

T.C.
DİCLE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

TEPKİ YÜZEYLERİ
VE
TASARIMLARI

AZİZ HARMAN

DOKTORA TEZİ

77697

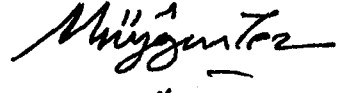

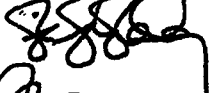


(MATEMATİK ANABİLİM DALI)

DİYARBAKIR
EYLÜL-2000


T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ

T.C.
DİCLE ÜNİVERSİTESİ
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğü

Bu çalışma, jürimiz tarafından Matematik Anabilim Dalı'nda DOKTORA tezi olarak kabul edilmiştir.

	<u>Jüri Üyesinin Ünvanı :</u>	<u>Adı Soyadı</u> _____ :	
Başkan	Prof.Dr.	Müjgan TEZ	
Üye	Doç.Dr.	Sezai OĞRAŞ (Danışman)	
Üye	Prof.Dr.	H.İlhan TUTALAR	
Üye	Prof.Dr.	Ali YILMAZ	
Üye	Yrd.Doç.Dr.	Pakize TAYLAN	
Yedek Üye	Yrd.Doç.Dr.	H.Özlem GÜNEY	

Yukarıdaki bilgilerin doğruluğunu onaylarım. / / 2000


Enstitü Müdürü
Prof.Dr.H.İlhan TUTALAR

TEŞEKKÜR

Doktora öğrenimim süresince, yardımlarından ve deneyimlerinden geniş ölçüde yararlandığım, tez danışmanlarım, başta Marmara Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Matematik Bölümü öğretim üyesi Sayın Prof. Dr. Müjgan TEZ olmak üzere, Dicle Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Matematik Bölümü öğretim üyesi Doç. Dr. Sezai OĞRAŞ ile diğer öğretim üyelerine ve yardımcılara teşekkür etmeyi bir borç bilirim.



BÖLÜM-1 GENEL BİLGİLER	1
1.1 TEPKİ YÜZEYİ YÖNTEM BİLİMİ NEDİR?	1
1.2 TEPKİ YÜZEYİ TASARIMINDA DENEYSEL SÜREÇ	3
1.3 TEPKİ FONKSİYONLARINA YAKLAŞIM	5
1.4 TEPKİ İLİŞKİSİNİN GEOMETRİK GÖSTERİMİ	9
1.5 TEPKİ YÜZEYİ İLE REGRESYON ANALİZİ İLİŞKİSİ	12
BÖLÜM-2	20
2.1 BİRİNCİ DERECEDEDEN MODELLER VE TASARIMLAR	20
2.2 BİRİNCİ DERECEDEDEN MODEL	20
2.3 BİRİNCİ DERECEDEDEN MODELLERİN UYDURULMASI İÇİN TASARIMLAR	22
2.4 BİRİNCİ DERECEDEDEN MODELLERİN UYUM EKSİKLİĞİ HAKKINDA BAZI ÖNERİLER	36
2.5 EN HIZLI ÇIKIŞ YA DA İNİŞ YÖNTEMİ	37
BÖLÜM-3 İKİNCİ DERECEDEDEN MODELLER VE TASARIMLARI	48
3.1 İKİNCİ DERECEDEDEN MODELİN TANIMI	48
3.2 İKİNCİ DERECEDEDEN TASARIMLARIN ÖZELLİKLERİ	51
3.3 İKİNCİ DERECEDEDEN BİR MODELİN UYARLANMASI	58
3.4 İKİLİ TEPKİ YÜZEYİ OPTİMİZASYONU	65
BÖLÜM-4 UYGULAMA VE SONUÇ	73
4.1 UYGULAMA	73
4.2 SONUÇ VE ÖNERİLER	81
KAYNAKLAR	83
ÖZGEÇMİŞ	85

AMAÇ

Birçok girdi deęişkeninden etkilenen tepki yüzeyi yöntem bilimi ve tasarımlarında karşılaşılabacak genel yüzey denkleminin cebirsel yapısını incelemek, özel hallerde geometrik yorumunu yapmak, optimum yönde araştırılan yüzeyin matematiksel gösterimini ifade ederek Kimya, Tıp, Ziraat, Psikoloji, Eğitim, Sanayi, Ekonomi vb. gibi dallarda yapılan deneysel ve araştırma problemleri ile ilgili çalışmalara katkıda bulunmaktadır.



ÖZET

Bu çalışmada, deneyci veya araştırmacıların kontrolündeki X vektörü ile gösterilen bir veya daha fazla değişkenden etkilenen, β bilinmeyen parametreler vektörü ve deneysel hataların sıfır ortalama ve σ^2 varyansı ile normal dağıldığı varsayımı altında, $E(Y) = \mu = f(x, \beta)$ şeklinde yazılabilen gerçek tepki yüzeyinin, uygun koşullar altında, Taylor açılımından yararlanarak polinomal yaklaşımı ve her durumda bir diferansiyel denklemin genel çözümü olduğu cebirsel olarak gösterilmiştir. En küçük kareler yöntemi kullanılarak matrissel denklemlerden oluşan bazı sonuçlar ispatlanmış ve tepki yüzeyine, basit yapılı birinci dereceden polinomal modellerle yaklaşım yapılmış, uyum eksikliği veya yüzey eğriselliğinden dolayı ikinci dereceden polinomal yaklaşıma ihtiyaç duyulmuştur. Bu modeli saf birinci dereceden ve karıştırılmış ikinci dereceden terimlerden arındırmak için önce öteleme sonra dönderme yapılarak bulunan kanonik formun katsayıları yardımıyla uyarlanan yüksek dereceli polinomun geometrik yorumu ile bazı tasarımlar incelenmiştir. Çalışılan uygulamada, [KHURİ. A. And John A. CORNEL (1987) Exercises 5-6] verilerin durumuna göre polinomal modeller uyarlanmış, durağan noktada maksimum ürün elde edilmiş ve uyum eksikliği test edilmiştir.

SUMMARY

In this Study, the polynomial approximation is applied by the Taylor expression to the equation of the expected response surface; The equation $E(Y) = \eta = f(x, \beta)$ is effected by one or more variables is expressed by the X vector that is controlled by the experimenters or the researches, and β is unknown parameters vector, and the standard errors are under normal distribution assumption. $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$ As a result, it is shown algebraically that the equation is a general solution of a differential equation in all cases. The least squares method is used, and some of the results that is formed by the matrix equations are proved, and also the simply formed first-order polynomial model is applied, but it is recognised that the lack of fit and the curvature of the surface requires the application of second-order polynomial expressions. First the model is translated then rotated in order to eliminate the pure first-order terms and mixed second-order terms. Consequently, the high order polynomial is geometrically interpreted by the coefficients of the canonical form that is found after, and also some designs are investigated. In the application [KHURI. A. and J.A. CORNEL-1987 Exercises 5-6] that is studied, polynomial models are applied with respect to data, and maximum product is attained at the stationary point and lack of fit is tested.

BÖLÜM-1

GENEL BİLGİLER

1.1 TEPKİ YÜZEYİ YÖNTEM BİLİMİ NEDİR?

Tepki yüzeyi yöntem bilimi, ilgili bir tepkinin birkaç değişkenden etkilendiği problemlerin modellenmesinde ve analizinde yararlı olan matematiksel ve istatistiksel tekniklerin bileşkesidir.

Burada incelenen değişkenler, özel bir uygulama alanına bağlı olacaktır. Örneğin, kimyasal bir araştırmadaki tepki, sülfürik asidin bir ürünü olabilir ve girdi değişkenler tepkimenin sıcaklığı ve basıncı olabilir veya eğitim bilimlerinde herhangi bir matematik konusunun işlenmesinden sonra, konunun anlaşılıp anlaşılmadığı test edilebilir. Araştırmacı, öğrencilerin notları ile başarıyı etkileyen faktörler arasında bir ilişkiyi merak edebilir. Kimyasal araştırmadaki tepki deneyi için basınç ve sıcaklık gibi iki girdi değişkeni vardır. Bunlar X_1 ve X_2 olmak üzere,

$$\eta_j = f(X_1, X_2) \quad (1.1.1)$$

şeklindeki bir fonksiyonel ilişki araştırılır. Genel olarak araştırmalarda, X_1, X_2, \dots, X_k gibi k tane girdi değişkeni ile karşı karşıya kalınabilir. Bu durumda, k tane girdi değişkeni ile ortalama tepki arasındaki ilişki,

$$\eta_j = f(X_1, X_2, \dots, X_k) \quad (1.1.2)$$

şeklinde yazılabilir. Daha kısa bir gösterim olarak X, X_1, X_2, \dots, X_k 'ların bir sütun vektörü olmak üzere, ortalama tepki fonksiyonunu aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\eta_j = f(X) \quad (1.1.3)$$

X 'ler için deneyler tekrarlandıkça, ölçülen tepki, ölçüm hatalarından dolayı değişim gösterir. Bu nedenle μ_j ortalama ürün ya da çıktı olarak alınabilir. Y ile göstereceğimiz bu tepkinin beklenen değeri μ_j ile gösterilir. Yani $E(Y) = \mu_j$ herhangi özel bir uygulamada $Y - \mu_j$ farkına, yani gözlenmiş Y değeri ile μ_j ortalama değeri arasındaki farka hata denir. Bu hata genellikle ε ile gösterilir.

$E(Y) = f(X) = \mu_j$ şeklindeki yüzeye tepki yüzeyi denir.

Tepki yüzeyi yöntem biliminin temel amacı,

$$Y = f(X) + \varepsilon \quad (1.1.4)$$

formundaki hatadan etkilenen fonksiyonel ilişkinin bazı özelliklerini incelemektir.

Burada hataların sıfır ortalama ve ortak σ^2 varyansı ile normal dağılıma sahip olduğu kabul edilir.

μ_j ile bir tek X girdi değişkeni arasındaki ilişki iki boyutlu bir uzayda basit bir eğri ile gösterilebilir. f fonksiyonunun yapısı tam olarak bilinmemesine rağmen, bir matematiksel elastik (franch) eğrisi gibi hareket eden bir polinomun grafiğine benzer. Bu basit eğriyi, fonksiyonun yerel bir gösterimi olarak ele alabiliriz. Benzer olarak μ_j ile X_1 ve X_2 gibi iki veri arasındaki ilişki genellikle üç boyutlu bir uzayda basit bir eğriyle gösterilebilir ve iki boyutlu elastik bir eğri gibi hareket eden uygun bir polinomun yerel yaklaşımı olarak kullanılabilir. Bu elastik eğriler doğal bir fonksiyon tipini sağlamaz. Fakat çalışılan sınırlı bir bölgede yerel bir yaklaşım sağlar.

Grafik tekniklerin deneysel kullanımı, bir çok bilimsel problemin çözümünde önemli rol oynar. Tepki yüzeyi yöntem biliminde temel amaç, sadece bir veya birden fazla verinin olduğu durumlarda, benzer deneysel süreci genişletmektir. Daha yüksek boyutlu durumlarda, basit grafiksel yöntemler yetersizdir. Fakat polinomların derecesini büyütürük ve uyarlanmış deneysel fonksiyonların özelliklerini göz önüne alarak uygun hale getirilebilir.

Bu konudaki istatistiğin rolü hakkında daha geniş bilgi Box (1976)'da verilmiştir.

1.2 TEPKİ YÜZEYİ TASARIMINDA DENEYSEL SÜREÇ

İlk bakışta deneysel bir araştırmanın gidişi oldukça keyfi ve belirsiz bir aşama olarak görünür. Örneğin varsayalım ki, özel bir bilim veya teknoloji alanında yetkin araştırmacılardan iki grup oluşturduk. Bağımsız çalışmak koşulu ile gruplara aynı cinsten genel bir bilimsel problem sunduk ve her gruba problemin çözümünü sağlayacak bir tasarım yapmalarını söyledik. Grupların aynı tasarımları sunamayacağı kesindir. Birincisi, gruplar deneyin planlama aşamasında görüş ayrılığına düşeceklerdir. Bu ayrılıklar aşağıdaki gibi ortaya çıkacaktır.

a) Hangi $X_1, X_2 \dots$ girdi değişkenleri kullanılmalıdır?

Değişkenler, kimyasal bir problemde, genellikle basınç ve sıcaklık olarak seçilir. ama bunların dışında hangi değişkenlerin kullanılacağı konusu farklılık gösterir. Daha büyük ayrılıklar sosyal bilimlerde ve psikolojik deneylerde ortaya çıkar.

b) X değişkenleri orjinal haliyle mi yoksa dönüştürülmüş değerleriyle mi kullanılmalıdır?

Matematiksel işlemleri basitleştirmek için büyük değerler alan X değişkenleri için $\ln(X)$ dönüşümü kullanılabilir. Verilerin sayısal yapısına göre $X^{-2}, X^{-1}, X^{1/2}$ vb gibi dönüşümler tercih edilir. Tek bir değişken için bir dönüşümün herhangi bir biçimi o değişken için metrik bir tercih olarak adlandırılır. Daha genel olarak 2 veya daha fazla değişken için dönüşüm gerekebilir. Örneğin iki nitrojenli gübrenin X_1 ve X_2 miktarlarının araştırıldığı bir ziraat deneyini düşünelim. X_1 ve X_2 veri değişkenlerini ele almak yerine, nitrojen gübresinin $X_1 = u_1 + u_2$ toplam miktarı veya $X_2 = u_1 / u_2$ oranı, eğer u_1 ve u_2 bazındaki bir tepki ilişkisini daha basit bir şekilde ifade edebiliyorsa kullanılabilir.

c) Tepki nasıl ölçülebilir?

Tepkinin nasıl tanımlandığı kesin değildir. Bu nedenle uygun tepki, araştırmacının deneysel bilgisine bağlıdır ve genellikle tartışma konusudur.

d) Verilen bir X değişkeninin hangi düzeylerinde deney uygulanmalıdır?

Kimyasal bir deneyde sıcaklığın en önemli veri olduğunu kabul edelim. Bir araştırmacı özel bir çalışma sisteminde, sıcaklık ile ilgili deneylerin 90°C-150°C arasında yapılması gerektiğine inanabilir. Sistemin sıcaklığa aşırı duyarlı olduğuna inanan bir başka araştırmacı 100°C-160°C arasını seçebilir. Ayrıca araştırmacılar her bir deney için sıcaklığın kaç derece artırılması gerektiği konusunda deneysel bilgilerini kullanırlar. Yani uygun bir ölçek seçmek zorundadırlar.

e) Özel bir durumda karmaşık bir model neden gereklidir?

Bu soru b, c, d soruları ile ilgilidir. Ne kadar uygun dönüşümler ve metrikler seçilirse uygulanacak model o kadar basitleşir. Ayrıca X uzayındaki ilgilenilen bölge ne kadar büyük ise ihtiyaç duyulan model de o kadar karmaşıktır.

f) Nitel değişkenler nasıl seçilmelidir?

Yukarıdaki tartışmanın tümü konsantrasyon gibi niceliksel verilere yöneliktir. Benzer belirsizlikler hammadde türü, katalizör türü ve tohum çeşidi gibi nitel verilerle ilgili deneylerde de ortaya çıkar. Örneğin bir malın üretiminde kullanılan hammaddeler için hangi değişkenler kullanılmalıdır? Test edilen değişkenler en ucuzundan mı veya en fazla ürün vereceğine inanılandan mı olsun? Sorunun yanıtı araştırmacının bakış açısına bağlıdır.

g) Hangi deneysel tasarım kullanılmalıdır?

Bu soru şimdiye kadar incelediğimiz soruların tümünü kapsar. Yapılacak tasarımın optimalliği amaçlanır. Tasarımın optimalliği sorunu, metriğin keyfi seçimi, dönüşüm ve çalışılacak bölgenin şekil ve büyüklüğü ile yakından ilgilidir. Deneysel tasarım için; Deneylerin yapıldığı girdi ve çıktılar uzayı, değişkenlerin ölçülmesi gerektiği ölçüler metrikler ve dönüşümler, ilgili bölgenin yerleşimi ve bu bölgedeki tasarım modelinin belirlenmesi gerekir.

Yukarıdaki tartışmalardan, tepki yüzeyi tasarım yönteminin tek olmadığı sonucunu elde ederiz.

Tepki yüzeyi tasarımı bir sıralı süreçtir. Yani bir iteratif yöntemdir. Amaç araştırmacıyı en hızlı ve en kısa zamanda optimum bölgenin komşuluğuna ulaştırmaktır. Bunun için TAHMİN-TASARIM-DENEY-ANALİZ sıralı süreci her deney

tekrarlandıkça uygulanır. Buradaki tasarım ve analiz sadece istatistiksel tasarım ve analizi nitelendirmez. Tasarım, çalışılan bağımlı bir modeli geliştirmek, test etmek ve hesaplamada uygun bir deneyin sentezidir. Analiz, tanımlanmış bir modelin doğruluğunu göstermek veya geliştirilmiş yeni bir modelin oluşumuna yol açan deneysel sonuçların incelenmesidir. İteratif yöntem tepki yüzeyi yöntem bilimine has değildir. Rasgele seçilmiş bloklar, Latin kareler ve faktöryel tasarımlar gibi geleneksel tasarımlar kullanıldığından beri istatistikçiler tarafından deneme yanılma sürecindeki yapı blokları oluşturmada kullanılmıştır.

1.3 TEPKİ FONKSİYONLARINA YAKLAŞIM

Tanım 1.3.1: Bazı fiziksel çalışmalarda, X_1, X_2, \dots, X_k tepkinin ilk karışımları, sıcaklıkları ve basınçları ölçen veri değişkenleri, $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k$ aktivasyon enerjileri, difizyon katsayıları, termal iletkenlik gibi şeyleri ölçen birtakım fiziksel parametreler ve f , \mathbf{X} 'in sürekli fonksiyonu olmak üzere;

$$E(Y) = \eta = f(\mathbf{X}, \theta) \quad (1.3.1)$$

ifadesine mekanik model denir.

Mekanik modelin matematiksel yorumu

Mekanik model diferansiyel veya integral denklemlerin bir çözümüdür.

İspat: Hal.1

Keyfi bir $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k)$ vektörünü sabit parametre olarak içeren $\eta = f(\mathbf{X}, \theta)$ mekanik modeli verilsin. Burada $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \dots, X_k)$ girdi değişkenlerinin vektörü ve $f(\mathbf{X}, \theta)$, \mathbf{X} 'in sürekli bir fonksiyonu olduğundan

$$\frac{d\eta}{d\mathbf{X}} = f'(\mathbf{X}, \theta)$$

olur.

$\frac{d\eta}{dX} = f'(X, \theta)$ ve $\eta = f(X, \theta)$ denklemleri arasında θ 'nın yok edilmesiyle

$F(X, \eta, \eta') = 0$ şeklinde birinci mertebeden bir adi diferansiyel denklem elde edilir.

Hal.2. $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k$ parametrelerini ve X_1, X_2, \dots, X_k bağımsız girdi değişkenlerini içeren $\eta = f(X_1, X_2, \dots, X_k; \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k)$ mekanik modeli $i = 1, 2, \dots, k$ için X_i değişkenlerinin sürekli fonksiyonu ise, modelde bağımsız değişken sayısı birden fazla olduğundan η 'nin her bir X_i 'ye göre kısmi türevleri alınır. Verilen model ile aşağıdaki sistem oluşturulabilir.

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \eta}{\partial X_1} &= \frac{\partial f}{\partial X_1} \\ \frac{\partial \eta}{\partial X_2} &= \frac{\partial f}{\partial X_2} \\ &\vdots \\ \frac{\partial \eta}{\partial X_n} &= \frac{\partial f}{\partial X_n} \end{aligned} \right\} \eta = f(X_1, X_2, \dots, X_k, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k)$$

denklem sisteminin ortak çözümüyle $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k$ parametreleri yok edilir. Bu durumda parametrelerden arındırılmış

$$F\left[X_1, X_2, \dots, X_k, \frac{\partial f}{\partial X_1}, \frac{\partial f}{\partial X_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial X_n}\right] = 0$$

formunda bir kısmi diferansiyel denklem bulunur.

Sonuç olarak mekanik model her iki durumda da bir diferansiyel denklemin çözümüdür.

Pratikte mekanik model mevcut olmadığından η ile X arasındaki ilişkinin düzgün olduğu kabul edilerek $f(X, \theta)$, $g(X, \beta)$ interpolasyon fonksiyonun bir yerel yaklaşımı olarak alınabilir. X deneysel değişkenlerinin sınırlı aralıklarında β elemanları interpolasyon fonksiyonunun katsayılarıdır. Bunlar fiziksel sistemdeki θ katsayıları ile ilgilidir. Ancak farklıdır.

Tanım 1.3.2: $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k$ bilinmeyen parametreler, g, X_1, X_2, \dots, X_k değişkenlerinin sürekli bir fonksiyonu olmak üzere,

$$E(Y) = g(X, \beta) \quad (1.3.2)$$

interpolasyon fonksiyonuna sistem için bir yerel yaklaşım modeli denir.

Yukarıda tanımlanan $\eta_j = f(X, \theta)$ mekanik modeli ve $\eta_j = g(X, \beta)$ saf deneysel modeli uç noktalardaki durumları gösterir. Birincisi sistem hakkında bir çok şeyin bilindiği bir uç noktada uygundur. Diğeri ise tepki yüzeyinin yerel olarak düzgün olduğunun bilinmesi dışında hiçbir şeyin farz edilmediği bir uçta olur. Bu durum deney ilerledikçe ve bilgiler toplandıkça değişebilir. Gerçek araştırmalar yukarıdaki uç noktalar ve aradaki her noktada oluştuğu için istatistiksel analizlere ihtiyaç duyulmaktadır.

Deneysel çalışmalarda, hiç bir gerçek problem daha önce belirlenen kategorilere tam olarak uyum sağlamaz. Ancak yaklaşım fonksiyonu için aşağıdaki sürecin izlenmesi uygulamada araştırmacılara kolaylık sağlar.

a) Genelde araştırmanın başında, η_j 'yi etkileyen X değişkenler uzayındaki X_1, X_2, \dots değişkenlerinin bir çoğunun varlığı söz konusudur. Bunları belli bir sayıya indirmek için, Biyolog-Kimyacı-Psikolog-Ziraatçı gibi araştırmacılarla oturup, en çok önemli olduğuna inandıkları değişkenleri seçmektir. Bu yöntem bazen önemli sakıncalar yaratabilir. Başta önemsiz olduğuna inanılan herhangi bir değişken önemli bir etki oluşturabilir. Bunun için fraksiyonel tasarımlar oluşturulmalıdır.

Örneğin bir araştırmada, $X_1, X_2, \dots, X_9, X_{10}$ η_j tepkisini etkileyen orjinal değişkenler olsun. Bunlardan ikisi araştırmacı tarafından güvenle ihmal edilerek kalan 8 değişken üzerinden 2 seviyeli 16 deneyli bir faktöryel tasarım uygulanmıştır. Ayrıca çalışılan aralıklarda etkili olduğuna inanılan 4 değişken için, araştırmacı ilk 3'ünü kendi düşüncesini doğrulamak ve 4.'sü ise beklenmeyen bir etki gösterebilen değişken olarak alınıp 2^{4-2} fraksiyonel tasarım yapabilir.

Eleme olarak bilinen bu yöntem küçük bloklar halinde yapıldığında çok etkilidir. Bu yöntem Box ve Hunter (1961-a-b)'de ayrıntılı olarak ele alınmıştır.

b) Nicel girdi deęişkenleri için deneysel hata, gözlenen tepkinin kapsadığı aralıkla karşılaştırıldığında çok büyük deęilse en çok ilgilenilen bölgedeki tepki fonksiyonunu hesaplamaya çalışmak yararlıdır. Birçok problemde, $f(\mathbf{X},\theta)$ gerçek tepki fonksiyonun yapısı bilinmedięi gibi kolaylıkla elde edilemeyebilir. Ancak bu fonksiyona $g(\mathbf{X},\beta)$ gibi bir polinom veya derecelendirme fonksiyonu ile yerel olarak yaklaşılabılır.

i) Yeterli yaklaşımı sağlamak için deneylerde ihtiyaç duyulan tekrar sayısı

ii) Çalışılan deneysel bölgenin konumu

iii) Girdiler için uygun dönüşüm, çıktılar için uygun yaklaşım fonksiyonu

iv) Yaklaşım fonksiyonu ve dolayısıyla tasarımların karmaşıklık derecesi.

Tepki yüzeyi yöntem biliminin iteratif yapısını oluşturur. Bu yapı Box ve Hunter (1978)'de ayrıntılı verilmiştir.

c) Bazı çalışmalarda, yaklaşım fonksiyonu yerine mekanizmanın temel özelliklerini göz önüne alan ve amaca uygun sonuçlar veren $f(\mathbf{X},\theta)$ mekanik modeli tercih edilebilir. Bu modeller doğal olarak kapalı formlarda veya diferansiyel denklemlerle ifade edilebilir. Fakat bu durumda, hesaplama aletlerinde ve lineer olmayan tasarım teorisinde birtakım problemlerle karşılaşılır. Mekanik modelin aşağıdaki gibi yararları vardır.

i) Yapılan araştırmanın kavranmasına bilimsel katkı sağlar.

