\}$  çiftli-latisi için,

$$\begin{aligned} \eta = & \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^q \beta_{i,j} x_i z_j + \sum_{i=1}^p \sum_{1 \leq j < k \leq q} \beta_{i,jk} x_i z_j z_k + \sum_{1 \leq i < j \leq p} \sum_{k=1}^q \beta_{ij,k} x_i x_j z_k + \sum_{1 \leq i < j \leq p} \sum_{1 \leq k < l \leq q} \beta_{ij,kl} x_i x_j z_k z_l \\ & + \sum_{1 \leq i < j \leq p} \sum_{k=1}^q \gamma_{ij,k} x_i x_j (x_i - x_j) z_k + \sum_{1 \leq i < j \leq p} \sum_{1 \leq k < l \leq q} \gamma_{ij,kl} x_i x_j (x_i - x_j) z_k z_l \\ & + \sum_{1 \leq i < j < k \leq p} \sum_{l=1}^q \beta_{ijk,l} x_i x_j x_k z_l + \sum_{1 \leq i < j < k \leq p} \sum_{1 \leq l < m \leq q} \beta_{ijk,lm} x_i x_j x_k z_l z_m \end{aligned} \quad (2.5.5)$$

regresyon fonksiyonu elde edilir.

Yukarıda gösterilen regresyon fonksiyonlarının çiftli-latis için uygun olduğu bu regresyon fonksiyonlarının katsayılar tahminlerinden elde edilir.

### 2.5.2. $\{p,q;3,2\}$ Çiftli-latisinin Katsayılarının Tahmini

(2.5.5) regresyon fonksiyonu sıfırdan farklı her  $c_1$  ve  $c_2$  ( $c_1 + c_2 = 1$ ) için kullanılırsa,  $c_1$  ve  $c_2$  nin elde edilen değerlerinde sırayla,  $\eta_{iii,jj}$ ,  $\eta_{iii,jk}$ ,  $\eta_{ijj,kk}$ ,  $\eta_{ijj,kl}$ ,  $\eta_{ijj,kk}$ ,  $\eta_{ijj,kl}$ ,  $\eta_{ijk,ll}$ ,  $\eta_{ijk,lm}$  için  $r_{iii,jj}$ ,  $r_{iii,jk}$ ,  $r_{ijj,kk}$ ,  $r_{ijj,kl}$ ,  $r_{ijj,kk}$ ,  $r_{ijj,kl}$ ,  $r_{ijk,ll}$ ,  $r_{ijk,lm}$  gözlemleri bulunur.  $\hat{\eta}$  deneysel ortalamaları,  $x_i$  ve  $z_i$  oranlarının uygun değerleri (2.5.5) denkleminde yerine yazılırsa,

$$\hat{\eta}_{iii,jj} = \hat{\beta}_{i,j} \quad (2.5.6)$$



$$\hat{\eta}_{ii,jk} = \frac{1}{2}(\hat{\beta}_{i,j} + \hat{\beta}_{i,k}) + \frac{1}{4}\hat{\beta}_{i,jk} \quad (2.5.7)$$

$$\hat{\eta}_{ij,kk} = \frac{1}{3}(2\hat{\beta}_{i,k} + \hat{\beta}_{j,k}) + \frac{2}{9}\hat{\beta}_{ij,k} + \frac{2}{27}\hat{\gamma}_{ij,k} \quad (2.5.8)$$

$$\hat{\eta}_{ij,kk} = \frac{1}{3}(\hat{\beta}_{i,k} + 2\hat{\beta}_{j,k}) + \frac{2}{9}\hat{\beta}_{ij,k} - \frac{2}{27}\hat{\gamma}_{ij,k} \quad (2.5.9)$$

$$\begin{aligned} \hat{\eta}_{ij,kl} &= \frac{1}{6}(2\hat{\beta}_{i,k} + 2\hat{\beta}_{i,l} + \hat{\beta}_{j,k} + \hat{\beta}_{j,l}) + \frac{1}{12}(2\hat{\beta}_{i,kl} + \hat{\beta}_{j,kl}) + \frac{1}{9}(\hat{\beta}_{ij,k} + \hat{\beta}_{ij,l}) \\ &\quad + \frac{1}{18}(\hat{\beta}_{ij,kl}) + \frac{1}{27}(\hat{\gamma}_{ij,k} + \hat{\gamma}_{ij,l}) + \frac{1}{54}\hat{\gamma}_{ij,kl} \end{aligned} \quad (2.5.10)$$

$$\begin{aligned} \hat{\eta}_{ij,kl} &= \frac{1}{6}(\hat{\beta}_{i,k} + \hat{\beta}_{i,l} + 2\hat{\beta}_{j,k} + 2\hat{\beta}_{j,l}) + \frac{1}{12}(\hat{\beta}_{i,kl} + 2\hat{\beta}_{j,kl}) + \frac{1}{9}(\hat{\beta}_{ij,k} + \hat{\beta}_{ij,l}) \\ &\quad + \frac{1}{18}\hat{\beta}_{ij,kl} - \frac{1}{27}(\hat{\gamma}_{ij,k} + \hat{\gamma}_{ij,l}) - \frac{1}{54}\hat{\gamma}_{ij,kl} \end{aligned} \quad (2.5.11)$$

$$\hat{\eta}_{ijk,l} = \frac{1}{3}(\hat{\beta}_{i,l} + \hat{\beta}_{j,l} + \hat{\beta}_{k,l}) + \frac{1}{9}(\hat{\beta}_{ij,l} + \hat{\beta}_{ik,l} + \hat{\beta}_{jk,l}) + \frac{1}{27}\hat{\beta}_{ijk,l} \quad (2.5.12)$$

$$\begin{aligned} \hat{\eta}_{ijk,l} &= \frac{1}{6}(\hat{\beta}_{i,l} + \hat{\beta}_{i,m} + \hat{\beta}_{j,l} + \hat{\beta}_{j,m} + \hat{\beta}_{k,l} + \hat{\beta}_{k,m}) + \frac{1}{12}(\hat{\beta}_{i,lm} + \hat{\beta}_{j,lm} + \hat{\beta}_{k,lm}) \\ &\quad + \frac{1}{18}(\hat{\beta}_{ij,l} + \hat{\beta}_{ij,m} + \hat{\beta}_{ik,l} + \hat{\beta}_{ik,m} + \hat{\beta}_{jk,l} + \hat{\beta}_{jk,m}) + \frac{1}{36}(\hat{\beta}_{ij,lm} + \hat{\beta}_{ik,lm} + \hat{\beta}_{jk,lm}) \\ &\quad + \frac{1}{54}(\hat{\beta}_{ijk,l} + \hat{\beta}_{ijk,m}) + \frac{1}{108}\hat{\beta}_{ijk,lm} \end{aligned} \quad (2.5.13)$$

normal denklemleri elde edilir. Yukarıdaki denklem sistemlerinin çözümü ile

$$\hat{\beta}_{i,j} = \hat{\eta}_{iii,ij} \quad (2.5.14)$$

$$\hat{\beta}_{i,jk} = 4\hat{\eta}_{iii,jk} - 2(\hat{\eta}_{iii,jj} + \hat{\eta}_{iii,kk}) \quad (2.5.15)$$

katsayıların en küçük kareler tahmini elde edilir. (2.5.8) ile (2.5.9) denklemlerinin toplanmasıyla

$$\begin{aligned} \hat{\eta}_{ij,kk} + \hat{\eta}_{ijj,kk} &= \hat{\beta}_{i,k} + \hat{\beta}_{j,k} + \frac{4}{9}\hat{\beta}_{ij,k} \\ \frac{4}{9}\hat{\beta}_{ij,k} &= (\hat{\eta}_{ij,kk} + \hat{\eta}_{ijj,kk}) + (\hat{\beta}_{i,k} + \hat{\beta}_{j,k}) \\ \hat{\beta}_{ij,k} &= \frac{9}{4}\{(\hat{\eta}_{ij,kk} + \hat{\eta}_{ijj,kk}) - (\hat{\eta}_{iii,kk} + \hat{\eta}_{jjj,kk})\} \end{aligned} \quad (2.5.16)$$

elde edilir. (2.5.8) denkleminde (2.5.9) denklemi çıkarıldığında,

$$\begin{aligned} \hat{\eta}_{ij,kk} - \hat{\eta}_{ijj,kk} &= \frac{1}{3}\hat{\beta}_{i,k} - \frac{1}{3}\hat{\beta}_{j,k} + \frac{4}{27}\hat{\gamma}_{ij,k} \\ \hat{\gamma}_{ij,k} &= \frac{9}{4}\{3(\hat{\eta}_{ij,kk} - \hat{\eta}_{ijj,kk}) - (\hat{\eta}_{iii,kk} - \hat{\eta}_{jjj,kk})\} \end{aligned} \quad (2.5.17)$$

elde edilir. (2.5.10) ile (2.5.11) denklemleri toplandığında

$$\begin{aligned} \hat{\eta}_{ij,kl} + \hat{\eta}_{ijj,kl} &= \frac{1}{2}(\hat{\beta}_{i,k} + \hat{\beta}_{i,l} + \hat{\beta}_{j,k} + \hat{\beta}_{j,l}) + \frac{1}{4}(\hat{\beta}_{i,kl} + \hat{\beta}_{j,kl}) + \frac{2}{9}(\hat{\beta}_{ij,k} + \hat{\beta}_{ij,l}) \\ &\quad + \frac{1}{9}\hat{\beta}_{ij,kl} \\ \hat{\beta}_{ij,kl} &= 9(\hat{\eta}_{ij,kl} + \hat{\eta}_{ijj,kl}) - \frac{9}{2}(\hat{\beta}_{i,k} + \hat{\beta}_{i,l} + \hat{\beta}_{j,k} + \hat{\beta}_{j,l}) - \frac{9}{4}(\hat{\beta}_{i,kl} + \hat{\beta}_{j,kl}) \\ &\quad - 2(\hat{\beta}_{ik,k} + \hat{\beta}_{ij,l}) \\ \hat{\beta}_{ij,kl} &= 9(\hat{\eta}_{ij,kl} + \hat{\eta}_{ijj,kl}) - \frac{9}{2}(\hat{\eta}_{iii,kk} + \hat{\eta}_{iii,ll} + \hat{\eta}_{jjj,kk} + \hat{\eta}_{jjj,ll}) \\ &\quad - \frac{9}{4}[4\hat{\eta}_{iii,kl} + 4\hat{\eta}_{jjj,kl} - 2(\hat{\eta}_{iii,kk} + \hat{\eta}_{iii,ll}) - 2(\hat{\eta}_{jjj,kk} + \hat{\eta}_{jjj,ll})] - \\ &\quad - 2\left[\frac{9}{4}\{(\hat{\eta}_{ij,kk} + \hat{\eta}_{ijj,kk}) - (\hat{\eta}_{iii,kk} + \hat{\eta}_{jjj,kk})\}\right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 2 \left[ \frac{9}{4} \{ (\hat{\eta}_{ij, //} + \hat{\eta}_{ij, //}) - (\hat{\eta}_{iii, //} + \hat{\eta}_{jj, //}) \} \right] \\
\hat{\beta}_{ij, kl} &= \frac{9}{2} \{ 2(\hat{\eta}_{ij, kl} + \hat{\eta}_{ij, kl}) + (\hat{\eta}_{iii, kk} + \hat{\eta}_{iii, //} + \hat{\eta}_{jj, kk} + \hat{\eta}_{jj, //}) - 2(\hat{\eta}_{iii, kl} + \hat{\eta}_{jj, kl}) \} \\
& - \frac{9}{2} \{ (\hat{\eta}_{ij, kk} + \hat{\eta}_{ij, kk} + \hat{\eta}_{ij, //} + \hat{\eta}_{ij, //}) \} \quad (2.5.18)
\end{aligned}$$

bulunur. (2.5.10) denkleminde (2.5.11) denklemi çıkarıldığında

$$\begin{aligned}
\hat{\eta}_{ij, kl} - \hat{\eta}_{ij, kl} &= \frac{1}{6} (\hat{\beta}_{i, k} + \hat{\beta}_{i, l} - \hat{\beta}_{j, k} - \hat{\beta}_{j, l}) + \frac{2}{27} (\hat{\gamma}_{ij, k} + \hat{\gamma}_{ij, l}) \\
& - (\hat{\eta}_{ij, kk} + \hat{\eta}_{ij, kk} + \hat{\eta}_{ij, //} + \hat{\eta}_{ij, //}) \\
\hat{\gamma}_{ij, kl} &= 27(\hat{\eta}_{ij, kl} - \hat{\eta}_{ij, kl}) - \frac{27}{6} (\hat{\beta}_{i, k} + \hat{\beta}_{i, l} - \hat{\beta}_{j, k} - \hat{\beta}_{j, l}) \\
& - 2 \left[ \frac{27}{4} (\hat{\eta}_{ij, kk} - \hat{\eta}_{ij, kk}) - \frac{9}{4} (\hat{\eta}_{iii, kk} - \hat{\eta}_{iii, kk}) \right. \\
& + \left. \frac{27}{4} (\hat{\eta}_{ij, //} - \hat{\eta}_{ij, //}) - \frac{9}{4} (\hat{\eta}_{iii, //} - \hat{\eta}_{jj, //}) \right] - \frac{27}{12} [4\hat{\eta}_{iii, kl} - \\
& - 2(\hat{\eta}_{iii, kk} + \hat{\eta}_{iii, //}) - 4\hat{\eta}_{jj, kl} + 2(\hat{\eta}_{jj, kk} + \hat{\eta}_{jj, //})] \\
\hat{\gamma}_{ij, kl} &= \frac{9}{2} \{ 6(\hat{\eta}_{ij, kl} - \hat{\eta}_{ij, kl}) - 3(\hat{\eta}_{ij, kk} + \hat{\eta}_{ij, //} - \hat{\eta}_{ij, kk} - \hat{\eta}_{ij, //}) - 2(\hat{\eta}_{iii, kl} - \hat{\eta}_{jj, kl}) \\
& + (\hat{\eta}_{iii, kk} + \hat{\eta}_{iii, //} - \hat{\eta}_{jj, kk} - \hat{\eta}_{jj, //}) \} \quad (2.5.19)
\end{aligned}$$

