ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΕΙΡΑΙΩΣ

Σχολή Χρηματοοικονομικής και Στατιστικής

Τμήμα Στατιστικής και Ασφαλιστικής Επιστήμης

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΣΤΗΝ **ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ**

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΙ ΑΠΟΚΡΙΤΙΚΩΝ ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ

Μίχου Ελένη

Διπλωματική Εργασία

που υποβλήθηκε στο Τμήμα Στατιστικής και Ασφαλιστικής Επιστήμης του Πανεπιστημίου Πειραιώς ως μέρος των απαιτήσεων για την απόκτηση του Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης στην *Εφαρμοσμένη Στατιστική*

Πειραιάς
Σεπτέμβριος 2017

Π Α Ν Ε Π Ι Σ Τ Η Μ Ι Ο   Π Ε Ι Ρ Α Ι Ω Σ

Σχολή Χρηματοοικονομικής και Στατιστικής

Τμήμα Στατιστικής και Ασφαλιστικής Επιστήμης

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΣΤΗΝ **ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ**

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΙ ΑΠΟΚΡΙΤΙΚΩΝ ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ

Μίχου Ελένη

Διπλωματική Εργασία

που υποβλήθηκε στο Τμήμα Στατιστικής και Ασφαλιστικής Επιστήμης του Πανεπιστημίου Πειραιώς ως μέρος των απαιτήσεων για την απόκτηση του Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης στην *Εφαρμοσμένη Στατιστική*

Πειραιάς
Σεπτέμβριος 2017

Η παρούσα Διπλωματική Εργασία εγκρίθηκε ομόφωνα από την Τριμελή Εξεταστική Επιτροπή που ορίσθηκε από τη ΓΣΕΣ του Τμήματος Στατιστικής και Ασφαλιστικής Επιστήμης του Πανεπιστημίου Πειραιώς στην υπ’ αριθμ. …….. συνεδρίασή του σύμφωνα με τον Εσωτερικό Κανονισμό Λειτουργίας του Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών στην Εφαρμοσμένη Στατιστική

Τα μέλη της Επιτροπής ήταν:

- Ευαγγελάρας Χαράλαμπος (Επιβλέπων)
- Κούτρας Μάρκος
- Πολίτης Κωνσταντίνος

Η έγκριση της Διπλωματική Εργασίας από το Τμήμα Στατιστικής και Ασφαλιστικής Επιστήμης του Πανεπιστημίου Πειραιώς δεν υποδηλώνει αποδοχή των γνωμών του συγγραφέα.

UNIVERSITY OF PIRAEUS

School of Finance and Statistics

Department of Statistics and Insurance Science

POSTGRADUATE PROGRAM IN
APPLIED STATISTICS

RESPONSE SURFACE DESIGNS

By

Eleni Michou

MSc Dissertation

Submitted to the Department of Statistics and Insurance Science of the University of Piraeus in partial fulfilment of the requirements for the degree of Master of Science in Applied Statistics

Piraeus, Greece
September 2017

Στους γονείς μου,

Κυριάκο και Ελισάβετ

Ευχαριστίες

Η εργασία αυτή εκπονήθηκε στα πλαίσια του μεταπτυχιακού προγράμματος σπουδών : «Εφαρμοσμένη Στατιστική».

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά, τον επιβλέποντα καθηγητή μου κ. Χαράλαμπο Ευαγγελάρα, για την συνεργασία μας, την καθοδήγηση που μου προσέφερε και για τις γνώσεις που μου παρείχε τόσο κατά την εκπόνηση της εργασίας, όσο και κατά τη διάρκεια των μαθημάτων και την κατανόηση του. Η συμβολή του ήταν καταλυτική στην επιλογή του πεδίου αυτού για την συνέχεια της καριέρας μου.

Ευχαριστώ επίσης τα μέλη της τριμελούς επιτροπής, τον Καθηγητή κ. Μάρκο Κούτρα και τον Αναπληρωτή Καθηγητή κ. Κωνσταντίνο Πολίτη για το χρόνο που αφιέρωσαν στη διόρθωση της εργασίας.

Ιδιαίτερα, θα ήθελα να ευχαριστήσω, τον σύντροφο μου Γιώργο, για την έμπρακτη στήριξη του και την ατελείωτη υπομονή του.

Τέλος, θέλω να ευχαριστήσω τους γονείς μου Κυριάκο και Ελισάβετ, που με αγάπη μου πρόσφεραν την απαραίτητη στήριξη καθολη την διαρκεια των σπουδών μου.

Περίληψη

Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η μελέτη και η παρουσίαση των επιφανειών απόκρισης με σκοπό ο αναγνώστης να καταλάβει τη χρησιμότητα αυτών των οικονομικών σχεδιασμών στη βελτιστοποίηση των πειραματικών σχεδιασμών. Στη συνέχεια, παρουσιάζονται κριτήρια βελτιστοποίησης των σχεδιασμών που μελετώνται, έτσι ώστε ο εκάστοτε πειραματιστής να μπορεί να συγκρίνει και να επιλέγει τον κατάλληλο (βέλτιστο) σχεδιασμό σύμφωνα με τις ανάγκες του πειράματος που διεξάγει.

Πιο συγκεκριμένα, στη διπλωματική αυτή πραγματοποιείται μελέτη, αξιολόγηση και επιλογή σχεδιασμών δεύτερης τάξης σε πειράματα. Αποτελείται από τέσσερα κεφάλαια. Στο πρώτο κεφάλαιο, γίνεται αναφορά σε βασικές έννοιες των πειραματικών σχεδιασμών και πιο συγκεκριμένα των επιφανειών απόκρισης. Στο δεύτερο κεφάλαιο, αναλύονται οι πλήρεις και οι κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί πρώτης τάξης. Στη συνέχεια, στο τρίτο κεφάλαιο, μελετώνται οι παραγοντικοί σχεδιασμοί δεύτερης τάξης, οι κεντρικοί σύνθετοι σχεδιασμοί, οι Box-Behnken σχεδιασμοί, καθώς και μια ειδική κατηγορία σχεδιασμών, οι ορθογώνιοι σχεδιασμοί. Τέλος, στο τέταρτο κεφάλαιο, αφού παρουσιαστούν ορισμένα κριτήρια βελτιστοποίησης των σχεδιασμών, διεξάγονται συγκρίσεις μεταξύ σχεδιασμών δεύτερης τάξης με 3, 4 και 5 παράγοντες, αντίστοιχα.

Abstract

The purpose of this thesis is to study and present response surfaces so that the reader will be fully aware of the necessity of those economic designs in optimization of experimental designs. Further the optimization criteria of those experimental designs are presented so that the experimenter will be able to compare and chose the appropriate (optimal) design, according to the experiment.

More specifically, this thesis comprises the study, evaluation and selection of 2nd order design in experiments. It consists of four chapters. First chapter contains basic information about experimental designs and more specifically the response surfaces. In the second chapter, full and fractional factorial designs of the 1st order are presented. Further, in third chapter we examine and study factorial designs of the 2nd order, central composite designs, Box-Behnken designs and a special category of designs, the orthogonal designs. Finally in the fourth chapter we present some design optimization criteria and compare the 2nd order designs with 3,4 and 5 factors respectively.

Πίνακας περιεχομένων

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η Στατιστική (Statistics) είναι ένας κλάδος των εφαρμοσμένων Μαθηματικών που αποσκοπεί στη μελέτη και στην κατανόηση φαινομένων και ιδιοτήτων πολυπληθών ομάδων. Κύριο αντικείμενό της είναι η συλλογή, η ταξινόμηση, η επεξεργασία, η παρουσίαση, η ανάλυση και η ερμηνεία διαφόρων δεδομένων με απώτερο στόχο την εξαγωγή ασφαλών συμπερασμάτων και κατά συνέπεια τη λήψη ορθών αποφάσεων. Η εφαρμογή της Στατιστικής εκτείνεται σε διάφορους κλάδους της ανθρώπινης δραστηριότητας, όπως πολιτική, οικονομία, υγεία, αλλά έχει και ευρύτατο πεδίο στις θετικές επιστήμες, στις κοινωνικές επιστήμες, στον επιχειρηματικό κλάδο.

Η στατιστική ως έννοια εμφανίζεται κατά τους μυθικούς χρόνους με τη δημιουργία των πρώτων οργανωμένων κοινωνιών. Μια πρώτη γραφή στατιστικής μορφής με αριθμητικά δεδομένα είναι ο νέων κατάλογος (κατάλογος των πλοίων) των Αχαιών στον Τρωικό πόλεμο από τον Όμηρο. Από τον κατάλογο αυτό οι ιστορικοί απέσπασαν σημαντικές εκτιμήσεις της οικονομικής ευρωστίας και του πληθυσμού των πόλεων-κρατών που συμμετείχαν καθώς και σημαντικά στοιχεία για την ναυπηγική, ναυτιλία και ναυτική τέχνη της εποχής εκείνης. Πρώτη όμως ιστορική συλλογή καθαρά στατιστικών στοιχείων θεωρείται η απογραφή πληθυσμού από τον Αυτοκράτορα της Κίνας Yao το 2238 π.Χ.. Τον όρο στατιστική αναφέρει ο Σωκράτης (Ξενοφώντας "Απομνημονεύματα") καθώς και ο Αριστοτέλης στο έργο του "Πολιτεία". Τη σύγχρονη γενική έννοια της συλλογής και ταξινόμησης δεδομένων φέρεται να έλαβε στις αρχές του 19^{ου} αιώνα.