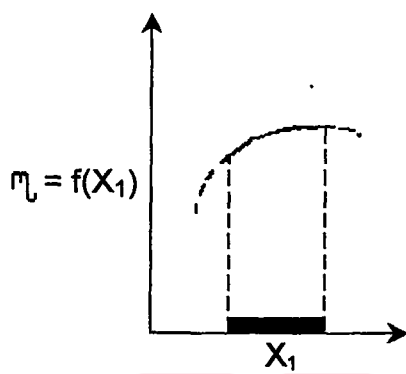
ii) Bütün veri deęişkenler için aralıkların tamamında olmasa da daha fazla deneysel araştırmaya ihtiyaç duyulduğunda genelleştirme için iyi bir temel oluşturur.

iii) Parametrelerin kullanımında ve tepki yüzeyi parametreleri için yansız kestirimler sağlamada kolaylık sağlar.

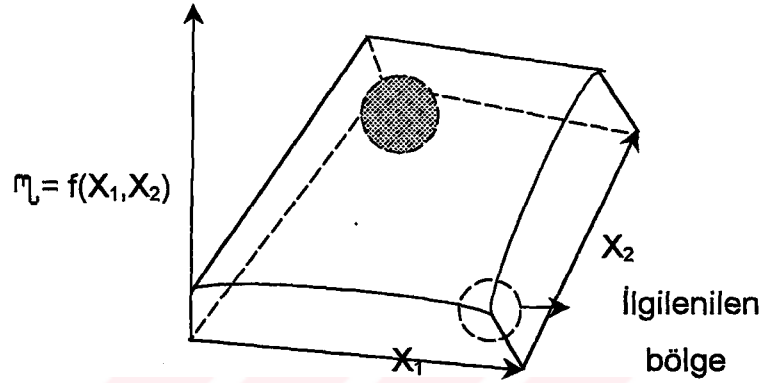
Araştırmalarda, bulunan kırılğan bir grafiğin yapısı araştırmacıda ümitsizlik yaratabildięi gibi, grafięi modellendiren mekanik fonksiyonun yapısı farklı kişiler arasında tartışma konusu olabilmektedir. Böyle durumlarda modelleri ayırt eden yöntemler kullanılmalıdır.

1.4 Tepki İlişkisinin Geometrik Gösterimi

(1.1.3) ile verilen gerçek tepki yüzeyi eğer bir tek X_1 girdi değişkeninden oluşuyorsa Şekil 1-a'daki gibi iki boyutlu bir uzayda bir tepki eğrisiyle, X_1 ve X_2 girdi değişkeni varsa, üç boyutlu bir uzayda X_1 ve X_2 'lere karşılık η yüzeyinin grafiği Şekil 1-b'deki gibi tasarlanabilir.

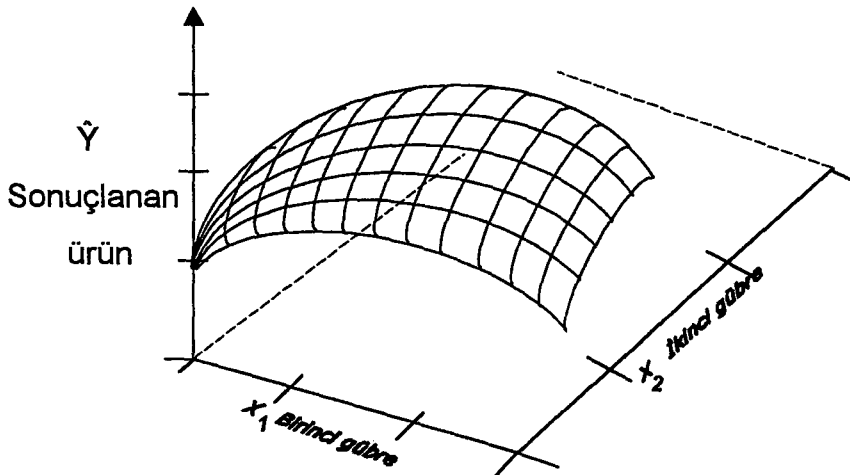


Şekil 1-a
Tek değişken için ilişkilendirilen
tepki yüzeyi



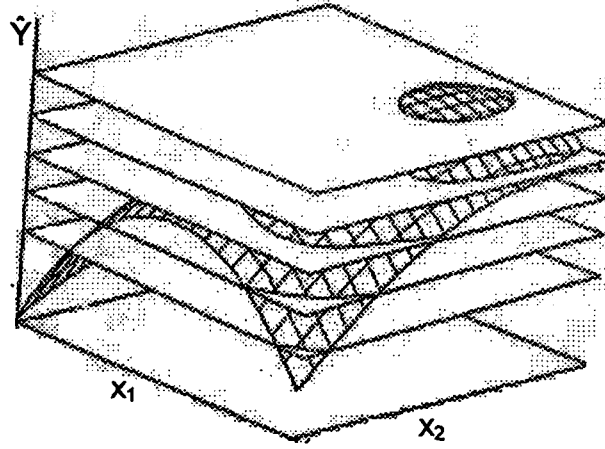
Şekil 1-b
İki değişken için ilişkilendirilen
tepki yüzeyi

K tane girdi değişkeni için $k+1$ boyutlu bir uzayda bir tepki yüzeyinden söz edilebilir. Örneğin her biri 4 düzeyinde uygulanmış iki farklı gübrenin doğal girdi değişkenleri X_1 ve X_2 olmak üzere 2^4 tasarımı yapılarak bu değişkenlere karşılık gelen kodlanmış veya dönüştürülmüş değişkenlerin x_1 ve x_2 olduğunu kabul edelim. Değişkenler (x_1, x_2) ve $\eta = f(x_1, x_2, \beta)$ tepki yüzeyi fonksiyonu olduğunda üç boyutlu uzayda (x_1, x_2) 'lerin her bir düzeyine karşılık gelen η değerleri birleştirilerek Şekil 1-c elde edilebilir.



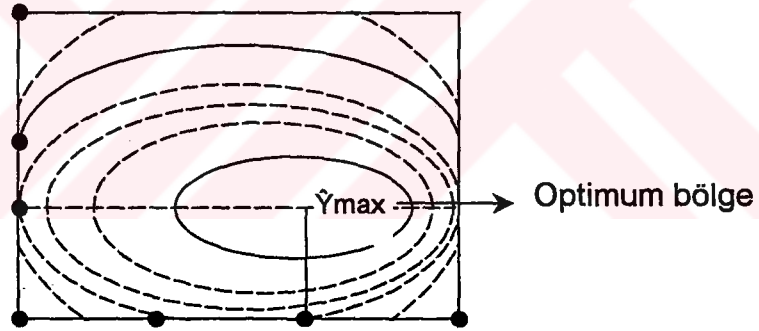
Şekil 1-c

Şekil 1-c'de elde edilen ürüne karşılık gelen yüzey x_1x_2 düzlemine paralel olarak aşağıdaki gibi kesilirse,



Şekil 1-d

bulunur. Tepki yüzeyinin (x_1, x_2) düzlemindeki iz düşümleri ile tepki yüzeyinin kontur çizimi elde edilir. En içteki bölge ise optimum bölgesidir. Yani maksimum ürünün elde edildiği bölgedir.



Şekil 1-e

Tepki Yüzeyinin Kontur Çizimi

Tepki Yüzeyinin Polinomal Gösterimi :

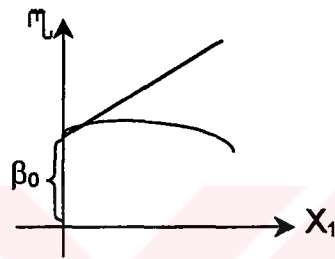
Tek bir X_1 faktörü için tepki fonksiyonu $\eta = \emptyset(X_1)$ olsun. Eğer $\emptyset(X_1)$ düzgün sürekli bir fonksiyon ise herhangi bir X_{10} noktası civarında Taylor serisinin yerel yaklaşımı olarak temsil edilebilir.

$\eta = \emptyset(X_1)$ fonksiyonun $X_1=X_{10}$ noktasında Taylor serisine açarsak,

$$\eta = \emptyset(X_{10}) + (X_1 - X_{10})\emptyset'(X_{10}) + \frac{1}{2!}(X_1 - X_{10})^2\emptyset''(X_{10}) + \dots$$

bulunur. Burada $\emptyset'(X_{10})$, $\emptyset''(X_{10})$ sırasıyla $\emptyset(X_1)$ fonksiyonunun X_{10} noktasında hesaplanmış türevleridir. Bu seri $\eta_L = \emptyset(X_1) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_{11} X_1^2 + \dots$ formunda bir polinoma indirgenebilir. Burada β_0 , β_1 ve β_{11} katsayıları $\emptyset(X_1)$ 'in X_{10} 'daki değeri ve bu noktadaki hesaplanmış türevlerinin değerlerine bağlıdır.

Yalnız birinci dereceden terimlerle $\eta_L = \beta_0 + \beta_1 X_1$ formunda düzgün doğrusuyla birinci dereceden model bulunur. İkinci dereceden terimlerin kullanılmasıyla $\eta_L = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_{11} X_1^2$ formunda parabol denklemi elde edilir. Bunların grafiği $\beta_0 > 0$ $\beta_1 > 0$ $\beta_{11} < 1$ için,



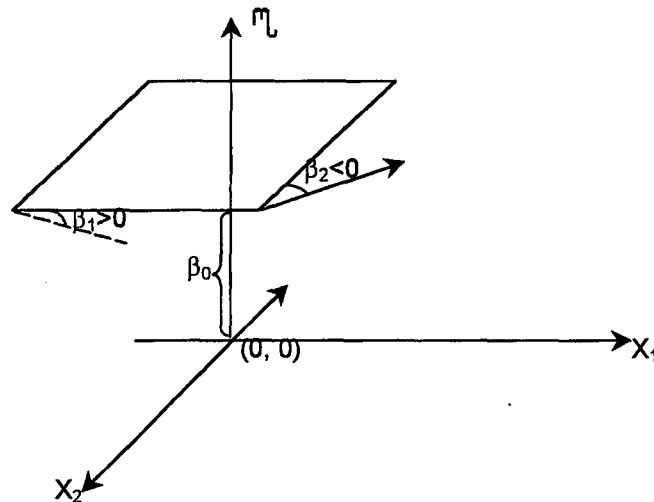
şeklindedir.

X_1 ve X_2 gibi iki faktör düzeyi için polinomal denklem,

$$\eta_L = \emptyset(X_1, X_2) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \dots$$

şeklinde verilir. Eğer bu denklem yalnız birinci dereceden terimleri içeriyorsa

$\eta_L = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2$ formunda, birinci dereceden bir polinomal modele indirgenir. Bunun grafiği aşağıdaki gibi üç boyutlu uzayda tasarlanabilir.



Polinom denklem ilk altı terimden oluşuyorsa ikinci dereceden model adını alır ve grafiksel olarak ikinci dereceden tepki yüzeyi belirlir. Şekil olarak Şekil 1-c ile benzerdir.

Bu denklemdaki $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_{12}, \dots$ parametreleri regresyon katsayıları olarak adlandırılır. X_1 ve X_2 değişkenleri deneysel ya da regresyon fonksiyonunun girdi değişkenleridir. $X_1=0$ ve $X_2=0$ noktası deneysel bir nokta ise, bu noktadaki $\emptyset(X_1, X_2)$, β_0 katsayısını verir. β_1, β_2 katsayıları $\frac{\partial \emptyset}{\partial X_1}$ ve $\frac{\partial \emptyset}{\partial X_2}$ kısmi türevlerinin $X_1=0$ ve $X_2=0$ noktasında hesaplanmış değerler olup modelin birinci dereceden etkileridir. $\beta_{11}, \beta_{22}, \beta_{12}$ katsayıları $\frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \emptyset}{\partial X_1^2}, \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \emptyset}{\partial X_2^2}$ ve $\frac{\partial^2 \emptyset}{\partial X_1 \partial X_2}$ kısmi türevlerinin sırayla $X_1=X_2=0$ noktasında hesaplanmış değerleri olup modelin ikinci dereceden etkileri olarak bilinir. Benzer olarak $\beta_{111}, \beta_{222} \dots$ vb gibi etkililer de bulunabilir.

1.5 TEPKİ YÜZEYİ İLE REGRESYON ANALİZİ İLİŞKİSİ

N tane gözlemin kullanılması koşulu altında

$$Y_u = \beta_0 + \beta_1 X_{u1} + \beta_2 X_{u2} + \dots + \beta_k X_{uk} + \epsilon_k \quad u=1,2,\dots,N \quad (1.5.1)$$

birinci dereceden modelin ortalamasıyla tepki fonksiyonu tanımlanabilir. Burada Y_u , u'ncü denemede gözlenmiş tepkiyi, X_{ui} , u'ncü denemede i'nci faktörün düzeyini, β_0 ve $i=1,2,\dots,N$ için β_i 'ler bilinmeyen parametreler ve ϵ_u , Y_u 'daki rastgele hata terimini gösterir. Hatalar için aşağıdaki varsayımlar yapılır.

- ϵ_u rastgele hataları sıfır ortalama ve ortak σ^2 varyansına sahiptir.
- ϵ_u rastgele hataları istatistiksel olarak bağımsızdırlar.

(F ve t istatistiklerinin anlamlılık testleri ve güven aralığı kestirim yöntemleri için bu varsayımlar yeterlidir.)

- ϵ_u rastgele hataları normal dağılıma sahiptir. Yani $u=1,2,\dots,N$ için $\epsilon_u \sim N(0, \sigma^2)$ 'dir.

(1.5.1) denklemindeki katsayıların kestirimi için en küçük kareler yöntemini kullanırsak,

$$R(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k) = \sum_{u=1}^N (Y_u - \beta_0 - \beta_1 X_{u1} - \beta_2 X_{u2} - \dots - \beta_k X_{uk})^2$$

eşitliğinin minimize edilmesiyle b_0, b_1, \dots, b_k değerleri elde edilir.

b_0, b_1, \dots, b_k parametreleri, minimize edilen $R(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k)$ 'nin $k+1$ tane normal denkleminin ortak çözümüyle elde edilir. Yani,

$$\left. \begin{aligned} b_0 N + b_1 \sum X_{u1} + b_2 \sum X_{u2} + \dots + b_k \sum X_{uk} &= \sum Y_u \\ b_0 \sum X_{u1} + b_1 \sum X_{u1}^2 + b_2 \sum X_{u1} X_{u2} + \dots + b_k \sum X_{u1} X_{uk} &= \sum X_{u1} Y_u \\ \vdots & \\ b_0 \sum X_{uk} + b_1 \sum X_{uk} X_{u1} + b_2 \sum X_{uk} X_{u2} + \dots + b_k \sum X_{uk}^2 &= \sum X_{uk} Y_u \end{aligned} \right\} \quad (1.5.2)$$

denklemlerinin ortak çözümü yapılır.

N tane gözlem altında (1.5.1) denklemini matris gösteriminde yazarsak,

$$Y = X\beta + \varepsilon \quad (1.5.3)$$

burada

$$Y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix}_{N \times 1}$$

$$X = \begin{bmatrix} 1 & X_{11} & X_{12} & \dots & X_{1k} \\ 1 & X_{21} & X_{22} & \dots & X_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & X_{N1} & X_{N2} & \dots & X_{Nk} \end{bmatrix}_{N \times (k+1)}$$

$$\beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix}_{(k+1) \times 1}$$

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_N \end{bmatrix}_{N \times 1} \text{ 'dir.}$$

(1.5.2) deki normal denklemler

$$X'Xb = X'Y \quad (1.5.4)$$

formunda yazılabilir. (1.5.3) denklemindeki β 'nin elemanlarının b en küçük kareler kestiricileri

$$b=(X'X)^{-1}X'Y \quad (1.5.5)$$

gibidir. (1.5.3) deki X matrisi tam sütün rankına sahip $(X'X)^{-1}$, $X'X$ matrisinin tersi olup $X'X$ ve $(X'X)^{-1}$ matrisleri simetriktir.

b kestiricisinin istatistiksel özellikleri ε 'nin elemanlarının özellikleri göz önüne alınarak kolaylıkla tanımlanabilir.

$E(\varepsilon)$ ve $\text{Var}(\varepsilon)$ sırasıyla ε hata vektörünün ortalama vektörü ve varyans-kovaryans matrisi olmak üzere, varsayım a ve b'den $E(\varepsilon)=0$ ve $\text{Var}(\varepsilon)=E(\varepsilon\varepsilon')= \sigma^2 I_N$ olup burada I_N , $N \times N$ boyutlu birim matristir.

b 'nin ortalaması veya beklenen değeri

$$\left. \begin{aligned} E(b) &= E[(X'X)^{-1}X'Y] \\ &= E[(X'X)^{-1}X'(X\beta+\varepsilon)] \\ &= E[(X'X)^{-1}X'X\beta+(X'X)^{-1}X'\varepsilon] \\ &= E(\beta)+(X'X)^{-1}X'E(\varepsilon) \\ &= E(\beta) = \beta \end{aligned} \right\} \quad (1.5.6)$$

Böylece b kestiricisinin $Y=X\beta+\varepsilon$ modelindeki β vektörü için yansız bir kestirici olduğunu söyleyebiliriz.

b kestiricisinin varyans-kovaryans matrisi

$$\begin{aligned} \text{Var}(b) &= \text{Var}[(X'X)^{-1}X'Y] \\ &= (X'X)^{-1}X' \text{Var}(Y)X(X'X)^{-1} \end{aligned}$$

$\text{Var}(Y) = \text{Var}(\varepsilon) = \sigma^2 I_N$ olduğundan

$$\text{Var}(b) = (X'X)^{-1} \cdot \sigma^2 \quad (1.5.7)$$

dir. $C = (X'X)^{-1} \sigma^2$ matrisinin i 'nci köşegen elemanına karşılık gelen $c_{ij} \sigma^2$, b 'nin i 'nci elemanı olan b_i 'nin varyansıdır. b_i 'nin standart hatası b_i 'nin varyansının pozitif karekökü olan $\sqrt{c_{ij} \sigma^2}$ dir. C 'nin $C_{ij} \sigma^2$, i, j 'nci elemanı b 'nin b_i ve b_j elemanları arasındaki kovaryans'tır. Eğer ε hataları ortak olarak normal dağılmış ise $b \sim N[\beta, (X'X)^{-1} \sigma^2]$ dir.

Uydurulmuş bir model bulmadaki amaçlardan biri deneysel bölgedeki noktalar boyunca tahmin edilmiş tepki değerleri için bir model kullanmaktır. $P=k+1$ olmak üzere (1.5.3) denklemindeki X matrisinin bir satırının elemanlarına karşılık gelen elemanların $1 \times p$ boyutlu bir vektörü X'_p olsun. Eğer b, β 'nin elemanlarının kestirimlerini gösteriyorsa, deneysel, bölgedeki herhangi bir $x=(X_1, X_2, \dots, X_k)'$ noktasında tepkinin tahmin edilmiş değeri için

$$\hat{Y} = x'_p b \quad (1.5.8)$$

yazılabilir.

u 'ncü gözleme karşılık gelen tepkinin tahmin edilmiş değeri $\hat{Y}_u = \hat{Y}(x_u) = x'_{up} b$ şeklindedir. Burada X'_{up} , X 'in u 'ncü satırıdır. Bundan sonra x noktasında Y 'nin tahmin edilmiş değerini $\hat{Y}(x)$ notasyonu ile göstereceğiz. Tahmin edilmiş $\hat{Y}(x)$ 'in yeterliliğinin bir ölçüsü $\hat{Y}(x)$ 'in varyansı

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{Y}(x)) &= \text{Var}(x'_p b) = x'_p \text{Var}(b) x_p \\ &= x'_p (X'X)^{-1} x_p \sigma^2 \end{aligned} \quad (1.5.9)$$

olarak bulunur.

$\hat{Y}(x)$ 'in standart hatası $\sqrt{\text{Var}(\hat{Y}(x))}$ 'dir.

Böylece (1.5.5)'de b 'yi bulmak için kullanılmış $(X'X)^{-1}$ ters matrisi $\hat{Y}(x)$ 'in varyansında olduğu gibi b 'nin elemanlarının varyans-kovaryanslarının belirlenmesinde de kullanılmıştır.

Uydurulmuş modelde kullanılan tahmin edilmiş tepki değerleri ve doğal olarak gözlenmiş tepki arasındaki fark için aşağıdaki sonuçlar yazılabilir.

u 'ncü denemede uydurulmuş model ile tahmin edilmiş değer ve u 'ncü denemede tepkinin gözlenmiş değeri arasındaki fark, $u=1, 2, \dots, N$ için $r_u = Y_u - \hat{Y}(x_u)$ u 'ncü kalan olarak adlandırılır. Eğer tahmin edilmiş değerler N tane denemenin her birinden bulunmuş ise kalanların vektörü $r=(r_1, r_2, \dots, r_N)'=Y-xb$ 'dir. Burada r_u kalanları ile ε_u hatalarını karıştırmamak gerekir. ε_u kurulmuş modelin kontrol edilmesinde

kullanılır. Kalanlar ise, hataların sabit varyansla bağımsız dağılıma sahip olmaları varsayımıyla veri değerlerinin kontrolü için daha uygundur. Kalanların başka özellikleri ise, uydurulmuş model (b_0) gibi bir sabit terim içeriyorsa, N tane kalanın toplamı sıfırdır. Yani $\sum_{u=1}^N r_u x_{ui} = 0$ 'dır. Diğer yandan $\sum_{u=1}^N r_u \hat{Y}(x_u)$ ve $\sum_{u=1}^N r_u x_{ui}$ çarpımlarının toplamı her $i=1, 2, \dots, k$ için sıfıra eşittir. Matris notasyonundaki özellikler ise,

a) $1'$ birlerden oluşan $1 \times N$ boyutlu bir vektör olmak üzere,

$$\begin{aligned} 1'r &= \Sigma[\hat{Y}(x)] = \Sigma[Y - X(X'X)^{-1}X'Y] \\ &= \Sigma[Y - XX^{-1}(X')^{-1}X'Y] = \Sigma[Y - Y] = 0 \text{ 'dır.} \end{aligned}$$

b) Kestirilmiş değerlerin $N \times 1$ boyutlu vektörü $\hat{Y}(x)$ ise

$$\begin{aligned} \hat{Y}(x) &= Xb \\ &= X(X'X)^{-1}X'Y = RY \text{ gibi yazılabilir.} \end{aligned}$$

İzdüşüm matrisi olarak bilinen R matrisi $N \times N$ boyutlu olup idempotenttir. Kalanların $N \times 1$ vektörü R 'nin terimlerinden belirlenebilir.

$$\begin{aligned} r &= Y - \hat{Y}(x) \\ &= Y - X(X'X)^{-1}X'Y \\ &= (I - R)Y \end{aligned}$$

Son eşitliğin iki yanını $[\hat{Y}(x)]'$ ile çarpılırsa, ve R simetrik idempotent olduğundan $R'=R$ ve $R^2=R$ dir.

$$\begin{aligned} [\hat{Y}(x)]'r &= Y'R'(I - R)Y \\ &= Y'R(I - R)Y \\ &= Y'(R - R^2)Y \\ &= Y'(R - R)Y \\ &= 0 \quad \text{bulunur.} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{c)} \quad \mathbf{X}'\mathbf{r} &= \mathbf{X}'\mathbf{Y} - \mathbf{X}'\hat{\mathbf{Y}}(x) \\
&= \mathbf{X}'\mathbf{Y} - \mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y} \\
&= \mathbf{X}'\mathbf{Y} - \mathbf{X}'\mathbf{Y} \\
&= 0
\end{aligned}$$

elde edilir.

$\hat{\mathbf{Y}}(x)$ 'in varyansı için (1.5.9) formülünde olduğu gibi (1.5.7) denklemindeki \mathbf{b} 'nin varyans-kovaryans matrisi için, hataların σ^2 varyansının bilindiği kabul edilmiştir. Bu varsayıma rağmen σ^2 bir kestiricisine ihtiyaç duyulabilir. Bu kestirici veri değerlerinin analizinden elde edilir. Genel olarak $N > p$ olmak üzere uydurulmuş model p tane parametre içerir ve gözlem sayısı N ise, S^2 kestirimi

$$\begin{aligned}
S^2 &= \frac{1}{N-p} \sum_{u=1}^N r_u^2 \\
&= \frac{1}{N-p} (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{b})'(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{b}) \\
&= \frac{1}{N-p} \text{K.K.T} \tag{1.5.10}
\end{aligned}$$

ile hesaplanır. Burada KKT Kalanların karelerinin toplamıdır. $N-p$ ise S^2 'nin serbestlik derecesidir. Gerçek model $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$ ile verilmiş ise S^2, σ^2 'nin bir yansız kestiricisidir. Ayrıca \mathbf{b} 'nin $\boldsymbol{\beta}$ için en iyi lineer yansız kestiricisi olduğunu söyleyebiliriz. Bunu Gauss-Markow (Graybil, 1961) teoremiyle göstermek mümkündür.

Gözlenmiş verilerin ortalamalarından sapmalarının karelerinin toplamı sapma kareler toplamı olarak adlandırılır.

$$\bar{Y} = (Y_1 + Y_2 + \dots + Y_N) / N$$

olmak üzere sapma kareler toplamı

$$SKT = \sum_{u=1}^N (Y_u - \bar{Y})^2 \tag{1.5.11}$$

Sapma kareler toplamında $Y_u - \bar{Y} = 0$ olduğunda SKT, N-1 serbestlik derecesine sahip olur. Bu kareler toplamı, uydurulmuş model ile açıklanmış kareler toplamı ve uydurulmuş model ile açıklanmamış kareler toplamı gibi iki parçaya ayrılabilir.

Birincisi, Regresyon kareler toplamı olup

$$RKT = \sum_{u=1}^N (\hat{Y}(x_u) - \bar{Y})^2 \quad (1.5.12)$$

formülü ile hesaplanır. $\hat{Y}(x_u) - \bar{Y}$ sapması, u'ncü gözlem için uyarlanmış modelin kestirilmiş değeri ile Y_u 'ların ortalamaları arasındaki farktır. Eğer uyarlanmış model p tane parametre içeriyorsa RKT'nin serbestlik derecesi p-1'dir.