elde edilir. (2.5.12) denklemi ele alınırsa,

$$\begin{aligned}
\hat{\eta}_{ijk, //} &= \frac{1}{3} (\hat{\eta}_{iii, //} + \hat{\eta}_{jj, //} + \hat{\eta}_{kk, //}) + \frac{1}{9} \frac{9}{4} [(\hat{\eta}_{ij, //} + \hat{\eta}_{ij, //} + \hat{\eta}_{iik, //} + \hat{\eta}_{ikk, //} + \hat{\eta}_{jjk, //} + \hat{\eta}_{jkk, //}) \\
& - (2\hat{\eta}_{iii, //} + 2\hat{\eta}_{jj, //} + 2\hat{\eta}_{kk, //})] + \frac{1}{27} \hat{\beta}_{ijk, l} \\
\hat{\eta}_{ijk, //} &= -\frac{1}{6} (\hat{\eta}_{iii, //} + \hat{\eta}_{jj, //} + \hat{\eta}_{kk, //}) + \frac{1}{4} (\hat{\eta}_{ij, //} + \hat{\eta}_{ij, //} + \hat{\eta}_{iik, //} + \hat{\eta}_{ikk, //} + \hat{\eta}_{jjk, //} + \hat{\eta}_{jkk, //}) \\
& + \frac{1}{27} \hat{\beta}_{ijk, l}
\end{aligned}$$

$$\hat{\beta}_{ijk,l} = \frac{9}{4} \{ 12\hat{\eta}_{ijk,ll} + 3(\hat{\eta}_{ij,ll} + \hat{\eta}_{i,j,ll} + \hat{\eta}_{iik,ll} + \hat{\eta}_{ikk,ll} + \hat{\eta}_{ijk,ll} + \hat{\eta}_{jkk,ll}) \} \\ + \frac{9}{4} 2(\hat{\eta}_{iii,ll} + \hat{\eta}_{jj,ll} + \hat{\eta}_{kk,ll}) \quad (2.5.20)$$

bulunur. (2.5.13) denklemini ele alınırsa

$$\hat{\eta}_{ijk,m} = \frac{1}{6} (\hat{\eta}_{iii,ll} + \hat{\eta}_{iii,mm} + \hat{\eta}_{jj,ll} + \hat{\eta}_{jj,mm} + \hat{\eta}_{kk,ll} + \hat{\eta}_{kk,mm}) \\ + \frac{1}{18} (\hat{\beta}_{ij,l} + \hat{\beta}_{ij,m} + \hat{\beta}_{ik,l} + \hat{\beta}_{ik,m} + \hat{\beta}_{jk,l} + \hat{\beta}_{jk,m}) \\ \hat{\eta}_{ijk,m} = \frac{1}{6} (\hat{\eta}_{iii,ll} + \hat{\eta}_{iii,mm} + \hat{\eta}_{jj,ll} + \hat{\eta}_{jj,mm} + \hat{\eta}_{kk,ll} + \hat{\eta}_{kk,mm}) \\ + \frac{1}{12} [-2(\hat{\eta}_{iii,ll} + \hat{\eta}_{iii,mm} + \hat{\eta}_{jj,ll} + \hat{\eta}_{jj,mm} + \hat{\eta}_{kk,ll} + \hat{\eta}_{kk,mm}) \\ + 4(\hat{\eta}_{iii,m} + \hat{\eta}_{jj,m} + \hat{\eta}_{kk,m})] \\ + \frac{1}{8} [(\hat{\eta}_{ij,ll} + \hat{\eta}_{ij,mm} + \hat{\eta}_{ij,mm} + \hat{\eta}_{ij,mm} + \hat{\eta}_{iik,ll} + \hat{\eta}_{ikk,ll} + \hat{\eta}_{iik,mm} \\ + \hat{\eta}_{ikk,mm} + \hat{\eta}_{jjk,ll} + \hat{\eta}_{jkk,ll} + \hat{\eta}_{jjk,mm} + \hat{\eta}_{jkk,mm}) - (\hat{\eta}_{iii,ll} + \hat{\eta}_{jj,ll} \\ + \hat{\eta}_{iii,mm} + \hat{\eta}_{kk,mm} + \hat{\eta}_{jj,ll} + \hat{\eta}_{kk,ll} + \hat{\eta}_{jj,mm} + \hat{\eta}_{kk,mm})] \\ + \frac{1}{8} [2(\hat{\eta}_{ij,m} + \hat{\eta}_{ik,m} + \hat{\eta}_{ikk,m} + \hat{\eta}_{jj,m} + \hat{\eta}_{jkk,m}) \\ - (\hat{\eta}_{ij,ll} + \hat{\eta}_{ij,mm} + \hat{\eta}_{ij,mm} + \hat{\eta}_{ij,mm} + \hat{\eta}_{iik,ll} \\ + \hat{\eta}_{ikk,ll} + \hat{\eta}_{iik,mm} + \hat{\eta}_{ikk,mm} + \hat{\eta}_{jjk,ll} + \hat{\eta}_{jkk,ll} + \hat{\eta}_{jjk,mm} + \hat{\eta}_{jkk,mm}) \\ - 2(\hat{\eta}_{iii,m} + \hat{\eta}_{jj,m} + \hat{\eta}_{iii,m} + \hat{\eta}_{kk,m} + \hat{\eta}_{jj,m} + \hat{\eta}_{kk,m}) \\ + 2(\hat{\eta}_{iii,ll} + \hat{\eta}_{iii,mm} + \hat{\eta}_{jj,ll} + \hat{\eta}_{jj,mm} + \hat{\eta}_{kk,ll} + \hat{\eta}_{kk,mm})] \\ + \frac{1}{54} \frac{9}{4} [12(\hat{\eta}_{ijk,ll} + \hat{\eta}_{ijk,mm}) - 3(\hat{\eta}_{ij,ll} + \hat{\eta}_{ij,mm} + \hat{\eta}_{ij,mm} + \hat{\eta}_{ij,mm} + \hat{\eta}_{iik,ll} \\ + \hat{\eta}_{ikk,ll} + \hat{\eta}_{iik,mm} + \hat{\eta}_{ikk,mm} + \hat{\eta}_{jjk,ll} + \hat{\eta}_{jkk,ll} + \hat{\eta}_{jjk,mm} + \hat{\eta}_{jkk,mm}) \\ + 2(\hat{\eta}_{iii,ll} + \hat{\eta}_{iii,mm} + \hat{\eta}_{jj,ll} + \hat{\eta}_{jj,mm} + \hat{\eta}_{kk,ll} + \hat{\eta}_{kk,mm})] + \frac{1}{108} \hat{\beta}_{ijk,m}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\beta}_{ijk,lm} = & \frac{9}{2} \left\{ 24\hat{\eta}_{ijk,lm} - 12(\hat{\eta}_{ijk,ll} - \hat{\eta}_{ijk,mm}) - 6(\hat{\eta}_{ij,lm} + \hat{\eta}_{ij,lm} + \hat{\eta}_{iik,lm} \right. \\
& + \hat{\eta}_{ikk,lm} + \hat{\eta}_{jjk,lm} + \hat{\eta}_{jkk,lm}) + 3((\hat{\eta}_{ij,ll} + \hat{\eta}_{ij,ll} + \hat{\eta}_{ij,mm} \\
& + \hat{\eta}_{ij,mm} + \hat{\eta}_{iik,ll} + \hat{\eta}_{ikk,ll} + \hat{\eta}_{iik,mm} + \hat{\eta}_{ikk,mm} + \hat{\eta}_{jjk,ll} \\
& + \hat{\eta}_{jkk,ll} + \hat{\eta}_{jjk,mm} + \hat{\eta}_{jkk,mm}) + 4(\hat{\eta}_{iii,lm} + \hat{\eta}_{ijj,lm} + \hat{\eta}_{kkk,lm}) \\
& \left. - 2(\hat{\eta}_{iii,ll} + \hat{\eta}_{iii,mm} + \hat{\eta}_{ijj,ll} + \hat{\eta}_{ijj,mm} + \hat{\eta}_{kkk,ll} + \hat{\eta}_{kkk,mm}) \right\} \quad (2.5.21)
\end{aligned}$$

bulunur.  $\beta$  ve  $\gamma$  katsayıları yerine onların en küçük kareler tahmini  $\hat{\beta}$  ve  $\hat{\gamma}$  ve diğer terimlerin yazılması ile oluşan (2.5.5) denklemde (2.5.11) yerine (2.5.21) denkleminin yazılmasıyla, tahmini yanıt varyansının daha kolay hesaplanması ve yanıtın daha kolay tahmin edilmesini sağlayan

$$\begin{aligned}
\tilde{\eta} = & \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^q a_{iii,ij} \hat{\eta}_{iii,ij} + \sum_{i=1}^p \sum_{1 \leq j < k \leq q} a_{iii,jk} \hat{\eta}_{iii,jk} \\
& + \sum_{1 \leq i < j \leq p} \sum_{k=1}^q (a_{ijj,kk} \hat{\eta}_{ijj,kk} + a_{ijj,kk} \hat{\eta}_{ijj,kk}) \\
& + \sum_{1 \leq i < j \leq p} \sum_{1 \leq k < l \leq q} (a_{ijj,kl} \hat{\eta}_{ijj,kl} + a_{ijj,kl} \hat{\eta}_{ijj,kl}) + \sum_{1 \leq i < j < k \leq p} \sum_{l=1}^q a_{ijk,ll} \hat{\eta}_{ijk,ll} \\
& + \sum_{1 \leq i < j < k \leq p} \sum_{1 \leq l < w \leq q} a_{ijk,lm} \hat{\eta}_{ijk,lm} \quad (2.5.22)
\end{aligned}$$

denklemini elde edilir. Burada

$$a_{iii,ij} = \left[ \frac{1}{2} x_i (3x_i - 1)(3x_i - 2) \right] [z_j (2z_j - 1)] = a_{iii} b_{jj} \quad (2.5.23)$$

$$a_{iii,jk} = \left[ \frac{1}{2} x_i (3x_i - 1)(3x_i - 2) \right] [4z_j z_k] = a_{iii} b_{jk} \quad (2.5.24)$$

$$a_{ijj,kk} = \left[ \frac{9}{2} x_i x_j (3x_i - 1) \right] [z_k (2z_k - 1)] = a_{ijj} b_{kk} \quad (2.5.25)$$

$$a_{ijj,kl} = \left[ \frac{9}{2} x_i x_j (3x_i - 1) \right] [4z_k z_l] = a_{ijj} b_{kl} \quad (2.5.26)$$

$$a_{ijj,kl} = \left[ \frac{9}{2} x_i x_j (3x_i - 1) \right] [4z_k z_l] = a_{ijj} b_{kl} \quad (2.5.27)$$

$$a_{ijj,kl} = \left[ \frac{9}{2} x_i x_j (3x_j - 1) \right] [4z_k z_l] = a_{ijj} b_{kl} \quad (2.5.28)$$

$$a_{ijk,ll} = [27x_i x_j x_k] [z_l (2z_l - 1)] = a_{ijk} b_{ll} \quad (2.5.29)$$

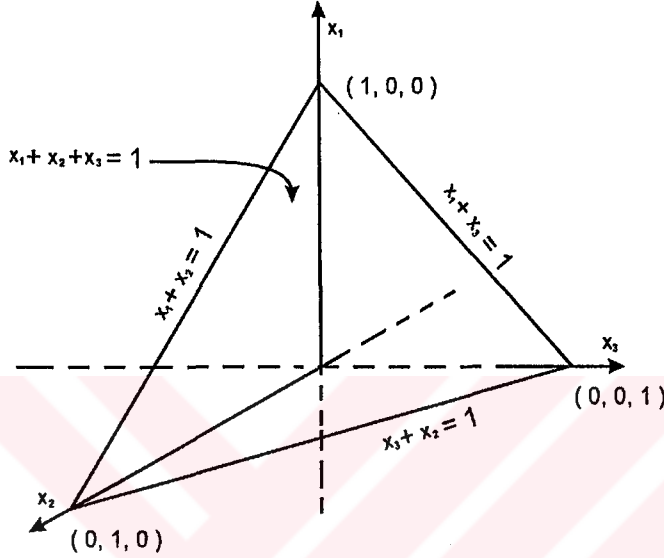
$$a_{ijk,lm} = [27x_i x_j x_k] [4z_l z_m] = a_{ijk} b_{lm} \quad (2.5.30)$$

dir.

## 2.6. Grafiksel Tasarım

### 2.6.1. Tüm Simpleks Bölge İçin Grafiksel Yaklaşım

Karma sisteminde (1.1) kısıtlaması karmanın boyutunu  $q$ ' dan  $q-1$ ' e kısıtlar. 3-bileşenli sistem için yüzey Şekil 2.3' deki gibi bir eşkenar üçgenin sınırları ve içiyle gösterilir, benzer olarak 4-bileşenli sistem için yüzey bir tetrahedron olur.



Şekil 2.3: Tüm deneysel noktaları üçgenin içinde yada üzerinde olan 3-bileşenli Simpleks bölge.

### 2.6.2. Sınırlı Bölgeler için Grafiksel Yaklaşım

Bazen karma denemelerde aşağıdaki sınırlamalara gereksinim duyulur,  $x_i$  üzerindeki sınırlama ile eklenen sınırlar bileşen oranlarının alt ve üst sınırlarında yer alır.

$$0 < L_i \leq x_i \leq U_i < 1 \quad (2.6.1)$$

Örneğin; Cain ve Price' ın (1986), bir kök yağının,  $x_2, x_3$  ve  $x_4$  gibi üç yağın biriyle veya birkaçının karışımı ile oluşan ve bir yağlama yağı olan dört bileşenli karması örnek olarak alınsın, kök yağı, yağ karışımının çoğunluğunu oluştursun ( $x_1 \geq 0.845$ ).  $x_1 = 0.90$  olduğu saptanan kök yağının oranı ile  $x_2 + x_3 + x_4 = 0.10$  olacak şekildeki üç yağın ,

$$0.025 \leq x_2 \leq 0.090$$

$$0.0075 \leq x_3 \leq 0.04$$

$$0.002 \leq x_4 \leq 0.042$$

şeklindeki değişen oranları ele alınsın. Kısıtlı bölge 6 uç tepe değerli ve 6 kenarlı düzensiz bir polihedronudur. Bu tip düzensiz polihedron, oranlar üzerindeki hem üst hem de alt sınır kısıtlamaları olduğu zaman oluşur.

Genel olarak, tasarım, bütün merkezlerden ( $q \geq 4$  olan) bazı yüzey merkezlerinden, kenar orta noktaların bazılarında ve uç tepe değerlerin bir kümesinden oluşan bir kısıtlı bölge üzerindeki (yukarıdaki) bir modele uygulamak için kullanılır. Uç tepe değerler, kenar orta noktalar, yüzey merkezleri ve bunun gibi noktalar "*aday(candidate) noktalar*" olarak adlandırılır. Bu noktalar için, modelin

$$y = X\beta + \varepsilon \quad (2.6.2)$$

olarak verildiği kabul edilsin.  $y$ ,  $n \times 1$  tipinde yanıt vektörü,  $X$ , uygun bileşen oranlarının  $n \times p$  ( $p \leq n$ ) matrisi ve modele bağlı oranlar arasındaki mümkün direkt oran,  $\beta$ ,  $p \times 1$  tipinde bilinmeyen parametre vektörü,  $\varepsilon$ ,  $n \times 1$  tipinde rasgele hata vektörüdür. Aday tasarım noktalarının özel kümesi, aşağıdaki basit değerler kullanılarak genellikle ACED gibi bir paket program yardımıyla seçilir.