1.1 Πειραματικοί Σχεδιασμοί

Ο πειραματισμός είναι μια από τις πιο κοινές δραστηριότητες των ανθρώπων, που καλύπτει ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών: από την προετοιμασία ενός φαγητού έως τις επιστημονικές καινοτομίες. Ουσιαστικά βοηθάει στη μελέτη του αποτελέσματος όταν αλλάξουν οι τιμές των ανεξάρτητων μεταβλητών. Επομένως, παρέχεται η γνώση για ορθή επιλογή των βέλτιστων αρχικών παραμέτρων. Ο πειραματικός σχεδιασμός, λοιπόν, είναι το πεδίο της Στατιστικής που περιέχει το σύνολο των γνώσεων και των τεχνικών που οδηγούν σε ορθολογικό πειραματισμό και σε αποδοτικότερη ανάλυση δεδομένων συνδέοντας τα συμπεράσματα των αναλύσεων με τους πρωταρχικούς στόχους μιας έρευνας. Επιπλέον, συμβάλλει στην κατανόηση και στη βελτίωση ενός συστήματος, είτε πρόκειται για προϊόν είτε για διαδικασία. Οι πειραματικοί σχεδιασμοί βρίσκουν εφαρμογή σε ποικίλους τομείς, ωστόσο η πιο εκτεταμένη χρήση τους παρατηρείται στη βιομηχανία, στην ιατρική και στη μηχανική.

Η ιδέα του πειραματικού σχεδιασμού ξεκίνησε στις αρχές του προηγούμενου αιώνα και σχετιζόταν με την επίδραση των καιρικών φαινομένων στη γεωργία διατηρώντας τις υπόλοιπες συνθήκες σταθερές (για παράδειγμα, ίδιο λίπασμα). Πιο συγκεκριμένα, ο R. A. Fisher εξέτασε χρησιμοποιώντας διάφορες στατιστικές μεθόδους, (όπως μοντέλα ελαχίστων τετραγώνων (ανάλυση παλινδρόμησης), κατανομή πολλαπλού συντελεστή συσχέτισης, έλεγχος υπολοίπων, ανάλυση διακύμανσης), την επιρροή των βροχοπτώσεων, της θερμοκρασίας και άλλων καιρικών φαινομένων χωρίς όμως να μπορέσει να εξάγει σημαντικές απαντήσεις. Με τη βοήθεια όμως του W. S. Gosset ανακάλυψε τον πειραματικό σχεδιασμό για να υπερνικήσει τις δυσκολίες που προκύπτουν όταν τα δεδομένα είναι τυχαία.

Προκειμένου όμως να διασφαλιστεί η ορθότητα του σχεδιασμού και κατ' επέκταση ενός πειράματος, είναι απαραίτητο να ακολουθηθούν επτά ιεραρχημένα βήματα. Αυτό κρίνεται αναγκαίο γιατί, για παράδειγμα, αν ζητήσουμε από 10 διαφορετικές ομάδες επιστημόνων εξειδικευμένες σε ένα συγκεκριμένο τομέα να υποβάλλουν ένα σχέδιο για την επίλυση κάποιου προβλήματος, είναι βέβαιο ότι δε θα υπάρξει ζευγάρι ομάδων που να παρουσιάσει ακριβώς το ίδιο σχέδιο. Αρχικά, λοιπόν, θα πρέπει να διευκρινιστεί ξεκάθαρα ο σκοπός του πειράματος και να οριστεί η απόκριση του πειράματος (εξαρτημένη μεταβλητή). Με τον όρο απόκριση (response) εννοούμε το αποτέλεσμα του πειράματος για τις διάφορες τιμές των ανεξάρτητων μεταβλητών. Σε ένα πείραμα μπορεί να υπάρχουν παραπάνω από μία αποκρίσεις. Τις χωρίζουμε σε συνεχείς και διακριτές ανάλογα με το πεδίο τιμών τους. Μπορούν ακόμα να κατηγοριοποιηθούν σε nominal-the-best, larger-the-better, smaller-the better (C. F. J. Wu and M. S. Hamada, 2009) ανάλογα με το δηλωθέν σκοπό τους. Το επόμενο βήμα αφορά την επιλογή των παραγόντων και των επιπέδων τους. Ο παράγοντας (factor) είναι μια υπό εξέταση ανεξάρτητη μεταβλητή του πειράματος, η οποία μπορεί να είναι είτε ποσοτική είτε ποιοτική. Για να μελετηθεί η επίδραση ενός παράγοντα σε μια απόκριση, χρησιμοποιούνται δύο ή παραπάνω τιμές (διακριτές) του παράγοντα, οι οποίες ονομάζονται επίπεδα (levels) του παράγοντα. Κάθε συνδυασμός των επιπέδων των παραγόντων ονομάζεται θεραπεία (treatment).

Στη συνέχεια, θα πρέπει να επιλεγεί ο σωστός πειραματικός σχεδιασμός. Το στάδιο αυτό είναι πολύ κρίσιμο και καθοριστικό γιατί μπορεί να οδηγήσει σε εξαγωγή λανθασμένων συμπερασμάτων. Για παράδειγμα, ένας κακός σχεδιασμός μπορεί να παραλείψει σημαντικές πληροφορίες, ενώ αντίθετα σ' ένα πολύ καλά σχεδιασμένο πείραμα τα αποτελέσματα μπορεί να είναι τόσο προφανή που να μη χρήζουν περαιτέρω ανάλυσης. Έπεται η παρουσίαση του πειράματος. Συχνά συνιστάται η χρήση πινάκων για την καλύτερη περιγραφή των παραγόντων και των επιπέδων. Με τον τρόπο αυτό διευκολύνεται και η ανάλυση δεδομένων επιλέγοντας κάθε φορά την κατάλληλη μέθοδο ανάλυσης για τον εκάστοτε σχεδιασμό. Ο πειραματικός σχεδιασμός ολοκληρώνεται με την εξαγωγή συμπερασμάτων και προτάσεων. Τα συμπεράσματα θα πρέπει να συνδέονται με τους αρχικούς στόχους του πειράματος, ενώ οι συστάσεις θα πρέπει να στοχεύουν σε μελλοντικούς πειραματισμούς.

Για ένα σωστό σχεδιασμό απαιτούνται τρεις βασικές αρχές: η επανάληψη (replication), η τυχαία επιλογή δειγμάτων (randomization) και η ομαδοποίηση (blocking). Με τον όρο επανάληψη εννοούμε την ανεξάρτητη επανάληψη των θεραπειών που εξετάζονται. Με την επανάληψη μπορούμε να εκτιμήσουμε το πειραματικό σφάλμα. Όσο αυξάνεται ο αριθμός των παρατηρήσεων και των επαναλήψεων τόσο μειώνεται το τυπικό σφάλμα. Η τυχαία επιλογή δειγμάτων αφορά τη σειρά επιλογής των μονάδων, τη σειρά με την οποία εφαρμόζεται το πείραμα στις παρατηρήσεις και τη σειρά με την οποία μετρούνται οι αποκρίσεις. Είναι απαραίτητη αρχή γιατί μειώνει την υποκειμενική κρίση, διασφαλίζει την εγκυρότητα της εκτίμησης του πειραματικού σφάλματος και βοηθάει στην ανάλυση του πειραματικού σχεδιασμού. Όσον αφορά την ομαδοποίηση σχετίζεται με το διαχωρισμό των ομοειδών μονάδων σε ομάδες (blocks). Για να είναι αποτελεσματική αυτή η κατηγοριοποίηση, θα πρέπει η διακύμανση μέσα στις ομάδες να είναι μικρότερη από τη διακύμανση ανάμεσα στις διάφορες ομάδες. Στόχος της είναι να μειωθεί το πειραματικό σφάλμα και να διευκολυνθεί η ανάλυση των δεδομένων.

1.2 Επιφάνειες Απόκρισης

Στη στατιστική, η μεθοδολογία των επιφανειών απόκρισης (Response Surface Methodology) αποτελείται από μία σειρά από μαθηματικές και στατιστικές τεχνικές που βασίζονται στην προσαρμογή των πειραματικών δεδομένων σε μία πολυωνυμική εξίσωση, η οποία θα πρέπει να περιγράφει και να προβλέπει τη συμπεριφορά μίας ομάδας δεδομένων. Πιο συγκεκριμένα, ερευνά τις σχέσεις μεταξύ διαφόρων ανεξάρτητων μεταβλητών και μιας ή περισσότερων εξαρτημένων μεταβλητών στοχεύοντας στη βελτιστοποίηση του επιλεγμένου πειραματικού σχεδιασμού. Ο βασικός σκοπός της είναι η προέκταση των εμπειρικών διαδικασιών σε περιπτώσεις με περισσότερες από μία ή δύο ανεξάρτητες μεταβλητές όπου η χρήση απλών γραφικών τεχνικών είναι ανεπαρκής.