İkincisi, kalan kareler toplamı olup

$$KKT = \sum_{u=1}^N (Y_u - \hat{Y}(x_u))^2 \quad (1.5.13)$$

formülü ile hesaplanır. $(N-1)-(P-1) = N-P$ olduğundan KKT, N-P serbestli derecesine sahiptir.

$1'$ 1xN boyutlu birlerin vektörü olmak üzere SKT, RKT formüllerini matris gösterimi ile aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\begin{aligned} SKT &= Y'Y - \frac{(1'Y)^2}{N} \\ RKT &= \mathbf{b}'\mathbf{x}'Y - \frac{(1'Y)^2}{N} \\ KKT &= Y'Y - \mathbf{b}'\mathbf{x}'Y \end{aligned} \quad (1.5.14)$$

Burada Y, Nx1 boyutlu gözlemlerin vektörü, X rankı p olan NxP boyutlu X_{ui} değerlerinin matrisi, b modeldeki katsayıların kestiriminin px1 boyutlu vektörüdür.

Tablo 1.5 Varyans analizi tablosu

Değişim Kaynağı	Serbestlik derecesi Sd	Kareler top. KT	Ortalama kare OK
(Uydurulmuş model) Regresyon	p-1	SKT	SKT/(p-1)
(Hata) Kalan	N-p	RKT	RKT/(N-p)
Toplam	N-1	KKT	

Uydurulmuş regresyon denkleminin anlamlılığı için geleneksel hipotez testi:

H_0 : β_0 hariç bütün β_i değerleri sıfırdır. (Yokluk hipotezi)

H_1 : β_0 hariç en az bir β_i değeri sıfırdan farklıdır. (Karşı hipotez)

Hataların normalliği varsayımı altında, H_0 testinde ilk olarak, F istatistiğinin hesaplanması gerekir.

$$F = \frac{\text{Regresyon kareler toplamının ortalaması}}{\text{Kalan kareler toplamının ortalaması}} = \frac{SKT/(p-1)}{RKT/(N-p)} \quad (1.5.15)$$

Eğer yokluk hipotezi doğru ise (1.5.15) denklemindeki F istatistiği, pay ve paydasında sırayla (p-1) ve (N-p) serbestlik dereceleri olmak üzere F dağılımına sahiptir. H_0 hipotezinin ikinci adımı, $F_{\alpha, p-1, N-p}$ tablo değeri (1.5.15) deki F'in hesap değeri ile karşılaştırılır. (1.5.15) deki F'in değeri $F_{\alpha, p-1, N-p}$ değerinden büyük ise yokluk hipotezi α anlamlılık düzeyinde reddedilir ve modeldeki $i \neq 0$ için bütün b_i 'lerin model ile açıklanmış değişimi açıklanmamış değişimden daha büyük olduğu sonucuna varılır.

BÖLÜM-2

2.1 BİRİNCİ DERECEDEDEN MODELLER VE TASARIMLAR

Basit yapılı ve az sayıda terim bulundurdıkları için, girdi değişkenleri uzayının bir alt bölgesinde, tepki yüzeyinin gerçek ortalama fonksiyonuna birinci dereceden bir polinomal model ile yaklaşılabılır.

Tanım 2.1 Birinci dereceden modeller uydurularak yapılan tasarımlara birinci dereceden tasarımlar denir.

2.2 BİRİNCİ DERECEDEDEN MODEL

X_1, X_2, \dots, X_k gibi girdi değişkenlerinin birinci dereceden modelinin genel formu

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \varepsilon \quad (2.2.1)$$

şeklindedir. Burada Y gözlenebilen tepki değişkeni, $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$ bilinmeyen parametreler ve ε ise rasgele bir hata terimidir. Eğer ε sıfır ortalamaya sahipse (2.2.1) denklemindeki modeli açıklayıcı (non-random) kısmı, η_j ile gösterilen tepkinin gerçek ortalaması

$$E(Y) = \eta_j = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i \quad (2.2.2)$$

şeklindedir.

Eğer tepki fonksiyonu, bağımsız değişkenlerin lineer bir fonksiyonu tarafından modellenmiş ise yaklaşım fonksiyonu birinci dereceden bir polinomal modeldir.

Birinci dereceden tasarımları oluşturmak için, birinci dereceden modelin N gözlem üzerinde matris formunu aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$Y=X\beta+\varepsilon \quad (2.2.3)$$

Burada $N \geq k+1$ olmak üzere Y , N gözlemin bir sütun vektörü, $\beta=(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k)'$ $(k+1) \times 1$ boyutlu bir bilinmeyen parametreler vektörü, X de $N \times (k+1)$ boyutlu girdi değişkenlerinin bir matrisidir. Bu bölümde X matrisini aşağıdaki gibi özel olarak ele alacağız. $X=[1:D_x]$ Burada 1 , birlerden oluşan $N \times 1$ boyutlu bir sütun vektörü, D_x de (u_i) 'nci elemanı yani X_{ui} 'nin i 'nci girdi değişkeninin u 'ncü sırada yapılan deneyde aldığı değerdir. Burada $u=1,2,\dots,N$, $i=1,2,\dots,k$ dir. Yukarıdaki D_x matrisi girdi değişkenleri düzeyinde tasarım matrisi olarak adlandırılır. (2.2.1) modelindeki deneysel hataların sıfır ortalama ve σ^2 varyansı ile normal dağıldığı ve X matrisinin tam sütun rankına sahip olduğu varsayımı ile β 'nin en küçük kareler kestiricisi

$$b=(X'X)^{-1}X'Y \quad (2.2.4)$$

şeklinde olup bunun en iyi lineer yansız kestirici olduğunu birinci bölümden biliyoruz. Ayrıca b 'nin varyans-kovaryans matrisi ise,

$$\text{Var}(b)=(X'X)^{-1}\sigma^2 \quad (2.2.5)$$

şeklindedir.

Bu bölümde, X_i girdi değişkenlerini aşağıdaki gibi kodlayacağız.

$$X_{ui} = \frac{2(X_{ui} - \bar{X}_i)}{R_i}, \quad u=1,2,\dots,N, \quad i=1,2,\dots,k \quad (2.2.6)$$

Burada, $\bar{X}_i = \sum_{u=1}^N \frac{X_{ui}}{N}$ ve R_i , en yüksek ve en düşük konumlandırılmalar arasındaki

farktır. Bu durumda N tane gözlem altında kodlanmış değişkenlerin değeri $i=1,2,\dots,k$ için

$$\sum_{u=1}^N X_{ui} = 0 \quad (2.2.7)$$

eşitliğini sağlar. (2.2.6) daki dönüşümde, $\bar{X}_1, \bar{X}_2, \dots, \bar{X}_k$ girdi değişkenlerin aritmetik ortalamasını, x_1, x_2, \dots, x_k kodlanmış değişkenleri için $(x_1, x_2, \dots, x_k) = (0, 0, \dots, 0)$ noktası tasarımın merkezi olarak alınacaktır. Eğer D , u 'ncü tasarım noktasındaki kodlanmış değişkenlerin $x_{u1}, x_{u2}, \dots, x_{uk}$ değerlerini u 'ncü satırında bulunduran $N \times K$ boyutlu bir matris ve $\mathbf{1}'$, $1 \times N$ boyutlu birlerin vektörü ise (2.2.7) denklemi $\mathbf{1}'D = \mathbf{0}'$ şeklinde yazılabilir. Burada kullanılan D_x matrisi doğal girdi değişkenlerin matrisi, D ise kodlanmış değişkenlerin matrisidir. Yani,

$$D_x = \begin{bmatrix} X_{1k} & X_{12} \dots X_{1k} \\ \vdots & \vdots \dots \vdots \\ X_{N1} & X_{N2} \dots X_{Nk} \end{bmatrix} \quad N \times k$$

$$D = \begin{bmatrix} X_{1k} & X_{12} \dots X_{1k} \\ \vdots & \vdots \dots \vdots \\ X_{N1} & X_{N2} \dots X_{Nk} \end{bmatrix} \quad N \times k$$

şeklindedir. Bundan sonra tasarım matrisi olarak kodlanmış değişkenlerin matrisi olan D matrisini kullanacağız.

2.3 BİRİNCİ DERECEDEKİ MODELLERİN UYDURULMASI İÇİN TASARIMLAR

Eğer (2.2.2) denklemindeki model gerçek ortalama tepki için yeterli bir gösterim ise, parametrelerini kestirmek için seçilen bir tasarım, ilgili bölge boyunca gerçek tepkinin yeterli tahminini vermelidir. Özel olarak R ile göstereceğimiz kodlanmış değişkenlerin uzayındaki $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)'$ gibi bir noktada tahmin edilmiş tepki $\hat{Y}(\mathbf{x})$ olsun.

$$\hat{Y}(\mathbf{x}) = [\mathbf{1}, \mathbf{x}'] \mathbf{b} \quad (2.3.1)$$

formunda yazılabilir. \mathbf{x} noktasındaki tahmin edilmiş tepkinin varyansı

$$\text{Var}[\hat{Y}(\mathbf{x})] = [\mathbf{1}, \mathbf{x}'] [\text{Var}(\mathbf{b})] [\mathbf{1}, \mathbf{x}'] \quad (2.3.2)$$

gibidir. (2.2.5) denklemini ve $\mathbf{1}'\mathbf{D}=\mathbf{0}'$ değerleri yerine yazılırsa, (2.3.2) denklemini,

$$\begin{aligned} \text{Var}[\hat{Y}(\mathbf{x})] &= [\mathbf{1}, \mathbf{x}'] (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \sigma^2 [\mathbf{1}, \mathbf{x}'] \\ &= [\mathbf{1}, \mathbf{x}'] \text{diag}\left[\frac{1}{N}(\mathbf{D}'\mathbf{D})^{-1}\right] [\mathbf{1}, \mathbf{x}'] \sigma^2 \\ &= \frac{\sigma^2}{N} + \mathbf{x}'(\mathbf{D}'\mathbf{D})^{-1}\mathbf{x} \cdot \sigma^2 \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

olarak bulunur. Buradan $\text{Var}(\hat{Y}(\mathbf{x}))$ 'in \mathbf{D} tasarım matrisine bağlı olduğu ortaya çıkar.

Birinci dereceden tasarımın seçimi için mantıklı bir ölçüt, $\hat{Y}(\mathbf{x})$ 'in varyansının minimizasyonudur. Yani R bölgesinde, birinci dereceden modelin gerçek ortalama tepkiyi yeterince temsil etmesi için $\mathbf{x}'(\mathbf{D}'\mathbf{D})^{-1}\mathbf{x}\sigma^2$ nin mümkün oldukça en küçük olabileceği tasarım araştırılır.

$\hat{Y}(\mathbf{x})$ 'in bu minimum varyans özelliğini belirlemede

$$0 \leq \mathbf{x}'(\mathbf{D}'\mathbf{D})^{-1}\mathbf{x} \leq \|\mathbf{x}\|^2 \|(\mathbf{D}'\mathbf{D})^{-1}\| \quad (2.3.4)$$

eşitsizliği önemli rol oynar. Burada $\|\cdot\|$, $\|\mathbf{x}\| = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{1/2}$ şeklinde tanımlanmış Euclid

normunu gösterir ve $\|(\mathbf{D}'\mathbf{D})^{-1}\| = \left[\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k (d^{ij})^2 \right]^{1/2}$ olup, d^{ij} , $i, j=1,2,\dots,k$ için $(\mathbf{D}'\mathbf{D})^{-1}$

matrisinin (i, j) 'inci elemanıdır. (2.3.4) eşitsizliğinden $\forall \mathbf{x} \in R$ için $\mathbf{x}'(\mathbf{D}'\mathbf{D})^{-1}\mathbf{x}$ 'i minimize etmede, \mathbf{D} tasarım matrisini öyle seçmeliyiz ki $1 \leq u \leq N$ için $x_{u1}, x_{u2}, \dots, x_{uk}$ koordinatlarında $\|(\mathbf{D}'\mathbf{D})^{-1}\|$ mümkün oldukça en küçük olsun.

D matrisinin, $i=1,2,\dots,k$ için i 'nci sütununu d_i ile gösterirsek $D=[d_1:d_2:\dots:d_k]$ olur. Bu durumda $i=1,2,\dots,k$ için c_i sabit bir değer olmak üzere R bölgesindeki X_i değerlerinin

$$d_i'd_i < c_i^2 \quad i=1,2,\dots,k \quad (2.3.5)$$

kısıtlamasını sağlaması durumunda, (2.3.5) koşulu tasarımın i 'nci koordinat eksenine doğrultusundaki yayılımının c_i^2 tarafından sınırlandırıldığı anlamındadır. Bu aynı zamanda,

$$i=1,2,\dots,k \text{ için} \quad d_{ii} \leq c_i^2 \quad (2.3.6)$$

eşitsizliğinin sağlaması anlamına gelir. Burada d_{ii} , $D'D$ matrisinin i 'nci köşegen elemanı d^{ii} de $(D'D)^{-1}$ matrisinin i 'nci köşegen elemanı ve $i=1,2,\dots,k$ için D 'nin i 'nci sütununun atılmasıyla bulunan matris $D_{(-i)}$ olsun. $D'D$ matrisinde d_{ii} 'nin Kofaktörü $|D_{(-i)}'D_{(-i)}|$ dir.

Böylece

$$d^{ii} = \frac{|D_{(-i)}'D_{(-i)}|}{|D'D|} \quad (2.3.7)$$

olur. Mutlak değeri, determinantı ile belli olan $k \times k$ boyutlu E matrisi için, ilk sütunu d_i ve diğer sütunları $D_{(-i)}$ 'nin sütunları olan DE_i matrisi,

$i=1,2,\dots,k$ için $DE_i=[d_i:D_{(-i)}]$ şeklinde olup,

$$|D'D| = |E_i'D'DE_i| = |D_{(-i)}'D_{(-i)}| \times [d_i'd_i - d_i'D_{(-i)}(D_{(-i)}'D_{(-i)})^{-1}D_{(-i)}'d_i]$$

dir. Bu sonuç (2.3.7)'de yerine yazılırsa,

$$d_{ii} = \frac{1}{d_i'd_i - d_i'D_{(-i)}(D_{(-i)}'D_{(-i)})^{-1}D_{(-i)}'d_i}$$

bulunur. $i=1,2,\dots,k$ için $d_i'd_i-d_i'D_{(-i)}(D_{(-i)}D_{(-i)})^{-1}D_{(-i)}'d_i \geq 0$ ve $d_i'd_i = d_{ii}$ oldukça

$$d^{ii} \geq \frac{1}{c_i^2} \quad (2.3.8)$$

yazılabilir.

(2.3.6) ve (2.3.8)'den;

$$i=1,2,\dots,k \text{ için} \quad d^{ii} \geq \frac{1}{c_i^2} \quad (2.3.9)$$

bulunur. Böylece $\text{Var}(b_i)$ en azından $\frac{\sigma^2}{c_i^2}$ 'ye eşittir.

$i \neq j$ için $d_i'd_j = 0$ ise (2.3.8) doğru olacağından $\text{Var}(b_i) = \sigma^2 d^{ii}$, eşitliği gerçekleşir.

Bu durumda tasarım $i=1,2,\dots,k$ için

$$\begin{aligned} d_i'd_j &= 0 & ; & \quad i \neq j \\ d_i'd_j &= c_i^2 & ; & \quad i = j \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

koşulu altında, d^{ii} , $\frac{1}{c_i^2}$ minimum değerini alır.

(2.3.10) koşulunu sağlayan bir tasarım, \mathbf{D} matrisinin sütunlarının dik olması

ve $\frac{1}{N} \sum_{u=1}^N X_{ui}^2 = \frac{1}{N} d_{ii}$ 'nin R bölgesinde minimum olması durumunda, c_i^2 'nin en büyük olmasına

neden olur. [A. Khuri j.A Cornel (1987)]

Tanım 2.2 Birinci dereceden bir tasarımda, $\mathbf{D}'\mathbf{D}$ için \mathbf{D} köşegensel ise dik tasarım olarak adlandırılır.

Dik tasarımlar, \mathbf{b} 'nin varyans-kovaryans matrisinin köşegensel olmayan elemanları sıfır olduğundan \mathbf{b} 'nin elemanlarının istatistiksel olarak bağımsız olduğunu göstermekle beraber $i=1,2,\dots,k$ için girdi değişkenlerinin bağımsız bir şekilde değerlendirilmesine olanak sağlar, dik birinci dereceden tasarımlar, β_i 'lerin kestirilmesinin minimum varyanslılığını bulmak açısından en uygun tasarımlardır. Dik tasarımlar aşağıdaki gibi sıralanabilir.

- a) 2^k faktöryel tasarımlar
- b) 2^k faktöryel tasarımın fraksiyonları
- c) Simplex tasarımlar
- d) Plackett ve Burman tasarımları

a) 2^k faktöryel tasarımlar:

k bir pozitif tamsayı olmak üzere, bir 2^k faktöryel tasarımında, her bir faktör veya girdi değişkeni, en düşük seviyede -1 , en yüksek seviyede $+1$ değeri ile kodlanabilen iki düzeyde ölçülür. k faktörlerinin bütün düzeylerinin mümkün kombinasyonlarını değerlendirdiğimizde, 2^k tane satırdan oluşmuş kodlanmış değişkenlerin tasarım matrisi olan \mathbf{D} matrisini elde ederiz. \mathbf{D} 'nin herhangi bir u 'ncu satırındaki elemanlar $+1$ ya da -1 'den oluşur. Daha önce kullandığımız dönüşüm formülüne benzer olarak 2^k faktöryel tasarım için aşağıdaki dönüşüm kullanılır.

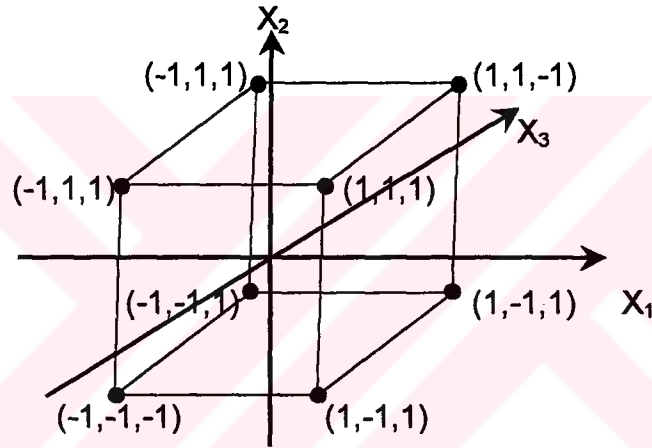
$$X_{ui} = \frac{2(X_{ui} - \bar{X}_i)}{R_i} \quad u=1,2,\dots,N, \quad i=1,2,\dots,k \quad (2.3.11)$$

Burada X_{ui} , u 'ncu deneysel deneme için i 'nci faktörün orjinal değeri, \bar{X}_i i 'nci faktör için en yüksek ve en düşük değerlerinin ortalaması, R_i de en düşük ve en yüksek gözlemler arasındaki farktır.

Kodlanmış değişkenlerin kullandığı bir 2^3 tasarımı için \mathbf{D} tasarım matrisi aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$D = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}_{8 \times 3} = [d_1 : d_2 : d_3]$$

Bu tasarım noktaları Şekil 2-a ile gösterilebilir.



Şekil 2-a 2^3 faktöryel tasarımı için kodlanmış değişkenlerin konumlandırılması

$i \neq j$ için D tasarım matrisinin d_i ve d_j sütunları için $d_i' d_j = 0$ 'dır. Bu nedenle 2^3 faktöryel tasarımı diktir. $i=j$ için $d_i' d_i = 8$, $i=1,2,3$ dir. Bu durumda

$$D'D = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{bmatrix}_{3 \times 3} \quad (D'D)^{-1} = \begin{bmatrix} 1/8 & 0 & 0 \\ 0 & 1/8 & 0 \\ 0 & 0 & 1/8 \end{bmatrix}_{3 \times 3}$$

ve $\text{diag}(8,8,8)=D'D$ yazılabilir. Bunu aşağıdaki gibi $\forall K \in Z^+$ için genelleştirebiliriz.

$$D'D = \begin{bmatrix} 2^k & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 2^k & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 2^k \end{bmatrix}_{k \times k}$$

$$(D'D)^{-1} = \begin{bmatrix} 2^{-k} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 2^{-k} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 2^{-k} \end{bmatrix}_{k \times k}$$

ve $D'D = \text{diag}(2^k, 2^k, \dots, 2^k) = 2^k I_k$ dir.

(2.2.2) denklemindeki X_i değerleri (2.3.11) formunda kodlanmış ise birinci dereceden modeli

$$\eta_j = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i$$

şeklinde yazabiliriz. Eğer bir 2^k faktöryel tasarım kullanılmış ise (2.2.4) denklemindeki b 'nin en küçük kareler kestiricisi ve (2.2.5) denklemindeki varyans-kovaryans matrisi

$$(X'X)^{-1} = 2^{-k} I_k \text{ olduğundan}$$

$$b = \frac{1}{2^k} X'Y \text{ ve}$$

$$\text{Var}(b) = \frac{\sigma^2}{c_i^2} I_{k+1} \text{ şeklinde olur.}$$

$i=1,2,\dots,k$ için i 'nci girdi değişkenlerine karşılık gelen X 'in sütunları pozitif ve negatif birlerden oluşur. Bu durumda b_1, b_2, \dots, b_k , 2^k uygulama kombinasyonları altında elde edilmiş gözlemdeki sabitlerdir. Bu sabitler k tane faktörün etkisini belirler. i 'nci satırdaki farklı terimlerin kareler toplamı

$$KT = 2^k b_i^2 \quad i = 1, 2, \dots, k$$

dir.

b_i 'ler istatistiksel olarak bağımsız olduğundan bu kareler toplamı KT'de istatistiksel olarak bağımsızdır. Kareler toplamı KT, 2^k tane gözleme uyarlanmış modelden çıkan sonuçlar olan kalan kareler toplamı KKT'ye bölünerek bir F istatistiği çıkarılır.

$$H_0 ; \beta_i = 0$$

$$H_1 ; \beta_i \neq 0 \quad \text{hipotezini test etmek için}$$

$F = \frac{KT}{KKT}$ hesap değeri ile $1, 2^k - k - 1$ serbestlik dereceli F'nin tablo değeri karşılaştırılır.

b) 2^k faktöryel tasarımın fraksiyonları:

Tanım 2.3: m negatif olmayan bir tamsayı ve $2^{k-m} \geq k+1$ olmak üzere, bir 2^k faktöryel tasarımının sadece 2^{k-m} tane kombinasyonunu içeren bir fraksiyonuna, 2^k faktöryel tasarımının 2^{-m} inci fraksiyonu denir.

Fraksiyonel tasarımlar ilk olarak Finney(1945) tarafından incelenmiş, Davies ve Hay(1950) ile Daniel(1959) tarafından geliştirilmiştir.

2^k faktöryel tasarımları, (2.2.1) denklemindeki birinci dereceden modele uyarlamayı istememize rağmen, bir 2^k faktöryel tasarımındaki tasarım noktalarının tamamında veri topladığımızda aşağıdaki genel polinomal modelin parametrelerinin kestirilmesi gerekir.

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \sum_{i=1} \sum_{<j} \beta_{ij} X_i X_j + \sum_{i=1} \sum_{<j} \sum_{<\ell} \beta_{ij\ell} X_i X_j X_\ell + \beta_{1,2,\dots,k} X_1 X_2 \dots X_k \quad (2.3.12)$$

(2.3.12) denklemindeki en yüksek dereceli terimler, $\beta_{ij} X_i X_j X_\ell \dots$, $\beta_{1,2,\dots,k} X_1 X_2 \dots X_k$ lar sırayla iki faktör, üç faktör,k faktör arasındaki etkileşim olarak ortaya çıkar. Böylece

tasarım noktalarına ve gözlem sayısına bağlı olarak (2.3.12)'deki kestirilmesi gereken parametrelerin sayısı k ile orantılı olarak artar. Örneğin her biri iki düzeyde 12 faktörle (2.3.12) denklemindeki modele uyarlamak için gerekli gözlemlerin sayısı en az $2^{12}=4096$ 'dır. Maliyeti düşünen bir araştırmacı, 2^k faktöryel kombinasyonlarının tamamının denenmesi gerektiğine inanmayıp bunlardan bazılarını

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^N \beta_i x_i + \varepsilon$$

modeline uyarlamayı tercih edebilir. $k+1$ kestirilmesi gereken parametrelerin sayısı olduğundan, 2^k faktöryel tasarımın noktalarının oluşturduğu kümenin bir alt kümesindeki noktalardan en az $k+1$ tanesini kullanarak fonksiyonel tasarım oluşturulabilir.

Bir 2^k faktöryel tasarımının bir fraksiyonu, tüm bir 2^k faktöryel tasarımının bir kısmını içeren bir tasarımıdır. Örneğin, 2^{-1} ya da $1/2$ fraksiyonu, bir 2^k tasarımının noktalarının sayısının yarısını içerir. Fraksiyonel tasarımlar birinci dereceden modelde bulunan $k+1$ tane parametrenin kestirilmesine olanak sağlaması ile birlikte diklik koşullarını sağlamalıdır.

Fraksiyonel faktöryel tasarımlarda, gerçek temel etkilere ek olarak etkileşim terimlerini bulundurduğu için, uyarlanmış birinci dereceden modeldeki regresyon katsayılarının en küçük kareler kestiricilerinde yanlılık ortaya çıkar.