- a)  $(X'X)^{-1}$  in izini minimize eden A-optimallik
- b)  $(X'X)$  in determinantını maximize eden D-optimallik
- c) İlgilenilen bölge üzerindeki  $x_0'(X'X)^{-1}x_0$  ' in maximum değerini minimize

eden G-optimallik. Burada  $x_0$ , bu bölgedeki keyfi bir noktadır.

- d)  $x_0'(X'X)^{-1}x_0$  ' in ortalama değerini minimize eden V-optimallik.

Bu kriterler birinci ve ikinci dereceden modeller için, bütün tasarım noktaları ilgilenilen bölgenin sınırlarında bulunan sınır tasarımını seçmekte kullanılır.

### 2.6.3. Karmalar İçin Grafikselle Yaklaşım

Amaç, karma tasarımlar için basit-değer kriterine bir alternatif bulmak olduğunda grafikselle yöntem önerilir. Gorman ve Hinman (1962), üçgen bölge üzerindeki üç bileşenli karmalar için simpleks-latis tasarımlarını örnekleme için kübik modeli ve ikinci dereceden model için tahmin varyansının konturlarını

kullanılarak, böyle konturları üç bileşenli sistemlerle sınırladılar. Eğer üç bileşenli bir sistemde çalışılıyorsa, genellikle beklenen yanıt değerlerinin (veya yüzeylerin) ve tahmin değerlerinin varyanslarının bir kontur plotı yeterli olacaktır. Üç bileşenden fazlası için başka teknikler gerekir.

Cox yöntemini bir örnekle açıklamak için bir  $s = (s_1, s_2, \dots, s_q)$  kaynak karması tanımlansın.  $S$  koordinatları, ilgilenilen bölgenin koordinatlarının ortalaması olan karışımın veya bölgenin merkezi olacaktır. Bir başka karışımında  $i$ . bileşeninin oranı bir  $\Delta_i$  ( $\Delta_i > 0$  veya  $\Delta_i < 0$ ) miktarıyla değişen karışım olduğu düşünülün, yani

$$x_i = s_i + \Delta_i$$

olsun. Yeni karışımındaki diğer bileşenlerin oranları

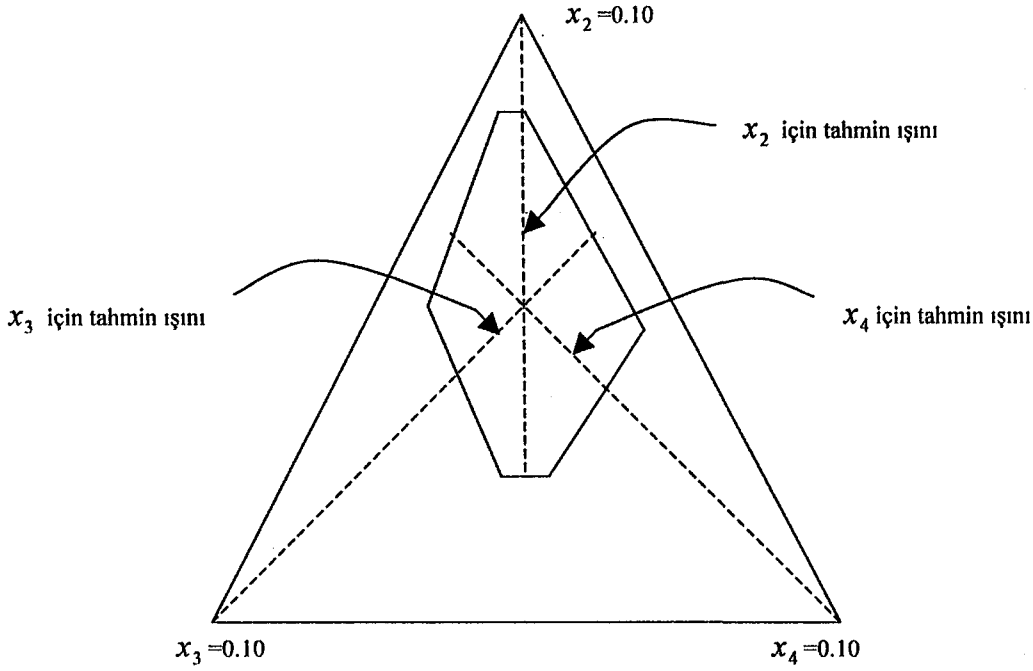
$$x_j = s_j - \frac{\Delta_i s_j}{1 - s_i}, \quad j=1,2,\dots,q, \quad i \neq j$$

denklemi kullanılarak ayarlanabiliyorsa, bu yeni karmada, geriye kalan herhangi iki  $j$  ve  $k$  ( $i \neq j, i \neq k$ ) bileşenlerinin oranlarının yardımcı karmadaki kendi oranlarıyla aynı olduğu anlamına gelir, yani

$$\frac{x_j}{x_k} = \frac{s_j}{s_k} \quad (j, k \neq i)$$

ve bu  $s'$  den  $x_i = 1$  tepe noktasına kadar incelendiğinde Cox yöntemi olarak bilinir. Bu ışınlar boyunca deneysel bölge içinde noktalar (veya karışımlar) tanımlandığında, Cox' un bu yöntemini tahmin ışınları olarak adlandırılır. Her bileşen için bir tahmini ışın bulunduğundan, her bileşen için ayrı bir yanıt izi bulunur. Üç bileşenli ( $x_2, x_3$  ve  $x_4$ ) yağlama örneği için tahmini ışınları Şekil 2.4 te gösterilmiştir.





Şekil 2.4 : Bölge merkezi  $(x_2, x_3, x_4) = (0.0564, 0.0227, 0.0209)$  koordinatlı olan karma. Kısıtlı bölge için Cox yöntemi veya tahmin ışınları.

#### 2.6.4. Yanıt İzi Boyunca Tahmini Varyans

Tahmini ışınlar boyunca yanıt izi ve varyansı incelenen çok bileşenli sistemler için kolay ve etkili bir metottur. Bunu göstermek için, bir karma denemenin (2.6.2) denklemindeki uygun modeli için tasarlanmış ve  $\varepsilon$  rasgele hata vektörünün ortalaması 0 ve varyansı  $\sigma^2 I$  olsun. Buradan (2.6.2) modelindeki  $\beta$ 'nin en küçük kareler tahmini ve tahminin varyans kovaryans matrisi

$$b = (X'X)^{-1} X'y$$

$$\text{varcov}(b) = (X'X)^{-1} \sigma^2$$

şeklindedir.  $x_0$ , tahmini ışında keyfi bir nokta ve  $\hat{y}(x_0)$  uygun modelle bulunan bu noktadaki tahmini yanıt değeridir. Buradan

$$\hat{y}(x_0) = x_0' b$$

ve varyansı

$$\text{Var}(\hat{y}(x_0)) = \sigma^2 x_0' (X'X)^{-1} x_0$$

olur. İşlemlerin daha kolay olması için  $\sigma^2 = 1$  olduğu kabul edilirse,  $x_0$  keyfi noktasındaki tahmin varyansı karmayı etkilemeyen bir değer olarak tanımlanabilir.



### 3.BÖLÜM

## KARMA DENEMELER İÇİN MODELLER

*Bu bölümde, karma denemelerde kullanılan Cox karma modeli, Scheffé karma modeli, lineer, kuadratik ve kübik karma modeli ve Becker karma modelleri hakkında bilgi verilecektir.*

### 3.1.Scheffé Karma Modeli

Scheffé karmalarının birinci dereceden modeli

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i \quad (3.1.1)$$

İkinci dereceden modeli

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j}^q \sum \beta_{ij} x_i x_j \quad (3.1.2)$$

olarak tanımlanır.

Scheffé karma modelinin bazı 3-bileşenli ve 4-bileşenli karmalarının tasarım noktaları Tablo 3.1 deki gibidir.

| yanıt         | $x_1$         | $x_2$         | $x_3$         |  | $x_1$         | $x_2$         | $x_3$         | $x_4$         |
|---------------|---------------|---------------|---------------|--|---------------|---------------|---------------|---------------|
| $\eta_1$      | 1             | 0             | 0             |  | 1             | 0             | 0             | 0             |
| $\eta_2$      | 0             | 1             | 0             |  | 0             | 1             | 0             | 0             |
| $\eta_3$      | 0             | 0             | 1             |  | 0             | 0             | 1             | 0             |
| $\eta_{12}$   | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ | 0             |  | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ | 0             | 0             |
| $\eta_{13}$   | $\frac{1}{2}$ | 0             | $\frac{1}{2}$ |  | $\frac{1}{2}$ | 0             | $\frac{1}{2}$ | 0             |
| $\eta_{23}$   | 0             | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ |  | 0             | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ | 0             |
| $\eta_{112}$  | $\frac{2}{3}$ | $\frac{1}{3}$ | 0             |  | $\frac{2}{3}$ | $\frac{1}{3}$ | 0             | 0             |
| $\eta_{223}$  | 0             | $\frac{2}{3}$ | $\frac{1}{3}$ |  | 0             | $\frac{2}{3}$ | $\frac{1}{3}$ | 0             |
| $\eta_{133}$  | $\frac{1}{3}$ | 0             | $\frac{2}{3}$ |  | $\frac{1}{3}$ | 0             | $\frac{2}{3}$ | 0             |
| $\eta_{233}$  | 0             | $\frac{1}{3}$ | $\frac{2}{3}$ |  | 0             | $\frac{1}{3}$ | $\frac{2}{3}$ | 0             |
| $\eta_{1112}$ | $\frac{3}{4}$ | $\frac{1}{4}$ | 0             |  | $\frac{3}{4}$ | $\frac{1}{4}$ | 0             | 0             |
| $\eta_{1223}$ | $\frac{1}{4}$ | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{4}$ |  | $\frac{1}{4}$ | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{4}$ | 0             |
| $\eta_{1144}$ |               |               |               |  | $\frac{1}{2}$ | 0             | 0             | $\frac{1}{2}$ |
| $\eta_{1234}$ |               |               |               |  | $\frac{1}{4}$ | $\frac{1}{4}$ | $\frac{1}{4}$ | $\frac{1}{4}$ |
| $\eta_{2344}$ |               |               |               |  | 0             | $\frac{1}{4}$ | $\frac{1}{4}$ | $\frac{1}{2}$ |

Tablo 3.1: Scheffé modeline göre 3- ve 4-bileşenli karmaların bazı tasarım noktaları.

İkinci dereceden (7.2) denkleminde 3-bileşenli karma modeli,

$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 \quad (3.1.3)$$

şeklindedir.

$x_i = 1$  ,  $x_j = 0$  ,  $i, j = 1, 2, 3$  ,  $i \neq j$  noktasında beklenen yanıt  $\eta_i$ ,

$x_i = \frac{1}{2}$  ,  $x_j = \frac{1}{2}$  ,  $x_k = 0$  ,  $i < j$  ,  $k \neq i, j$  noktasında beklenen yanıt  $\eta_{ij}$  ise

$$\binom{q+m-1}{m} = \binom{3+2-1}{2} = 6$$

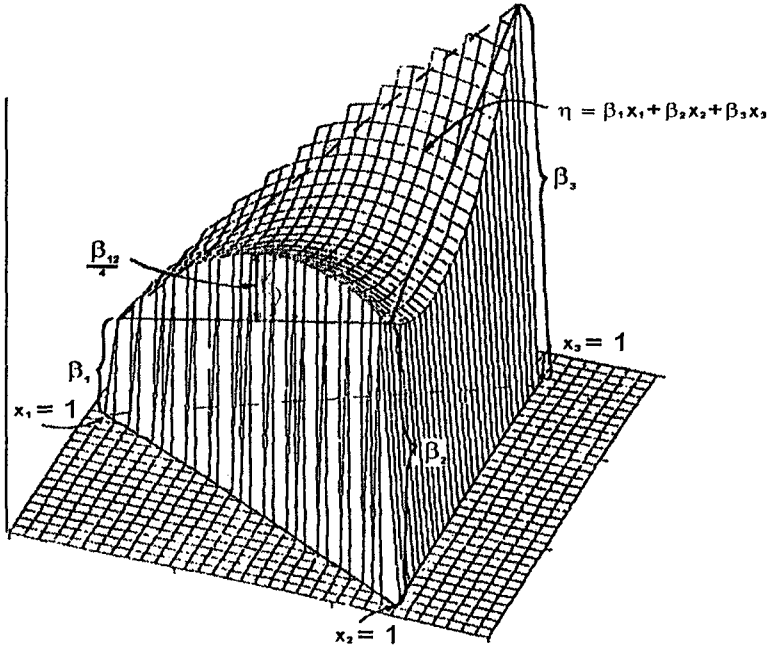
olduğundan 6 tasarım noktası bulunur. Bunlar

$$\begin{aligned}\eta_1 &= \beta_1, & \eta_2 &= \beta_2, & \eta_3 &= \beta_3 \\ \eta_{12} &= \beta_1 \left(\frac{1}{2}\right) + \beta_2 \left(\frac{1}{2}\right) + \beta_{12} \left(\frac{1}{4}\right) \\ \eta_{13} &= \beta_1 \left(\frac{1}{2}\right) + \beta_3 \left(\frac{1}{2}\right) + \beta_{13} \left(\frac{1}{4}\right) \\ \eta_{23} &= \beta_2 \left(\frac{1}{2}\right) + \beta_3 \left(\frac{1}{2}\right) + \beta_{23} \left(\frac{1}{4}\right)\end{aligned}$$

olur. Buradan da:

$$\begin{aligned}\beta_1 &= \eta_1, & \beta_2 &= \eta_2, & \beta_3 &= \eta_3 \\ \beta_{12} &= 4\eta_{12} - 2\eta_1 - 2\eta_2 \\ \beta_{13} &= 4\eta_{13} - 2\eta_1 - 2\eta_3 \\ \beta_{23} &= 4\eta_{23} - 2\eta_2 - 2\eta_3\end{aligned}\tag{3.1.4}$$

$\beta_i$  parametresi,  $i$  saf bileşenin yanıtı,  $\beta_{ij}$ ,  $i$  ve  $j$  bileşenlerinin köşe noktalarındaki yanıtlar ile  $i$  ve  $j$  bileşenlerinin köşelerini birleştiren kenarların orta noktalarındaki yanıtları karşılaştıran bir zıtlıktır. (3.1.3) denklemindeki  $\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$  toplamı karmanın lineer kısmıdır. Şekil (3.1) de  $\beta_{ij} x_i x_j$ ,  $i < j$  terimi bulunmayan karmanın lineer bölümünü oluşturan  $\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$ 'nin oluşturduğu yanıt yüzeyi gösterilmiştir.