Η μεθοδολογία αυτή θεωρείται στη διεθνή βιβλιογραφία (D. Bas and I. H. Boyact, 2007) ως η πιο δημοφιλής μέθοδος βελτιστοποίησης των τελευταίων χρόνων. Έχει δύο βασικά πλεονεκτήματα σε σχέση με τις συνήθεις πειραματικές μεθόδους ή τις μεθόδους βελτιστοποίησης. Αρχικά, προσφέρει ένα μεγάλο όγκο πληροφοριών μέσα από ένα μικρό αριθμό πειραμάτων. Επιπλέον, παρατηρεί τις αλληλεπιδράσεις των ανεξάρτητων μεταβλητών στις αποκρίσεις. Ωστόσο, υπερτερεί στο γεγονός ότι η πλειοψηφία των σχεδιασμών θα πρέπει να προσαρμόζει τα δεδομένα της σε ένα πολυωνυμικό μοντέλο δευτέρου βαθμού. Συχνά, με μετασχηματισμούς των δεδομένων (για παράδειγμα, λογαριθμίζοντας) υπερνικάμε το συγκεκριμένο εμπόδιο, αλλά δεν είμαστε πάντα σίγουροι για το ποιος είναι ο κατάλληλος μετασχηματισμός και αν τελικά θα προκύψουν τα επιθυμητά αποτελέσματα.

Στην πράξη, ένας εύκολος τρόπος να υπολογιστεί ένα πρώτου βαθμού πολυωνυμικό μοντέλο είναι να χρησιμοποιηθεί ένας παραγοντικός σχεδιασμός ή ένας κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός δύο επιπέδων. Αυτό είναι επαρκές για να καθορίσει ποιες ανεξάρτητες μεταβλητές έχουν γραμμικές επιπτώσεις στην εξαρτημένη μεταβλητή. Όταν μείνουν μόνο οι σημαντικές ανεξάρτητες μεταβλητές, τότε ένας πιο περίπλοκος σχεδιασμός, όπως ένας κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός, μπορεί να εφαρμοστεί για να υπολογίσει ένα δευτέρου βαθμού πολυωνυμικό μοντέλο, το οποίο αποτελεί μόνο μια προσέγγιση. Εντούτοις, το δευτέρου βαθμού μοντέλο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για βελτιστοποίηση της απόκρισης (μεγιστοποίηση, ελαχιστοποίηση ή επιτυχία ενός συγκεκριμένου στόχου).

Πιο αναλυτικά, ένας πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός (full factorial design) είναι ένα πείραμα του οποίου ο σχεδιασμός αποτελείται από δύο ή περισσότερους παράγοντες (factors), ποσοτικούς (για παράδειγμα, πίεση, θερμοκρασία) ή ποιοτικούς (για παράδειγμα, τύπος καταλύτη). Ένας πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός επιτρέπει τη μελέτη της επίδρασης κάθε παράγοντα στην εξαρτημένη μεταβλητή, καθώς επίσης και των αποτελεσμάτων των αλληλεπιδράσεων (interactions) μεταξύ των παραγόντων στην εξαρτημένη μεταβλητή. Συχνά, τη μελέτη του σχεδιασμού διευκολύνει η αναπαράσταση των παραγόντων, των επιπέδων, των δοκιμών και άλλων αναγκαίων χαρακτηριστικών σε πίνακα (planning matrix).

Για την πλειοψηφία των παραγοντικών σχεδιασμών, κάθε παράγοντας έχει μόνο δύο επίπεδα (full factorial design at two levels). Σε έναν παραγοντικό σχεδιασμό πρώτης τάξης, δηλαδή της μορφής 2^k, λαμβάνουμε τις εξής πληροφορίες : τον αριθμό των παραγόντων (k), τον αριθμό των επιπέδων κάθε παράγοντα (2), τον αριθμό των συνδυασμών-θεραπειών (2^k). Για παράδειγμα, ένας 2^5 σχεδιασμός έχει 5 παράγοντες που καθένας έχει 2 επίπεδα και συνολικά υπάρχουν $2^5 = 32$ θεραπείες. Επιπλέον, στην πράξη, τα επίπεδα κωδικοποιούνται λαμβάνοντας μόνο τις τιμές $-1, +1$. Μπορούν όμως να υπάρχουν και παραγοντικά πειράματα με παράγοντες διαφόρων επιπέδων (mixed designs). Για παράδειγμα, ένας $2^4 3$ σχεδιασμός έχει 5 παράγοντες, από τους οποίους οι τέσσερις έχουν 2 επίπεδα και ο ένας έχει 3 επίπεδα, ενώ οι συνδυασμοί είναι $2^4 3 = 16 \times 3 = 48$.

Τα πλήρη παραγοντικά πειράματα δύο επιπέδων έχουν μεγάλη αξία διότι εξάγουν συμπεράσματα για τις επιπτώσεις των παραγόντων και των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των παραγόντων και συμβάλλουν στη δημιουργία ενός εμπειρικού μοντέλου που περιγράφει την επίδραση της απόκρισης από τους παράγοντες. Επιπρόσθετα, επιτρέπουν την μελέτη μεγάλου αριθμού μεταβλητών χρησιμοποιώντας σχετικά μικρό αριθμό πειραμάτων και δεν απαιτούν πολύπλοκους υπολογισμούς κατά την ανάλυση των δεδομένων. Πιο συγκεκριμένα, σ’ ένα παραγοντικό πείραμα η στατιστική ανάλυση των αποτελεσμάτων μπορεί να γίνει με τη χρήση πινάκων ANOVA, ανάλυσης παλινδρόμησης και διαγραμμάτων υπολοίπων.

Γενικά, τα πλήρη παραγοντικά πειράματα μπορούν να χρησιμοποιηθούν όταν υπάρχουν περισσότερα από δύο επίπεδα για κάθε παράγοντα. Εντούτοις, ο αριθμός πειραματικών δοκιμών που απαιτούνται για τους τριών επιπέδων (ή περισσότερων) παραγοντικούς σχεδιασμούς (παραγοντικοί σχεδιασμοί δεύτερης τάξης – full factorial designs at three levels) θα είναι αρκετά μεγαλύτερος απ' ό,τι για τους σχεδιασμούς δύο επιπέδων. Επομένως, ο παραγοντικός σχεδιασμός δε συνιστάται για περισσότερα από δύο επίπεδα και προτιμώνται πιο σύνθετοι σχεδιασμοί, όπως ο κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός (central composite design). Είναι ένας πολύ χρήσιμος σχεδιασμός διότι μελετάει αποτελεσματικά την επίδραση της καμπυλότητας χρησιμοποιώντας μικρό αριθμό επαναλήψεων. Ένας ακόμη συμμετρικός πειραματικός σχεδιασμός είναι ο Box–Behnken σχεδιασμός, ο οποίος απαιτεί λιγότερους συνδυασμούς θεραπείας από έναν κεντρικό σύνθετο σχεδιασμό.

Στις περιπτώσεις που ο αριθμός των παραγόντων είναι μεγάλος ή ο αριθμός των πειραμάτων πρέπει να είναι σχετικά μικρός προτιμάται ο κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός (fractional factorial design). Στην περίπτωση αυτή χρησιμοποιούμε κλάσμα του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού με μικρότερο αριθμό πειραμάτων, συνήθως 2^{k-1}. Με αυτό τον τρόπο μειώνουμε σημαντικά τον αριθμό των πειραμάτων, με μικρές πιθανότητες να χάσουμε σημαντική πληροφορία. Η στατιστική ανάλυση των συμπερασμάτων μπορεί να γίνει με πίνακα ANOVA, διαγράμματα υπολοίπων, διάγραμμα έκτροπων τιμών.