(2.2.3)'ün bir 2^k faktöryel tasarımına 2^{-m} 'ci fraksiyonu uyarlanırsa, gerçek μ ortalamaya tepkisi de

$$\mu_j = X\beta + X_2\beta_2 \quad (2.3.13)$$

formunda ise, burada X_2 matrisi X 'in elemanlarını da içeren karşılıklı çarpım elemanlarından oluşur. Yani karşılıklı X 'in terimleriyle ilişkili parametreler vektörüdür.

b_i 'nin beklenen değeri, (2.3.11) denklemindeki gibi kodlanmış değişkenlerle (2.2.3) denklemindeki modelde i 'nci regresyon katsayısı β_i 'nin en küçük kareler kestiricisi,

$$E(b_i) = 2^{-(k-m)} X_i' (X\beta + X_2\beta_2) \quad i=1,2,\dots,k \quad (2.3.14)$$

dir. Burada X_i , β_i ile ilişkili X matrisinin sütunudur. X_i , X 'in diğer sütunlarına dik olduğu gibi X_2 'nin β_i 'ye karşılık gelen etkisiyle karıştırılmış etkilerle ilişkilendirilen sütunları hariç tüm sütunları diktir. Bu nedenle b_i 'deki yanlılık, temel etkiyle karıştırılmış etkilere karşılık gelen β_2 'nin elemanlarına bağlıdır.

Örneğin üç faktör için bir 2^{3-1} fraksiyonel faktöryeli ele alalım ve aşağıdaki modeli uyarladığımızı kabul edelim.

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \varepsilon$$

Gerçek ortalama tepki ise;

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{23} X_2 X_3 + \beta_{123} X_1 X_2 X_3$$

şeklinde olsun. Bu durumda (2.3.13)'deki X ve X_2 matrisleri

$$X = \begin{bmatrix} 1 & X_1 & X_2 & X_3 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}_{4 \times 4} \quad X_2 = \begin{bmatrix} X_1 X_2 & X_1 X_3 & X_2 X_3 & X_1 X_2 X_3 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}_{4 \times 4}$$

Denklem (2.3.14)'den

$$E(b_0) = \beta_0 + \beta_{123}$$

$$E(b_1) = \beta_1 + \beta_{23}$$

$$E(b_2) = \beta_2 + \beta_{13}$$

$$E(b_3) = \beta_3 + \beta_{12} \quad \text{bulunur.}$$

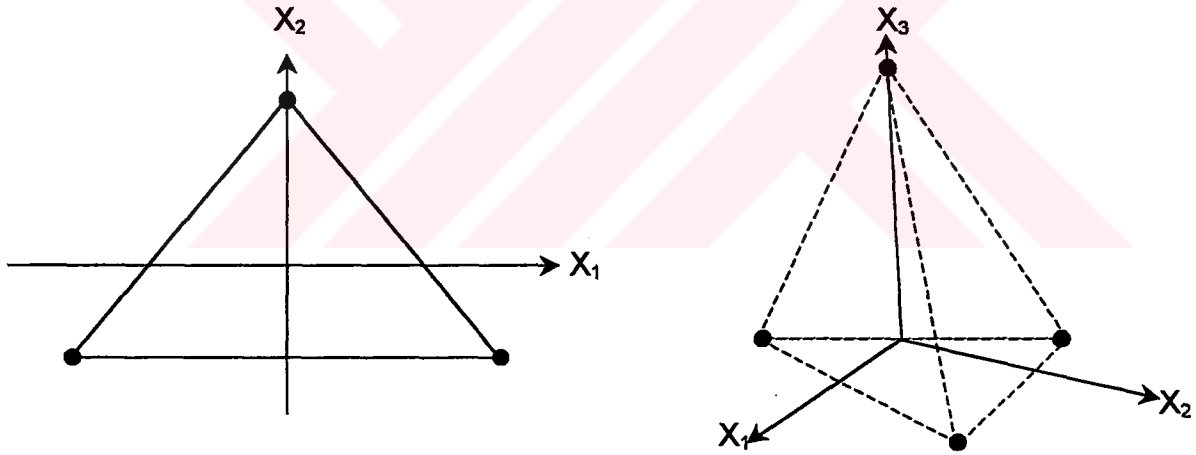
Böylece b_0, b_1, b_2, b_3 kestiricilerindeki yanlılıklar sırasıyla $\beta_{123}, \beta_{23}, \beta_{13}, \beta_{12}$ olarak bulunur.

c) Simplex tasarımı:

Birbirinden eşit uzaklıkta da olabilen $N=k+1$ noktanın oluşturduğu geometrik şekle simplex denir.

Simplex tasarımı, $N=k+1$ tasarım noktasından oluşmuş dik bir tasarımdır. Burada k birinci dereceden modelin değişkenlerinin sayısıdır. Bu tasarım noktaları k boyutlu düzgün kenarlı bir şeklin uç noktaları veya bir simplex de konumlandırılmış olup, orjinle herhangi noktanın birleştirilmesiyle oluşan açı θ ise $\text{Cos}\theta = \frac{-1}{k}$ dir. (Box-1952)

$k=2$ için simplex tasarım noktaları eşkenar bir üçgenin uç noktalarıdır. $k=3$ için düzgün dörtyüzlünün uç noktalarıdır.



Şekil 2-b

$k=2$ ve $k=3$ boyutlarda simplex tasarımı

$k=N-1$ değişkene karşılık gelen N nokta altında bir simplex tasarımı oluşturmak için ilk sütunundaki elemanları birbirine eşit $N \times N$ mertebeden dik bir \mathbf{P} matrisini ele alalım. Simplex için tasarım matrisi $\sqrt{N}\mathbf{P}$ matrisinin son $N-1$ sütunlarından oluşturulabilir. Bu tasarıma karşılık gelen ve $\sqrt{N}\mathbf{P}$ matrisine eşit olan \mathbf{X} matrisi,

$$\mathbf{X}'\mathbf{X} = \mathbf{N}\mathbf{I}_N$$

eşitliğini sağlar. P matrisini oluşturmak için, ilk sütun elemanları eşit olan ve singular olmayan herhangi bir Q matrisi düşünülüp, Gram-Schmitt dikleştirme tekniğini kullanarak Q 'nun sütunları lineer olarak diğer N sütuna dönüştürülebilir. Bu N tane sütun dik olacağı gibi ilk sütun elemanlarından $\frac{1}{\sqrt{N}}$ birim uzaklıkta olup, dikleştirilmiş sütunlar P matrisini oluşturur. Örneğin iki boyutlu bir simplex için X matrisi

$$X = \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & -\sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & \frac{-2}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}_{3 \times 3} \quad (2.3.15)$$

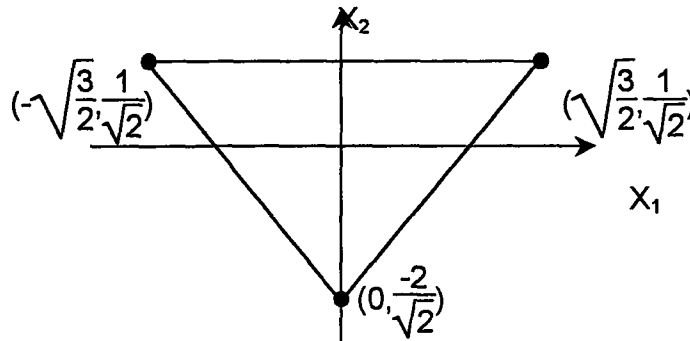
şeklinde dik P matrisi ile oluşturulmuştur.

$$P = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{-2}{\sqrt{6}} \end{bmatrix}_{3 \times 3} \quad \text{ve } X = \sqrt{3} P$$

dir.

$$X'X = 3P'P = 3I_3$$

olur.



Şekil 2-c (2.3.15) denkleminde verilen simplex tasarımının konumlandırması.

Simplex tasarım için, birinci deneyde, k faktörlerinin tümü en küçük seviyede konumlandırılır, ikinci deneyde sadece ilk faktörün seviyesi yükseltilir ve diğer takip eden deneylerde bu faktör ilk iki seviyesindeki ortalamasında tutulur. Üçüncü deneyde ikinci faktörün seviyesi yükseltilir ve diğer takip eden bütün deneylerde bu faktör ilk üç seviyesinin ortalamasında tutulur. Bu süreç, k'ncı faktörün yalnız başına aynı değişime tabi tutulmasına kadar devam eder. Açık olarak bu yöntemle oluşturulmuş Simplex için tasarım noktalarının koordinatları

$$\begin{array}{ccccccc}
 -a_1 & -a_2 & -a_3 & \dots & -a_i & \dots & -a_k \\
 a_1 & -a_2 & -a_3 & \dots & -a_i & \dots & -a_k \\
 0 & 2a_2 & -a_3 & \dots & -a_i & \dots & -a_k \\
 0 & 0 & +3a_3 & \dots & -a_i & \dots & -a_k \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 0 & 0 & 0 & \dots & -a_i & \dots & -a_k \\
 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & ka_k
 \end{array}$$

şeklinde sıralı k'lılardır. Burada $a_i = \left\{ \frac{cN}{i(i+1)} \right\}$ ve c'de seçilen bir derecelendirme sabitidir.

Simplex tasarım yoğunlaştırılmış bir tasarımdır. Yani, tasarım noktalarının sayısı modeldeki parametrelerin sayısına eşittir. Böylece simplex tasarım deneysel hata varyansının kestirilmesinde veya uyum eksikliğinin test edilmesinde serbestlik derecesinin olmayışından etkilenmez. Bunun için alışılmış regresyon katsayılarının anlamlılık testleri, eğer tasarıma türetme noktalar eklenmezse hata varyansının kestirimi bulunamayacağı gibi uyum eksikliği de test edilemez.

d) Plackett ve Burman tasarımları:

Plackett ve Burman (1946) tasarım noktalarının sayısı olan N'in k+1'e eşit olduğu k değişkendir iki düzeyli fraksiyonel faktöryel tasarımlar tanıtmışlardır. Bu tasarımlar N'in 4'ün katı olduğu durumda mümkündür. Bunlar alışılmış fraksiyonel faktöryel

tasarımlara alternatif olan dik tasarımlardır. Bu tasarımlar, N'in 2'nin bir kuvveti olması gerekmediği ancak 4'ün bir katı olduğunda yapılabilir.

Plackett ve Burman'a göre amaç, $N=k+1$ için mümkün olan en maksimum doğrulukta bütün etkileri kestirebilen tasarımların elde edilmesidir. Eğer N, 2'nin bir kuvveti ve $N>k+1$ ise faktörler arasındaki belli etkileşimlerin etkileri de maksimum doğrulukla hesaplanabilir. Bu durumda (N'in 2'nin kuvveti olması durumunda) Plackett ve Burman tasarımları 2 düzeyli faktöryel tasarımlarla aynıdır. Plackett ve Burman $N=4,8,12,\dots,100$ için deney kullanarak $k=3,7,11,\dots,99$ için tasarım düzenlemeleri elde etmişlerdir. Bu tip tasarımlar, gerek niceliksel gerekse niteliksel değişkenlerle kullanılabilirler. k değişkenden bir Plackett ve Burman tasarımı oluşturmak için ± 1 'e eşit elemanlardan oluşan bir satır seçmeliyiz. Öyle ki pozitif olanların sayısı $\frac{(k+1)}{2}$ ve negatif olanların sayısı da $\frac{k+1}{2}$ olsun. Burada $2 \mid (k+1)$ ve $2 \mid (k-1)$ 'dir. Bu satır tasarımın ilk satırı olarak seçilir. İkinci satır, birinci satırın bir dairesel yer değişimiyle, benzer şekilde k'nci satır da bu satırdan bir önceki satırın dairesel yer değişimiyle yani birinci satırın k-1 kez yer değişimiyle oluşturulur. Sonuç olarak k'nci satıra -1'lerden oluşacak şekilde bir satır eklenerek $N=k+1$ satırlı bir tasarım oluşturulur. Örneğin, $k=7$ için $+1,+1,+1,-1,+1,-1,-1$ satırını başlangıç kabul ederek aşağıdaki tasarımı elde ederiz.

X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7
1	1	1	-1	1	-1	-1
-1	1	1	1	-1	1	-1
-1	-1	1	1	1	-1	-1
1	-1	-1	1	1	1	-1
-1	1	-1	-1	1	1	1
1	-1	1	-1	-1	1	1
1	1	-1	1	-1	-1	1
-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1

2.4 BİRİNCİ DERECEDEN MODELLERİN UYUM EKSİKLİĞİ HAKKINDA BAZI ÖNERİLER

Birinci dereceden tasarımların dezavantajı, bunların ya deneysel hata varyansının bir kestiricisini sağlamaları ya da yoğunlaştırılmış birinci dereceden tasarımlarda olduğu gibi uyarlanmış birinci dereceden modelin uyum eksikliğini test etmek için hiç bir yöntemin sağlanmamasıdır. Örneğin, eğer gerçek model temel etkilere ek olarak saf kuadratik etkiler içeriyorsa o zaman uyum eksikliği problemi ortadan kalkar. Birinci dereceden modelin uyum eksikliği, genelde modelin büyük bir bölgede uyarlandığı ve diğer birden büyük dereceli terimlerin bulunmasıyla ortaya çıkar.

Genelde, uyarlanmış bir modelin uyum eksikliğini test edilmesi için, tasarım noktalarından bazı türetme noktalarının alınması gerekir. Bu durumda HKT hata kareler toplamı, türetme gözlemlerden dolayı KT_{SH} saf hata kareler toplamı ve KT_{UE} uyum eksikliği kareler toplamı olmak üzere ikiye ayrılabilir.

Birinci dereceden temel tasarıma türetme noktalarının eklenmesi ile değişik özelliklere sahip yeni bir tasarım oluşur.

Eğer birinci dereceden tasarım dik ise, bu ekleme ile birlikte bu özelliğin değişmemesi arzu edilir. Bu yöntem zorunlu deneylerin çokluğu nedeniyle ekonomik değildir.

Diğer bir alternatif durum ise, merkezi nokta türetmelerle birlikte birinci dereceden temel dik tasarımların bir arada toparlanmasıdır. Yani $(0,0,\dots,0)$ merkez noktasında tekrarlanmış gözlemlerin alınması gerekir. Bu diklik özelliğini değiştirmemekle beraber aynı zamanda deneysel hata varyansının yansız bir kestiricisini elde etmemizi mümkün kılar. Eğer n_0 tane tekrarlanmış gözlem tasarım merkezinden alınmış ve başka noktalar türetilmemiş ise saf hata kareler toplamı,

$$KT_{SH} = Y_0' I_{n_0} - \left(\frac{1_{n_0} - 1'_{n_0}}{n_0} \right) Y_0$$

olup burada Y_0 merkez noktasında yapılmış gözlemlerin vektörü, $1_{n_0}, 1'_{n_0}$, $n_0 \times n_0$ tipinden birim matrisler ve 1_{n_0} n_0 boyutlu birler vektörüdür.

Uyum eksikliği kareler toplamı ise,

$$KT_{UE} = Y' [I_N - X(X'X)^{-1}X'] Y - Y_0' \left(I_{n_0} - \frac{1_{n_0} 1'_{n_0}}{n_0} \right) Y_0$$

dir. Burada Y , bulunan M tane gözlemin vektörü (merkez noktalar dahil) X' matrisi ise $X' = [X'_1; X'_0]$ şeklindedir. X_1 birinci dereceden dik tasarım boyunca birler sütunundan oluşan $(N-n_0) \times (K+1)$ boyutlu bir matristir. X_0 ise merkez nokta türetmelerine karşılık gelen $n_0 \times (K+1)$ boyutlu bir matristir. Yani $X_0 = [1_{n_0}; 0]$ dir. 0 ise $n_0 \times k$ boyutlu satır matrisidir.

Draper ve Herzberg (1971) 'e göre $H_0 = \sum_{i=1}^k \beta_{ii} = 0$ hipotezini test etmek için en uygun test istatistiği 1, (n_0-1) serbestlik dereceli

$$F = \frac{\frac{n_0(N-n_0)(\bar{Y} - \bar{Y}_0)^2}{N}}{\frac{KT_{SH}}{n_0 - 1}}$$

istatistiğidir. Sonuç olarak merkez nokta türetmelerin eklenmesi bize temel birinci dereceden tasarımların diklik özelliklerini kullanmamıza olanak verir ve gerçek tepki fonksiyonunun ikinci dereceden bir model olarak açıklanabildiğinde etkileşim terimlerinin ve saf kuadratik terimlerin varlığıyla ilgili bilgiler sağlar.

2.5 EN HIZLI ÇIKIŞ YA DA İNİŞ YÖNTEMİ

Sistem için optimum çalışma koşullarının ilk kestiricileri gerçek optimumdan uzak olacağı için deneycinin amacı optimum civarına en hızlı olacak şekilde hareket etmektir. Optimumun uzağında bulunuyorken, X' lerin küçük bir bölgesinde gerçek yüzeye yeterli bir yaklaşım olarak birinci dereceden bir modelin kullanılması en ekonomiktir.

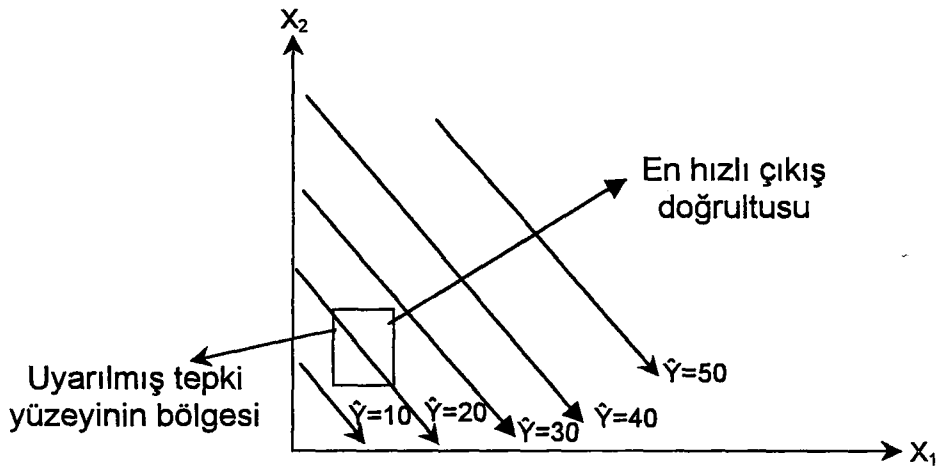
En hızlı çıkış yöntemi, tepkideki maksimum artışın doğrultusunda hareket edilen yöntemdir. En hızlı iniş yöntemi ise tepkideki maksimum azalış doğrultusunda hareket edilen bir yöntemdir. Bunlar sırasıyla, bir tepeye tırmanmaya (çıkış için) veya bir vadiye inmeye benzetilebilir (iniş için). En hızlı iniş, tepki için minimizasyon arařtırmalarında kullanılır. Uyarlanacak birinci dereceden model

$$\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{k=1}^N \beta_k X_k \quad (2.5.1)$$

şeklindedir.

En hızlı çıkış doğrultusu, \hat{Y} 'nin en hızlı şekilde arttığı doğrultu olup, bu doğrultu uyarlanmış tepki yüzeyinin normaline paraleldir. İlgili bölgenin merkezi boyunca uyarlanmış yüzeyin normali olan doğru, en hızlı çıkış yolu olarak alınır. Bu durumda yol boyunca adım büyüklüğü $\{\beta_i\}$ regresyon katsayıları ile orantılıdır. Gerçek adım büyüklüğü ise arařtırmacının süreç bilgisine baėlı olarak kendisi tarafından belirlenir.

Deneyle, en hızlı çıkış yolu boyunca tepkiden daha fazla artış gözlenmeyene kadar tekrarlanır. Daha sonra yeni bir en hızlı çıkış yolu belirlenerek yöntem devam ettirildiğinde optimum komşuluėuna varılır. Birinci dereceden tepki yüzeyinin konturları ařaėıdaki şekilde gösterilmiş paralel doğrulardan oluşur.



Şekil 2-d Birinci dereceden tepki yüzeyi ve en hızlı çıkışın doğrultusu

Örnek: Bir kimyacı, bir sürecin ürününü maksimize edecek çalışma şartlarını belirtmek istemiştir. Tepkime sıcaklığı ve tepkime süresi gibi süreci etkileyen iki kontrol edilebilir değişken kullanılıyor. Başlangıçta 35 dakikalık bir tepkime süresi 155°F'lik tepkime sıcaklığı ile süreci başlatarak %40 civarında ürün elde ediyor. Bu bölgenin optimumu içermesi imkânsız olduğundan birinci dereceden bir model uyarlayarak en hızlı çıkış yöntemini uyguluyor.

Araştırmacı, birinci dereceden modeli uyarlamak için belirlenen bölgenin (30,40) dakika tepkime süreli (150,160)°F tepkime sıcaklığı olduğuna karar veriyor. Hesaplamaları kolaylaştırmak için bağımsız değişkenleri (-1,1) aralığında kodlamıştır. X_1 doğal zaman ve X_2 doğal sıcaklık değişkeni olsun.

$$\bar{X}_1 = \frac{X_{11} + X_{12}}{2} = \frac{30 + 40}{2} = 35$$

$$\bar{X}_2 = \frac{X_{21} + X_{22}}{2} = \frac{150 + 160}{2} = 155$$

$$X_{ui} = \frac{2(X_{ui} - \bar{X}_i)}{R} \text{ ise}$$

$$R_1 = 40 - 30 = 10, R_2 = 160 - 150 = 10$$

$$X_1 = 30 \text{ ve } X_2 = 155 \text{ için } X_1 = \frac{2(30 - 35)}{10} = -1, X_2 = \frac{2(150 - 155)}{10} = -1$$

$$X_1 = 40, X_2 = 160 \text{ için } X_1 = \frac{2(40 - 35)}{10} = 1, X_2 = \frac{2(160 - 155)}{10} = 1$$

dir. Birinci dereceden modelin uyarlanması için süreç verileri aşağıdaki gibidir.

<u>Doğal değişkenler</u>		<u>Kodlanmış değişkenler</u>		<u>Tepki</u>
X_1	X_2	x_1	x_2	Y
30	150	-1	-1	39.3
30	160	-1	1	40.0
40	150	1	-1	40.9
40	160	1	1	41.5
35	155	0	0	40.3
35	155	0	0	40.5
35	155	0	0	40.7
35	155	0	0	40.2
35	155	0	0	40.6

Bu veriler beş merkez noktalı 2^2 faktöryel tasarım belirler. Merkezdeki yinelenmiş gözlemler deneysel hatayı kestirmek ve birinci dereceden modelin yeterliliğini incelemek amacıyla kullanılmıştır.

En hızlı çıkış yolu boyunca hareket etmeden önce en küçük kareler yöntemiyle uyarlanan $\hat{Y} = 40,44 + 0,7754x_1 + 0,325x_2$ birinci dereceden modelin yeterliliği araştırılmalıdır. Bunun için merkez noktalı 2^2 tasarımda,

- Bir hata kestiricisinin bulunması
- Modeldeki etkileşimlerin incelenmesi
- İkinci dereceden etkilerin analizi yapılır.

$$\hat{\sigma}^2 = \left(\frac{(40,3)^2 + (40,5)^2 + (40,7)^2 + (40,2)^2 + (40,6)^2 - \frac{(202,3)^2}{5}}{5-1} \right) = 0,043$$

Birinci dereceden model, x_1 ve x_2 değişkenlerinin tepki üzerinde bir toplamsal etkiye sahip olduğunu belirler. Değişkenler arasındaki etkileşim X_1X_2 gibi bir karşılıklı çarpım teriminin katsayısı β_{12} ile ölçülür. Bu katsayısının en küçük kareler kestiricisi

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{1}{4} [(1.39,3) + (1.41,5) + (-1.40,0) + (-1.40,9)] = 0,025$$

Etkileşim için kareler toplamı

$$KT_{Et} = \frac{(-0,1)^2}{5-1}$$

$$F = \frac{KT_{Et}}{\frac{\Delta^2}{6}} = \frac{0,0025}{0,0430} = 0,058$$

Bu değer $F_{\alpha,1,4}$ tablo değerinden küçük olup etkileşim önemsizdir.

Birinci dereceden modelin diğer bir sağlanması tasarım faktöryel kısmındaki dört noktada $\hat{Y}_1 = 40,425$, tasarım merkezindeki ortalama tepki $\hat{Y}_m = 40,40$ ile karşılaştırılmasıyla bulunur. Eğer tasarlanan eğri yüzeyin üzerine oturuyorsa o zaman $\bar{Y}_1 - \bar{Y}_m$ yüzeydeki eğriselliğin bir ölçüsü olur. Eğer β_{11} ve β_{22} , x'_1 ve x'_2 saf ikinci dereceden terimlerin katsayıları ise o zaman $\bar{Y}_1 - \bar{Y}_m$, $\beta_{11} + \beta_{22}$ 'nin bir kestiricisidir.

$$\beta_{11} + \beta_{22} = \bar{Y}_1 - \bar{Y}_m = 40,425 - 40,46 = -0,035$$

$H_0 : \beta_{11} + \beta_{22} = 0$ hipotezi için

$$KT_{saf\ karesel} = \frac{n_1 n_m (\bar{Y}_1 - \bar{Y}_m)^2}{n_1 + n_m}$$

$$= \frac{4.5 \cdot (-0,035)^2}{4+5} = 0,0027$$

Burada n_1 ve n_m sırasıyla faktöryel ve merkez noktaların sayısıdır.

$$F = \frac{KT_{saf.et}}{\frac{\Delta^2}{6}} = \frac{0,0027}{0,0430} = 0,063$$

hesap değeri $F_{\alpha,1,4}$ tablo değerinden küçük olduğundan saf ikinci dereceden etkileşim yoktur.

$$\hat{\beta}_1 \text{ ve } \hat{\beta}_2 \text{ 'nin standart hataları } s.h(\hat{\beta}_1) = \sqrt{\frac{\Delta^2}{4}} = 0,10 \text{ olup } \hat{\beta}_1 \text{ ve } \hat{\beta}_2 \text{ regresyon}$$

katsayılarının her ikisi de standart hatalarından büyük oldukları için birinci dereceden model yeterlidir.