Şekil (3.1):  $\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$  denkleminin yanıt yüzeyi.

Genel olarak  $i, j = 1, 2, \dots, q$ ,  $i < j$  için

$$\begin{aligned}\beta_i &= \eta_i \\ \beta_{ij} &= 4\eta_{ij} - 2(\eta_i + \eta_j)\end{aligned}\quad (3.1.5)$$

olur. Scheffé karma modelinin matris gösterimi

$$y = X\beta + \varepsilon \quad (3.1.6)$$

şeklindedir. Burada  $X$ ,  $n \times p$  tipinde  $i$ .sattırı  $x_i$  değerlerini içeren matris,  $y$ ,  $n \times 1$  tipinde yanıt vektörü,  $\beta$ ,  $p \times 1$  tipinde bilinmeyen parametrelerin vektörü,  $\varepsilon$ ,  $n \times 1$  tipinde  $E(\varepsilon) = 0$  ve  $\text{Var}(\varepsilon) = \sigma^2 I$  özelliklerini sağlayan rasgele hata vektörüdür.

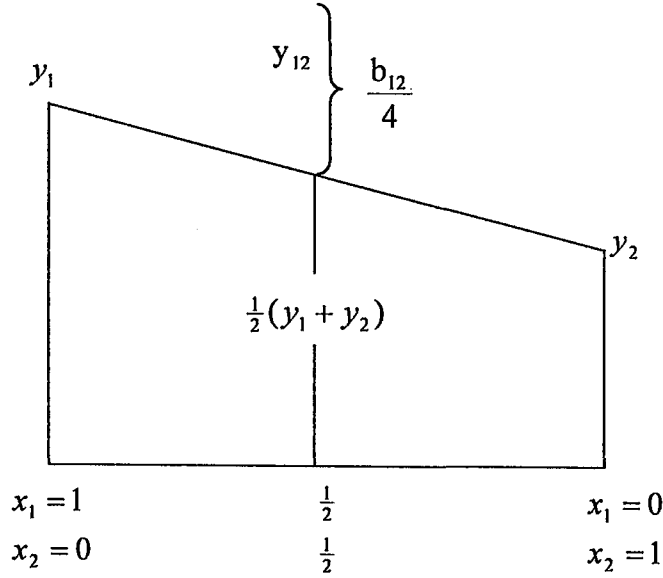
$u$ -uncu denemede yanıtın gözlem değeri  $y_u$ , ( $1 \leq u \leq N$ ) olmak üzere

$$y_u = \eta_u + \varepsilon_u$$

formunda yazılsın. (3.1.5) denkleminde  $\eta_i$  ve  $\eta_{ij}$  yerine sırayla  $y_i$  ve  $y_{ij}$  yazıldığında,

$$\begin{aligned}b_i &= y_i, \quad i=1, 2, \dots, q \\ b_{ij} &= 4y_{ij} - 2(y_i + y_j), \quad i, j=1, 2, \dots, q, \quad i < j \\ \frac{b_{ij}}{4} &= y_{ij} - \frac{(y_i + y_j)}{2}\end{aligned}\quad (3.1.7)$$

olur, son denklemdaki  $\frac{b_{ij}}{4}$  miktarı  $x_i = x_j = \frac{1}{2}$  karmasındaki gözlenen yanıtın yüksekliği ile  $i$  ve  $j$  bileşenlerinin tepe noktalarında gözlenen yanıtın yüksekliğinin ortalaması arasındaki farkı gösterir. Bu Şekil 3.2 de gösterilmiştir.



Şekil 3.2: 1 ve 2 bileşenlerinin karması.

$r_i$ ,  $x_i = 1, x_j = 0$  noktasındaki,  $r_j$ ,  $x_i = 0, x_j = 1$  noktasındaki,  $r_{ij}$ ,  $x_i = \frac{1}{2}, x_j = \frac{1}{2}$  noktasındaki tekrarlı gözlemler ve  $\bar{y}_i, \bar{y}_j$  ve  $\bar{y}_{ij}$  tekrarların ortalamaları olmak üzere parametre tahminleri için en küçük kareler formülü,

$$\begin{aligned} b_i &= \bar{y}_i, \quad i = 1, 2, \dots, q \\ b_{ij} &= 4\bar{y}_{ij} - 2(\bar{y}_i + \bar{y}_j), \quad i = 1, 2, \dots, q, \quad i < j \end{aligned} \quad (3.1.8)$$

$b_i$  ve  $b_{ij}$  tahminlerinin varyansı,

$$E(b_i) = E(\bar{y}_i) = \beta_i$$

$$\text{var}(b_i) = \text{var}(\bar{y}_i) = \frac{\sigma^2}{r_i}$$

$$E(b_{ij}) = E[4\bar{y}_{ij} - 2(\bar{y}_i + \bar{y}_j)] = \beta_{ij}$$

$$\text{var}(b_{ij}) = \text{var}[4\bar{y}_{ij} - 2(\bar{y}_i + \bar{y}_j)] = \frac{16\sigma^2}{r_{ij}} + \frac{4\sigma^2}{r_i} + \frac{4\sigma^2}{r_j} \quad (3.1.9)$$

$$\text{cov}(b_i, b_j) = E[\bar{y}_i(\bar{y}_j)] - E(\bar{y}_i)E(\bar{y}_j) = 0, \quad i \neq j$$

$$\begin{aligned} \text{cov}(b_i, b_{ij}) &= E[\bar{y}_i(4\bar{y}_{ij} - 2\bar{y}_i - 2\bar{y}_j)] - E(\bar{y}_i)E(4\bar{y}_{ij} - 2\bar{y}_i - 2\bar{y}_j) \\ &= -2E(\bar{y}_i^2) + 2(E(\bar{y}_i))^2 = -\frac{2\sigma^2}{r_i} \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

$$\text{cov}(b_{ij}, b_{ik}) = \frac{4\sigma^2}{r_i}, \quad j \neq k$$

olarak bulunur.  $b_i$  ve  $b_{ij}$  tahminleri,  $(y_i$  ve  $y_{ij})$  rasgele deęişkenlerin lineer fonksiyonları ve kendileri de rasgele deęişkenler olduğundan  $x'$  deki yanıtın  $\hat{y}(x)$  tahmini bir rasgele deęişkendir.  $b_i$  ve  $b_{ij}$  tahminleri yansız ise  $\hat{y}(x)$  nin beklenen deęeri  $E[\hat{y}(x)] = \eta$  olur.  $\hat{y}(x)$  tahmininin varyansı (3.1.9) ve (3.1.10) denklemleriyle gösterilebilir ancak daha kolay bir yolla da gösterilebilir, buda:

$$\begin{aligned}
\hat{y}(x) &= \sum_{i=1}^q b_i x_i + \sum_{i<j}^q b_{ij} x_i x_j \\
&= \sum_{i=1}^q \bar{y}_i x_i + \sum_{i<j}^q (4\bar{y}_{ij} - 2\bar{y}_i - 2\bar{y}_j) x_i x_j \\
&= \sum_{i=1}^q \bar{y}_i \left[ x_i - 2x_i \left( \sum_{i \neq j}^q x_j \right) \right] + \sum_{i<j}^q 4\bar{y}_{ij} x_i x_j \\
&= \sum_{i=1}^q a_i \bar{y}_i + \sum_{i<j}^q a_{ij} \bar{y}_{ij} \tag{3.1.11}
\end{aligned}$$

şeklindedir, burada  $a_i = x_i(2x_i - 1)$  ve  $a_{ij} = 4x_i x_j$ ,  $i, j = 1, 2, \dots, q$ ,  $i < j$  dir.  $\bar{y}_i$  ve  $\bar{y}_{ij}$ , sırayla  $r_i$  ve  $r_{ij}$ ' nin ortalamaları olmak üzere  $\hat{y}(x)$ ' in varyansı,

$$\text{var}[\hat{y}(x)] = \sigma^2 \left\{ \sum_{i=1}^q \frac{a_i^2}{r_i} + \sum_{i<j}^q \frac{a_{ij}^2}{r_{ij}} \right\} \tag{3.1.12}$$

şeklindedir. Eğer  $\sigma^2$  bilinmiyorsa  $r_i$  ve  $r_{ij}$  tekrarlı gözlemlerle  $\sigma^2$ ' nin yansız tahmin edicisi  $s^2$  bulunur.  $\sigma^2$  yerine  $s^2$ ' nin yazılmasıyla,  $\text{var}[\hat{y}(x)]$ ' in bir tahmini yazılır ve bu  $\overline{\text{var}[\hat{y}(x)]}$  şeklinde yazılır.  $\eta$  için  $(1 - \alpha)$  güven aralığı

$$\hat{y}(x) - \Delta < \eta < \hat{y}(x) + \Delta \tag{3.1.13}$$

şeklindedir. Burada  $\Delta = [t_{f, \alpha/2} \overline{\text{var}[\hat{y}(x)]}]^{1/2}$  ve  $f$ , t-dağılımının serbestlik derecesidir. Gözlemlerin varyansı, farklı karmalara yüklenmiş deęerlerin ortalamaları arasındaki



varyans ve tüm karışımlardaki tekrarlı örnekler arasındaki varyans olarak iki farklı şekilde ele alınsın. Gözlemlerdeki karmalar arasındaki varyans,

$$\text{Karmalar arasındaki Kareler Toplamı} = \sum_{i=1}^6 r_i (\bar{y}_i - \bar{y})^2 \quad (3.1.14)$$

olur. Burada  $r_i$ , i. karmanın tekrarlı gözlem sayısı,  $\bar{y}_i$ , i. karmanın  $r_i$  tekrarlı gözlem sayısının ortalaması,  $\bar{y}$ , N gözlem sayısının tüm ortalamasıdır, ve bu toplam p-1 serbestlik derecesine sahiptir.  $\{q,m\}$  polinomu,  $\{q,m\}$  simpleks latis tasarım noktalarında toplanan verilere uydurulduğunda, modeldeki terimlerin sayısı tasarımla gösterilen farklı karmaların sayısına eşit olacaktır, bu sayı  $\binom{q+m-1}{m}$  dir. Böylece uydurulan modelle açıklanan gözlemlerdeki değişim “regresyon kareler toplamı” ,

$$\text{Regresyon kareler toplamı (R.K.K)} = \sum_{u=1}^N (\hat{y}_u - \bar{y})^2 \quad (3.1.15)$$

olarak yazılır. Burada  $\hat{y}_u$ , uygun model kullanılarak elde edilen karma bileşenlerin u. koşuldaki tahmini,  $\bar{y}$ , bütün gözlemlerin ortalamasıdır ve  $\bar{y} = \frac{(y_1 + y_2 + \dots + y_N)}{N}$  dir.

Karmalar içindeki tekrarlı gözlemler arasındaki değişim, karmalar arasındaki farkla bulunamaz ve kalanların değişimi olarak bulunur. Kalan kareler toplamı

$$\text{Kalan Kareler Toplamı (K.K.K)} = \sum_{u=1}^N (y_u - \hat{y}_u)^2 \quad (3.1.16)$$

olup, N-p serbestlik derecesine sahiptir. N verisinin tamamının varyansı ise

$$\text{Tüm Kareler Toplamı (T.K.K)} = \sum_{u=1}^N (y_u - \bar{y})^2 \quad (3.1.17)$$

dir.

|           | Serbestlik derecesi | Kareler toplamı                                | Ortalama kare         | F-oranı                           |
|-----------|---------------------|--|-----------------------|-----------------------------------|
| Regresyon | $p-1$               | $R.K.K = \sum_{u=1}^N (\hat{y}_u - \bar{y})^2$ | $\frac{R.K.K}{(p-1)}$ | $\frac{R.K.K/(p-1)}{K.K.K/(N-p)}$ |
| Kalan     | $N-p$               | $K.K.K = \sum_{u=1}^N (y_u - \hat{y}_u)^2$     | $\frac{K.K.K}{(N-p)}$ |                                   |
| Tüm       | $N-1$               | $T.K.K = \sum_{u=1}^N (y_u - \bar{y})^2$       |                       |                                   |

**Tablo 3.2:** Varyans analiz tablosu.

Alınan model doğru ise regresyon için ve kalan için ortalama karelerin beklenen değeri

$$E(\text{kalanların ortalama karesi}) = \sigma^2$$

$$E(\text{regresyonun ortalama karesi}) = \sigma^2 + f(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{23})$$

olur. Yüzey simpleks üzerinde bir düzlem ise  $f(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{23}) = 0$  olur. Eğer  $H_0: \beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \beta$ ,  $\beta_{13} = \beta_{12} = \beta_{23} = 0$  hipotezi doğru ise, simpleks veya üçgen üzerindeki yüzey, tüm noktalardan eşit uzaklıkta olan yatay bir düzlemdir. Oranlar

$$\frac{(p-1) \times (\text{regresyon ortalama karesi})}{\{\sigma^2 + f(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{23})\} = \sigma^2} \sim \chi^2_{(p-1)}$$

ve

$$\frac{(N-p) \times (\text{kalanlar ortalama karesi})}{\sigma^2} \sim \chi^2_{(N-p)}$$

dir.  $\chi^2$  rasgele değişkenleri bağımsızdır ve buradan F rasgele değişkeni

$$F = \frac{(p-1) \times (\text{regresyon ortalama karesi}) / (p-1)\sigma^2}{(N-p) \times (\text{kalanlar ortalama karesi}) / (N-p)\sigma^2} \quad (3.1.18)$$

olarak bulunur. (3.1.18) oranının sonucu ile tablodan  $F_{(p-1, N-p, \alpha)}$  değeri karşılaştırılır, eğer bu değer tablo değerinden büyük çıkarsa  $H_0$  hipotezi reddedilir, küçükse kabul edilir ve buda yüzeyin, simpleksin noktalarından eşit uzaklıkta olan bir düzlem olduğunu gösterir.

### 3.2.Cox Karma Modeli

Cox karma modeli Scheffé karma polinomuna bir alternatif olarak verilir.

Polinomlar kullanıldığında,  $\sum_{i=1}^q x_i = 1$  kısıtlaması parametrizasyonda fazlalık gösterir. Tüm özdeş  $\lambda$  ' lar için birinci dereceden polinom özdeştir ve bu polinom

$$(\beta_0 + \lambda) + \sum_{i=1}^q (\beta_i - \lambda)x_i \quad (3.2.1)$$

şeklinde yazılır. (3.1.1) ve (3.1.2) Scheffé karma polinomlarında, ilgilenilen yalnızca verilen noktalardaki yanıt yüzeyinin yüksekliğinin tahmini ise hesaplamalar hariç parametrizasyonların seçimi önemsizdir. Bununla beraber, ilgili bireysel yorum ile parametreler genellikle faydalıdır ve buradan hareketle, Scheffé' nin polinomları bazen uygun olmasına rağmen aşağıdaki dezavantajları vardır. Bunlar:

(i) Aynı sistem üzerinde iki kez tekrarlanan bir denemede, sabit terimler arasındaki fark hariç beklenen yanıt aynı ise (3.1.1) ve (3.1.2) modellerinde iki tekrarda farklı  $\beta_i$  parametreler görülür. Bu da yorumu güçleştirir.