Στην πράξη, όπως προαναφέραμε, συχνά κρίνεται αναγκαία η χρήση μιας διαδοχικής πειραματικής στρατηγικής η οποία αρχικά χρησιμοποιεί ένα σχεδιασμό πρώτης τάξης και στη συνέχεια ένα δεύτερης τάξης, ο οποίος μπορεί να προσεγγίσει την επιφάνεια απόκρισης με ένα κατάλληλο μοντέλο παλινδρόμησης δεύτερης τάξης, ή χρησιμοποιεί διαδοχικούς σχεδιασμούς δεύτερης τάξης. Ο πρώτος σχεδιασμός θεωρείται αναποτελεσματικός όταν η πειραματική περιοχή είναι πολύ κοντά στο βέλτιστο σημείο της επιφάνειας απόκρισης, όπου κυριαρχούν τα φαινόμενα καμπυλότητας έναντι των γραμμικών. Αυτή η διαδοχική χρήση σχεδιασμών μπορεί να γίνει κατανοητή μέσα από ένα πείραμα των Morris et all. (1997) που αφορά το διαχωρισμό της ρανιτιδίνης και των σχετικών συστατικών χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της τριχοειδούς ηλεκτροφόρησης. Η υδροχλωρική ρανιτιδίνη είναι το ενεργό συστατικό του φαρμάκου Zantac, μιας γνωστής θεραπείας για το έλκος. Η ηλεκτροφόρηση είναι μια μέθοδος που χρησιμοποιείται για το διαχωρισμό της ρανιτιδίνης και των τεσσάρων σχετικών συστατικών. Ως σημαντικοί παράγοντες θεωρήθηκαν οι εξής 3: το pH του ρυθμιστικού διαλύματος, η τάση που χρησιμοποιήθηκε για την ηλεκτροφόρηση και η συγκέντρωση του a-CD, ενός συστατικού του ρυθμιστικού διαλύματος. Η (χρωματογραφική) απόκριση είναι μια εκθετική συνάρτηση και σκοπός του πειράματος είναι η ελαχιστοποίησή της. Κατά την παρουσίαση του σχεδιασμού σε πίνακα παρατηρήθηκε ότι μια περιοχή δοκιμών δεν παρουσίαζε ιδιαίτερο ενδιαφέρον. Επομένως, χρησιμοποιήθηκε ένας πειραματικός σχεδιασμός δεύτερης τάξης (κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός) ο οποίος κατέληξε στο συμπέρασμα ότι το pH και η τάση είναι οι πιο σημαντικοί παράγοντες. Επειδή όμως ήταν δύσκολο να υπολογιστεί το ελάχιστο, πραγματοποιήθηκε ένας ακόμα σχεδιασμός δεύτερης τάξης ορίζοντας το pH ως τη πιο σπουδαία μεταβλητή και ελαχιστοποιώντας την εκτιμώμενη επιφάνεια απόκρισης.

Οι G.E.P.X. Box N.R. Draper (1987) αναφέρουν κάποιες επιθυμητές ιδιότητες για τους σχεδιασμούς αποκριτικών επιφανειών. Αρχικά, πρέπει κρίνεται ικανοποιητική η κατανομή των πληροφοριών μέσα στα πλαίσια του πειράματος. Οι προσαρμοσμένες τιμές πρέπει να είναι όσο το δυνατόν πιο κοντά στις πραγματικές παρατηρήσεις, κάτι που ελαχιστοποιεί τα κατάλοιπα (residuals) αλλά και το στατιστικό λάθος στις προσπάθειες πρόβλεψης. Τα σφάλματα είναι καλό να εκτιμώνται εσωτερικά μέσω του μοντέλου, ενώ αναγκαίο ειναι παρουσιάζουν καλή συμπεριφορά όταν γίνονται λάθη στην εισαγωγή των μεταβλητών . Σε πολλές περιπτώσεις που απαιτείται μετασχηματισμός του μοντέλου, θα πρέπει να είναι δυνατόν να να εκτιμηθεί. Επιπροσθέτως, θα πρέπει να είναι κατάλληλοι για χρησιμοποίηση blocks και να χρειάζονται τον ελάχιστο αριθμό συνδυασμών μεταξύ των επαναλήψεων. Θα πρέπει ακόμη, να μπορεί να γίνεται έλεγχος (σχεδόν) σε κάθε στάδιο της διαδικασίας για τη διακύμανση του μοντέλου. Τέλος, είναι καλό να υπάρχουν μέθοδοι για καλή γραφική απεικόνιση του σχεδιασμού μέσω απλών μοτίβων.

Στους πειραματικούς σχεδιασμούς, οι βέλτιστοι σχεδιασμοί (optimal or optimum designs) είναι μια κατηγορία πειραματικών σχεδιασμών που είναι βέλτιστοι όσον αφορά κάποιο στατιστικό κριτήριο. Για τον υπολογισμό των στατιστικών μοντέλων, οι βέλτιστοι σχεδιασμοί επιτρέπουν στις παραμέτρους να υπολογιστούν χωρίς μεροληψία (bias) και με την ελάχιστη διακύμανση. Ένας μη-βέλτιστος σχεδιασμός απαιτεί μεγαλύτερο αριθμό εκτελέσεων για να υπολογίσει τις παραμέτρους με την ίδια ακρίβεια με ένα βέλτιστο σχεδιασμό. Πρακτικά, αυτό σημαίνει ότι οι βέλτιστοι σχεδιασμοί μπορούν να μειώσουν τις δαπάνες του πειράματος. Η βελτιστοποίηση ενός σχεδιασμού εξαρτάται από το στατιστικό μοντέλο και αξιολογείται από ένα στατιστικό κριτήριο, το οποίο συσχετίζεται με τη διακύμανση του εκτιμητή. Η διευκρίνιση του κατάλληλου μοντέλου και του κατάλληλου κριτηρίου απαιτεί την κατανόηση της στατιστικής θεωρίας και της πρακτικής γνώσης για τον πειραματικό σχεδιασμό.

Οι βέλτιστοι σχεδιασμοί προσφέρουν τρία βασικά πλεονεκτήματα. Αρχικά, μειώνουν τις δαπάνες του σχεδιασμού επιτρέποντας στα στατιστικά μοντέλα να υπολογιστούν με λιγότερες θεραπείες. Μπορούν ακόμα να προσαρμόσουν πολλαπλούς τύπους παραγόντων, όπως τα μίγματα (mixtures) και οι διακριτοί παράγοντες, και, τέλος, μπορούν να βελτιστοποιηθούν όταν περιορίζεται ο χώρος του σχεδιασμού (για παράδειγμα, όταν ο μαθηματικός χώρος του πειράματος περιέχει σχεδόν ανέφικτους παράγοντες).

Αν X είναι ένας πίνακας μοντέλου, ο X'X είναι ο πίνακας πληροφορίας. Επειδή η διακύμανση του εκτιμητή ενός παραμετρικού διανύσματος είναι ένας πίνακας, το πρόβλημα «της ελαχιστοποίησης της διακυμάνσεως»[1] γίνεται περίπλοκο. Έτσι, το κριτήριο βελτιστοποίησης βασίζεται στις ιδιοτιμές του πίνακα πληροφορίας.

---

[1] Από το θεώρημα των Gauss-Markov, ο εκτιμητής ελαχίστων τετραγώνων ελαχιστοποιεί τη διακύμανση των μέσων αμερόληπτων. Για τα στατιστικά μοντέλα με μία πραγματική παράμετρο, ισοδύναμα με τη διακύμανση ενός αποτελεσματικού εκτιμητή είναι η «πληροφορία

Στην παρούσα διπλωματική εργασία, στο κεφάλαιο 2 γίνεται ανάλυση του 2^k παραγοντικού σχεδιασμού και των αντίστοιχων κλασματικών σχεδιασμών πρώτης τάξης παραθέτοντας παραδείγματα. Στο κεφάλαιο 3 αρχικά μελετάται ο 3^k παραγοντικός σχεδιασμός και στη συνέχεια αναλύονται πολυπλοκότεροι σχεδιασμοί, όπως ο κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός και ο σχεδιασμός Box-Behnken. Ταυτόχρονα, γίνεται αναφορά σε δύο βασικές ιδιότητες των επιφανειών απόκρισης : την ορθογωνιότητα και την περιστρεψιμότητα. Τέλος, στο κεφάλαιο 4 γίνεται αναφορά στο κριτήριο σύγκρισης σχεδιασμών με τη χρήση του κριτηρίου της D-efficiency, εφαρμόζοντάς αλγόριθμο στο υπολογιστικό πακέτο της Matlab.

Fisher» του συγκεκριμένου εκτιμητή. Επομένως, λόγω αυτής της αμοιβαιότητας, η ελαχιστοποίηση της διακύμανσης αντιστοιχεί στη μεγιστοποίηση των πληροφοριών.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

Παραγοντικοί σχεδιασμοί για μοντέλα πρώτης τάξης

2.1 Παραγοντικοί Σχεδιασμοί 2^k

Οι πιο απλοί παραγοντικοί σχεδιασμοί είναι οι πλήρεις παραγοντικοί σχεδιασμοί 2^k. Πρόκειται για μια ακολουθία πειραμάτων όπου εξετάζονται όλοι οι δυνατοί συνδυασμοί των 2 επιπέδων των k παραγόντων, οι οποίοι μπορούν να είναι είτε ποιοτικοί (πχ. δυο διαφορετικά μηχανήματα) είτε ποσοτικοί (πχ. θερμοκρασία και πίεση). Μια πλήρης εκτέλεση ενός 2^k παραγοντικού σχεδιασμού περιλαμβάνει 2^k εκτελέσεις. Καθένας από τους παράγοντες συμβολίζεται συνήθως με ένα κεφάλαιο γράμμα του λατινικού αλφαβήτου : A, B .... Τα επίπεδα των παραγόντων συμβολίζονται συνήθως με -1 για τη χαμηλή στάθμη και $+1$ για την υψηλή στάθμη. Εκτός των κύριων επιδράσεων ερευνώνται φυσικά και οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραγόντων.