$(X_1=0, X_2=0)$ noktasından yani tasarım merkezinden en hızlı çıkış yolu boyunca uzaklaşmak için, X_1 doğrultusunda 0,775 birim, X_2 doğrultusunda 0,325 birim hareket edilir. Böylece en dik çıkış doğrusu $(0,0)$ noktasından geçer ve $0,325/0,775$ eğimine sahiptir. Araştırmacı doğal değişkenler için 5 dakikalık tepkime süresini adım büyüklüğü seçip en dik çıkış doğrultusu boyunca adımlar $\Delta X_1 = 1,00$ ve $\Delta X_2 = (0,325/0,775)$. $\Delta X_1 = 0,420$ olarak belirler.

Tablo 2.2 Birinci dereceden modelin Varyans analizi

<u>Varyans kaynağı</u>	<u>Kareler toplamı</u>	<u>Serbestlik derecesi</u>	<u>Ortalama kare</u>
Regresyon (β_1, β_2)	2,8250	2	1,4125
Kalan (Hata)	0,1772	6	
Etkileşim	0,025	1	0,0025
Saf karesel	0,0027	1	0,0027
Saf hata	0,1720	4	0,0430
Toplam	3,0022	8	

$$\Delta X_1 = 1,0 \quad \Delta X_2 = \frac{\hat{\beta}_2}{\hat{\beta}_1 / \Delta X_1} = \frac{0,325}{0,775/1,0} = 0,42 \quad \Delta X_1 = \Delta x_1 \cdot 5 = (1,0) \cdot 5 = 5 \quad \Delta X_2 = \Delta x_2 \cdot 5 = 2$$

dir.

Tablo 2.3 Deney için en hızlı çıkış verileri

Adımlar	Kodlanmış değişkenler		Doğal değişkenler		Tepki Y
	X ₁	X ₂	X ₁	X ₂	
orjin	0	0	35	155	
Δ	1,00	0,42	5	2	
orjin+Δ	1,00	0,42	40	157	41,0
orjin+2Δ	2,00	0,84	45	159	42,9
orjin+3Δ	3,00	1,26	50	161	47,1
orjin+4Δ	4,00	1,68	55	163	49,7
orjin+5Δ	5,00	2,10	60	165	53,8
orjin+6Δ	6,00	2,52	65	167	59,9
orjin+7Δ	7,00	2,94	70	169	65,0
orjin+8Δ	8,00	3,36	75	171	70,4
orjin+9Δ	9,00	3,78	80	173	77,6
orjin+10Δ	10,00	4,20	85	175	80,3
orjin+11Δ	11,00	4,62	90	179	76,2
orjin+12Δ	12,00	5,04	95	181	75,1

Araştırmacı, bu yol boyunca gözlemleri hesaplayıp tepkimede bir azalma meydana gelinceye kadar devam ediyor. Tablo 2.3'den 10. adıma kadar tepkimede artış, bundan sonra üründe azalma gözlenmiştir. Bu nedenle X₁=85, X₂=175 noktası komşuluğunda yeni bir birinci dereceden model uyarlanmalıdır. X₁ için araştırılacak bölge (80,90) ve X₂ için (170,180) dir. Bu durumda değişkenler

$$x_1 = \frac{X_1 - 85}{5} \quad x_2 = \frac{X_2 - 175}{5}$$

şeklinde kodlanır. Bir kez daha beş merkez noktalı bir 2² faktöryel tasarım kullanılıyorsa, elde edilen veriler tablo 2.4'te verilmiştir.

Tablo 2.4 İkinci, birinci dereceden model için veriler

<u>Doğal değişkenler</u>		<u>Kodlanmış değişkenler</u>		<u>Tepki</u>
X ₁	X ₂	x ₁	x ₂	Y
80	170	-1	-1	76,5
80	180	-1	1	77,0
90	170	1	-1	78,0
90	180	1	1	79,5
85	175	0	0	79,9
85	175	0	0	80,3
85	175	0	0	80,0
85	175	0	0	79,7
85	175	0	0	79,8

Tablodaki verilere uyarlanan birinci dereceden modelin katsayıları en küçük kareler yöntemiyle kestirilip

$$\hat{Y} = 78,97 + 1,00x_1 + 0,50x_2$$

bulunarak birinci aşamadaki gibi model yeterliliği incelenebilir.

ÖRNEK: Dr. A. Barella ve Dr. A. Sust tarafından uluslararası yün tekstil organizasyonu için yapılan yün eğirme deneyinde elde ettikleri veriler aşağıdaki gibidir.

Örnek testin uzunluğu X ₁ (mm)	Eğime çemberinin genişliği X ₂	Çember üzerindeki yük X ₃ (g)	Bitmemiş devir sayısı Y
250	8	40	674
350	8	40	3636
250	10	40	174
350	10	40	1140
250	8	50	292
350	8	50	2000
250	10	50	90
350	10	50	360

$$\bar{X}_1 = \frac{4(20+350)}{8} = 300, \quad \bar{X}_2 = \frac{4(8+10)}{8} = 9, \quad \bar{X}_3 = \frac{4(4+50)}{8} = 45$$

$$R_1=350-250=100, \quad R_2=10-8=2, \quad R_3=50-40=10$$

X_1, X_2, X_3 doğal girdi değişkenleri,

$$X_1 = \frac{2(X_1 - 300)}{100}, \quad X_2 = \frac{2(X_2 - 9)}{2}, \quad X_3 = \frac{2(X_3 - 45)}{10}$$

şeklinde kodlanırsa $X_1, X_2, X_3 \in \{-1, 1\}$ olacaktır.

Örnek testin uzunluğu X_1	Eğirme çemberinin genişliği X_2	Çemberin üstündeki yük X_3	10 tabanında logaritmalı bitmemiş devir sayısı : Y	logaritmalı kestirilmiş değerler \hat{Y}
-1	-1	-1	2,83	2,84
1	-1	-1	3,56	3,59
-1	1	-1	2,23	2,25
1	1	-1	3,06	3,00
-1	-1	1	2,47	2,49
1	-1	1	3,30	3,24
-1	1	1	1,95	1,90
1	1	1	2,56	2,65

3 değişkenin 2 düzeyinde gözlemleri kullanıldığından yapılacak tasarım 2^3 faktöryel tasarımdır. Bu verilerin birinci dereceden polinomal yaklaşımı

$$g(x, \beta) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \varepsilon$$

olacaktır.

$\hat{Y} = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_3 X_3$ uydurulmuş modelin katsayıları, en küçük kareler yöntemiyle bulunabilir.

$$Y = \begin{bmatrix} 2,83 \\ 3,56 \\ 2,23 \\ 3,06 \\ 2,47 \\ 3,30 \\ 1,95 \\ 2,56 \end{bmatrix}_{8 \times 1} \quad X = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}_{8 \times 4} \quad \beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{bmatrix}_{4 \times 1}$$

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \\ \varepsilon_7 \\ \varepsilon_8 \end{bmatrix}_{8 \times 1} \quad X'X = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 8 \end{bmatrix}_{4 \times 4} \quad (X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} 1/8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/8 \end{bmatrix}_{4 \times 4}$$

$$(X'X)^{-1} Y = \begin{bmatrix} 21,96 \\ 3,00 \\ -2,36 \\ -1,40 \end{bmatrix}_{4 \times 1}$$

$$\hat{\beta} = b = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}_{4 \times 1} = \begin{bmatrix} 1/8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/8 \end{bmatrix}_{4 \times 4} \cdot \begin{bmatrix} 21,96 \\ 3,00 \\ -2,36 \\ -1,40 \end{bmatrix}_{4 \times 1} = \begin{bmatrix} 2,745 \\ 0,375 \\ -0,295 \\ -0,175 \end{bmatrix}_{4 \times 1}$$

x_1	x_2	x_3	10 tab. logaritmalı Y	10 tab. logaritmalı \hat{Y}	$e=Y-\hat{Y}$
-1	-1	-1	2,83	2,84	-0,01
1	-1	-1	3,56	3,59	-0,03
-1	1	-1	2,23	2,25	-0,02
1	1	-1	3,06	3,00	0,06
-1	-1	1	2,47	2,49	-0,02
1	-1	1	3,30	3,19	0,11
1	1	1	2,56	2,65	-0,09

$$\sum e_i = 0 \text{ olup uyarlanmış model } \hat{Y} = 2,745 + 0,375x_1 - 0,295x_2 - 0,0175x_3 \\ (\pm 0,025) \quad (\pm 0,025) \quad (\pm 0,025) \quad (\pm 0,025)$$

şeklinde bulunur.

Parantez içindeki sayılar kestirilmiş standart hata olup

$$\frac{\Delta^2}{6} = \frac{\sum Y_i - \frac{\bar{Y}^2}{N}}{N-1} \text{ ve } \sqrt{\frac{\Delta^2}{6}} = \text{s.h} = \pm 0,025$$

şeklinde hesaplanır.

BÖLÜM-3

İKİNCİ DERECEDEDEN MODELLER VE TASARIMLARI

3.1 İKİNCİ DERECEDEDEN MODELİN TANIMI

Araştırmacılar genellikle gerçek tepki yüzeyinin şekli hakkında yeterli bilgiye sahip olmadıklarından ilk aşamada tepki değerlerine birinci dereceden bir model uyarlamakla deneysel süreci başlatırlar. Ancak yüzeyde eğrisellik olması durumunda veya uyarlanmış birinci dereceden modelde uyum eksikliği bulunması halinde, birinci dereceden modele yüksek dereceli terimler ekleyerek deneysel süreci devam ettirirler. Bu yeni yüksek dereceli model,

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i=1}^k \sum_{j=2}^{k-1} \beta_{ij} X_i X_j + \varepsilon \quad (3.1.1)$$

formunda ikinci dereceden model olacaktır. Burada X_1, X_2, \dots, X_k girdi değişkenleri, Y bu değişkenlerden etkilenen tepki, $i, j = 1, 2, \dots, k$ için $\beta_0, \beta_i, \beta_{ij}$ bilinmeyen parametreler ve ε rastgele bir hatadır.

Tanım 3.1.1: (3.1.1) denklemi ile verilen modele ikinci dereceden model denir.

Tanım 3.1.2: (3.1.1) denklemi ile verilen ikinci modeldeki parametrelerin kestirilmesi için elde edilmiş tepkinin ortalamasıyla yapılan tasarıma ikinci dereceden tasarım denir.

(3.1.1) denkleminde, 1 tane sabit terim, k tane birinci dereceden, k tane saf ikinci dereceden ve $\frac{k(k-1)}{2}$ tane karıştırılmış ikinci dereceden terim olmak üzere, toplam terim sayısı $p = \frac{(k+1)(k+2)}{2}$ dir. Bu nedenle ikinci dereceden bir tasarım için en az p tane tasarım noktasına ihtiyaç duyulur.

İkinci dereceden tasarımların bazı özelliklerini incelemek için tasarım momentleri olarak adlandırılan tasarım noktalarının dağılımlarının bilinmesi gerekir.

Uyarlanmış modelin $Y = X\beta + \varepsilon$ şeklinde matris gösterimi ile verilmiş olduğunu kabul edelim. Eğer modelin derecesi d ve k tane girdi değişkeninin bir fonksiyonu ise,

$\delta = 0, 1, 2, \dots, 2d$ olmak üzere tasarım momentinin derecesi,

$$[1^{\delta_1}, 2^{\delta_2}, \dots, k^{\delta_k}] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N X_{u1}^{\delta_1} X_{u2}^{\delta_2} \dots X_{uk}^{\delta_k} \quad (3.1.2)$$

şeklindedir. burada, N toplam gözlem sayısı ve $\delta = \delta_1 + \delta_2 + \dots + \delta_k$ olacak şekilde negatif olmayan birer tamsayıdır. Bu tasarım momentler, Moment Matrisi olarak adlandırılan $N^{-1}X'X$ matrisinin elemanlarıdır. Örneğin istenen model X_1, X_2, \dots, X_k değişkenleri aşağıdaki gibi kodlanmış birinci dereceden olsun.

$$\bar{X}_i = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N X_{ui}, \quad x_{ui} = \frac{X_{ui} - \bar{X}_i}{S_{x_i}} \quad \text{ve} \quad S_{x_i} = \left\{ \sum_{u=1}^N \frac{(X_{ui} - \bar{X}_i)^2}{N} \right\}^{1/2} \quad (3.1.3)$$

$u=1, 2, \dots, N, i=1, 2, \dots, k$ olup, burada, S_{x_i}, X_i eksenini doğrultusunda tasarım noktalarının bir yayılım ölçüsüdür. Moment matrisi ise,

$$\frac{1}{N} X'X = \begin{array}{c} 1 \\ X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_k \end{array} \begin{bmatrix} 1 & 1 & X_1 & X_2 & \dots & X_k \\ 1 & [1] & [2] & \dots & [k] \\ [10] & [11] & [12] & \dots & [1k] \\ & & [22] & \dots & [2k] \\ & & & & \dots \\ & & & & [kk] \end{bmatrix}_{k \times (k+1)} \quad (3.1.4)$$

simetrik

şeklindedir. Burada $[i] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N X_{ui}$, $[ii] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N X_{ui}^2$ ve $i, j = 1, 2, \dots, k$ için $[ij] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N X_{ui} X_{uj}$ 'dir.

$[i]$ momenti birinci dereceden moment olarak adlandırılır ve N tane gözlem altında X_{ui} değerlerinin ortalamasıdır.

[ii] momenti ikinci dereceden moment olarak adlandırılır ve her $u=1,2,\dots,N$ için X_{ui}^2 değerlerinin ortalamasıdır. Bu moment $[i^2]$ olarak da gösterilebilir.

$i \neq j$ için [ij] momenti karıştırılmış ikinci dereceden moment olarak adlandırılır ve $i \neq j$ için $X_{ui}X_{uj}$ çarpımlarının ortalamasıdır.

İkinci dereceden model için (3.1.3)'de verilen S_{xi} , standart sapmanın bir ölçüsüdür. u'ncü denemede kodlanmış değişkenlere bağlı ikinci dereceden bir model için tepkinin gözlenmiş değeri;

$$Y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_{ui} + \sum_{i=1}^k \beta_i X_{ui}^2 + \sum_{i=1}^k \sum_{j=2}^{k-1} \beta_{ij} X_{ui} X_{uj} + \varepsilon_u \quad u=1, 2, \dots, N \quad (3.1.5)$$

formunda gösterilir. Burada ε_u , Y_u 'daki deneysel hatadır. $u=1, 2, \dots, N$ olmak üzere ε_u 'nun değerlerinin sıfır ortalama ve σ^2 varyansı ile bağımsız olarak dağılmış rastgele değişkenler gibi olduğunu kabul edelim. (3.1.5) modelini aşağıdaki gibi matris gösteriminde yazabiliriz.

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

Burada $Y=(Y_1, Y_2, \dots, Y_N)$; X : $N \times p$ boyutlu bir matris ve u'ncü satırı, $u=1, 2, \dots, N$ için u'ncü denemede tasarım noktalarının bir fonksiyonudur. $p = \frac{(k+1)(k+2)}{2}$ olup β , $p \times 1$ boyutlu bilinmeyen bir parametreler vektörüdür. $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_N)'$ şeklindedir. (3.1.6) modelindeki β vektörünün en küçük kareler kestiricisi

$$b = (X'X)^{-1}X'Y \quad (3.1.7)$$

ile verilir.

b'nin varyans-kovaryans matrisi

$$\text{Var}(b) = (X'X)^{-1}\sigma^2 \quad (3.1.8)$$

şeklindedir. $N^{-1}X'X$ tasarım matrisi 0, 1, 2, 3 ve 4. dereceden tasarım momentlerini bulundurur.

[i], $i=1, 2, \dots, k$ için birinci dereceden momentler sıfır,

[ii] ikinci dereceden momentler bir olmak üzere $k=2$ için moment matrisi,

[i]=0 ve [ii]=1 için

$$N^{-1}X'X = \begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & X_1 & X_2 & X_1^2 & X_2^2 & X_1X_2 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ X_1 \\ X_2 \\ X_1^2 \\ X_2^2 \\ X_1X_2 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & [12] \\ 0 & 1 & [12] & [111] & [122] & [112] \\ 0 & [12] & 1 & [112] & [222] & [122] \\ 0 & [111] & [112] & [1111] & [1122] & [1112] \\ 0 & [122] & [222] & [1122] & [2222] & [1222] \\ 0 & [112] & [122] & [1112] & [1222] & [1122] \end{bmatrix} \end{matrix} \quad 6 \times 6$$

şeklindedir. $i=1, 2, \dots, k$ olmak üzere $[iii]^2 = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^k X_i^3 \right]^2$ ve [iiii] i'nci girdi değişkeninin

eksenleri doğrultusundaki tasarım noktalarının sırayla çarpıklık ve sivrilik ölçüleridir.

Eğer dağılım simetrik ise $[iii]^2=0$ olacağından [iii] simetriden ayrılışında bir ölçüsüdür.

[iiii] momenti i'nci doğrultudaki tasarım noktalarının yayılması hakkında bilgi verir.

3.2 İKİNCİ DERECEDEEN TASARIMLARIN ÖZELLİKLERİ

1) Diklik (Ortogonalik)

İkinci dereceden bir tasarımda $X'X$ matrisi veya moment matrisinden herhangi birinin köşegensel olması durumunda tasarım diktir. İkinci dereceden tasarımlar için köşegensel matris bulmak olanaksızdır. Çünkü [ii] ve [ijj] momentleri sıfırdan farklı olup daima pozitif sayılardır. Ayrıca (3.1.5) denklemindeki modelin değişkenleri dik polinomların terimlerinden elde edilebiliyorsa bu tasarım diktir.

$i=1, 2, \dots, k$ olmak üzere i'nci girdi değişkeni olan X_i için m'nci dereceden dik polinom $P_m(X_{ui})$ olsun. $m \geq 0$ olmak üzere

$$P_m(X_{ui}) = X_{ui}^m + \alpha_{m-1,m} X_{ui}^{m-1} + \dots + \alpha_{1m} X_{ui} + \alpha_{0m}$$

olup α değerleri

$$\sum_{u=1}^N P_m(X_{ui}) P_{m-j}(X_{ui}) = 0 \text{ ve } P_0(X_{ui}) = 1 \quad j=1, 2, \dots, m$$

denklemlerinden seçilir. Bu durumda ikinci dereceden modelin terimleri aşağıdaki gibi dik polinomun terimlerinden belirlenebilir.

$$Y = (XP)(P^{-1}\beta) + \varepsilon = \dot{X}\dot{\beta} + \varepsilon$$

Burada P , X_{ui}^m terimlerinin $P_m(X_{ui})$ 'ye dönüştürülmüş singüler olmayan bir matristir.

$\dot{X} = XP$ ve $\dot{\beta} = P^{-1}\beta$ 'dir. Bu durumda (3.1.3)'ten

$$P_1(X_{ui}) = X_{ui}, \quad P_2(X_{ui}) = X_{ui}^2 - [iii] X_{ui}^{-1} \quad i=1, 2, \dots, k$$

dir.

(3.1.5) modeli ise $u=1, 2, \dots, N$ için

$$Y_u = \left(\beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} \right) + \sum_{i=1}^k (\beta_1 + [iii] \beta_{ii} P_1(X_{ui})) + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} P_2(X_{ui}) + \sum_{i=1}^k \sum_{j=2}^{k-1} \beta_{ij} P_1(X_{ui}) P_1(X_{uj}) + \varepsilon$$

şeklinde yazılabilir.

$i=1, 2, \dots, k$ için $\sum_{u=1}^N P_1(X_{ui}) P_2(X_{ui}) = 0$ ve $i=1, 2, \dots, k$ ile $m=1, 2$ için $\sum_{u=1}^N P_m(X_{ui}) = 0$

oldukça ve eğer

$$\begin{aligned} [ij] &= [ijj] = [ijj] = 0 & i < j \\ [iij] &= 1 & i < j \\ [iijn] &= [ijjn] = [ijn] = 0 & i < j < n \\ [iij] &= [ijj] = 0 & i < j \\ [ijns] &= [ijn] = 0 & i < j < n < s \end{aligned}$$

ise, $N^{-1} \dot{X}' \dot{X}$ moment matrisi köşegensel olup tasarım diktir.

2) Döndürülebilirlik:

Kestirilmiş \hat{Y} tepkisinin varyansı tasarım merkezinden eşit uzaklıktaki noktaların bir fonksiyonu olduğu, doğrultunun fonksiyonu olmadığı durumlarda tasarım döndürülebilirdir. Çünkü bir tasarımın $(0,0,\dots,0)$ tasarım merkezi etrafında döndürülmesiyle \hat{Y} 'nin varyansı sabit kalır.

Döndürülebilirlik için gerekli ve yeterli koşul dört veya daha küçük dereceden bütün tek momentler sıfır ve çift momentler;

$$i, j = 1, 2, \dots, k, \quad i < j \text{ için } [ii] = \lambda_2, \quad [iij] = \lambda_4 \quad \text{ve} \quad [iiii] = 3\lambda_4 \quad \text{olmasıdır.}$$

[iiii] dördüncü dereceden saf moment, [iij] karıştırılmış dördüncü dereceden moment, [ii] ikinci dereceden saf momenttir. (3.1.3) denkleminde $\lambda_2 = [ii] = 1$ bulunur. Ancak λ_4 'ün değeri sabit değildir. Bu nedenle ikinci dereceden tasarımlar için λ_4 farklı değerler alabilir. $\lambda_4 = 1$ ise tasarım döndürülebilirdir.

Box ve Hunter 1957'de ikinci dereceden döndürülebilir bir tasarım için deneysel bölgedeki herhangi bir X noktasındaki kestirilmiş tepkinin varyansını

$$\text{Var}(\hat{Y}(x)) = A\{2(k+2)\lambda_4^2 + 2\lambda_4(\lambda_4-1)(k+2)\rho^2 + [(k+1)\lambda_4 - (k-1)\rho^4]\} \quad (3.2.1)$$

şeklinde vermişlerdir.

Burada $\rho^2 = X'X$ ve $A = \sigma^2 \{2N\lambda_4[(k+2)\lambda_4 - k]\}^{-1}$ 'dir. İkinci dereceden döndürülebilir dik bir tasarım için $\lambda_4 = 1$ iken (3.2.1) denklemi

$$\text{Var}(\hat{Y}(x)) = \frac{\sigma^2(k+2) + \rho^4}{2N} \text{ denklemine dönüşür.}$$

Tasarım merkezinde (3.2.1) denklemindeki \hat{Y} 'nin varyansı $\rho = 0$ iken

$$\text{Var}(\hat{Y}(0)) = \sigma^2 \lambda_4 \left\{ N \left(\lambda_4 - \frac{k}{k+2} \right) \right\}^{-1} \text{ 'dir.} \quad (3.2.2)$$

Bu denklemden $\lambda_4 > \frac{k}{k+2}$ için $\text{Var}(\hat{Y}(0))$ 'in λ_4 'ün azalan bir fonksiyonu olduğunu söyleyebiliriz. Bu da ikinci dereceden bir polinomun uyum eksikliğinin bir ölçüsüdür.

$\rho \neq 0$ ve sabitleştirilmiş N için ρ 'nun bir $W(\rho)$ fonksiyonu ile ölçülmüş kestirimin niteliği, λ_4 'ün değerlerinin kullanıldığı döndürülebilir tasarıma bağlıdır. Tasarım merkezi civarında $\rho=0$ noktasında $\text{Var}(\hat{Y}(x))$ 'in değeri $\rho=1$ 'deki varyansa eşittir. Bu özelliği sağlayan ikinci dereceden tasarımlar **tam düzgün tasarım** olarak adlandırılır.

λ_4 değeri $\frac{k}{k+2}$ 'ye yaklaştığında (3.2.1) denklemindeki A değeri sonsuza ıraksayacağı için ikinci dereceden döndürülebilir tasarım anlamsızlık kazanır.

$$u=1, 2, \dots, N \text{ için } \rho^2 = \sum_{i=1}^k X_{ui}^2, \quad i=1, 2, \dots, k \text{ için } [ii] = 1 \text{ ise}$$

$$\rho^2 = N^{-1} \sum_{u=1}^N \sum_{i=1}^k X_{ui}^2 = \sum_{i=1}^k [ii] = k \quad (3.2.3)$$

olur. Burada, $\rho^2 = N^{-1} \sum_{u=1}^N (X_{ui}^2)^2 = \sum_{i=1}^k [iii] + \sum_{i=1}^k \sum_{j=2}^{k-1} [ijij]$ yazılabilir. Bu son denklemden

$$3k\lambda_4 + k(k-1)\lambda_4 = k^2 \quad (3.2.4)$$

bulunur.

3) 3^k faktöryel tasarım:

Herbiri üç düzeyde olan k tane girdi değişkeninin bütün mümkün kombinasyonlarında gözlenmiş tepki ile uyarlanan ikinci dereceden bir tasarım 3^k faktöryel tasarım olarak adlandırılır.