(ii) (3.1.2)' den karesel terimlerin kaldırılması, özel bir bileşen için yanıtın eğriliğinin büyüklüğü ve yönünü göz önüne almak (3.1.2)' yi anlamsız yapar.

(iii) (3.1.1) ve (3.2.2)'deki  $\beta_i$  ve  $\beta_{ij}$  ' nin yorumu, çok basit karmalar için yanıtın terimlerindedir. İlgilenilen oldukça karmaşık karmaların davranışları da olabilir ve gerçekte deneme bölgesi, sadece birkaç bileşenli karmaları ihmal edebilir.

Bu dezavantajları ortadan kaldırmak için bir alternatif polinom formu Cox karma modelidir.

Cox karmaların birinci dereceden modeli

$$\eta_1(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i \quad (3.2.2)$$

ikinci dereceden modeli

$$\eta_2(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i,j=1}^q \beta_{ij} x_i x_j, \quad \beta_{ij} = \beta_{ji} \quad (3.2.3)$$

şeklindedir. (3.2.2) denklemindeki  $\beta_i$  parametresi  $i$ . bileşenin yanıt üzerindeki etkisini gösterir. Eğer  $i$ . bileşenin oranı değiştirilecek olursa,  $\sum_{i=1}^q x_i = 1$  kısıtlamasının bozulmaması için kalan  $q-1$  bileşenden en az birinin oranında değişiklik olacaktır. Bunun için simpleks içinde merkeze yakın herhangi bir noktada  $s = (s_1, s_2, \dots, s_q)$  standart karma seçilsin. Ve  $s$  ile  $x_i = 1$  noktalarını birleştiren doğru üzerinde bir  $x$  noktası seçilsin,  $x$  üzerindeki  $i$ . bileşenin oranı  $\Delta_i$ ,  $s$  üzerindeki  $i$ . bileşenin oranı  $s_i$  olsun.  $i$ . bileşen parametresinin tanımlanmasında bu bileşenin oranının  $x_i$ 'den  $x_i + \Delta_i$ 'ye arttığı göz önüne alınsın. Ve kalan bileşenlerde standart karma içinde kendi oluşumlarına göre oranlar dahilinde ayarlansın. Böylece  $j \neq i$  için  $x_j$ ,

$$\frac{x_j - \Delta_i s_j}{(1 - s_i)} \quad (3.2.4)$$

şeklinde değişir. (3.2.2) birinci dereceden model için beklenen yanıtta değişim,

$$\Delta \eta_1(x) = \frac{\beta_i \Delta_i}{1 - s_i} - \frac{\Delta_i}{1 - s_i} \sum_{i=1}^q \beta_j s_j \quad (3.2.5)$$

şeklindedir.

Bu da,

$$\sum_{i=1}^q \beta_i s_j = 0 \quad (3.2.6)$$

kısıtlamasını güçlendirir ve bu

$$\eta_1(s) = \beta_0 \quad (3.2.7)$$

olmasını gerektirir.

$\beta_i$  parametresi  $i$ . bileşenin değişimi için yanıt yüzeyinin eğimini belirler. (3.2.5)

denklemindeki  $\frac{1}{1-s_i}$  katsayısı ve yeni bir

$$\alpha_i = \frac{\beta_i}{1-s_j} \quad (3.2.8)$$

parametresi tanımlanır.  $x_i$ 'deki artışı  $1-s_i$  oranının bir kesri olarak ifade edebilmek için,

$$z_j = \frac{x_i}{1-s_j} \quad (3.2.9)$$

şeklindeki bağımsız değişken kullanılır. Aynı yol ikinci dereceden polinomlar içinde

kullanılır. (3.2.6) kısıtlamasının yanı sıra  $\sum_{k=1}^q \beta_{jk} s_j s_k = 0$  kısıtlamasıyla birinci

dereceden denklemindeki oranlarla aynı değişim yapıldığında,

$$\Delta \eta_2(s) = \beta_i \frac{\Delta_i}{1-s_i} + \beta_{ii} \left( \frac{\Delta_i}{1-s_i} \right)^2 \quad (3.2.10)$$

standart karması elde edilir. Ayrıca  $\sum_{k=1}^q \beta_{jk} s_j s_k = 0$  olduğundan (3.2.3) denkleminde

$$\eta_2(s) = \beta_0 \quad (3.2.11)$$

olur. Daha sonra  $x=s'$  den başlanarak yeni oranlar elde edilir. Bu oranlar (3.2.9) denklemi de kullanılarak

$$\Delta\eta_2(s) = \sum \beta_i \Delta z_i + \sum \beta_{ij} \Delta z_i \Delta z_j \quad (3.2.12)$$

şeklinde yazılabilir. Değişim  $s'$  den değil de  $x'$  de ölçülmüş ise düzeltmeler yapılır. (3.2.12) denklemindeki ikili çarpımlar değişmez ancak lineer terimler merkezin değişiminden etkilenecektir. Eğer  $s$ ,  $(s_1 = s_2 = \dots = s_q = 1/q)$  şeklinde standart karma

ise,  $\sum \beta_j s_j = 0$  ve  $\sum_{k=1}^q \beta_{jk} s_j s_k = 0$

$$\sum_{j=1}^q \beta_j = 0 \quad \sum_{k=1}^q \beta_{jk} = 0 \quad (j=1,2,\dots,q) \quad (3.2.13)$$

şeklinde basit formda olacaktır.

### 3.3. Lineer, Kuadratik ve Kübik Karma Modelleri

Bir  $\{q,m\}$  simpleks-latisin noktalarında toplanan verilere uygulanabilen regresyon fonksiyonunun genel formu  $m$ . dereceden bir polinom denklemi olup, bu

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i < j}^q \sum_{i < j}^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i < j < k}^q \sum_{i < j < k}^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \dots \quad (3.3.1)$$

şeklinindedir. Bu denklemden terimlerin sayısı  $\binom{q+m}{m}$  ve bu denklemden terimler

$x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1$  koşulunu sağlar.

Burada  $x_q$  çekilirse:

$$x_q = 1 - \sum_{i=1}^q x_i \quad (3.3.2)$$

olur. (3.3.2) eşitliği (3.3.1) de yerine yazılırsa  $\eta$ ,  $\binom{q+m-1}{m}$  terimli  $(x_1, x_2, \dots, x_{q-1})$ ,  $q-1$  bileşenli  $m$ . dereceden bir polinom olur. Bu denklem basit formdadır, çünkü daha az bileşen ve daha az terim içerir, ve böylece  $q$ . bileşeni denklemde bulunmadığından, bu bileşenin etkisi kaybolacaktır. Bu yüzden  $q$ . bileşenin değeri önemli olduğu sürece (3.3.2) denklemi kullanılmaz. Bunun yerine yüzeyi gösterecek (3.3.1) denkleminde başka bir alternatif denklem türetilebilir. Bu denklem, (3.3.2) denklemindeki terimlerin bazılarının özdeş  $(x_1 + x_2 + \dots + x_q)$  terimlerle çarpılmasıyla veya sadeleştirilmesiyle oluşturulur. Oluşan denkleme “kanonik polinom” veya “basit  $\{q, m\}$  polinom” denir.  $\{q, m\}$  polinomundaki terimlerin sayısı  $\binom{q+m-1}{m}$  dir ve bu sayı  $\{q, m\}$  simpleks-latisin tasarım noktalarını oluşturan noktaların sayısına eşittir.

Örneğin  $m=1$  için

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i$$

denkleminde  $\beta_0(x_1 + x_2 + \dots + x_q) = 1$  yazıldığında

$$\eta = \beta_0 \left( \sum_{i=1}^q x_i \right) + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i = \sum_{i=1}^q \beta_i^* x_i \quad (3.3.3)$$

$$\beta_i^* = \beta_0 + \beta_i, \quad i=1, 2, \dots, q$$

“lineer denklemi” elde edilir. (3.3.3) denklemindeki terimlerin sayısı  $\{q, 1\}$  latisin noktalarının sayısı ile aynıdır ve  $q$  dur.  $q$  değişkenli 2. dereceden genel polinom:

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^q \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j}^q \beta_{ij} x_i x_j \quad (3.3.4)$$

olur,  $x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1$  eşitliği bu denklemde yerine yazıldığında,

$$x_i^2 = x_i \left( 1 - \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^q x_j \right) \quad (3.3.5)$$

$$\eta = \beta_0 \left( \sum_{i=1}^q x_i \right) + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^q \beta_{ii} x_i \left( 1 - \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^q x_j \right) + \sum_{i < j}^q \beta_{ij} x_i x_j$$

$$\eta = \sum_{i=1}^q (\beta_0 + \beta_i + \beta_{ii}) x_i - \sum_{i=1}^q \beta_{ii} x_i \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^q x_j + \sum_{i < j}^q \beta_{ij} x_i x_j$$

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i^* x_i + \sum_{i < j}^q \beta_{ij}^* x_i x_j \quad (3.3.6)$$

şeklindeki “kuadratik denklem” elde edilir. Bu denklemin terimlerinin sayısı

$$q + q \frac{(q-1)}{2} = \frac{q(q+1)}{2}$$

olur. (3.3.4) ve (3.3.6) denklemleri arasında karşılaştırma yapıldığında (3.3.6) denklemindeki parametrelerin (3.3.4) denklemindeki parametrelerin basit fonksiyonu olduğu sonucu çıkar. Bu parametrelerde,

$$\begin{aligned} \beta_i^* &= \beta_0 + \beta_i + \beta_{ii} \\ \beta_{ij}^* &= \beta_{ij} - \beta_{ii} - \beta_{jj} \end{aligned} \quad i, j = 1, 2, \dots, q, \quad i < j$$

şeklindedir. (3.3.6) denklemini homojen formda

$$\eta = \sum_{i=1}^q \delta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j}^q \delta_{ij} x_i x_j$$

$$\eta = \sum_{i < j}^q \delta_{ij} x_i x_j \quad (3.3.7)$$



şeklinde yazılır. Bu homojen form,  $x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1$  ifadesi ile (3.3.7)

denklemindeki  $\sum_{i=1}^q \beta_i^* x_i$  'nin çarpımından ve daha sonra terimlerin sadeleşmesiyle oluşan bir formdur. (3.3.6) ve (3.3.7) modelleri biri diğerinden elde edildiği için eşittir. “*Tam kübik*” veya  $\{q,3\}$  polinomu,

$$\begin{aligned} \eta = & \sum_{i=1}^q \beta_i^* x_i + \sum_{i<j}^q \sum_{i<j}^q \beta_{ij}^* x_i x_j + \sum_{i<j}^q \sum_{i<j}^q \delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) \\ & + \sum_{i<j<k}^q \sum_{i<j<k}^q \beta_{ijk}^* x_i x_j x_k \end{aligned} \quad (3.3.8)$$

olarak bulunur.  $\delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)$  terimleri dikkate alınmadığında polinom “*özel kübik polinom*” olur ve bu

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i^* x_i + \sum_{i<j}^q \sum_{i<j}^q \beta_{ij}^* x_i x_j + \sum_{i<j<k}^q \sum_{i<j<k}^q \beta_{ijk}^* x_i x_j x_k \quad (3.3.9)$$

şeklinde yazılır. Bütün  $\{q,m\}$  polinomlarında  $\beta_i^*, \beta_{ij}^*, \beta_{ijk}^*$  terimlerindeki yıldızları kaldırıp yerine  $\beta_i, \beta_{ij}, \beta_{ijk}$  terimleri kullanılsın. Böylece 3-bileşenli karma için, (3.3.3), (3.3.6), (3.3.9) denklemlerinin modelleri sırayla,

$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$$

denklemini lineer form,

$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3$$

denklemini kuadratik form,

$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \delta_{12} x_1 x_2 (x_1 - x_2) \\ + \delta_{13} x_1 x_3 (x_1 - x_3) + \delta_{23} x_2 x_3 (x_2 - x_3) + \beta_{123} x_1 x_2 x_3$$

denklemini tam kübik form ve

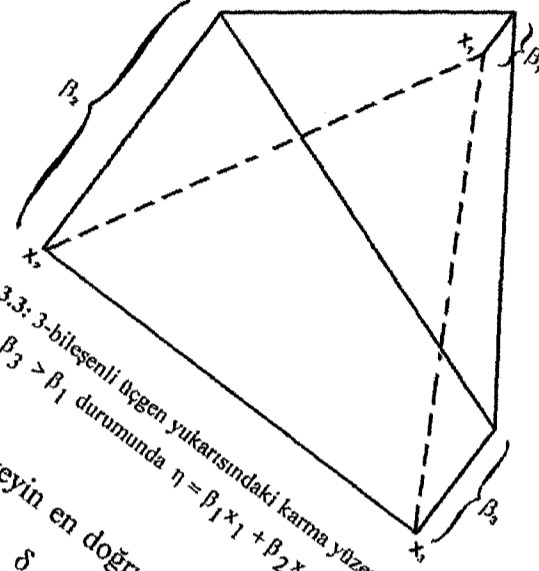
$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{123} x_1 x_2 x_3$$

denklemini özel kübik formdur.  $\{q, m\}$  polinomundaki terimlerin sayısı  $q'$  nun birkaç değeri Tablo 3.3' de gösterilmiştir.

| q-bileşen sayısı | Lineer form için | Kuadratik form için | Özel kübik Form için | Tam kübik Form için |
|------------------|------------------|---------------------|----------------------|---------------------|
| 2                | 2                | 3                   | ---                  | ---                 |
| 3                | 3                | 6                   | 7                    | 10                  |
| 4                | 4                | 10                  | 14                   | 20                  |
| 5                | 5                | 15                  | 25                   | 35                  |
| 6                | 6                | 21                  | 41                   | 56                  |
| 7                | 7                | 28                  | 63                   | 84                  |
| 8                | 8                | 36                  | 92                   | 120                 |
| ⋮                | ⋮                | ⋮                   | ⋮                    | ⋮                   |
| Q                | q                | $q(q+1)/2$          | $q(q^2+5)/6$         | $q(q+1)(q+2)/6$     |

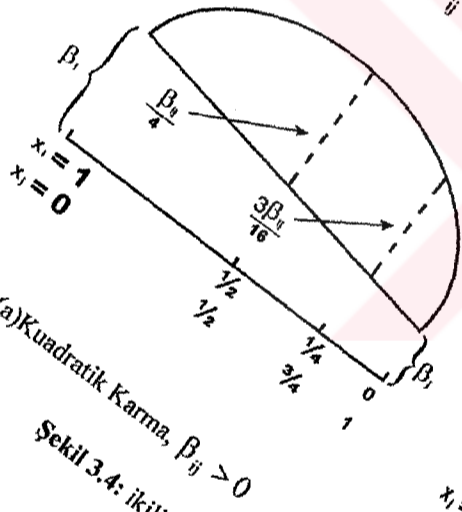
**Tablo 3.3:**  $\{q, m\}$  polinomundaki  $q'$  nun değerleri için kanonik polinomların terimlerinin sayısı.