Οι 2^k παραγοντικοί σχεδιασμοί είναι σχεδιασμοί κατάλληλοι για την εκτίμηση των παραμέτρων μοντέλων $1^{ης}$ τάξης, δηλαδή η γενική μορφή του μοντέλου δίνεται από μια σχέση παλινδρόμησης δεύτερης τάξης της μορφής :

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_i + \sum_{\substack{i=1 \\ i<j}}^{k-1} \sum_{j=1}^{k} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon_i$$

όπου

y : η μεταβλητή απόκρισης

$\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$: οι άγνωστες παράμετροι (β_0 είναι ο σταθερός όρος και οι υπόλοιπες είναι οι κύριες επιδράσεις)

β_{ij} : οι αλληλεπιδράσεις (2^{k-1} το πλήθος)

ε_i : τυχαίο σφάλμα.

Κάθε μοντέλο έχει έναν πινάκα X αλγεβρικών πρόσημων που υποδηλώνει τη στάθμη κάθε παράγοντα σε καθεμία από τις θεραπείες έχοντας μια στήλη μόνο με $+1$ για τη σταθερά β_0. Με τη χρήση των κωδικοποιημένων αυτών μεταβλητών επιτυγχάνονται μηδενικές συσχετίσεις μεταξύ των μεταβλητών.

2.1.1 Παραγοντικός Σχεδιασμός 2^3

Ένα παράδειγμα πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού πρώτης τάξης είναι η περίπτωση των 3 παραγόντων. Ας υποθέσουμε ότι έχουμε δύο ποσοτικούς παράγοντες, τη θερμοκρασία (T) και τη συγκέντρωση (C), και έναν ποσοτικό, τον τύπο του καταλύτη (K). Το εύρος τιμών της θερμοκρασίας είναι 160-180, της συγκέντρωσης 20-40, ενώ ο καταλύτης μπορεί να είναι τύπου A ή B. Ο πίνακας των κωδικοποιημένων μονάδων θα είναι :

T	C	K	Μέση απόδοση y
−	−	−	60
+	−	−	72
−	+	−	54
+	+	−	68
−	−	+	52
+	−	+	83
−	+	+	45
+	+	+	80

όπου

Θερμοκρασία T (^oC)		Συγκέντρωση C (%)		Καταλύτης K	
−	+	−	+	−	+
160	180	20	40	A	B

Ο αντίστοιχος πίνακας με τα επίπεδα των παραγόντων για 8 δοκιμές είναι :

Αριθμός δοκιμής	T (^oC)	C (%)	K (A ή B)	Απόδοση y (%)
1	160	20	A	60
2	180	20	A	72
3	160	40	A	54
4	180	40	A	68
5	160	20	B	52
6	180	20	B	83
7	160	40	B	45
8	180	40	B	80

Το μοντέλο, λοιπόν, έχει τη μορφή :

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 \ .$$

Χρησιμοποιώντας τα δεδομένα των πινάκων και τη μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων προκύπτουν οι κύριες επιδράσεις και οι αντίστοιχες αλληλεπιδράσεις. Πιο συγκεκριμένα, η κύρια επίδραση της θερμοκρασίας είναι $\beta_1 = 23$, της συγκέντρωσης $\beta_2 = -5$ και του καταλύτη $\beta_3 = 1{,}5$. Αντίστοιχα, η αλληλεπίδραση της θερμοκρασίας με τη συγκέντρωση είναι $\beta_{12} = 1{,}5$, της θερμοκρασίας με τον καταλύτη $\beta_{13} = 10$ και της συγκέντρωσης με τον καταλύτη $\beta_{23} = 26$.

2.2 $\mathbf{2^{k-m}}$ Κλασματικοί Παραγοντικοί Σχεδιασμοί

Όσο ο αριθμός των παραγόντων, k, αυξάνεται, τόσο περισσότερες επαναλήψεις απαιτούνται, με αποτέλεσμα να είναι πολύ δύσκολη η περάτωση πειραμάτων είτε για οικονομικούς λόγους είτε και λόγω έλλειψης πειραματικών μονάδων. Στην περίπτωση αυτή καταφεύγουμε στους κλασματικούς παραγοντικούς σχεδιασμούς, δηλαδή σε ένα κλάσμα 2^{k-m} των 2^k. Το m θα πρέπει να ικανοποιεί τη σχέση

$$2^{k-m} \geq k + 1$$

ώστε να μπορεί να γίνει εκτίμηση όλων των παραμέτρων του μοντέλου 1^{ης} τάξης που δίνεται παραπάνω. Πολλές φορές όμως αυτό δεν είναι αρκετό.

2.2.1 Διακριτική ικανότητα σχεδιασμού

Κάθε κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός έχει διακριτική ικανότητα, η οποία συμβολίζεται με R. Με τον όρο αυτό εννοούμε, ότι καμία επίδραση p παραγόντων δεν είναι ταυτόσημη με άλλη επίδραση που περιέχει λιγότερους από $R-p$ παράγοντες. Πρόκειται δηλαδή για την δυνατότητα διαχωρισμού των σημαντικότερων επιδράσεων. Αν ένας πειραματιστής εξετάζει αρκετούς παράγοντες που ενδεχομένως τον ενδιαφέρουν, αλλά πιστεύει ότι μόνον R-1 από αυτούς θα έχουν σημαντικές επιδράσεις, τότε ένας κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός με διακριτική ικανότητα R είναι η κατάλληλη επιλογή του σχεδιασμού. Αν η εικασία του πειραματιστή είναι σωστή, τότε ο κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός θα προβάλλεται σε έναν πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό στους R-1 σημαντικούς παράγοντες. Αναλυτικότερα:

- Σχεδιασμοί διακριτικής ικανότητας III. Σχεδιασμοί στους οποίους καμία κύρια επίδραση δεν είναι ταυτόσημη με οποιαδήποτε άλλη κύρια επίδραση, αλλά οι κύριες επιδράσεις είναι ταυτόσημες με αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων.
- Σχεδιασμοί διακριτικής ικανότητας IV. Σχεδιασμοί στους οποίους καμία κύρια επίδραση δεν είναι ταυτόσημη με οποιαδήποτε άλλη κύρια επίδραση, ή με οποιαδήποτε αλληλεπίδραση δύο παραγόντων, αλλά αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων είναι ταυτόσημες με άλλες αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων.
- Σχεδιασμοί διακριτικής ικανότητας V. Σχεδιασμοί στους οποίους καμία κύρια επίδραση ή αλληλεπίδραση δύο παραγόντων δεν είναι ταυτόσημη με οποιαδήποτε άλλη κύρια επίδραση ή αλληλεπίδραση δύο παραγόντων, αλλά αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων είναι ταυτόσημες με αλληλεπιδράσεις τριών παραγόντων. κ.ο.κ

Για παράδειγμα, ας υποθέσουμε ότι έχουμε έναν 2^{4-1} παραγοντικό σχεδιασμό, τεσσάρων παραγόντων και 8 δοκιμών. Η διαδικασία αφορά τον σχεδιασμό ενός προϊόντος καθαρισμού χρησιμοποιώντας μια νέα διαδικασία. Ο σκοπός ήταν να βρεθεί ένα αρκετά σταθερά προϊόν (με σταθερότητα ίση με 25) ώστε να προωθηθεί στην αγορά. Στην προσπάθεια αυτή, αναγνωρίστηκαν 4 επιδράσεις : η συγκέντρωση οξέως (A), η συγκέντρωση καταλύτη (B), η θερμοκρασία (T) και η μονομερής συγκέντρωση (D), η οποία συμβολίζεται στον παρακάτω πίνακα ως *abc* αλληλεπίδραση.

Αριθμός δοκιμής	A A	B B	c C	abc D	Σταθερότητα y
1	−	−	−	−	20
2	+	−	−	+	14
3	−	+	−	+	17
4	+	+	−	−	10
5	−	−	+	+	19
6	+	−	+	−	13
7	−	+	+	−	14
8	+	+	+	+	10

όπου

A		B		C		D	
−	+	−	+	−	+	−	+
20	30	1	2	100	150	25	50

Οι αντίστοιχες κύριες επιδράσεις είναι

$$\beta_1 = -5{,}75$$

$$\beta_2 = -3{,}75$$

$$\beta_3 = -1{,}25$$

$$\beta_4 = +0{,}75.$$

Είναι λοιπόν προφανές, ότι δεν προέκυψε η ζητούμενη σταθερότητα, ωστόσο φάνηκε από τον κλασματικό σχεδιασμό ότι οι παράγοντες A και B κυριαρχούν και συνεπώς θα πρέπει η περαιτέρω ανάλυση να επικεντρωθεί σε αυτούς τους δύο μόνο παράγοντες (συγκέντρωση οξέως και συγκέντρωση καταλύτη).