$k=2$ için eğer X_{ui} 'nci girdi değişkeninin üç düzeyi birbirinden eşit uzaklıkta ise $i=1, 2, \dots, k$ için $a_i - c_i, a_i, a_i + c_i$ formunda yazılabilir. Kodlanmış değişkenler,

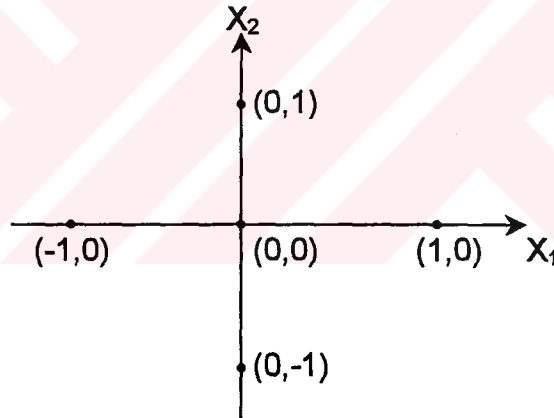
$$X_{ui} = \frac{X_{ui} - a_i}{c_i} \quad u = 1, 2, \dots, 9 \quad i=1,2$$

dönüşümün kullanılmasıyla sırayla -1, 0 ve 1'e karşılık gelir. Bu durumda tasarım matrisi,

$$D = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ -1 & 0 \\ -1 & 1 \\ 0 & -1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} 9 \times 2$$

şeklindedir.

Tasarım noktaları ise aşağıdaki gibidir.



Şekil 3.1 3^2 faktöryel tasarım noktalarının konumlandırılması

$k=3$ için De Buan 1959'da üç faktör için üç düzeyli tasarımları incelemiştir. Bu tasarımlar 3^3 faktöryel tasarımın bazı noktalarının kombinasyonunu içerir.

4) Box ve Behnken Tasarımları:

İkinci dereceden bir modeldeki parametrelerin kestirimi için üç düzeyden daha az tasarımlar sınıfı Box ve Behnken tarafından geliştirilmiştir. Yani 3^k faktöryel tasarımın faktöryel kombinasyonlarının bir alt kümesi ile oluşturulan tasarımlardır. Box ve Behnken tasarımları ne döndürülebilir ne de diktirler.

5) Merkezi Bileşik Tasarımlar: (MBT)

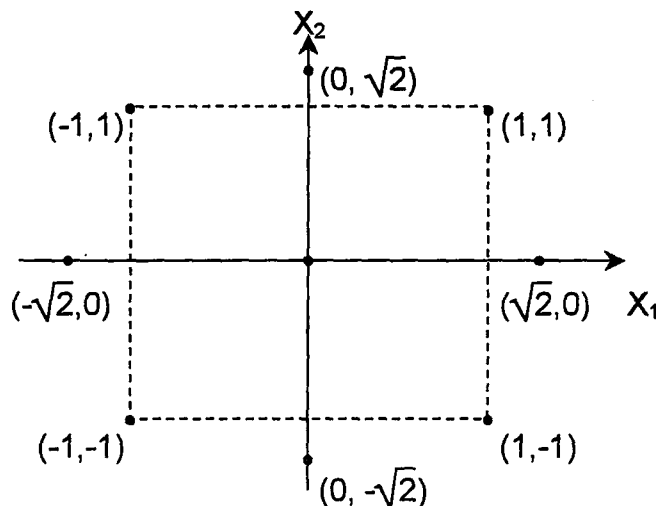
Merkezi bileşik tasarımlar 3^k faktöryel tasarımlara alternatif bir tasarım sınıfı olarak Box ve Wilson tarafından (1951'de) geliştirilmiş olup içeriği aşağıdaki gibidir.

- Tam bir 2^k faktöryel tasarım veya 2^k 'nin bir fonksiyonu için faktör düzeyleri genellikle $-1, +1$ değerleri ile kodlanır. Bu tasarım için faktöryel durum olarak bilinir.
- n_0 merkez noktalarının sayısı olup $n_0 \geq 1$ 'dir.
- Her tasarım değişkeninin eksenleri üzerindeki eksensel iki noktanın tasarım merkezine uzaklığı α kadardır.

Tasarım noktalarının toplam sayısı $N=2^k+2k+n_0$ 'dir. Örneğin $k=2$ için $\alpha=\sqrt{2}$ ve $n_0=1$ iken MBT için tasarım matrisi

$$D = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & -1 \\ -1 & 1 \\ 1 & 1 \\ \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}_{9 \times 2} \quad (3.2.5)$$

şeklindedir. Tasarım noktalarının grafiksel gösterimi aşağıdaki gibidir.



4. dereceye kadar bütün tek momentler sıfır olduğundan (3.1.3) eşitliği MBT sağlar. Yani,

$$\begin{aligned} [i] &= 0 & i=1, 2, \dots, k \\ [iii] &= 0 & i=1, 2, \dots, k \\ [ij] &= 0 & i, j=1, 2, \dots, k (i \neq j) \\ [iij] &= 0 & i, j=1, 2, \dots, k (i \neq j) \\ [ijk] &= 0 & i \neq j \neq k \\ [iiij] &= 0 & i \neq j \\ [iiijk] &= 0 & i \neq j \neq k \end{aligned}$$

olup diğer momentler sıfırdan farklıdır. ($i \neq j$)

Eğer $[iiii] = 3[iii]$ ise MBT döndürülebilir. $[ii]=1$, tasarımın faktöryel durumundaki noktaların sayısı F ise $N=F+2k+n_0$ MBT'deki toplam nokta sayısıdır.

$$g = \left[\frac{N}{(F+2\alpha^2)} \right]^{1/2} \text{ için } Fg^4 + 2\alpha^4 g^4 = 3Fg^4 \Rightarrow \alpha = F^{1/4}$$

dir. Eğer bir MBT $[iij]$ dördüncü dereceden karıştırılmış momentlere sahip ise diktir. Buna eşdeğer olarak $\lambda^4=1$ 'dir.

$$[iij] = \frac{Fg^4}{N} = \frac{FN}{(F+2\alpha^2)^2} = 1 \Rightarrow (F+2\alpha^2)^2 = FN \Rightarrow \alpha = \left[\frac{(FN)^{1/2} - F}{2} \right]^{1/2}$$

olur. Ayrıca MBT'nin dikliği ve döndürülebilirliği için

$$\alpha^4 = F \Rightarrow (F+2\sqrt{F})^2 = F(2k+n_0) \Rightarrow n_0 \cong 4\sqrt{F}+4-2k$$

yaklaşık tamsayı değeri kadar merkez nokta sayısı kullanılmalıdır.

İkinci dereceden tasarımlar aşağıdaki gibi sınıflandırılabilir.

- a) 3^k faktöryel tasarım
- b) Box ve Behnken tasarımları
- c) Merkezi bileşik tasarımlar
- d) Silindirik döndürülebilir tasarımlar
- e) Simetrik olmayan döndürülebilir tasarımlar
- f) Hake tasarımları
- g) Karışık tasarımlar
- h) Box ve Draper tasarımları
- i) Düzgün kabuk tasarımları

3.3 İKİNCİ DERECEDEKİ BİR MODELİN UYARLANMASI

Uyarlanmış tepki yüzeyine yerel yaklaşım için aşağıdaki adımlar izlenir.

- i) Kestirilmiş ikinci dereceden tepki yüzeyini temsil eden uygun bir model bulmak
- ii) (3.1.1)'deki modeli kullanarak $(X_{10}, X_{20}, \dots, X_{k0})$ durağan noktasının yerini belirlemek. Bu noktada kestirilmiş tepki yüzeyinin eğimi sıfır olacaktır. Eğer durağan nokta deneysel bölgenin içinde ise bir sonraki adıma geçilir.
- iii) Durağan noktanın niteliğini belirlemek, maksimum-minimum veya eğer noktası olduğuna karar verilir.
- iv) Durağan nokta civarında tepki yüzeyi belirlenir.

Uyarlayacağımız k değişkenli ikinci dereceden model

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i=1}^k \sum_{j=2}^{k-1} \beta_{ij} X_i X_j \quad (3.3.1)$$

olsun. Bu modelde kestirilmesi gereken parametre veya terim sayısı $P = \frac{(k+1)(k+2)}{2}$ 'dir.

Gözlenmiş değerleri kullanarak, (3.3.1) ile verilen modelin katsayılarını kestirmek için tasarımlar yapılır. Tasarım için kestirilmiş ikinci dereceden polinomal modelin

$$\hat{Y}(x) = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i=1}^k b_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^k \sum_{j=2}^{k-1} b_{ij} x_i x_j \quad (3.3.2)$$

şeklinde olduğunu kabul edelim. Burada amaç x_i 'ler için en uygun optimum koşulları bularak tepki yüzeyinin yapısını belirlemektir. Kestirilmiş tepkiyi optimize edecek olan x_1, x_2, \dots, x_k düzeylerini bulmak için; (3.3.1)'in $i=1, 2, \dots, k$ için x_i 'lere göre kısmi türevleri sıfıra eşitlenirse,

$$\frac{\partial Y}{\partial x_1} = \frac{\partial Y}{\partial x_2} = \dots = \frac{\partial Y}{\partial x_k} = 0$$

koşulunu sağlayan $(X_{10}, X_{20}, \dots, X_{k0})$ noktasına durağan nokta denir. Durağan nokta bir maksimum tepki noktası veya bir minimum tepki noktası olabileceği gibi bir eğer noktası da olabilir. Durağan noktayı belirleyen bir genel çözüm elde etmek için, (3.3.2) ile verilen kestirilmiş modeli matris gösteriminde yazarak X vektörüne göre türev alıp sıfıra eşitlersek,

Burada $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix}_{k \times 1}$ $b = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_k \end{bmatrix}_{k \times 1}$ ve $B = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \frac{\hat{\beta}_{12}}{2} & \dots & \frac{\hat{\beta}_{1k}}{2} \\ & \hat{\beta}_{22} & \dots & \frac{\hat{\beta}_{2k}}{2} \\ & & \ddots & \\ \text{simetrik} & & & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix}_{k \times k}$

olmak üzere

$$\hat{Y} = b_0 + x'b + x'Bx \quad (3.3.3)$$

yazabiliriz.

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \hat{Y}(x)}{\partial x_1} &= b_1 + 2b_{11}x_1 + \sum_{j=2}^{k-1} b_{1j}x_j = 0 \\ \frac{\partial \hat{Y}(x)}{\partial x_2} &= b_2 + 2b_{22}x_2 + \sum_{j=2}^{k-1} b_{2j}x_j = 0 \\ &\vdots \\ \frac{\partial \hat{Y}(x)}{\partial x_k} &= b_k + 2b_{kk}x_k + \sum_{j=2}^{k-1} b_{kj}x_j = 0 \end{aligned} \right\}$$

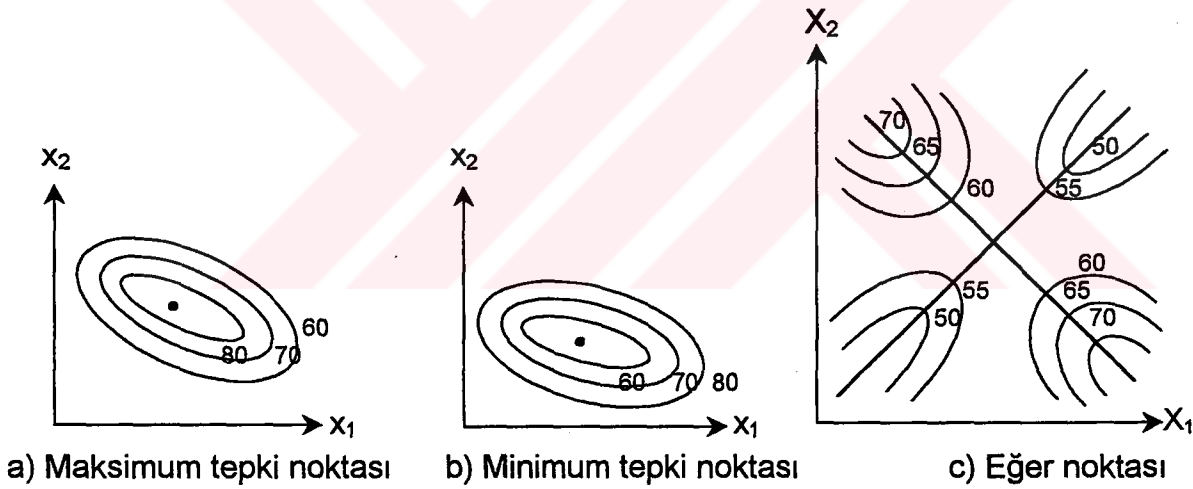
sisteminin homojen olmayan halinin katsayılar matrisi \mathbf{B} 'dir. Bu sistem matris gösteriminde $\frac{\partial \hat{Y}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{b} + 2\mathbf{B}\mathbf{x} = 0$ şeklinde yazılabilir. Bu matris denkleminin çözümü de,

$$2\mathbf{B}\mathbf{x} = -\mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{B}\mathbf{x} = -\frac{1}{2}\mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{x} = -\frac{1}{2}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{b}$$

durağan nokta olarak bulunur. Bu noktadaki kestirilmiş tepkiyi bulmak için $\hat{Y} = \mathbf{b}_0 + \mathbf{x}'\mathbf{b} + \mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x}$ eşitliğinde durağan nokta yerine yazılırsa,

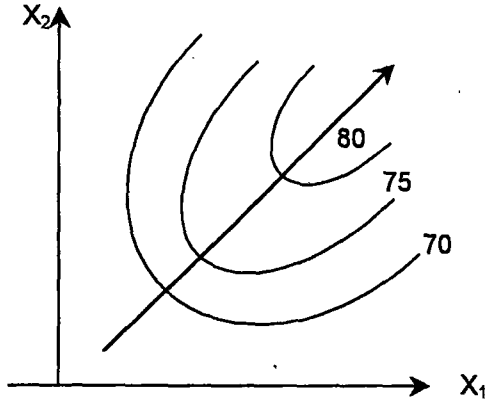
$$\begin{aligned} \hat{Y} &= \mathbf{b}_0 + \mathbf{x}_0'(\mathbf{b} + \mathbf{B}\mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0'[\mathbf{b} + \mathbf{B}(-\frac{1}{2}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{b})] \\ \hat{Y} &= \mathbf{b}_0 + \mathbf{x}_0'(\mathbf{b} - \frac{1}{2}\mathbf{B}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{b}) = \mathbf{b}_0 + \mathbf{x}_0'(\mathbf{b} - \frac{1}{2}\mathbf{b}) = \mathbf{b}_0 + \frac{1}{2}\mathbf{x}_0'\mathbf{b} \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

bulunur.

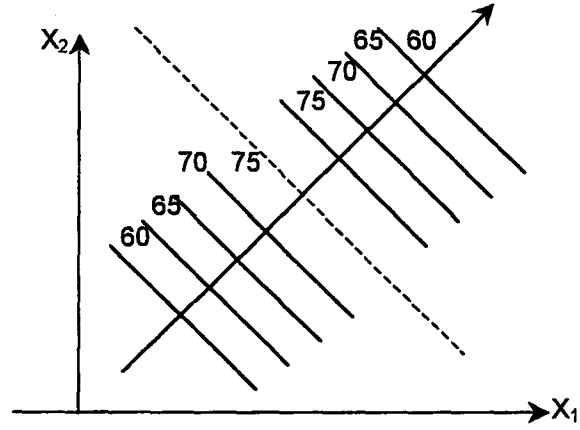


Şekil 3.2 Uyarlanmış ikinci dereceden tepki yüzeyindeki durağan noktalar

Durağan noktayı belirleyen $\mathbf{X}_0 = (X_{10}, X_{20}, \dots, X_{k0})$ vektörünün elemanları yüzey hakkında bilgi vermez. Durağan noktanın maksimum, minimum veya eğer noktası olması durumunda, durağan noktanın deneysel bölgenin içinde olduğu kabul edilir. Durağan noktanın koordinatları deneysel bölgenin dışında ise yükselen veya azalan bir eşik sistemi ile karşılaşılır.



a) Bir yükselen eşik sistemi



b) Durağan Eşik

Durağan noktanın gerçek yeri için % $(1-\alpha)$ güven bölgesi ilk olarak Box ve Hunter (1954) tarafından verilmiştir.

Gerçek durağan noktası (X_1, X_2, \dots, X_k) 'nin koordinat konumlandırması $X=(X_1, X_2, \dots, X_k)$ ' tarafından sağlanıyorsa ve ayrıca (3.3.1)'deki ikinci dereceden model gerçek tepkiyi sağlıyorsa

$$\beta + 2B_2X = 0 \text{ dır.}$$

Burada $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k)$ ve $k \times k$ boyutlu B_2 matrisi daha önceki B matrisi gibi $\beta_{11}, \beta_{22}, \dots, \beta_{kk}$ gerçek kuadratik parametreleri içerir. Eğer B_2 ve β 'nin elemanları sırayla B ve b tarafından sağlanıyorsa B ve b 'deki elemanlar çok terimli dağılıma sahiptirler. Bu durumda $k \times 1$ boyutlu aşağıdaki gibi bir vektör tanımlayabiliriz.

$$\delta = b + 2Bx$$

Burada $\delta \sim N(0, \sigma^2 V)$ olup $\sigma^2 V$, δ elemanların varyans-kovaryans matrisidir.

Eğer σ^2 'nin bir ortalama kare hata kestirimi bu B kestiriminden bağımsız olarak ki-kare dağılımına sahip ise x için % $1-\alpha$ güven bölgesi

$$\frac{\delta^{-1} V^{-1} \delta}{O.K.H_k} \leq F_{\alpha, K, V} \quad (3.3.5)$$

şeklindedir. Burada V ortalama kare hata ile ortak serbestlik derecesidir.

Durağan nokta deneysel bölgenin dışında ise bu nokta civarında tepki sistemini daha ayrıntılı incelemek için tepki sistemine kanonik formda yaklaşmak gerekir.

k değişkenli bir sistem için, kanonik formu oluşturmada ilk adım durağan noktayı tasarımın merkezine yani sistemin orjinine taşımaktır. Bu $(Z_1, Z_2, \dots, Z_k) = (X_1 - X_{10}, X_2 - X_{20}, \dots, X_k - X_{k0})'$ veya $Z = X - X_0$ ötelemesiyle yapılır. (3.3.3) denklemindeki tepki yüzeyinde bu öteleme yapılırsa

$$\begin{aligned}
 \hat{Y}(x) &= b_0 + (Z + X_0)'b + (Z + X_0)'B(Z + X_0) \\
 &= b_0 + Z'b + X_0'b + (Z'B + X_0'B)(Z + X_0) \\
 &= b_0 + Z'b + X_0'b + Z'BZ + Z'BX_0 + X_0'BZ + X_0'BX_0 \\
 &= b_0 + X_0'b + X_0'BX_0 + Z'BZ + Z'b + Z'BX_0 + X_0'BZ \\
 &= b_0 + X_0'b + X_0'BX_0 + Z'BZ + Z'(b + BX_0) + X_0'BZ \\
 &= \hat{Y}_0 + Z'BZ + Z'(b - \frac{1}{2}bB^{-1}B) + (-\frac{1}{2}B^{-1}b)'BZ \\
 &= \hat{Y}_0 + Z'BZ + \frac{1}{2}Z'b - \frac{1}{2}Zb' = \hat{Y}_0 + Z'BZ
 \end{aligned} \tag{3.3.6}$$

Z' 'deki kestirilmiş tepki, durağan noktadaki tepkiye Z_i 'lerin bir kuadratik formu eklenerek bulunur. Bu durumda, durağan noktadaki tepkinin lineer fonksiyonu oluşturulduğundan Z_i eksenleri X_i eksenlerine paralel olarak çizilir.

$W = (W_1, W_2, \dots, W_k)'$ olacak şekilde

$$W = M'Z \tag{3.3.7}$$

koşulunu sağlayan bir W vektörünü tanımlayalım. Burada M , sütunları B matrisinin özvektörleri olan $k \times k$ boyutlu dik bir matristir. M matrisi B 'nin köşegenselleştirilmesinde etkilidir. Şöyle ki; $M'BM = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k)'$ 'dir. Burada, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ B 'nin özvektörleridir. W_1, W_2, \dots, W_k değişkenleriyle birleştirilmiş eksenler tepki sisteminin esas eksenleri olarak adlandırılır. (3.3.5)'deki dönüşüm Z_i eksenlerinin W_i eksenlerine

dönüştürülmesidir. Eğer $M'Z = M'(X-X_0)$ şeklinde yazarsak X_i 'lerin katsayıları W_i 'lerin doğrultusunu belirler. X_i 'lerin katsayıları 1 ise W_i eksenleri X_i eksenlerine paraleldir. (3.3.6)'daki $Z'BZ$ ifadesi W cinsinden yazılırsa,

$$W = M'Z, W' = Z'M, M'M = I$$

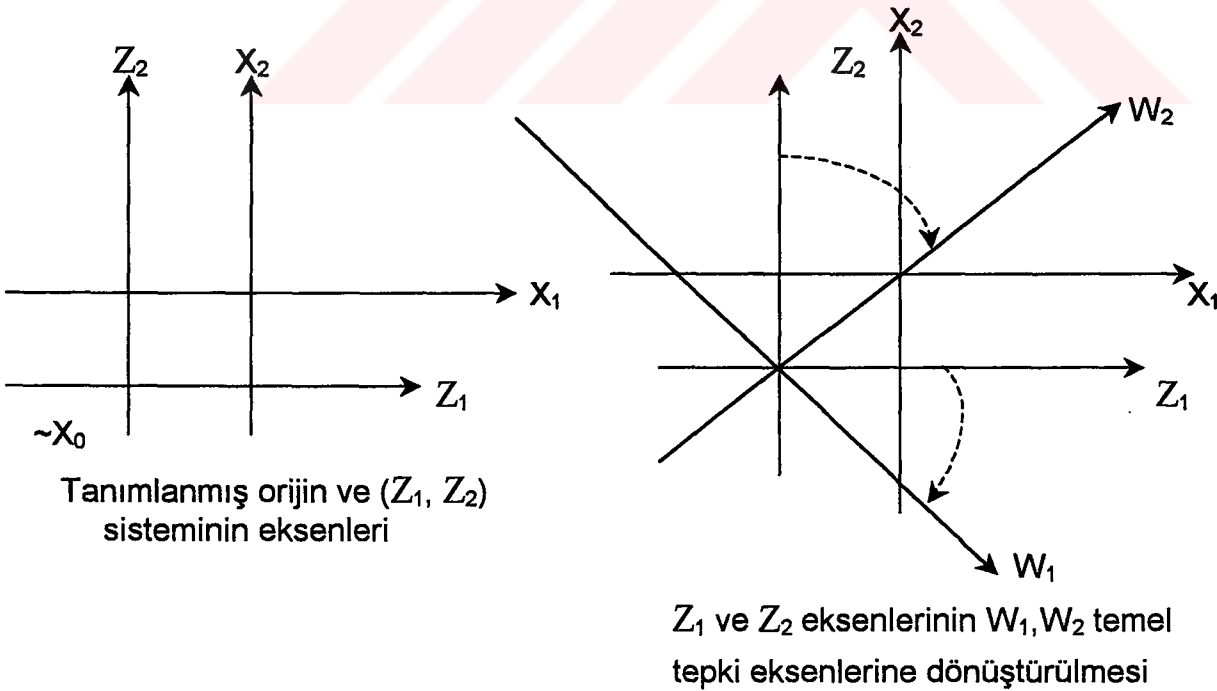
ve Z' yerine $W'M'$ yazılırsa

$$Z'BZ = W'MBMW = \lambda_1 w_1^2 + \lambda_2 w_2^2 + \dots + \lambda_k w_k^2 \quad (3.3.8)$$

bulunur. B matrisi gerçel değerli simetrik olduğundan λ_i özdeğerleri gerçel değerlidir ve

$$\hat{Y} = \hat{Y}_0 + \sum_{k=1}^k \lambda_k W_k^2 \quad (3.3.9)$$

kanonik denklemindeki W_i^2 terimlerinin sırayla katsayılarıdır.



İkinci dereceden tepki yüzeyinin (3.3.9) denklemindeki kanonik formu, (3.3.3) formundaki ikinci dereceden yaklaşım polinomuna benzer rol oynar. Eğer $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ değerlerinin;

- a) Tümü negatif ise kestirilmiş yüzey X_0 'da maksimumdur.
- b) Tümü pozitif ise kestirilmiş yüzey X_0 'da minimumdur.
- c) En az biri zıt işaretli ise kestirilmiş yüzey X_0 'da eğer noktasına sahiptir.

Ayrıca λ_i değerleri sıfır veya sıfıra oldukça yakın ise W_i doğrultusunda tepki değişmez. Bu durumda kestirilmiş yüzey bir durağan eşik sistemidir. Örneğin $k=2$ için $\lambda_2=0$ ve $\lambda_1<0$ yüzey W_1 doğrultusunda öne doğru eğik olup W_2 doğrultusunda kestirilmiş tepki değerleri aynıdır. Eğer $\lambda_2=0$, $\lambda_1<0$ ve durağan nokta tasarım bölgesinin dışında ise yüzey yükselen eşik, $\lambda_2=0$ ve $\lambda_1>0$ ise azalan bir eşiktir. Eğer $|\lambda_2| > |\lambda_1|$ ise W_2 doğrultusundaki yükselme W_1 doğrultusundaki yükselmeden daha büyüktür.