(3.3.3) veya (3.3.6) modellerinde  $x_i = 1$  yazıldığında  $x_j = 0$ ,  $i \neq j$   $\eta = \beta_i$  olur.  $\beta_i$  parametresi  $i$ . saf bileşen için beklenen yanıtı gösterir ve grafiksel olarak  $\beta_i$  ( $i=1,2,\dots,q$ ) için  $x_i = 1$  köşe noktasında simpleksin yukarısındaki karma yüzeyin yüksekliğidir. (3.3.3) denklemi, bileşenlerin lineer karışımlarının yanıt yüzeyi simpleks üzerindeki bir düzlemdir.  $q=3$  için yanıt yüzeyi Şekil 3.3' de gösterilmiştir.

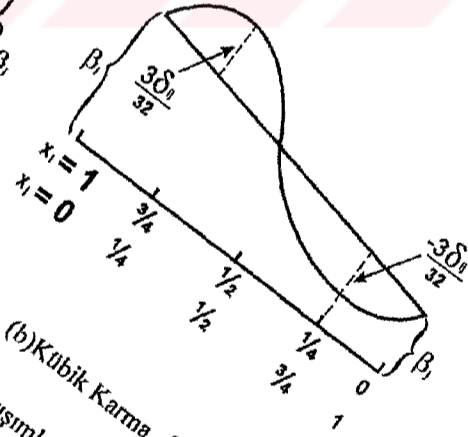


Şekil 3.3: 3-bileşenli üçgen yukarıdaki karma yüzey. Yüzey kenarı boyunca  $\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$  olur.

Eğer (3.3.8) kübik formülü yüzeyin en doğru gösterimi ise, bu formül ikili karma sinercisinin kübik katsayısı olan  $\delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)$  ekli terimini içerir.  $(x_i - x_j)$  kenarı boyunca  $\delta_{ij} \neq 0$ ,  $\delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)$  terimi pozitif değerler kadar negatif değer alıyorsa,  $i$  ve  $j$  bileşenleri arasında, Şekil 3.4 de gösterilen hem sinercistik ve hem antoganistik karmanın ortaya çıkması mümkün olur.  $(\beta_{ij} > 0 \Rightarrow \beta_{ij}$  ikili karma sinercismi,  $\beta_{ij} < 0 \Rightarrow \beta_{ij}$  ikili karma antoganizmidir.)



(a) Kuadratik Karma,  $\beta_{ij} > 0$



(b) Kübik Karma,  $\delta_{ij} > 0$

Şekil 3.4: ikili karmaların lineer olmayan karışımları.

### 3.4. Becker Karma Modeli

Becker karma modelinde, q-bileşenli bir karma denemede ilgilenilen bölge (q-1) boyutlu simpleksle sınırlıdır. Bu bölge

$$S_{q-1} = \left\{ x = (x_1, \dots, x_q) \mid \sum_{i=1}^q x_i = 1, x_i \geq 0, i = 1, \dots, q \right\} \quad (3.4.1)$$

dir.  $S_{q-1}$  bölgesindeki genel yanıt modeli,

$$y = X\beta + \varepsilon \quad (3.4.2)$$

şeklindedir. Burada  $y$ ;  $N \times 1$  tipinde gözlem vektörü,  $X$ ; elemanları karma bileşenlerinin oranları ve fonksiyonları olan  $N \times p$  tipinde genişletilmiş tasarım matrisi,  $\beta$ ;  $p \times 1$  tipinde bilinmeyen parametrelerin vektörü,  $\varepsilon$ ;  $E(\varepsilon) = 0$ ,  $\text{Var}(\varepsilon) = \sigma^2 I$  olan rasgele hataların  $N \times 1$  tipinde vektörüdür. Becker ekli bileşenler için karma denemeleri ele almış ve q bileşen için homojen fonksiyonlu üç yanıt modeli bulmuştur.  $2 \leq n \leq q$  olmak üzere Becker karma modeli

$$H_1 : E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} \min(x_i, x_j) + \dots + \sum_{i_1 < \dots < i_n} \beta_{i_1 \dots i_n} \min(x_{i_1}, \dots, x_{i_n}) \quad (3.4.3)$$

$$H_2 : E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} \frac{x_i x_j}{x_i + x_j} + \dots \\ + \sum_{i_1 < \dots < i_n} \beta_{i_1 \dots i_n} \frac{x_{i_1} \dots x_{i_n}}{(x_{i_1} + \dots + x_{i_n})^{n-1}} \quad (3.4.4)$$

$$H_3 : E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} (x_i x_j)^{1/2} + \dots + \sum_{i_1 < \dots < i_n} \beta_{i_1 \dots i_n} (x_{i_1} \dots x_{i_n})^{1/n} \quad (3.4.5)$$

dir.  $H_2$  'deki herhangi bir payda 0 ise buna karşılık gelen terimin değeri 0 alınır.  $S_{q-1}$  bölgesi üzerinde karma yanıtını incelemek için simpleks sentroit ve simpleks latis tasarımları klasik alternatifler olarak verilir.  $x^{(k)}, (\frac{1}{k}, \frac{1}{k}, \dots, \frac{1}{k}, 0, \dots, 0) \in S_{q-1}$ ,  $(k=1,2,\dots,n)$  olarak verilsin.  $\frac{1}{k}$  bileşeni  $k$  çokluğuna sahiptir ve  $r_k$ , bir simpleks sentroit tasarımında  $q$ -koordinatlarının kombinasyonlarıyla bulunan  $\binom{q}{1}$  noktalarının her biri için bir ağırlık ise,

$$\binom{q}{1}r_1 + \dots + \binom{q}{n}r_n = 1 \quad (3.4.6)$$

olur. Simpleks,  $x_1, \dots, x_q$  bileşenlerine göre değişmez simetrik olduğundan  $x^{(k)}$   $(k=1, \dots, n)$ 'nin  $\binom{q}{k}$  permutasyonlarıyla gösterilen noktaların her biri için aynı  $r_k$  ağırlığı uygulanır. Bu da simpleks-sentroit tasarımın bir simetrik model sınıfı için kullanılabildiğini gösterir.  $H_1, H_2, H_3$  Becker modellerini kapsayan bu model sınıfı,  $x_1, \dots, x_q$  bileşenlerine göre simetrik değişmezdir.  $y = X\beta + \varepsilon$  modeli için genişletilmiş tasarım matrislerinin yapısı tanımlanabilir ve bu tasarım matrisi genellikle,

$$X = [f(x_1), \dots, f(x_N)]'$$

şeklinindedir. Burada  $f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_N)$   $N$  tane farklı  $p \times 1$  tipinde vektör,  $X_{(m)}$ ,  $(m=1, \dots, N)$ ,  $S_{q-1}$  'den seçilen  $N$  tasarım noktaları,

$$y = [(y_{(1)}), \dots, (y_{(N)})]' \quad (2 \leq n \leq q \leq p \leq N) \quad (3.4.7)$$

$N$  gözlemdir.  $H_1$  için, genişletilmiş tasarım matrisi,

$$X_1 = [f_1(x_1), \dots, f_1(x_N)]' \quad (3.4.8)$$

şeklindedir. Burada

$$f'_1 = (f'_{11}, f'_{12}, \dots, f'_{1n}) \quad (3.4.9)$$

$$f'_{11} = [x_1, x_2, \dots, x_q]$$

$$f'_{12} = [\min(x_1, x_2), \dots, \min(x_{q-1}, x_q)]$$

$$f'_{1n} = [\min(x_1, \dots, x_N), \dots, \min(x_{q-n+1}, \dots, x_q)]$$

dir.  $H_2$  için, genişletilmiş tasarım matrisi

$$X_2 = [f_2(x_1), \dots, f_2(x_N)]' \quad (3.4.10)$$

şeklindedir ve

$$f'_2 = (f'_{21}, \dots, f'_{2n}) \quad (3.4.11)$$

$$f'_{21} = (x_1, \dots, x_q)$$

$$f'_{22} = \left[ \frac{x_1 x_2}{x_1 + x_2}, \dots, \frac{x_{q-1} x_q}{x_{q-1} + x_q} \right]$$

$$f'_{2n} = \left[ \frac{x_1 \dots x_n}{(x_1 + \dots + x_n)^{n-1}}, \dots, \frac{x_{q-n+1} \dots x_q}{(x_{q-n+1} + \dots + x_q)^{n-1}} \right]$$

dir.  $H_3$  için, genişletilmiş tasarım matrisi

$$X_3 = [f_3(x_1), \dots, f_3(x)]' \quad (3.4.12)$$

şeklindedir ve burada

$$f'_3 = (f'_{31}, \dots, f'_{3n}) \quad (3.4.13)$$

$$f'_{31} = (x_1, \dots, x_q)$$

$$f'_{32} = [(x_1 x_2)^{1/2}, \dots, (x_{q-1} x_q)^{1/2}]$$

$$f'_{3n} = [(x_1 \dots x_n)^{1/2}, \dots, (x_{q-n+1} \dots x_q)^{1/2}]$$

dir.  $f_{11}, f_{21}, f_{31}$  ifadeleri incelenirse  $f_{11} = f_{21} = f_{31}$  olduğu görülür. Simpleks-sentroit tasarımı altında  $q$ -boyutlu  $x_{(m)}$  ( $m=1, \dots, N$ ) tasarım noktaları

$$\mathbf{x}_{(1)} = (1, 0, \dots, 0), \quad \mathbf{x}_{(q)} = (0, \dots, 0, 1), \dots, \quad \mathbf{x}_{(N)} = (0, \dots, 0, \frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n})$$

$$N = \binom{q}{1} + \dots + \binom{q}{n}$$

şeklindedir ve  $p=N$  dir.  $X_1, X_2, X_3$  genişletilmiş tasarım matrisleri  $M_{jk}$  ( $j > k$ ,  $k=1, 2, \dots, n$ ) ve  $I_u = M_u$  (birim matris) matrisleri kullanılarak açıklanabilir.  $M_{jk}$   $\binom{q}{j} \times \binom{q}{k}$  tipinde bir matristir.

$M_{j1}$  matrisi,  $\mathbf{x}^{(1)} = (\frac{1}{j}, \frac{1}{j}, \dots, \frac{1}{j}, 0, \dots, 0) = \frac{1}{j}(1, 1, \dots, 1, 0, \dots, 0)$  vektörüne bağlı olarak elde edilir.  $M_{j1}$ 'in  $\binom{q}{j}$  satırları  $\mathbf{x}^{(1)}$ 'in  $\binom{q}{j}$  permutasyonlarını gösterir.  $M_{jk}$  matrisleri ( $j > k > 1$ ) model özelliklerine göre  $M_{j1}$  den oluşur. Sonuç olarak  $k > j$  için  $M_{jk} = 0$  dir. Buradan da singüler olmayan tasarım matrisleri

$$X_1 = X_3 = \begin{bmatrix} I_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 2^{-1}M_{21} & 2^{-1}I_{22} & 0 & \dots & 0 \\ 3^{-1}M_{31} & 3^{-1}M_{32} & 3^{-1}I_{33} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ n^{-1}M_{n1} & n^{-1}M_{n2} & n^{-1}M_{n3} & \dots & n^{-1}I_{nn} \end{bmatrix} \quad (3.4.14)$$

$$X_2 = \begin{bmatrix} I_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 2^{-1}M_{21} & (2 \times 2)^{-1}I_{22} & 0 & \dots & 0 \\ 3^{-1}M_{31} & (2 \times 3)^{-1}M_{32} & (3^2 \times 3)^{-1}I_{33} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ n^{-1}M_{n1} & (2n)^{-1}M_{n2} & (3^2 n)^{-1}M_{n3} & \dots & (n^{n-1}n)^{-1}I_{nn} \end{bmatrix} \quad (3.4.15)$$

şeklinde elde edilir.

$$A = \begin{bmatrix} r_1 I_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & r_2 I_{22} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & r_3 I_{33} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & r_n I_{nn} \end{bmatrix} \quad (3.4.16)$$

ağırlık matrisi olmak üzere en küçük kareler yöntemiyle modeller yanıtı uydurulur, ve tahmin edilen yanıt  $f(x, b, \dots)$  dir.

Burada  $b = (X' \Lambda X)^{-1} X' \Lambda y$  dir. Daha açık olarak  $D(b) = \sigma^2 (X' \Lambda X)^{-1}$  olur.





## 4. BÖLÜM

### KARMA DENEMELERDE MODEL SEÇİMİ

*Seçilen bir örnek üzerine en uygun model seçilip en iyi bileşim oluşturulacak, ayrıca belirli sınırlar verilmiş bir örneğin çözümü yapılacaktır.*

#### 4.1. Bir Deney İçin Model Seçimi

Kumaşa mavi boya ( $x_1$ ), sarı boya ( $x_2$ ) ve kırmızı boya ( $x_3$ ) karmaları dökülerek kumaşın boyayı tutma deneyi yapılıyor ve buna ilişkin gözlem değerleri aşağıdaki tablo ile veriliyor.

|   | mavi<br>$x_1$ | sarı<br>$x_2$ | kırmızı<br>$x_3$ | Kumaşın renk tutması<br>( $y_u$ ) | Kumaşın renk tutmasının<br>Ortalama değeri ( $\hat{y}_u$ ) |
|---|---------------|---------------|------------------|-----------------------------------|--|
| 1 | 1             | 0             | 0                | 2.84 , 3.19                       | 3.015  |
| 2 | 0             | 1             | 0                | 2.43                              | 2.43   |
| 3 | 0             | 0             | 1                | 3.50                              | 3.50   |
| 4 | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ | 0                | 1.635 , 1.234                     | 1.4345   |
| 5 | $\frac{1}{2}$ | 0             | $\frac{1}{2}$    | 1.690 , 1.494                     | 1.592  |
| 6 | 0             | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$    | 1.145 , 1.430                     | 1.2875   |

Tablo (4.1): pamuklu bir kumaşa döküle boyaların kumaşı tutma gözlem sonuçları.