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3
Παραγοντικοί Σχεδιασμοί για μοντέλα Δεύτερης Τάξης

3.1 Παραγοντικοί Σχεδιασμοί 3^k

Μια άλλη κατηγορία παραγοντικών σχεδιασμών είναι οι σχεδιασμοί k παραγόντων με 3 επίπεδα ο καθένας. Στην περίπτωση αυτή, οι απαιτούμενες δοκιμές για μια πλήρη εκτέλεση αυξάνονται σημαντικά σχετικά με προηγουμένως, σε 3^k και γι' αυτό συχνά καταφεύγουμε σε κλάσματα αυτών. Τα επίπεδα του κάθε παράγοντα συμβολίζονται ως εξής: -1 για την χαμηλή στάθμη, 0 για τη μεσαία στάθμη και $+1$ για την υψηλή στάθμη. Συνεπώς, για την περιγραφή ενός συνδυασμού επιπέδων παραγόντων θα χρησιμοποιείται μια k-άδα αποτελούμενη από αυτές τις τιμές. Παραδείγματος χάριν, θα περιγράψουμε με $\{1\ 0\ \ -1\}$ μια κατάσταση στην οποία έχουμε σχεδιασμό 3^3 (3 παράγοντες τριών επιπέδων) με τον παράγοντα A στην υψηλή στάθμη, τον B στη μεσαία και τον C στη χαμηλή στάθμη. Είναι απαραίτητο να σημειωθεί ότι σε αυτήν την κατηγορία σχεδιασμών οι παράγοντες πρέπει να είναι ποσοτικοί και τα επίπεδά τους να ισαπέχουν.

Οι παραγοντικοί σχεδιασμοί με παράγοντες που έχουν περισσότερα από δυο επίπεδα χρησιμοποιούνται κυρίως όταν μας ενδιαφέρει η επίδραση της καμπυλότητας ενός ποσοτικού παράγοντα στη συνάρτηση απόκρισης.

Οι 3^k παραγοντικοί σχεδιασμοί είναι σχεδιασμοί $2^{ης}$ τάξης, δηλαδή η γενική μορφή του μοντέλου δίνεται από ένα μοντέλο της μορφής :

$$y = \beta_0 \ + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_i + \sum_{\substack{i=1 \\ i>j}}^{k} \sum_{j=1}^{k} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} x_i^2 + \varepsilon_i$$

όπου

y : μεταβλητή απόκρισης

$\beta_0, \beta_i, \beta_{ii}$: άγνωστες παράμετροι

β_{ij} : αλληλεπιδράσεις, για $i > j$

ε_i : τυχαίο σφάλμα.

Το τετραγωνικό, λοιπόν, αυτό μοντέλο αποτελείται από έναν σταθερό όρο (β_0), k πρώτου βαθμού όρους, k τετραγωνικούς όρους και $k(k-1)/2$ όρους αλληλεπιδράσεων.

Συνολικά, αποτελείται από $p = \frac{(k+1)(k+2)}{2}$ όρους, όπως συνηθίζεται να συμβολίζεται στη διεθνή βιβλιογραφία.

3.1.1 Παραγοντικός Σχεδιασμός 3^2

Μια απλή περίπτωση ενός 3^k παραγοντικού σχεδιασμού είναι για $k = 2$ παράγοντες. Στην περίπτωση αυτή υπάρχουν $3^2 = 9$ θεραπείες σε κάθε πλήρη επανάληψη του. Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να εξετάσουμε την επίδραση δύο παραγόντων στην αντοχή των ζωνών ασφαλείας των φορτηγών : την υδραυλική πίεση του αντίστοιχου συστήματος (A) και την πεπλατυσμένη μεσαία ρύθμιση (B).

Ο συνδυασμός των επιπέδων των παραγόντων σε μορφή πίνακα θα είναι

B / A	$+1$	0	-1
$+1$	$+1\ +1$	$+1\ 0$	$+1 - 1$
0	$0\ +1$	$0\ 0$	$0\ -1$
-1	$-1\ +1$	$-1\ 0$	$-1\ -1$
	AB		

Το αντίστοιχο δεύτερης τάξης μοντέλο είναι

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2,$$

το οποίο μπορεί να επιλυθεί κυρίως με την κανονική ανάλυση.
Ωστόσο, γράφοντας το σχεδιασμό με τον εξής τρόπο

$$Y_{ij} = \mu + A_i + B_j + AB_{ij} + \varepsilon_{ij}$$

μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο αντίστοιχος πίνακας ANOVA με τους βαθμούς ελευθερίας και τα αθροίσματα τετραγώνων, να γίνει ανάλυση διακύμανσης, να πραγματοποιηθούν F-tests και να υπολογιστεί η τιμή p (p value). Με τον τρόπο αυτό μπορούν να εξαχθούν συμπεράσματα για το συγκεκριμένο πείραμα.

$Πηγή$	$Βαθμοί\ Ελευθερίας$
$Παράγοντας\ A$	$3 - 1 = 2$

$Παράγοντας\ B$	$3-1=2$
$Αλληλεπίδραση\ AB$	$(3-1)*(3-1)=4$
$Σφάλμα$	$3^2(n-1)$
$Συνολο$	3^2n-1

Για τον υπολογισμό των αθροισμάτων τετραγώνων πέρα των συνήθων μεθόδων που εφαρμόζονται στους παραγοντικούς σχεδιασμούς, μπορεί να εφαρμοστεί και η εξής διαδικασία: οι κύριες επιδράσεις μπορούν να διασπαστούν σε 2 συνιστώσες με ένα βαθμό ελευθερίας η καθεμία και η αλληλεπίδραση δύο παραγόντων σε 4 συνιστώσες με 1 βαθμό ελευθερίας η καθεμία. Οι συνιστώσες στις όποιες διασπάται καθεμία από τις κυρίες επιδράσεις είναι μια γραμμική (L) και μια τετραγωνική (Q). Από τον συνδυασμό αυτών προκύπτουν οι 4 συνιστώσες της αλληλεπίδρασης.

3.2 Ορθογώνιοι Σχεδιασμοί

Ένας ορθογώνιος σχεδιασμός συμβολίζεται με $OA(n,q,s,t)$ και αναπαρίσταται ως έναν $n \times q$ πίνακα, όπου n είναι οι εκτελέσεις του σχεδιασμού, q οι παράγοντες, s ο αριθμός των επιπέδων των παραγόντων και t η λεγόμενη ισχύς του σχεδιασμού. Η ισχύς είναι άμεσα συνδεδεμένη με τη διακριτική ικανότητα του σχεδιασμού. Γενικά, κάθε ορθογώνιος σχεδιασμός $OA(n,q,s,t)$ ορίζει έναν παραγοντικό κλασματικό σχεδιασμό με διακριτική ικανότητα $t+1$. Το πλεονέκτημά των ορθογώνιων σχεδιασμών είναι ότι οι εκτιμήσεις των κύριων επιδράσεων είναι μεταξύ τους ασυσχέτιστες.

Οι ορθογώνιοι σχεδιασμοί ανάλογα με τον αριθμό των παραγόντων που μπορούν να μελετήσουν διαχωρίζονται σε κορεσμένους και μη-κορεσμένους. Πιο συγκεκριμένα, κορεσμένος ορθογώνιος σχεδιασμός είναι ο σχεδιασμός που μπορεί να μελετήσει το μεγαλύτερο δυνατό αριθμό παραγόντων σε συνάρτηση με τον αριθμό των εκτελέσεών του και της ισχύος του. Αντίθετα, μη-κορεσμένος λέγεται όταν ο αριθμός των παραγόντων δεν είναι ο μεγαλύτερος δυνατός σε συνάρτηση με τον αριθμό των εκτελέσεών του και της ισχύος του. Ωστόσο, το πρόβλημα που υπάρχει σχετίζεται με το κόστος των πειραμάτων που πρέπει να εκτελεσθούν, αφού σε κάθε περίπτωση ο αριθμός των εκτελέσεων που απαιτούνται είναι μεγαλύτερος από τον αριθμό των παραμέτρων του μοντέλου που πρέπει να εκτιμηθούν.

Παραδείγματα ορθογώνιων σχεδιασμών δύο επιπέδων είναι οι σχεδιασμοί Hadamard, οι οποίοι κάνουν χρήση κανονικοποιημένων πινάκων που καταλήγουν σε σχεδιασμούς $OA(n, n-1{,}2, 2)$, και οι σχεδιασμοί Plackett-Burman, οι οποίοι είναι μια ειδική κατηγορία κορεσμένων ορθογώνιων σχεδιασμών $OA(n, n-1{,}2, 2)$ που κατασκευάζονται με κυκλικές μεταθέσεις.