Kanonik formda tepki yüzeyini belirlemede son aşama X_i değerlerinin fonksiyonları gibi W_i değerleri belirlenir. Bu belirleme $W=M'Z$ dik dönüşümdeki gösterimle yapılır. B'nin k tane özdeğerine karşılık gelen özvektörlerden oluşan M matrisinin k tane sütunu oluşturulur. $M=[m_1; m_2; \dots; m_k]$ şeklinde parçalandığını kabul edelim. Burada m_i , M 'nin i'nci sütunudur. m_i 'nin elemanları λ_i 'ye karşılık gelen özvektörün bulunmasıyla elde edilir ve m_i 'nin elemanlarının karelerinin toplamı 1 olacak şekilde normalize edilir. Yani $m_i'm_i=1$ 'dir. Ayrıca m_i 'nin elemanları $(B-\lambda_i I_k)m_i=1$ denkleminin çözümü ile de bulunur. Öyle ki $m_i'm_i=1$ 'dir. $\lambda_i \neq \lambda_j$ durumunda B'nin özvektörleri $i \neq j$ olmak üzere $m_i'm_j=0$ özelliğini sağlamalıdır. M matrisinin elemanları ve λ_i 'lerin bilinmesiyle tepki yüzeyinin tasviri, kanonik denklem kullanılarak yapılabilir.

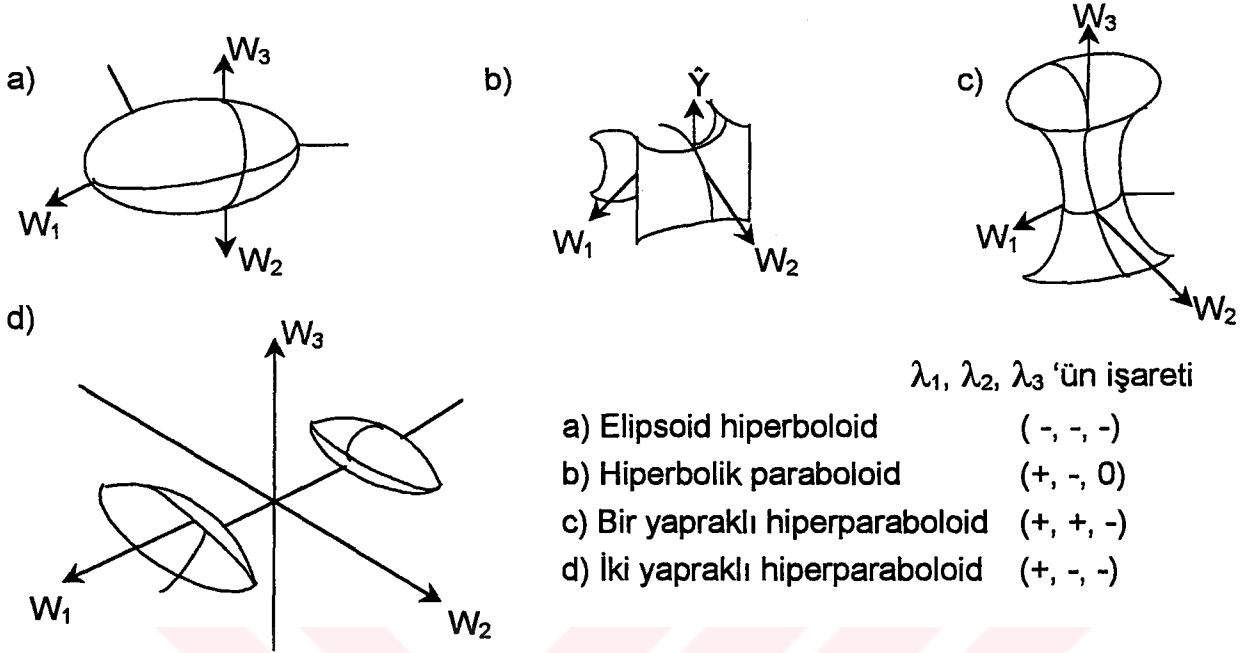
Durağan noktadan uzaklaşarak tepkideki değişimler şekilsel olarak gösterilebilir. W_i 'leri X_i 'ler cinsinden ifade etmek için

$$W = M'Z = M'(X-X_0) \text{ denklemini kullanılır.}$$

Kestirilmiş tepkinin kontur yüzeyleri

$\hat{Y} = \hat{Y}_0 + \lambda_1 W_1^2 + \lambda_2 W_2^2 + \dots + \lambda_k W_k^2$ kanonik formundaki $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ 'nin işaretiyle yakından ilgilidir.

k=3 için kontur yüzeyleri aşağıdaki gibidir.



3.4 İKİLİ TEPKİ YÜZEYİ OPTİMİZASYONU

Y tepkisi maksimize veya minimize edecek bir takım girdi veya tasarım değişkeninin optimal konumlandırılmalarını tespit etmek için Y'nin varyansının küçük veya sabit olması istenir. Varyansın sabit olmadığı durumlarda tepki yüzeyi yöntem bilimi hatalı çıkar. Bu sorunu Vining ve Myers (1990) ikili tepki yüzeyini kullanarak giderdiler. Vining ve Myers, önce ikinci dereceden modelleri hem birincil hem de ikincil tepki yüzeylerine uyguladılar. İkincil tepki değeri üstündeki uygun kısıtlamaya göre temel tepkiyi optimize etmeyi amaçlamışlardır. Onların kullandığı Lagrange optimizasyon süreci, ikincil tepkinin kestiriminin sabitlenmiş bir değere eşitlenmesi kısıtlaması, daha iyi olabilecek durumları dışlar. Ayrıca tam ikinci dereceden model üzerindeki hem birincil hem de ikincil tepki yüzeyleri hakkındaki kısıtlama gerçekçi değildir. Bunun yerine en iyi alt küme (konumlandırma) modellerinin kullanılması, yöntemi daha da genelleştirir.

$$\mathcal{M}_1 = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i=1}^k \sum_{j=2}^{k-1} \beta_{ij} X_i X_j + \varepsilon_1$$

$$\mathcal{M}_2 = \gamma_0 + \sum_{i=1}^k \gamma_i X_i + \sum_{i=1}^k \gamma_{ii} X_i^2 + \sum_{i=1}^k \sum_{j=2}^{k-1} \gamma_{ij} X_i X_j + \varepsilon_2$$

birincil ve ikincil tepkilere uyarlanmış yüzeyler sırayla

$$\hat{W}_1 = b_0 + x'b + x'Bx$$

$$\hat{W}_2 = c_0 + x'c + x'Cx \quad \text{şeklinde yazılabilir. Burada}$$

$$b_0 = \hat{\beta}_0, \quad c_0 = \hat{\gamma}_0, \quad b = (\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_k), \quad c = (\hat{\gamma}_0, \hat{\gamma}_1, \dots, \hat{\gamma}_k) \text{ ve}$$

$$B = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2b_{11} & b_{12} \dots b_{1k} \\ & 2b_{22} \dots b_{2k} \\ & & \dots \\ \text{simetrik} & & & 2b_{kk} \end{bmatrix}_{k \times k}$$

$$C = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2c_{11} & c_{12} \dots c_{1k} \\ & 2c_{22} \dots c_{2k} \\ & & \dots \\ \text{simetrik} & & & 2c_{kk} \end{bmatrix}_{k \times k}$$

(3.3.3)'te bulunmuş matrislerdir.

Lagrange çarpanlarını kullanarak, VM, $\hat{W}_1 y_1$ $\hat{W}_2 = T$ 'ye göre optimize edecek x 'leri bulmak için bir yöntem sunmuşlardır. Burada T değeri, kısıtlayıcı tepkinin istenen bir hedef değeridir.

$L = b_0 + b'x + x'Bx + \lambda(c_0 + c'x + x'Cx - T)$ olmak üzere $\frac{\partial L}{\partial x} = 0$ denklemini sağlayan x noktası araştırılır.

\hat{W}_μ : Ortalama için kestirilmiş tepki yüzeyi

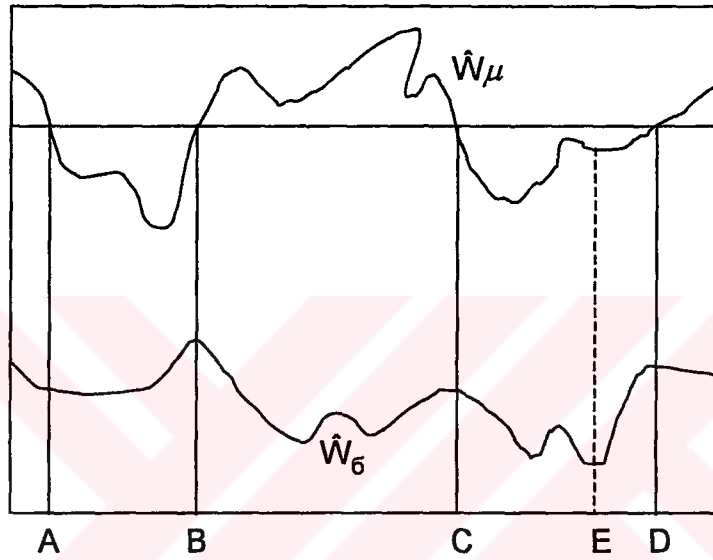
\hat{W}_σ : Standart sapma için kestirilmiş tepki yüzeyi

olmak üzere VM tartışmasının özeti aşağıdaki gibidir.

- "Hedef değer T en iyisidir." Bu μ 'yu belirlenmiş bir μ_0 değerinde tutarak σ^2 'yi minimize etmek anlamındadır. Yani $\hat{W}_\mu = \mu_0$ 'a göre \hat{W}_σ ifadesi minimize edilir.
- "En büyüğü en iyisidir." Bu μ 'yu oldukça büyütürken σ^2 'yi kontrol etmektir. Yani, $\hat{W}_\sigma = \sigma_0$ 'a göre \hat{W}_μ 'yü maksimize etmektir.
- "En küçüğü en iyisidir." Bu σ^2 'yi kontrol ederken μ 'yu mümkün oldukça küçültmek anlamındadır. Yani, $\hat{W}_\sigma = \sigma_0$ 'a göre \hat{W}_μ 'yü minimize etmektir.

Bu durumlardan anlaşıldığı gibi, birincil ve ikincil tepkilerin belirlenmesi deneyin amacına bağlıdır. \hat{W}_μ ve \hat{W}_σ her ikisi de bazı rastgele hata terimlerine sahip tepki yüzeylerinin yaklaşımlarıdır.

Optimizasyonu eşitlik ölçütü ile sınırlandırmak bazı tepki değerlerinin ihmal edilmesine yol açar. Örneğin "Hedef değer en iyisidir." durumu için aşağıdaki şekil incelendiğinde;



kestirilmiş ortalama tepki eğrisi \hat{W}_μ ile gösterilmiş ve kestirilmiş standart sapma eğrisi \hat{W}_σ ile gösterilmiştir. Amaç, \hat{W}_μ 'nin T hedef değerine yakın olacağı uygun bir küme araştırılırken \hat{W}_σ standart hatasını da küçük tutmaktır. VM'ye göre hedef değer T olsun. $\hat{W}_\mu = T$ 'dir. A, B, C ve D gibi dört nokta bu kısıtlamayı sağlar. Bunlardan A noktası minimum varyansı olduğundan optimal konumlandırması vardır. \hat{W}_μ ve \hat{W}_σ 'nin davranışları incelendiğinde, A noktasından E noktası tercih edilir. Küçük bir yanlılık katılarak varyans büyük bir oranda küçültülebilir. $MSE = (\hat{W}_\mu - T)^2 + \hat{W}_\sigma^2$ ortalama kare hatası E 'de minimumdur. MSE ölçütü hedef etrafında yayılma sağladığı halde varyansı küçük tutar. Bu nedenle bu yaklaşım VM'deki eşitlik kısıtlayıcılarından daha uygundur. Bunun için önce herhangi bir kabullenme yapılmadan her ikisi de x 'in fonksiyonu olan \hat{W}_μ^2 ve \hat{W}_σ^2 modelleri oluşturulur. Daha sonra $MSE = (\hat{W}_\mu - T) + \hat{W}_\sigma$ 'nin minimize edildiği x değeri bulunmalıdır.

Örnek: Örnek 2.1'deki kimyasal sürecin analizine devam edelim. Tablo 2.4'teki verilere X_1 , X_2 değişkenlerine bağlı ikinci dereceden bir model uyarlanamaz. Deneyci bu verileri yeterli sayıda toplayarak bir ikinci dereceden model uyarlamaya karar veriyor.

Deneyci dokuz gözleme ek olarak ($X_1 = 0$, $X_2 = \mp 1,414$) ve ($X_1 = \mp 1,414$, $X_2 = 0$) noktalarında dört gözlem elde ediyor. Bu veriler aşağıdaki gibidir.

<u>Doğal değişkenler</u>		<u>Kodlanmış değişkenler</u>		<u>Tepki</u>
X_1	X_2	x_1	x_2	Y
80	170	-1	-1	76,5
80	180	-1	1	77,0
90	170	1	-1	78,0
90	180	1	1	79,5
85	175	0	0	79,9
85	175	0	0	80,3
85	175	0	0	80,0
85	175	0	0	79,7
85	175	0	0	79,8
92,07	175	1,414	0	78,4
77,93	175	-1,414	0	75,6
85	182,07	0	1,414	78,5
85	167,93	0	-1,414	77,0

Kodlanmış verilere, en küçük kareler yöntemiyle ikinci dereceden bir model uyarlanarak

$$\hat{Y} = 79,9408 + 0,9949x_1 + 0,5151x_2 - 1,3770x_1^2 - 1,0018x_2^2 + 0,12500x_1x_2$$

elde edilmiştir. Bu model için varyans analizi tablosu aşağıdaki gibidir.

<u>Değişim kaynağı</u>	<u>Kareler toplamı</u>	<u>Serbestlik der.</u>	<u>Ortalama kare</u>	<u>F</u>
Regresyon	28,2560	5	5,6512	81,205
Hata	0,4871	7	0,0696	
Uyum Eksikliği	0,2751	3	0,0917	1,73
Saf hata	0,2120	4	0,0530	
Toplam	28,7431	12		

Uyum eksikliği önemli olmadığından ikinci dereceden model gerçek yüzeyi temsil eder. İkinci dereceden modelin gerçek yüzeye yeterli dereceden yaklaştığını garantilemek için kanonik analiz uygulanabilir.

$$b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,9949 \\ 0,5151 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} -1,3770 & 0,1250 \\ 0,1250 & -1,0018 \end{bmatrix}$$

olup durağan nokta

$$X_0 = -\frac{1}{2}B^{-1}b = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1,3770 & 0,1250 \\ 0,1250 & -1,0018 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0,9949 \\ 0,5151 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,3890 \\ 0,3056 \end{bmatrix}$$

olup $X_{10} = 0,3890$ ve $X_{20} = 0,3056$ 'dır.

Durağan nokta aşağıdaki gibi doğal değişkenler cinsinden ifade edilebilir.

$$0,3890 = \frac{X_1 - 85}{5}, \quad \frac{X_2 - 175}{5} = 0,3056 \Rightarrow$$

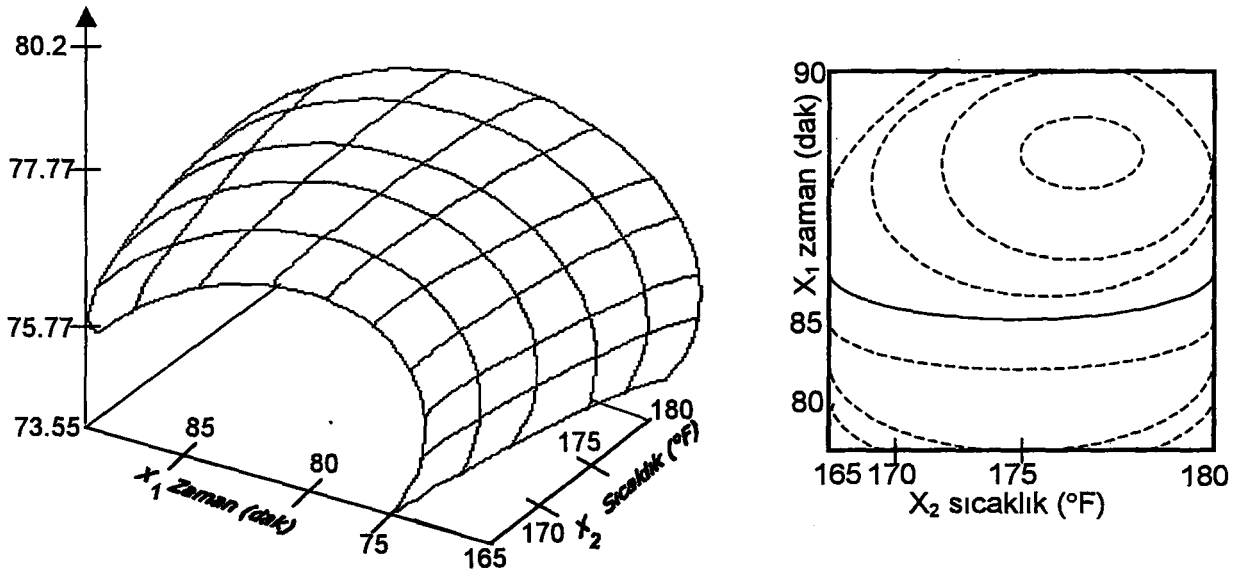
$$X_1 = 86,9450 \cong 87 \text{ dakika tepkime süresi}$$

$$X_2 = 176,528 \cong 176,5 \text{ °F'lik sıcaklığı verir.}$$

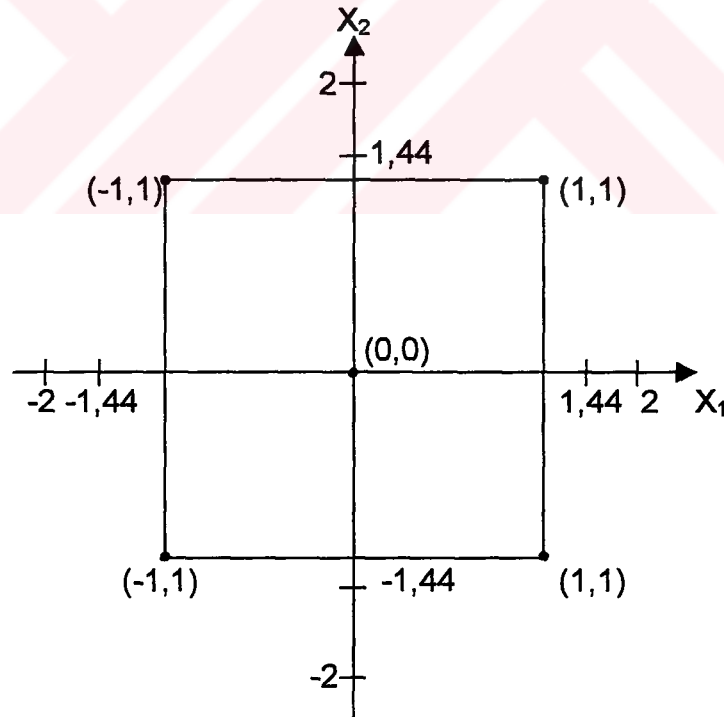
Durağan noktada tahmin edilmiş tepki

$$\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \frac{1}{2}X_0'b = 79,9408 + \frac{1}{2}(0,3890, 0,3056) \begin{pmatrix} 0,9949 \\ 0,5151 \end{pmatrix} = 80,21$$

Tepki yüzeyini karakterize etmenin en kolay yolu, zaman ve sıcaklığın bir fonksiyonu olarak ürünün bir kontur çizimini yapmaktır.



Şekillerin incelenmesinden optimum 175°F ve 85 dakikalık tepkime süresine çok yakın olduğu söylenebilir ve bu nokta tepkimenin maksimumudur. Ayrıca kontur çiziminden tepkimenin, sıcaklık değişimine nazaran tepkime süresindeki değişimlere daha duyarlı olduğu söylenebilir.



Veri tablosu için merkezi bileşik tasarımın grafiğidir.

$$|B - \lambda I| = \begin{vmatrix} -1,3770 - \lambda & 0,1250 \\ 0,1250 & -1,0018 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow$$

$$\lambda^2 + 2,3788\lambda + 1,3639 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = -0,9641 \text{ ve } \lambda_2 = -1,4147$$

bulunur. Bu durumda uyarlanmış modelin kanonik formu

$$\hat{Y} = 80,21 - 0,9641 w_1^2 - 1,4147 w_2^2$$

şeklinde bulunur. λ_1, λ_2 negatif olup durağan nokta araştırma bölgesi içinde olduğundan durağan noktanın bir maksimum nokta olduğu sonucuna varılır. Modelin kanonik formu, uç doğrultusunda ürün kaybına daha az duyarlı olduğunu işaret ediyor. (W_1, W_2) uzayındaki noktaların (X_1, X_2) uzayındaki noktalara dönüştürülmesi gerekir.

$W = M'Z = M'(X-X_0)$ Burada M ($k \times k$) boyutlu ($k=2$) dik bir matristir. M 'in sütunları λ_1, λ_2 ile ilişkilendirilmiş normalize edilmiş öz vektörlerdir. Yani, m_i , M 'nin i 'nci sütunu ise $m_i ; (B-\lambda_i I)m_i = 0$ denkleminin çözümü olup $\sum_{j=1}^k M_{ji} = 1$ 'dir.

$$\begin{bmatrix} (-1,3770 + 0,9641) & 0,1250 \\ 0,1250 & -1,0018 + 0,9641 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_{11} \\ m_{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\left. \begin{array}{l} -0,4129m_{11} + 0,1250m_{21} = 0 \\ 0,1250m_{11} - 0,0377m_{21} = 0 \end{array} \right\} \text{ Bu sistemin } m_{11}^2 + m_{21}^2 = 1 \text{ normalize}$$

edilmiş çözümlerini araştırdığımızda,

denkleminin aşikar çözümü yoktur. $m_{21}^* = 1 \Rightarrow m_{11}^* = 0,3027$ bulunur.

$$\sqrt{(m_{11}^*)^2 + (m_{21}^*)^2} = \sqrt{(0,3027)^2 + 1^2} = 1,0448$$

$$\Rightarrow m_{11} = \frac{m_{11}^*}{1,0448} = \frac{0,3027}{1,0448} = 0,2897$$

$$m_{21} = \frac{m_{21}^*}{1,0448} = \frac{1}{1,0448} = 0,9571$$

$\lambda_2 = -1,4147 \Rightarrow$ Benzer şekilde $m_{12} = -0,9574$ ve $m_{22} = 0,2888$ bulunur.

Buradan da,

$$M = \begin{bmatrix} 0,2897 & -0,9574 \\ 0,9571 & 0,2888 \end{bmatrix} \Rightarrow (W = M'(X - X_0))$$

$$\begin{bmatrix} W_1 \\ W_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0,2897 & 0,9574 \\ -0,9571 & 0,2888 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 - 0,3890 \\ X_2 - 0,3056 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow W_1 = 0,2897 (X_1 - 0,3890) + 0,9574 (X_2 - 0,3056)$$

$$W_2 = -0,9571 (X_1 - 0,3890) - 0,2888 (X_2 - 0,3056)$$

bulunur.



BÖLÜM-4

UYGULAMA VE SONUÇ

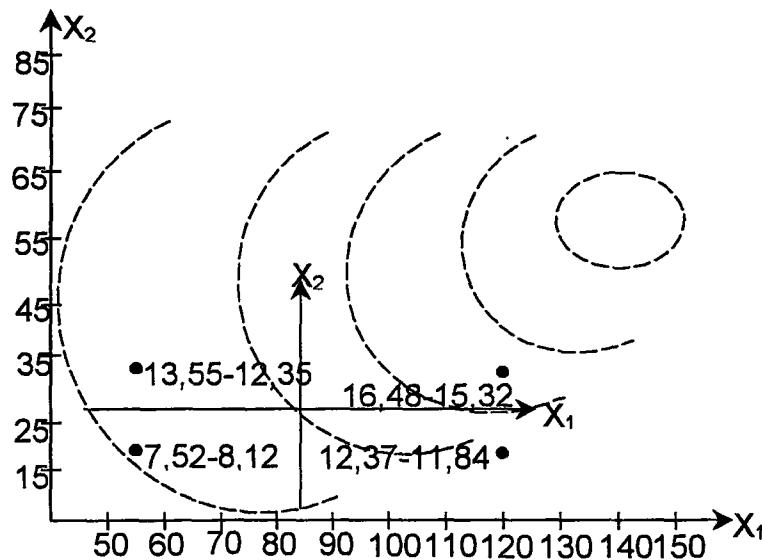
4.1 UYGULAMA

Birincisi standart bir N-P-K kombinasyonu ve diğeri tamamlayıcı bir besleme olan iki tip gübrenin verildiği, parsel başına libre (454 gr) olarak ölçülmüş yer fıstığı ürünü için, gübrelerden etkilenen parsellere uygulanmıştır. Bir parselle uygulanmış her gübrenin miktarının düzeyi (lb/parsel) bir merkezi bileşik döndürülebilir tasarımın koordinat konumlandırmaları ile belirlenmiştir. Her deneysel kombinasyonun iki tekrarından bulunan yer fıstığı olarak elde edilmiş hasat miktarı verilerinin tablosu aşağıdaki gibidir.