Verilen gözlem sonuçlarını Scheffé ikinci dereceden modele uygulayalım.

$$\eta = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j}^q \beta_{ij} x_i x_j$$

$$\eta = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3$$

$$\eta_i = \beta_i, \quad i=1,2,3$$

$$\eta_{ij} = \frac{1}{2}(\beta_i + \beta_j) + \frac{1}{4}\beta_{ij}, \quad i \neq j, \quad i < j$$

$$b_i = y_i, \quad i=1,2,3$$

$$b_1 = 3.015, \quad b_2 = 2.43, \quad b_3 = 3.50$$

$$b_{12} = 4y_{12} - 2(y_1 + y_2)$$

$$b_{12} = 4.(1.4345) - 2.(3.015+2.43) = -5.152$$

$$b_{13} = 4y_{13} - 2(y_1 + y_3)$$

$$b_{13} = 4.(1.592) - 2.(3.015+3.50) = -6.662$$

$$b_{23} = 4y_{23} - 2(y_2 + y_3)$$

$$b_{23} = 4.(1.2875) - 2.(2.43+3.50) = -6.71$$

$$b_i = \bar{y}_i, \quad b_{ij} = 4\bar{y}_{ij} - 2(\bar{y}_i + \bar{y}_j)$$

$$E(b_i) = E(\bar{y}_i) = \beta_i$$

$$E(b_{ij}) = E[4\bar{y}_{ij} - 2(\bar{y}_i + \bar{y}_j)] = \beta_{ij}$$

$$s^2 = \sum_{i=1}^6 \sum_{u=1}^{2 \text{ veya } 3} \frac{(y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^6 (r_i - 1)}$$

$$s^2 = \frac{(2.84 - 3.015)^2 + (3.19 - 3.015)^2 + \dots + (1.145 - 1.2875)^2}{(2-1) + (1-1) + (1-1) + (2-1) + (2-1) + (2-1)}$$

$$s^2 = 0.05$$

$$\text{Var}(b_i) = \frac{\sigma^2}{r_i}$$

$$\text{Var}(b_1) = \frac{0.05}{2} = 0.025$$

$$\text{Var}(b_2) = \text{Var}(b_3) = \frac{0.05}{1} = 0.05$$

$$\text{Var}[4\bar{y}_{ij} - 2(\bar{y}_i + \bar{y}_j)] = \frac{16\sigma^2}{r_{ij}} + 4\left(\frac{\sigma^2}{r_i} + \frac{\sigma^2}{r_j}\right)$$

$$\text{Var}(b_{12}) = S^2 \left( \frac{16}{2} + \frac{4}{2} + \frac{4}{1} \right) = 0.05.(14) = 0.7$$

$$\text{Var}(b_{13}) = S^2 \left( \frac{16}{2} + \frac{4}{2} + \frac{4}{1} \right) = 0.05.(14) = 0.7$$

$$\text{Var}(b_{23}) = S^2 \left( \frac{16}{2} + \frac{4}{1} + \frac{4}{1} \right) = 0.05.(16) = 0.8$$

tahminlerin standart hataları:

$$s.h(b_i) = \sqrt{\text{Var}(b_i)}$$

$$s.h(b_1) = 0.16$$

$$s.h(b_2) = s.h(b_3) = 0.22$$

$$s.h(b_{ij}) = \sqrt{\text{Var}(b_{ij})}$$

$$s.h(b_{13}) = s.h(b_{12}) = 0.84$$

$$s.h(b_{23}) = 0.89$$

$$\begin{aligned} \text{Cov}(b_i, b_j) &= E[\bar{y}_i(\bar{y}_j)] - E(\bar{y}_i)E(\bar{y}_j) \\ &= \beta_i\beta_j - \beta_i\beta_j = 0 \end{aligned}$$

$$\text{Cov}(b_i, b_{ij}) = -2 \frac{\sigma^2}{r_i}$$

$$\text{Cov}(b_{ij}, b_{ik}) = 4 \frac{\sigma^2}{r_i}$$

$$\hat{y}(x) = \sum_{i=1}^q b_i x_i + \sum \sum b_{ij} x_i x_j$$

$$= \sum_{i=1}^q \bar{y}_i x_i + \sum \sum (4\bar{y}_{ij} - 2(\bar{y}_i + \bar{y}_j)) x_i x_j$$

$$\hat{y}(x) = \sum \bar{y}_i [x_i - 2x_i(\sum x_j)] + \sum \sum 4\bar{y}_{ij} x_i x_j$$

$$\hat{y}(x) = \sum_{i=1}^q a_i \bar{y}_i + \sum \sum a_{ij} \bar{y}_{ij} \quad , \quad a_i = x_i(2x_i - 1), \quad a_{ij} = 4x_i x_j$$

ve model:

$$\hat{y}(x) = 3.015x_1 + 2.43x_2 + 3.50x_3 - 5.152x_1x_2 - 6.662x_1x_3 - 6.71x_2x_3$$

$$(0.15) \quad (0.22) \quad (0.22) \quad (0.84) \quad (0.84) \quad (0.89)$$

(4.1.1)

olur. Parametre tahminleri sonuçlarından

$$b_3 > b_1 > b_2$$

$$b_{12} < 0, \quad b_{13} < 0, \quad b_{23} < 0$$

1 ve 2, 1 ve 3, 2 ve 3 ikili karmalarının hepsi antoganistiktir. İkili karmaların hiçbirisi sinercistik olmadığından herhangi bir rengin karmada kesin olarak bulunması gerektiği söylenemiyor, bu yüzden tekil karmalara bakılır ve 3 karmasının değeri çok yüksek olduğundan ekonomik olmayacağı söylenebilir, buda oluşturulacak karmada 3. bileşenin tek başına bulunmaması gerektiğini gösterir.

3-bileşenli üçgenin  $x$  noktasındaki,  $\hat{y}(x)$ 'in tahmini varyansı

$$\overline{\text{var}[\hat{y}(x)]} = s^2 \left\{ \sum_{i=1}^3 \frac{a_i^2}{r_i} + \sum_{i < j}^3 \frac{a_{ij}^2}{r_{ij}} \right\}$$

örneğin;  $(x_1 = \frac{2}{3}, x_2 = \frac{1}{3}, x_3 = 0)$  noktasında:

$$a_1 = x_1(2x_1 - 1) = \left(\frac{2}{3}\right)\left(\frac{1}{3}\right) = \frac{2}{9}$$

$$a_2 = \left(\frac{1}{3}\right)\left(-\frac{1}{3}\right) = -\frac{1}{9}$$

$$a_3 = 0$$

$$a_{12} = 4x_1x_2 = 4\left(\frac{2}{3}\right)\left(\frac{1}{3}\right) = \frac{8}{9}$$

$$a_{13} = a_{23} = 0$$

$\hat{y}(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0)$ 'nin tahmini varyansı:

$$\begin{aligned} \overline{\text{var}[\hat{y}(x)]} &= 0.05 \left\{ \frac{\left(\frac{2}{9}\right)^2}{2} + \frac{\left(\frac{1}{9}\right)^2 + 0}{1} + \frac{\left(\frac{8}{9}\right)^2 + 0 + 0}{2} \right\} \\ &= 0.05 \left\{ \frac{35}{81} \right\} = 0.022 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{y}(x) &= 3.015\left(\frac{2}{3}\right) + 2.43\left(\frac{1}{3}\right) + 3.50(0) - 5.152\left(\frac{2}{3} \cdot \frac{1}{3}\right) - 6.662(0) - 6.71(0) \\ \hat{y}(x) &= 1.68 \end{aligned}$$

$\eta$  için %95'lik güven aralığı:  $t_{4,0.025} = 2.776$

$$\Delta = t_{4,0.025} \sqrt{\sigma^2} = 2.776(\sqrt{0.022}) = 0.4$$

$$\hat{y} - \Delta \leq \eta \leq \hat{y} + \Delta$$

$$1.68 - 0.4 \leq \eta \leq 1.68 + 0.4$$

$$1.28 \leq \eta \leq 2.08$$

$\hat{y}(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0)$  noktası için

$$\hat{y}(x) = 3.015\left(\frac{1}{3}\right) + 2.43\left(\frac{2}{3}\right) + 0 - 5.152\left(\frac{1}{3} \cdot \frac{2}{3}\right) - 0$$

$$\hat{y}(x) = 1.5$$

$$\overline{\text{var}[\hat{y}(x)]} = 0.05 \left\{ \frac{\left(\frac{1}{9}\right)^2}{2} + \frac{\left(\frac{2}{9}\right)^2 + 0}{1} + \frac{\left(\frac{8}{9}\right)^2}{2} \right\} = 0.05 \left\{ \frac{73}{162} \right\}$$

$$\overline{\text{var}}[\hat{y}(x)] = 0.023$$

$$\Delta = t_{4,0.025} \sqrt{\sigma^2} = 2.776(\sqrt{0.023}) = 0.4$$

$$1.5 - 0.4 \leq \eta \leq 1.5 + 0.4$$

$$1.1 \leq \eta \leq 1.9$$

$\hat{y}(\frac{1}{3}, 0, \frac{2}{3})$  noktası için

$$\hat{y}(x) = 3.015(\frac{1}{3}) + 0 + 3.50(\frac{2}{3}) - 6.662(\frac{1}{3} \cdot \frac{2}{3}) = 1.85$$

$$\overline{\text{var}}[\hat{y}(x)] = 0.05 \left\{ \frac{(\frac{1}{9})^2}{2} + \frac{(\frac{2}{9})^2}{1} + 0 + \frac{(\frac{8}{9})^2}{2} \right\} = 0.05 \left\{ \frac{73}{162} \right\} = 0.023$$

$$\Delta = t_{4,0.025} \sqrt{\sigma^2} = 2.776(\sqrt{0.023}) = 0.4$$

$$1.85 - 0.4 \leq \eta \leq 1.85 + 0.4$$

$$1.45 \leq \eta \leq 2.25$$

$\hat{y}(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$  noktası için

$$\hat{y}(x) = 3.015(\frac{1}{3}) + 2.43(\frac{1}{3}) + 3.5(\frac{1}{3}) - 5.152(\frac{1}{9}) - 6.662(\frac{1}{9}) - 6.71(\frac{1}{9})$$

$$\hat{y}(x) = 0.92$$

$$\overline{\text{var}}[\hat{y}(x)] = 0.05 \left\{ \frac{(\frac{1}{9})^2}{2} + \frac{(\frac{1}{9})^2}{1} + \frac{(\frac{1}{9})^2}{1} + \frac{(\frac{4}{9})^2}{2} + \frac{(\frac{4}{9})^2}{2} + \frac{(\frac{4}{9})^2}{2} \right\}$$

$$\overline{\text{var}}[\hat{y}(x)] = 0.05 \left\{ \frac{53}{162} \right\} = 0.017$$

$$\Delta = t_{4,0.025} \sqrt{\sigma^2} = 2.776(\sqrt{0.017}) = 0.36$$

$$0.92 - 0.36 \leq \eta \leq 0.92 + 0.36$$

$$0.56 \leq \eta \leq 1.28$$

$\hat{y}(\frac{4}{5}, \frac{1}{5}, 0)$  noktası için

$$\hat{y}(x) = 3.015(\frac{4}{5}) + 2.43(\frac{1}{5}) - 5.152(\frac{4}{5} \cdot \frac{1}{5}) - 0 = 2.08$$

$$\overline{\text{var}}[y(x)] = 0.05 \left\{ \frac{(\frac{12}{25})^2}{2} + \frac{(\frac{3}{25})^2}{1} + \frac{(\frac{16}{25})^2}{2} \right\} = 0.05 \left\{ \frac{418}{1250} \right\} = 0.016$$

$$\Delta = t_{4,0.025} \sqrt{\sigma^2} = 2.776(\sqrt{0.016}) = 0.36$$

$$2.08 - 0.36 \leq \eta \leq 2.08 + 0.36$$

$$1.72 \leq \eta \leq 2.44$$

$\hat{y}(\frac{1}{5}, \frac{4}{5}, 0)$  noktası için

$$\hat{y}(x) = 3.015(\frac{1}{5}) + 2.43(\frac{4}{5}) - 5.152(\frac{4}{5} \cdot \frac{1}{5}) - 0 = 1.7$$

$$\overline{\text{var}}[y(x)] = 0.05 \left\{ \frac{(\frac{3}{25})^2}{2} + \frac{(\frac{12}{25})^2}{1} + \frac{(\frac{16}{25})^2}{2} \right\} = 0.05 \left\{ \frac{553}{1250} \right\} = 0.02$$

$$\Delta = t_{4,0.025} \sqrt{\sigma^2} = 2.776(\sqrt{0.02}) = 0.4$$

$$1.7 - 0.4 \leq \eta \leq 1.7 + 0.4$$

$$1.3 \leq \eta \leq 2.1$$

$\hat{y}(0, \frac{1}{5}, \frac{4}{5})$  noktası için

$$\hat{y}(x) = 3.015(0) + 2.43(\frac{1}{5}) + 3.50(\frac{4}{5}) - 0 - 6.71(\frac{1}{5} \cdot \frac{4}{5}) = 2.21$$

$$\overline{\text{var}}[y(x)] = 0.05 \left\{ \frac{(\frac{3}{25})^2}{1} + \frac{(\frac{12}{25})^2}{1} + \frac{(\frac{16}{25})^2}{2} \right\} = 0.05 \left\{ \frac{281}{625} \right\} = 0.02$$

$$2.21 - 0.4 \leq \eta \leq 2.21 + 0.4$$

$$1.81 \leq \eta \leq 2.61$$

| karma | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | Alt limit | $\hat{y}(x)$ | Üst limit | $(\overline{\text{var}}[\hat{y}(x)])^{\frac{1}{2}}$ |
|-------|-------|-------|-------|-----------|--------------|-----------|---|
| 1     | 0.68  | 0.16  | 0.16  | 1.28      | 1.68         | 2.08      | 0.15  |
| 2     | 0.16  | 0.68  | 0.16  | 1.1       | 1.5          | 1.9       | 0.15  |
| 3     | 0.16  | 0.16  | 0.68  | 1.45      | 1.85         | 2.25      | 0.15  |
| 4     | 0.33  | 0.33  | 0.33  | 0.56      | 0.92         | 1.28      | 0.13  |
| 5     | 0.80  | 0.10  | 0.10  | 1.72      | 2.08         | 2.44      | 0.13  |
| 6     | 0.10  | 0.80  | 0.10  | 1.3       | 1.7          | 2.1       | 0.15  |
| 7     | 0.10  | 0.10  | 0.80  | 1.81      | 2.21         | 2.61      | 0.15  |
| 8     | 0.90  | 0.05  | 0.05  | 2.14      | 2.5          | 2.86      | 0.13  |

Tablo 4.2: Rasgele seçilen karmalar için limitler ve  $\hat{y}(x)$  değerleri.

$$\bar{y}(x) = \sum_{u=1}^{10} \frac{y_u}{10} = \frac{20.588}{10} = 2.06$$

| değerleri | Ortalama değer<br>( $\hat{y}_u$ ) | Kalanlar<br>( $y_u - \hat{y}_u$ )         | Sapmalar<br>( $y_u - \bar{y}$ )                   | Regresyon<br>( $\hat{y}_u - \bar{y}$ )                  |
|-----------|-----------------------------------|---|---|---|
| 2.84      | 3.015                             | -0.175                                    | 0.78  | 0.955   |
| 3.19      | 3.015                             | 0.175                                     | 1.13  | 0.955   |
| 2.43      | 2.43                              | 0   | 0.37  | 0.37  |
| 3.50      | 3.50                              | 0   | 1.44  | 1.44  |
| 1.635     | 1.4345                            | 0.2005                                    | -0.425  | -0.6255   |
| 1.234     | 1.4345                            | -0.2005                                   | -0.826  | -0.6255   |
| 1.690     | 1.592                             | 0.098                                     | -0.37   | -0.468  |
| 1.494     | 1.592                             | -0.098                                    | -0.566  | -0.468  |
| 1.145     | 1.2875                            | -0.1425                                   | -0.915  | -0.7725   |
| 1.430     | 1.2875                            | 0.1425                                    | -0.63   | -0.7725   |
|           |                                   | $\sum_{u=1}^{10} (y_u - \hat{y}_u)^2 = 0$ | $\sum_{u=1}^{10} (y_u - \bar{y})^2 = 144.10^{-6}$ | $\sum_{u=1}^{10} (\hat{y}_u - \bar{y})^2 = 144.10^{-6}$ |

Tablo 4.3: Kalanlar, sapmalar ve regresyon kareler toplamı tablosu

Varyans tablosunun analizi:

|           | Serbestlik derecesi | Kareler toplamı      | Ortalama kare                                    | F-oran                      |
|-----------|---------------------|----------------------|--|-----------------------------|
| regresyon | p-1=5               | 144.10 <sup>-6</sup> | 144.10 <sup>-6</sup> /5<br>=288.10 <sup>-7</sup> | 288.10 <sup>-7</sup> /0 = ∞ |
| kalan     | N-p=4               | 0                    | 0  |                             |
| toplam    | N-1=9               | 144.10 <sup>-6</sup> |  |                             |

Tablo 4.4: Boya örneği için varyans tablosu.