Είναι επίσης σημαντικό τα μοντέλα δεύτερης τάξης να δίνουν ακριβείς προβλέψεις στην περιοχή ενδιαφέροντος. Αυτό σημαίνει σταθερή διακύμανση της απόκρισης στα σημεία ενδιαφέροντος x. Η διακύμανση της μεταβλητής απόκρισης σε ένα σημείο x δίνεται από τον τύπο

$$Var\big(\hat{y}(x)\big) = \sigma^2 x'(X'X)^{-1}x.$$

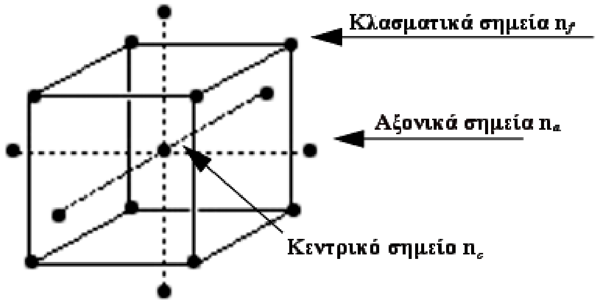
3.3 Κεντρικοί Σύνθετοι Σχεδιασμοί – Central Composite Designs (C.C.D)

Το 1951 οι Box και Wilson μελετώντας τους 3^k παραγοντικούς σχεδιασμούς, οδηγηθήκαν στη δημιουργία μιας νέας κατηγορίας σχεδιασμών, των σύνθετων κεντρικών σχεδιασμών. Είναι μια μέθοδος με την οποία οδηγούμαστε σε μοντέλο 2ης τάξης χωρίς να χρειαστεί να ολοκληρώσουμε έναν 3^k παραγοντικό σχεδιασμό.

Υποθέτουμε ότι έχουμε k παράγοντες οι οποίοι κωδικοποιούνται από το διάνυσμα $x = (x_1, x_2, \ldots, x_k)$. Ένας σχεδιασμός αυτής της μορφής αποτελείται από τρία μέρη :

1. Τα n_f κλασματικά σημεία. Απαρτίζονται είτε από τα 2^k σημεία ενός παραγοντικού σχεδιασμού ή από έναν 2^{k-m} κλασματικό σχεδιασμό με $x_i = -1, +1$ για $i = 1, 2, \ldots, \kappa$,
2. Τα $2k$ αξονικά σημεία (n_a). Είναι της μορφής $(0, 0, \ldots, 0, x_i, 0, \ldots, 0)$ με $x_i = -a, +a$ για $i = 1, 2, \ldots, \kappa.$, και
3. Τα n_c κεντρικά σημεία $(n_c > 1)$ με $x_i = 0$ για $i = 1, 2, \ldots, \kappa$.

Όσον αφορά το αξονικό μέρος, έχει την ιδιότητα στον άξονα κάθε μεταβλητής να γίνεται επιλογή δύο σημείων σε απόσταση α από το κέντρο του σχεδιασμού. Η αναπαράσταση ενός κεντρικού σύνθετου σχεδιασμού έχει είτε κυβοειδή μορφή (για α=1) είτε σφαιρική.



Τα σημεία που προκύπτουν από τον παραγοντικό σχεδιασμό οδηγούν σε ένα σχεδιασμό βέλτιστης διασποράς για ένα μοντέλο πρώτης τάξης και συνεισφέρουν σημαντικά στην εκτίμηση των όρων της αλληλεπίδρασης. Τα κεντρικά σημεία είναι εκείνα που δίνουν στοιχεία σχετικά με την καμπυλότητα της συνάρτησης απόκρισης. Εφόσον υπάρχει στο σύστημα ένδειξη κυρτότητας προσθέτουμε τα αξονικά σημεία για την εκτίμηση των δευτεροβάθμιων όρων, αφού χωρίς αυτά έχουμε πληροφορία μόνο για το άθροισμά τους.

Για παράδειγμα, αν οι υπό εξέταση παράγοντες είναι $k = 3$, θα γίνει χρήση ενός 2^3 παραγοντικού σχεδιασμού. Έτσι, εκτιμάμε τα $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3$ και τους συντελεστές των όρων των ανά δυο αλληλεπιδράσεων, αλλά όχι τους συντελεστές των τετραγωνικών όρων $\beta_{11}, \beta_{22}, \beta_{33}$. Για να επιτευχθεί αυτό θα πρέπει να εισαχθούν στον 2^3 παραγοντικό σχεδιασμό 6 αξονικά σημεία και τουλάχιστον 1 κεντρικό σημείο. Αν υποθέσουμε ότι ο συμβολισμός είναι ο συνήθης για τα επίπεδα των παραγόντων του 2^3 : $(\pm1, \pm1, \pm1)$, τότε το κεντρικό σημείο n_c είναι το $(0,0,0)$ και τα αξονικά σημεία n_a είναι τα: $(\pm\alpha, 0,0), (0, \pm\alpha, 0), (0,0, \pm\alpha)$. Το μοντέλο που προκύπτει από τα 15 αυτά σημεία είναι ένας κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός.

Υπάρχουν τρεις κατηγορίες Κεντρικών Σύνθετων Σχεδιασμών, ανάλογα με την επιλογή του α :

i. οι σφαιρικοί, όπου το $\alpha = \sqrt{k}$, στους οποίους όλα τα σημεία του σχεδιασμού ανήκουν στην ίδια γεωμετρική σφαίρα.
ii. οι περιστρέψιμοι, όπου $\alpha = \sqrt[4]{n_f}$, στους οποίους η διακύμανση της $y(x)$ εξαρτάται μόνο από την απόσταση του σημείου από το κέντρο του σχεδιασμού. Με αλλα λόγια τα αξονικά σημεία n_a επιλέγονται έτσι ώστε οι διακυμάνσεις των προβλέψεων να είναι ίσες, όταν τα σημεία ισαπέχουν από το κέντρο.

iii. οι κυβοειδείς, όπου $\alpha = 1$, στους οποίους όλα τα σημεία του σχεδιασμού βρίσκονται σε έναν κύβο.

Παρατηρούμε, τώρα, ότι ένας κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός αποτελείται από $p = (k+1)(k+2)/2$ παραμέτρους που θα πρέπει να εκτιμηθούν. Επειδή, όμως, δεν μπορούμε να περιορίσουμε τα $2k$ αξονικά σημεία, θα προσπαθήσουμε με χρήση κατάλληλου κριτηρίου να περιορίσουμε τα σημεία του παραγοντικού τμήματος του σχεδιασμού επιλέγοντας τον ελάχιστο δυνατό αριθμό τους.

Σε έναν κεντρικό σύνθετο σχεδιασμό πολύ σημαντικό ρόλο παίζει η επιλογή της τιμής του α για τα αξονικά σημεία. Αρχικά, περιορίζουμε το πεδίο τιμών του α μεταξύ του 1 και του $\sqrt{k}$. Όταν πάρει την ελάχιστη τιμή, δηλαδή $\alpha = 1$, τότε τα κεντρικά σημεία βρίσκονται στο κέντρο των εδρών του κύβου. Όταν, όμως, $\alpha = \sqrt{k}$, τότε όλα τα σημεία του σχεδιασμού (αξονικά και κλασματικά) βρίσκονται σε μια σφαίρα ακτίνας $\sqrt{k}$. Τοποθετώντας τα σημεία με αυτόν τον τρόπο, οι εκτιμήσεις των παραμέτρων είναι αποτελεσματικότερες και ταυτόχρονα επιτυγχάνεται η σφαιρικότητα του σχεδιασμού. Ωστόσο, αν οι παράγοντες k αυξηθούν πολύ, τότε υπάρχει περίπτωση τα αξονικά σημεία να τοποθετηθούν μακριά από το κέντρο και να μην υπάρχουν πληροφορίες για τα συγκεκριμένα επίπεδα των παραγόντων.

Οι Box, Hunter το 1957 πρότειναν μια καλή ιδιότητα για τα μοντέλα 2[ης] τάξης, την περιστρεψιμότητα. Με τον όρο αυτό εννοούμε ότι για όλα τα σημεία x τα οποία ισαπέχουν από το κέντρο του σχεδιασμού η διακύμανση $\mathrm{Var}\big(\hat{y}(\mathrm{x})\big)$ είναι κοινή, δηλαδή είναι σταθερή σε σφαίρες γύρω από το κέντρο του σχεδιασμού. Με άλλα λόγια, η διακύμανση $Var(\hat{y}(x))$ που είναι η εκτιμώμενη απόκριση στο $x = (x_1, \dots, x_k)$, εξαρτάται μόνο από την απόσταση

$$\|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \ \dots + \ x_k^2}.$$

Για παράδειγμα, ένας σχεδιασμός με αυτήν την ιδιότητα θα διατηρεί τη διακύμανση της μεταβλητής απόκρισης σταθερή όταν περιστρέφεται γύρω από το κέντρο (0,0,0). Όταν η περιστρεψιμότητα δεν εξασφαλίζεται, έχουν προταθεί μέτρα τα οποία διαπιστώνουν το κατά πόσο περιστρέψιμος είναι ένας σχεδιασμός (Khuri (1988), Draper and Guttman (1988) και Draper and Pukelsheim (1990)).