Gübre 1	Gübre 2	Ürün (lb/parsel)	Doğal X_1, X_2		kodlanmış X_{1i}, X_{2i}		Y
50	15	7,52 – 8,12					
120	15	12,37 – 11,84					
50	25	13,55 – 12,35					
120	25	16,48 – 15,32					

$\bar{X}_1 = \frac{50+120}{2} = 85,$	$\bar{X}_2 = \frac{15+25}{2} = 20$
$X_{11} = \frac{2(50-85)}{120-50} = -1,$	$X_{11} = \frac{2(50-85)}{120-50} = -1$
$X_{12} = \frac{2(120-85)}{120-50} = 1,$	$X_{12} = \frac{2(25-20)}{25-15} = 1$

Doğal X_1, X_2	kodlanmış X_{1i}, X_{2i}	Y
120 15	1 -1	12,37-11,84
50 25	-1 1	13,55-12,35
120 25	1 1	16,48-15,32



Tepki yüzeyine $Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \varepsilon$ gibi birinci dereceden model ile yaklaşalım.

$$Y = \begin{bmatrix} 7,52 \\ 8,12 \\ 12,37 \\ 11,84 \\ 13,55 \\ 12,35 \\ 16,48 \\ 15,32 \end{bmatrix}_{8 \times 1}, \quad X = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}_{8 \times 3}, \quad \beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix}_{3 \times 1}, \quad \varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \\ \varepsilon_7 \\ \varepsilon_8 \end{bmatrix}_{8 \times 1}$$

$$X'X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \end{bmatrix}_{3 \times 8} \cdot \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}_{8 \times 3} = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{bmatrix}_{3 \times 3}$$

$$(X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{8} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{8} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{8} \end{bmatrix}_{3 \times 3} \quad b = \hat{\beta} \text{ ol. üz. } \beta \text{'nin en küçük kareler kestiricisi,} \\ b = (X'X)^{-1} X'Y$$

$$b = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}_{3 \times 1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{8} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{8} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{8} \end{bmatrix}_{3 \times 3} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \end{bmatrix}_{3 \times 8} \cdot \begin{bmatrix} 7,52 \\ 8,12 \\ 12,37 \\ 12,84 \\ 13,55 \\ 16,48 \\ 15,32 \end{bmatrix}_{8 \times 1}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{1}{8} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{8} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{8} \end{bmatrix}_{3 \times 3} \cdot \begin{bmatrix} 97,55 \\ -2,29 \\ 56,91 \end{bmatrix}_{3 \times 1} = \begin{bmatrix} 12,19375 \\ -0,28625 \\ 7,11375 \end{bmatrix}_{3 \times 1} \Rightarrow$$

$\hat{Y} = 12,19375 - 0,28625X_1 + 7,11375X_2$ birinci ve ikinci gübrenin kodlanmış değerlerine karşılık gelen birinci dereceden modeldir.

$$\text{Kareler toplamı} = Y'Y - \frac{(1'Y)^2}{8} = 12558,395 - \frac{9516,0025}{8} = 11368,895 \quad 8-1=7 \text{ s.d.ile}$$

$$\text{Regresyon kareler toplamı} = b'X'Y - \frac{(1'Y)^2}{8} = 1594,9993 - \frac{9516,0025}{8} = 405,449 \quad 3-1=2 \text{ s.d.ile}$$

$$\text{Kalan kareler toplamı} = Y'Y - b'X'Y = 12558,395 - 1594,9993 = 10963,396 \quad 8-3=5 \text{ s.d.ile}$$

$$\begin{aligned} \text{Saf hata kareler toplamı} &= \frac{1}{2}[(7,52 - 8,12)^2 + (12,37 - 11,84)^2 + (13,55 - 12,35)^2 + \\ & (16,48 - 15,32)^2] = \frac{1}{2}[0,36 + 0,2809 + 1,44 + 1,3456] = 1,71325 \quad 4 \text{ s.d.ile} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Uyum eksikliği kareler toplamı} &= \text{Kalan kareler toplamı} - \text{Saf hata kareler toplamı} \\ &= 10963,396 - 1,71325 = 10961,683 \quad 5-4=1 \text{ s.d.ile} \end{aligned}$$

Elde edilen yer fıstığı ürünü verilerine uyarlanmış birinci dereceden model için ANOVA tablosu:

<u>Kaynak</u>	<u>Serbestlik der.</u>	<u>Kareler toplamı</u>	<u>ortalama kare</u>	<u>F</u>
Regresyon	2	405,449	202,7245	0,092
Hata	5	10963,396	2192,6792	
Uyum Eksikliği	1	10963,683	10963,683	
Saf hata	4	1,71325	0,4283125	

$$F = \frac{\text{Regresyon ortalama kare}}{\text{Kalan ortalama kare}} = \frac{202,7245}{2192,6792} = 0,092 < F_{0,01,2,5} = 13,27$$

olduğundan birinci dereceden modelde uyum eksikliği yoktur. Bu nedenle tercih edilen gözlem değerleri için yukarıdaki birinci dereceden model yeterlidir.

Ancak araştırmada elde edilen değerler aşağıdaki gibi ise;

Doğal		Kodlanmış		Ürün (lb/pars.)	
Gübre 1	Gübre 2	x_1	x_2	Tek.1	Tek.2
50	15	-1	-1	7,52	8,12
120	15	1	-1	12,37	11,84
50	25	-1	1	13,55	12,35
120	25	1	1	16,48	15,32
35,5	20	$-\sqrt{2}$	0	8,63	9,44
134,5	20	$\sqrt{2}$	0	14,22	12,59
85	12,9	0	$-\sqrt{2}$	7,90	7,33
85	271	0	$\sqrt{2}$	16,49	17,40
85	20	0	0	15,73	17,00

Kodlanmış değerler,

$$X_i = \frac{2(X_i - \bar{X}_i)}{R_i} \text{ ve}$$

$$R_1 = 120 - 50, \quad \bar{X}_1 = \frac{120 + 50}{2} = 85$$

$$R_2 = 25 - 15, \quad \bar{X}_2 = \frac{15 + 25}{2} = 20$$

şeklinde yazılır.

$$Y = \begin{bmatrix} 7,52 \\ 8,12 \\ 12,37 \\ 11,84 \\ 13,55 \\ 12,35 \\ 16,48 \\ 15,32 \\ 8,63 \\ 9,44 \\ 14,22 \\ 12,59 \\ 7,90 \\ 7,33 \\ 16,49 \\ 17,40 \\ 15,73 \\ 17,00 \end{bmatrix}_{18 \times 1}, \quad X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_2 & x_1 x_2 & x_1^2 & x_2^2 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{18 \times 6}$$

$$X'X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} & 0 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 2 & 2 & 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 18 & 0 & 0 & 0 & 16 & 16 \\ 0 & 16 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 16 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 \\ 16 & 0 & 0 & 0 & 24 & 8 \\ 16 & 0 & 0 & 0 & 8 & 24 \end{bmatrix}_{6 \times 6}$$

matrisine elemanter satır işlemi uygulanarak tersi aşağıdaki gibi bulunmuştur.

$$(X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} 0,5 & 0 & 0 & 0 & -0,25 & -0,25 \\ 0 & 0,0625 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,0625 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,125 & 0 & 0 \\ -0,25 & 0 & 0 & 0 & 0,125 & 0,109 \\ -0,25 & 0 & 0 & 0 & 0,109 & 0,125 \end{bmatrix}_{6 \times 6}$$

$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_{12} \\ b_{11} \\ b_{22} \end{bmatrix}_{6 \times 1} = (X'X)^{-1} X'Y = \begin{bmatrix} 0,5 & 0 & 0 & 0 & -0,25 & -0,25 \\ 0 & 0,0625 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,0625 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,125 & 0 & 0 \\ -0,25 & 0 & 0 & 0 & 0,125 & 0,109 \\ -0,25 & 0 & 0 & 0 & 0,109 & 0,125 \end{bmatrix}_{6 \times 6} \cdot \begin{bmatrix} 224,41 \\ 22,10 \\ 44,72 \\ -2,67 \\ 187,31 \\ 195,79 \end{bmatrix}_{6 \times 1} = \begin{bmatrix} 16,43 \\ 1,3981 \\ 2,795 \\ -0,334 \\ -2,494 \\ -1,964 \end{bmatrix}_{6 \times 1}$$

$$\hat{Y} = 16,43 + 1,381X_1 + 2,795X_2 - 0,34X_1X_2 - 2,494X_1^2 - 1,96X_2^2$$

(0,845) (0,297) (0,297) (0,422) (0,495) (0,495)

Parantez içindeki sayılar kestirilmiş katsayıların kestirilmiş standart hataları olup, aşağıdaki gibi hesaplanmıştır.

$$\bar{Y} = \frac{224,41}{18} = 12,467$$

$$KT = (SST) = \sum_{u=1}^{18} (Y_u - \bar{Y})^2 = 24,472 + 18,896 + 0,009 + 0,393 + 1,172 + 0,013 + 16,104 + 8,139 + 14,722 + 9,162 + 3,073 + 0,015 + 20,857 + 26,388 + 16,184 + 24,334 + 10,647 + 20,638 = 2215,218$$

18-1=17 s.d. ile

$$KT_{SH} = (SS_{PE}) = \sum_{\ell=1}^n \sum_{u=1}^{Y_{\ell}} (Y_{u\ell} - \bar{Y}_{\ell})^2 = (7,52-7,52)^2 + (8,12-7,82)^2 + (12,37-12,105)^2 + (11,84-12,105)^2 + (13,55-12,95)^2 + (12,35-12,95)^2 + (16,48-15,9)^2 + (15,2-15,9)^2 + (8,63-9,035)^2 + (9,44-9,035)^2 + (14,22-13,355)^2 + (12,57-13,395)^2 + (7,90-7,615)^2 + (7,33-7,615)^2 + (16,49-16,945)^2 + (17,40-16,945)^2 + (15,73-16,365)^2 + (17,0-16,365)^2 = 0,09+0,09+0,07+0,07+0,36+0,36+0,33+0,33+0,16+0,16+0,20+0,20+0,40+0,40+0,08+0,08+0,68+0,68 = 4,74$$

9 serbestlik dereceli

$$RKT = (SSR) = \sum_{u=1}^{18} (\hat{Y}(x_u) - 12,467)^2 = 2[(7,462-12,467)^2 + (10,892-12,467)^2 + (13,72-12,467)^2 + (15,81-12,467)^2 + (9,462-12,467)^2 + (13,422-12,467)^2 + (8,478-12,467)^2 + (16,526-12,467)^2 + (16,43-12,467)^2] = 2[25,05+2,480+1,570+11,175+9,030+0,912+15,912+16,475+15,705] = 196,618 ;$$

5-1=4 s.d. ile

$$HKT = (SSE) = \sum_{u=1}^{12} (Y_u - \hat{Y}(x_u))^2 = SST - SSR = 215,218 - 196,618 = 18,6 \quad 18-5=13 \text{ s.d. ile}$$

$$F = \frac{SSR/4}{SSE/13} = \frac{49,1545}{16,5552} = 2,969 \left. \vphantom{\frac{SSR/4}{SSE/13}} \right\} F_{\text{Hesap}} < F_{\text{Tablo}} \Rightarrow \text{Kestirilmiş modelde uyum eksikliği yoktur.}$$

$F_{0,01,4,13} = 7,70$

$$OKH = (MSE) = \frac{1}{N-P} SSE = \frac{18,6}{18-5} = \frac{18,6}{13} = 1,430 = S^2$$

$$b_0 = 16,43 \Rightarrow \sqrt{c_{00}S^2} = \sqrt{0,5 \cdot 1,430} = 0,845$$

$$b_1 = 1,381 \Rightarrow \sqrt{c_{11}S^2} = \sqrt{0,062 \cdot 1,430} = 0,297$$

$$b_3 = 0,334 \Rightarrow \sqrt{c_{22}S^2} = \sqrt{0,125 \cdot 1,430} = 0,422$$

$$\sqrt{c_{33}S^2} = \sqrt{0,172 \cdot 1,430} = 0,495$$

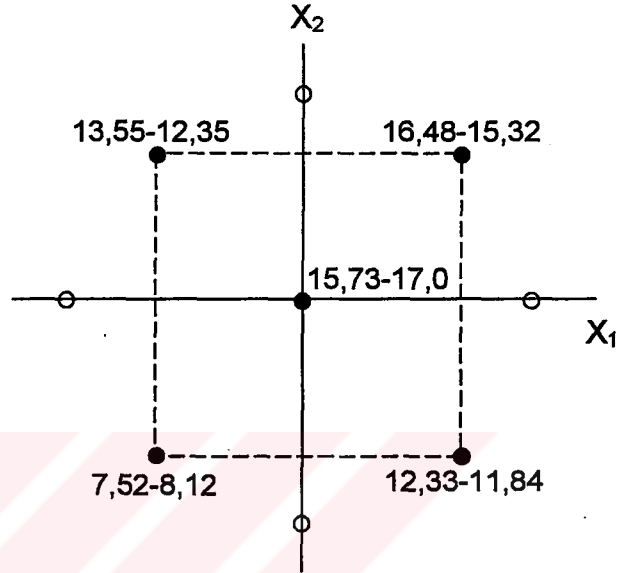
$$\sqrt{c_{44}S^2} = \sqrt{0,172 \cdot 1,430} = 0,495$$

$$X = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & \frac{b_{12}}{2} \\ \frac{b_{12}}{2} & b_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2,494 & -0,167 \\ -0,167 & -1,964 \end{bmatrix}$$

$$B^{-1} = \begin{bmatrix} -0,403 & 0,034 \\ 0,034 & -0,512 \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} 1,381 \\ 2,795 \end{bmatrix}$$



Elde edilen ürün için merkezi bileşik dördürülebilir tasarım

$$X_0 = \frac{1}{2} B^{-1} b = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -0,403 & 0,034 \\ 0,034 & -0,512 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1,381 \\ 2,795 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0,23 \\ -0,69 \end{bmatrix}$$

Durağan nokta dördüncü bölgededir. Bu noktadaki tepki,

$$\hat{Y}_0 = b_0 + \frac{X_0' b}{2} = 16,43 - 1,2309 = 15,199 \text{ olup, veri tablosundan da görüleceği}$$

gibi her iki gübrenin yaklaşık olarak en üst düzeyde kullanılmasıyla bu ürün elde edilir.

$$|B - \lambda I| = \begin{vmatrix} -2,494 - \lambda & -0,167 \\ -0,167 & -1,964 - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + 4,458\lambda + 4,898 - 0,0278 = 0$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{-4,458 \mp \sqrt{193,873764 - 19,4816}}{2} = \frac{-4,458 \mp 0,626}{2}$$

$$\lambda_1 = -2,542, \quad \lambda_2 = -1,916$$

λ_1 ve $\lambda_2 < 0$ olduğundan durağan nokta bir maksimum tepki noktasıdır. Bu da yukarıda yorumladığımız durağan nokta ile tepki ilişkisinin doğruluğunun bir başka ölçütüdür.

$$(Z_1, Z_2) = (X_1 + 0.23, X_2 + 0.69)$$

$$\hat{Y}(Z) = \hat{Y}_0 + Z' B Z, \quad W = (W_1, W_2)' \quad \text{olmak üzere } W = M' Z$$

$$M' B M = \begin{bmatrix} -2,542 & 0 \\ 0 & -1,916 \end{bmatrix}, \quad Z' B Z = W' M' B M W = \lambda_1 W_1^2 + \lambda_2 W_2^2$$

$$Z' B Z = -2,542 W_1^2 - 1,916 W_2^2 \Rightarrow \hat{Y}(Z) = 15,199 - 2,542 W_1^2 - 1,916 W_2^2$$

$$\lambda_1 = -2,542 \Rightarrow \begin{bmatrix} -2,494 + 2,542 & -0,167 \\ -0,167 & -1,964 + 2,542 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_{11} \\ m_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\left. \begin{aligned} 0,048 m_{11} - 0,167 m_{12} &= 0 \\ -0,167 m_{11} + 2,578 m_{12} &= 0 \end{aligned} \right\}$$

$m_{11}^2 + m_{12}^2 = 1$ normalize etme koşulu ile ilk

denklemden $m_{11}^* = 1 \Rightarrow m_{12}^* = 0,87425 \Rightarrow$

$$m_{11} = \frac{1}{\sqrt{1^2 + (0,287425)^2}} = \frac{1}{1,04} = 0,961$$

$$m_{12} = \frac{1}{\sqrt{1 + (0,28725)^2}} = \frac{0,28725}{1,04} = 0,276 \Rightarrow m_1 = \begin{bmatrix} 0,961 \\ 0,276 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_2 = -1,916 \Rightarrow \begin{bmatrix} -2,494 + 1,96 & -0,167 \\ -0,167 & -1,964 + 1,960 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_{21} \\ m_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\left. \begin{aligned} -0,534 m_{21} - 0,167 m_{22} &= 0 \\ -0,167 m_{21} - 0,004 m_{22} &= 0 \end{aligned} \right\}$$

normalize edilmiş çözüm için

$m_{22}^* = 1 \Rightarrow m_{21}^* = -0,3127 \Rightarrow$

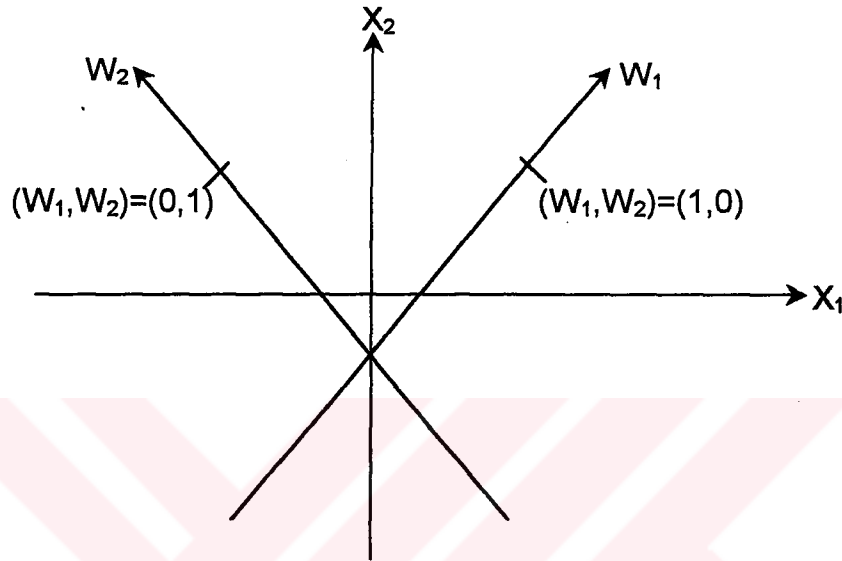
$$m_{21} = \frac{-1,3127}{\sqrt{1^2 + (1,3127)^2}} = \frac{-1,3127}{1,650} = -0,795$$

$$m_{22} = \frac{1}{\sqrt{1 + (1,3127)^2}} = 0,606 \Rightarrow m_2 = \begin{bmatrix} -0,795 \\ 0,606 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} W_1 \\ W_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,961 & 0,276 \\ -0,795 & 0,606 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} X_1 + 0,23 \\ X_2 + 0,69 \end{bmatrix}$$

$$W_1 = 0,9961X_1 + 0,276X_2 + 0,221 + 0,190 = 0,961X_1 + 0,276X_2 + 0,411$$

$$W_2 = -0,795X_1 + 0,606X_2 + 0,418 - 0,182 = -0,795X_1 + 0,606X_2 + 0,230$$



4.2 SONUÇ VE ÖNERİLER

Uygulamada, merkez nokta ve merkezden eşit uzaklıktaki noktalarda elde edilen ürün ihmal edildiğinde, veri değerleri birinci dereceden bir polinomal model ile tasarlanabilir. Ancak verilerin tümü tekrarlı halde kullanıldığında, ikinci dereceden bir model ile bir merkezi bileşik döndürülebilir tasarım yapılabilir ve durağan noktada maksimum ürün elde edilir. Tepki yüzeyinin geometrik yapısı ise, denklemler bulunan kanonik form ile belli olan bir koniktir.

Şimdiye kadar, her bir faktörün seviyesinin diğer faktörlerin seviyelerinden bağımsız olduğu durumlarda tepki yüzeyi tasarımları incelenmiştir. Faktörler bir karışımın bileşenleri olması durumunda, faktörler bağımsız olmadığı için karışım deneylerindeki tepki değişkeni üzerindeki bileşenlerin etkilerini incelemek amacıyla simplex tasarımlar kullanılır. Eğer x_1, x_2, \dots, x_p bir karışımın p tane bileşeninin oranlarını gösterirse,

$$i=1,2,\dots,p \text{ için } 0 \leq x_i \leq 1 \text{ ve } x_1+x_2+\dots+x_p = 1$$

dir. $\sum x_i = 1$ kısıtlaması nedeniyle karışım modelleri, tepki yüzeyi çalışmasında uyarlanan alışılmış polinomlardan farklıdır.

Tepki yüzeyi tasarımları kullanılırken uyum sağlamayan değişkenleri ortadan kaldırmak için bloklara ayırma kullanılmalıdır. Eğer tepki yüzeyi modelinin parametre kestirimlerini etkilemeyecek şekilde bloklara ayrılmışsa, yüzey dik olarak blok edilmiş olur. Bloklara ayırmada, merkez noktaları bloklar arasında eşit olarak dağıtılmalıdır.

Bir ikinci dereceden tasarımın dik olarak blok edilmesi için aşağıdaki koşulları sağlamalıdır.

- a) Her blok birinci dereceden bir tasarım olmalıdır
- b) Her blok tarafından katılmış her bir değişkenin kareler toplamı, blokta ortaya çıkan tüm gözlemlerin sayısına eşit olmalıdır.

Merkezi bileşik tasarımlar bloklara ayırma için elverişlidirler. Tepki yüzeyi tasarımları, bloklara ayrıldığında, saf hatanın bir kestirimini bulmak için merkez noktalar kullanıldığından ve blokların etkisini belirlediği için varyans analizi hakkında önemli bilgi verir.

KAYNAKLAR

- 1- BOX, G.E.P and K.G. Wilson (1951) On the Experimental Attainment of Optimum Conditions Journal of the Royal Statistical Society, B, 13, 1-45
- 2- BOX, G.E.P (1952) Multi-Factor Designs of First Order, Biometrika, 39, 49-57
- 3- BOX, G.E.P and J.S. Hunter (1954) A Conference Region for the Solution of a Set of Simultaneous Equations with an Application to Experimental Design, Biometrika, 41, 190-199
- 4- BOX, G.E.P and J.S. Hunter (1961-a) The 2^{k-p} Fractional Factorial Designs, Part I, Technometrics, 3, 311-352
- 5- BOX, G.E.P and J.S. Hunter (1961-b) The 2^{k-p} Fractional Factorial Designs, Part II, Technometrics, 3, 449-458
- 6- BOX, G.E.P and N.R. Draper (1976) Robust Designs, Biometrika 62, 347-352
- 7- BOX, G.E.P and W.G. Hunter (1978) Statistics for Experimenters Wiley, New York
- 8- BOX, G.E.P and N.R. Draper (1987) Empirical Model Building and Response Surfaces, New York: John Wiley.
- 9- Daniel, C. (1976) Applications of Statistics to Industrial Experimentation Wiley New York
- 10-Davies, O.L. and W.A. Hay (1950) The Construction and Uses of Fractional Factorial Designs in Industrial Research, Biometrics, 13, 231-241
- 11-Dennis K.J.L.N. and Wanshu Tu (1995) Dual Response Surface Optimization. Journal of Quality Technology, 27, 34-39
- 12-Douglas C. Montgomery (1976) Design and Analysis of Experiments, New York: John Wiley
- 13-Draper, N.R. and D.K.J. (1990) Small Response Surface Designs. Technometrics, 32, 187-194
- 14-Draper, N.R. and A.M. Herzberg (1971) On Lack of Fit. Technometrics, 13, 231-241
- 15-Finney, D.J. (1974) The Fractional Replication of Factorial Arrangements. Annals of Eugenics, 12, 291-301
- 16-G.Geoffrey Vining and Diane Schaub (1996) Experimental Designs for Estimating Both Mean and Variance Functions, Journal of Quality Technology, 28, 135-147

- 17-Graybill, F.A. (1961) An Introduction to Linear Statistical Models Vol.1, New York: McGraw-Hill
- 18-Hartley, H.O. (1959) Smallest Composite Designs for Quadratic Response Surfaces, *Biometrika*, 15, 611-624
- 19-Khuri, A.I. and J.A. Cornell (1987) *Response Surfaces: Designs and Analyses* Dekker, New York
- 20-Plackett, R.L. and J.P. Burman (1946) The Design of Optimum Multifactorial Experiments *Biometrics*, 33, 305-325
- 21-J.A. Cornell and D.C. Montgomery (1996) Interaction Models as Alternatives to Low-Order Polynomials. *Journal of Quality Technology*, 28, 163-176
- 22-By James M. Lucas (1977) Design efficiencies for varying numbers of Center points, *Biometrika*, 64, 145-147
- 23-K.G. Roquemore (1976) Hybrid Designs for Quadratic Response Surfaces, *Technometrics*, 18, 419-422
- 24-Vining, G.G. and Myers, R.H. (1990) Combining Taguchi and Response Surface Philosophies: A Dual Response Approach, *J. of Quality Technology*, 22, 38-45

ÖZGEÇMİŞ

1963 yılında D.Bakır'ın Lice ilçesinde doğdum. İlk öğrenimimi Lice'de, orta öğrenimimi D.Bakır'da tamamladıktan sonra 1985-1986 öğretim yılında Dicle Ünv. Fen – Edebiyat Fakültesi Matematik Bölümü'nden mezun oldum. 1995 yılında Dicle Ünv. Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans öğrenimimi tamamladım. Çeşitli liselerde Matematik Öğretmeni olarak çalıştım. 1993'ten itibaren Dicle Ünv. Eğitim Fakültesi Matematik Anabilim Dalı'nda Öğretim Görevlisi olarak çalışmaktayım. Evli ve iki çocuk babasıyım.