F-oranı testi için;  $H_0 : \beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \beta$  ,  $\beta_{12} = \beta_{13} = \beta_{23} = 0$  hipotezi doğru ise yanıt yüzey, simplex veya üçgen üzerindeki yüzey yüksekliği her noktada aynı olan bir yatay düzlemdir.

$$F_{(p-1, N-p, \alpha)} = F_{(5,4,0.05)} = 6.26$$

$$F_{(5,4,0.05)} < \infty$$

olduğundan  $H_0$  hipotezi reddedilir. Buda yanıt yüzeyinin simpleksten aynı uzaklıkta olmadığını gösterir. Bu yüzey düzlem veya eğri olabilir.

Eğer yüzey köşe noktalarından eşit uzaklıkta olmayan bir düzlem ise:

$$H_0 : \beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \beta, \beta_{12} = \beta_{13} = \beta_{23} = 0 \text{ hipotezi reddedilir,}$$

$$H_A : \beta_{12} = \beta_{13} = \beta_{23} = 0, \beta_1 \neq \beta_2 = \beta_3 \text{ veya}$$

$$\beta_1 = \beta_2 \neq \beta_3 \text{ veya}$$

$$\beta_1 \neq \beta_2 \neq \beta_3 \text{ hipotezi kabul edilir.}$$

Eğer yüzey bir eğri ise:

$$H_0 : \beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \beta, \beta_{12} = \beta_{13} = \beta_{23} = 0 \text{ hipotezi reddedilir,}$$

$$H_A : \beta_{12} = \beta_{13} = \beta_{23} \neq 0, \beta_1 = \beta_2 = \beta_3 \text{ veya}$$

$$\beta_1 = \beta_2 \neq \beta_3 \text{ veya}$$

$$\beta_1 \neq \beta_2 = \beta_3 \text{ hipotezi kabul edilir.}$$

Aynı örnek Scheffé modeline  $\beta_0$  katsayısı ekleyerek çözülecek olursa, yeni denklem:

$$\eta = \beta_0 + \beta_1^* x_1 + \beta_2^* x_2 + \dots + \beta_{q-1}^* x_{q-1} + \sum_{i < j}^q \beta_{ij} x_i x_j$$

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^{q-1} \beta_i^* x_i + \sum_{i < j}^q \beta_{ij} x_i x_j$$

şeklinde olur. Kumaşı boyama örneğinde  $\beta_0, \beta_3$  'ün yerine ve  $\beta_i^*, \beta_i - \beta_3$  ' ün yerine yazılsın.

$$\hat{y}(x) = b_0 + b_1^* x_1 + b_2^* x_2 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3$$

$$b_0 = b_3 = 3.50$$

$$b_1^* = b_1 - b_3 = 3.015 - 3.50$$

$$b_2^* = b_2 - b_3 = -1.07$$



$$s.h(b_0) = s.h(b_3) = 0.22$$

$$s.h(b_i^*) = \{\text{var}(b_i) + \text{var}(b_3) - 2\text{cov}(b_i, b_3)\}^{1/2}$$

$$s.h(b_1^*) = \{0.025 + 0.050 - 2.(0)\}^{1/2} = 0.27$$

$$s.h(b_2^*) = \{0.050 + 0.050 - 2.(0)\}^{1/2} = 0.32$$

$$\hat{y}(x) = 3.50 - 0.485x_1 - 1.07x_2 - 5.152x_1x_2 - 6.662x_1x_3 - 6.71x_2x_3$$

(4.1.2)

|           | Serbestlik derecesi | Kareler toplamı      | Ortalama kare                                    | F-oran                      |
|-----------|---------------------|----------------------|--|-----------------------------|
| regresyon | p-1=5               | 144.10 <sup>-6</sup> | 144.10 <sup>-6</sup> /5<br>=288.10 <sup>-7</sup> | 288.10 <sup>-7</sup> /0 = ∞ |
| kalan     | N-p=4               | 0                    | 0  |                             |
| toplam    | N-1=9               | 144.10 <sup>-6</sup> |  |                             |

**Tablo 4.5:** Boya örneği için  $\beta_0$  katsayılı varyans tablosu.

Scheffé' nin ikinci dereceden (4.1.1) denkleminde ait varyans analizi Tablo 4.4 ile, Scheffé' nin ikinci dereceden denkleminde bir  $\beta_0$  parametresi eklendiğinde oluşan yeni (4.1.2) denkleminde ait varyans analizi Tablo 4.5 ile gösterilmiştir. İki tablodan da anlaşılacağı gibi  $\beta_0$  parametresinin eklenmesiyle modelin varyansında hiç bir değişiklik meydana gelmez. Değişiklik sadece uydurulan model denkleminde oluşur.

#### 4.1.1. Kumaşın Boya Tutma Işık Haslığı Aynı olan Boyaların Tutarlılık Testi

Kumaşın boya tutma deneyinde aynı ışık haslığına sahip boyaların oranları aşağıdaki gibidir. Mavi boyanın ışık haslığı ( $x_1$ ), sarı boyanın ışık haslığı ( $x_2$ ), kırmızı boyanın ışık haslığı ( $x_3$ ) olmak üzere

$$0.07 \leq x_1 \leq 0.98$$

$$0.13 \leq x_2 \leq 0.25$$

$$0.07 \leq x_3 \leq 0.25$$

Bu kısıtlama tutarsızdır, çünkü sınırlı R bölgesi içinde  $x_1 = 0.98$  gibi hiçbir  $x$  noktası yoktur. R sınırlı bölgesindeki  $x_1$  noktasının en yüksek noktası 0.80' dir.

Bu tutarsızlık,

$$b_i + \sum a_j > 1$$

olduğundan meydana gelmiştir. Bu tutarsızlık,

$$R'_i = \frac{(b_j - a_j)}{(1 - \sum_{k=1}^q a_k)}$$

psüdo-bileşen denklemleri ile gösterilirse:

$$R'_1 = \frac{(0.98 - 0.07)}{1 - 0.20} = 1.1375 > 1$$

olduğundan tutarsızdır. Bulunan bu tutarsızlığı düzeltmek için alt veya üst sınırları arttırıp azaltabiliriz; yani  $x_1$  'in oranı  $b_1 = 0.80$  ' e indirilirse:

$$b_1 + a_2 + a_3 = 0.80 + 0.13 + 0.07 = 1$$

olur ve böylece karma tutarlı hale getirilmiş olunur.

## KAYNAKLAR

- [1] BECKER , N. G. (1968). Models for the response of a mixture. *Journal of the Royal Statistical Society, B*, Vol. 30, pp. 349-358.
- [2] BECKER , N. G. (1970). Mixture design for a Model linear in the proportions. *Biometrika*, Vol. 57, pp. 329-338.
- [3] BECKER , N. G. (1978). Models and designs for experiments with mixtures. *Austral. J. Stat.*, vol. 20, pp. 195-208.
- [4] CORNELL , J. A. (1975). Some comments on designs for Cox's mixture polynomial. *Technometrics*, Vol. 17, pp. 25-35.
- [5] CORNELL , J. A. and OTT , L. (1975). The use of gradients to aid in the interpretation of mixture response surfaces. *Technometrics*, Vol. 17, pp. 409-424.
- [6] CORNELL , J. A. and GORMAN , J. W. (1978). On the detection of an additive blending component in multi-component mixtures. *Biometrics*, Vol. 34, pp. 251-263.
- [7] CORNELL , J. A. (1979). Experiments with Mixtures: An Update and Bibliography. *Technometrics*, Vol. 21, pp. 95-106.
- [8] CORNELL , J. A. Experiments with Mixtures, 2d Edition, Willey, New York.
- [9] COX , D. R. (1971). A note on polynomial response functions for mixtures. *Biometrika* , Vol. 58, pp. 155-159.
- [10] CROSIER, R. B. (1984). Mixture experiments: Geometry and pseudo-components. *Technometrics*, Vol. 26, pp. 209-216.
- [11] DRAPER , N. R. and LAWRENCE , W. E. (1965). Mixture designs for three factors. *J. Roy. Statist. Soc. B*, Vol. 27, pp. 450-465.
- [12] DRAPER , N. R. and LAWRENCE , W. E. (1965). Mixture designs for four factors. *J. Roy. Statist. Soc. B*, Vol. 27, pp. 473-478.
- [13] DRAPER , N. R. and ST. JOHN , R. C. (1977). A mixtures model with inverse terms. *Technometrics*, Vol. 19, pp. 37-46.
- [14] DRAPER , N. R. and ST. JOHN , R. C. (1977). Designs in three and four components for mixtures models with inverse terms. *Technometrics*, Vol. 19, pp. 117-130.

- [15] GALIL , Z. and KIEFER , J. (1977). Comparison of Box-Draper and D-optimum designs for experiments with mixtures. . *Technometrics*, Vol. 19, pp.441-444.
- [16] GALIL , Z. and KIEFER , J. (1977). Comparison of simplex designs for quadratic mixture models. *Technometrics*, Vol. 19, pp. 445-453.
- [17] KHURI , A. I. and CORNELL , J. A. (1987). Response Surface Designs and Analyses. Dekker Inc. ASQC Quality Pres, New York.
- [18] KUROTORI, I. S. (1966). Experiments with mixtures of components having lower bounds. *Industrial Quality Control*. Vol. 22, pp. 592-596.
- [19] LAMBRAKIS , D. P. (1968). Experiments with Mixtures: A generalization of the simplex-lattice design. *Journal of the Royal Statistical Society, B*, Vol. 30, pp. 123-136.
- [20] LAMBRAKIS , D. P. (1969). Experiments with Mixtures: An alternative to the simplex-lattice design. *Journal of the Royal Statistical Society, B*, Vol. 31, pp. 234-245.
- [21] LAMBRAKIS , D. P. (1969). Experiments with Mixtures: Estimated regression function of the multiple-lattice design. *Journal of the Royal Statistical Society, B*, Vol. 31, pp. 276-284.
- [22] MARQUARDT , D. W. and SNEE , R.D. (1974). Test statistics for mixture models. . *Technometrics*, Vol. 16, pp. 533-537.
- [23] MURTY , J. S. and DAS , M. N. (1968). Design and analysis of experiments with mixtures. *Ann. Math. Statist.*, Vol. 39, pp. 1517-1539.
- [24] MURTHY , M. S. R. and MURTY , J. S. (1983). Restricted region simplex design for mixture experiments. *Communications in Statistics, Theory and Methods*, Vol. A12, pp. 2605-2615.
- [25] NIGAM , A. K., GUPTA , S. C. and GUPTA , S. (1983). Anew algorithm for extreme vertices designs for linear mixture models. *Technometrics*, Vol. 25, pp. 367-371.
- [26] PARK , S. H. (1978). Selecting contrasts among parameters in Scheffé's mixture models: Screening components and model reduction. . *Technometrics*, Vol. 20, pp. 273-279.
- [27] PIEPEL , G. F. (1983). Defining consistent constraint regions in mixture experiments. *Technometrics*, Vol. 25, pp. 97-101.

- [28] SAXENA . S. K. and NIGAM , A. K. (1973). Symetric-simplex block designs designs for mixtures. *J. Roy. Statist soc. B*, Vol. 35, pp. 466-472.
- [29] SAXENA . S. K. and NIGAM , A. K. (1977). Restricted exploration of mixtures by symmetric-simplex designs. *Technometrics*, Vol. 19, pp. 47-52.
- [30] SCHEFFE , H. (1958). Experiments with Mixtures. *Journal of the Royal Statistical Society, B*, Vol. 20, pp. 344-360.
- [31] SCHEFFE , H. (1963). The Simplex-centroid design for experiments with mixtures. *Journal of the Royal Statistical Society, B*, Vol. 25, pp. 235-263.
- [32] SNEE , R. D. (1973). Tecniques for the analysis of mixture data. *Technometrics*, Vol. 15, pp. 517-528.
- [33] SNEE , R. D. (1975). Experimental designs for quadratic models in constrained mixture spaces. *Technometrics*, Vol. 17, pp. 149-159.
- [34] SNEE , R. D. and MARQUARDT , D. W. (1974). Extreme vertices design for linear mixture models. *Technometrics*, Vol. 16, pp. 399-408.
- [35] SNEE , R. D. and MARQUARDT , D. W. (1976). Screening concepts and designs for experiments with mixtures. *Technometrics*, Vol. 18, pp. 19-29.
- [36] THOMPSON , W. O. and MYRES , R.H. (1968). Response surface designs for experiments with mixtures. *Technometrics*, Vol. 10, pp. 739-756.
- [37] VINNING , G. G. , CORNELL , J. A. and MYERS , R. H. (1993). A Graphical Approach for Evaluating Mixture Designs. *Appl. Statist.* Vol. 42, No. 1, pp. 127-138.