Για να επιτευχθεί η ιδιότητα της περιστρεψιμότητας σε έναν κεντρικό σύνθετο σχεδιασμό θα πρέπει να επιλέγει η κατάλληλη τιμή για το α, η οποία τώρα εξαρτάται από τα n_f σημεία του παραγοντικού σχεδιασμού. Στην πραγματικότητα, λοιπόν, ένας κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός είναι ταυτόχρονα και περιστρέψιμος όταν

$$\alpha = \sqrt[4]{n_f}\ ,$$

σύμφωνα με το κριτήριο των Box, Hunter (1957).

Επιπρόσθετα, σημαντική θέση στην επιλογή κατάλληλου κεντρικού σύνθετου σχεδιασμού έχει ο αριθμός των δοκιμών για την εύρεση των κεντρικών σημείων n_c. Η επιλογή του α είναι φανερό ότι συνδέεται άμεσα με το είδος της περιοχής που μας ενδιαφέρει και συνεισφέρει στη σταθερότητα της διακυμάνσεως. Όταν πρόκειται για σφαίρα ο σχεδιασμός θα πρέπει να περιλαμβάνει $3-5$ δοκιμές, ενώ στην κυβοειδή περίπτωση $1-2$ δοκιμές φαίνεται πως αρκούν. Αν επιχειρήσουμε παραπάνω δοκιμές από τις αναγκαίες, δεν υπάρχει κάποια απώλεια πέραν του κόστους περάτωσης των επιπλέον δοκιμών.

Για την καλύτερη κατανόηση των παραπάνω και κυρίως των διαφοροποιήσεων στις τιμές του α θα ανατρέξουμε στο πείραμα που αναφέραμε στην εισαγωγή ως πείραμα των Morris et all. (1997) για το διαχωρισμό της ρανιτιδίνης και των σχετικών συστατικών μέσω της μεθόδου της τριχοειδούς ηλεκτροφόρησης. Οι σημαντικοί παράγοντες, όπως έχουμε ήδη αναφέρει, είναι το pH του ρυθμιστικού διαλύματος (A), η τάση που χρησιμοποιήθηκε για την ηλεκτροφόρηση (B) και η συγκέντρωση του a-CD, ενός συστατικού του ρυθμιστικού διαλύματος (C). Η μελέτη του σχεδιασμού έγινε χρησιμοποιώντας έναν κεντρικό σύνθετο σχεδιασμό. Για να είναι επιπλέον ο σχεδιασμός σφαιρικός πρέπει $\alpha = \sqrt{3} \cong 1{,}732$. Για την περιστρεψιμότητα έχουμε $n_f = 8$ και άρα $\sqrt[4]{n_f} = \sqrt[4]{8} = 1{,}682$. Όμως, για να πάρουμε ακέραιες τιμές για την τάση και τη συγκέντρωση επιλέχθηκαν $\alpha = 1{,}68$ για τον παράγοντα A και $\alpha = 1{,}67$ για τους παράγοντες B και C. Τέλος, για να επαληθεύεται και η ορθογωνιότητα η ζητούμενη τιμή του α θα είναι $\alpha = 1{,}633$.

Μια γενική μορφή του πίνακα πληροφορίας ενός κεντρικού σύνθετου σχεδιασμού k παραγόντων και $x_1, x_2, \dots, x_k$ μεταβλητών περιέχει έναν κλασματικό σχεδιασμό 2^{k-p}, υποστήλες με $\mp\alpha$, που κατεβαίνουν σταδιακά, όπως κάνουν και οι αντίστοιχες υποστήλες των α^2. Πιο αναλυτικά, η γενική μορφή ενός πίνακα X είναι η εξής:

<table>
<tr><th>x_0</th><th>x_1</th><th>x_2</th><th>$\dots$</th><th>x_k</th><th>x_1^2</th><th>x_2^2</th><th>$\dots$</th><th>x_k^2</th><th>x_1x_2</th><th>x_1x_3</th><th>$\dots$</th><th>x_2x_k</th></tr>
<tr><td>$+1$</td><td colspan="4" rowspan="4">±1
2^{k-p}</td><td>$+1$</td><td>$+1$</td><td>...</td><td>$+1$</td><td colspan="4" rowspan="4">±1
Αλληλεπιδράσεις</td></tr>
<tr><td>$+1$</td><td>$+1$</td><td>$+1$</td><td>...</td><td>$+1$</td></tr>
<tr><td>$\dots$</td><td>...</td><td>...</td><td>...</td><td>...</td></tr>
<tr><td>$+1$</td><td>$+1$</td><td>$+1$</td><td>...</td><td>$+1$</td></tr>
</table>

$+1$	$-\alpha$				α^2							
$+1$	$+\alpha$				α^2							
…	…	…	…	…								
$+1$	$-\alpha$				α^2							
$+1$	$+\alpha$				α^2							
$+1$		$-\alpha$				α^2						
$+1$		$+\alpha$				α^2						
…	…	…	…	…								
$+1$		$-\alpha$				α^2			0			
$+1$		$+\alpha$				α^2						
…	…	…	…	…								
$+1$				$-\alpha$				α^2				
$+1$				$+\alpha$				α^2				
…	…	…	…	…				α^2				
$+1$				$-\alpha$				α^2				
$+1$				$+\alpha$				α^2				
$+1$												
$+1$	0				0				0			
…												
$+1$												

Ακολουθεί ένα παράδειγμα πίνακα πληροφορίας ενός κεντρικού σύνθετου σχεδιασμού 3 παραγόντων για $\alpha = 2$ με 15 επαναλήψεις και συνολικά $p = 10$ όρους.

Αριθμός Δοκιμής	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1^2	x_2^2	x_3^2	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3
1	$+1$	-1	-1	-1	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$
2	$+1$	$+1$	-1	-1	$+1$	$+1$	$+1$	-1	-1	$+1$
3	$+1$	-1	$+1$	-1	$+1$	$+1$	$+1$	-1	$+1$	-1
4	$+1$	$+1$	$+1$	-1	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	-1	-1
5	$+1$	-1	-1	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	-1	-1
6	$+1$	$+1$	-1	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	-1	$+1$	-1

7	$+1$	-1	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	-1	-1	$+1$
8	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$	$+1$
9	$+1$	-2	0	0	$+4$	0	0	0	0	0
10	$+1$	$+2$	0	0	$+4$	0	0	0	0	0
11	$+1$	0	-2	0	0	$+4$	0	0	0	0
12	$+1$	0	$+2$	0	0	$+4$	0	0	0	0
13	$+1$	0	0	-2	0	0	$+4$	0	0	0
14	$+1$	0	0	$+2$	0	0	$+4$	0	0	0
15	$+1$	0	0	0	0	0	0	0	0	0

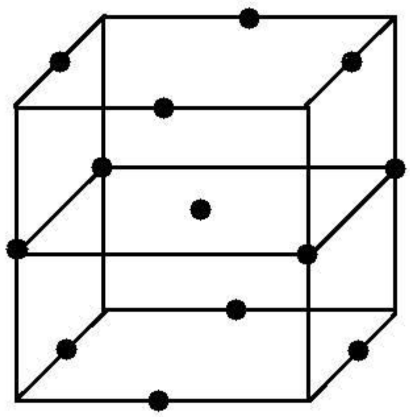
Στη συνέχεια, δίνεται ένας συγκεντρωτικός πίνακας όπου για διάφορες τιμές του k φαίνεται το πλήθος των σημείων του σχεδιασμού και οι τιμές του α για να είναι ο σχεδιασμός σφαιρικός, κυβοειδής και περιστρέψιμος.

Πλήθος παραγόντων k	*3*	*4*	*5*
n_f *(Κλασματικά σημεία)*	8	16	32
n_a *(Αξονικά σημεία)*	6	8	10
n_c *(Κεντρικά σημεία)*			
i. *Σφαιρικός*	3-5	3-5	3-5
ii. *Κυβοειδής*	1-2	1-2	1-2
a			
Σφαιρικός ($a = \sqrt{k}$)	1,732	2	2,236
Κυβοειδής	1	1	1
Περιστρέψιμος ($a = \sqrt[4]{n_f}$)	1,681	2	2,378

3.4 Box – Behnken Σχεδιασμοί (Box – Behnken Designs/BBD)

Οι George E. P. Box και Donald Behnken το 1960 πρότειναν κάποιους νέους σχεδιασμούς δεύτερης τάξης με τρία επίπεδα ως πειραματικούς μεθόδους των επιφανειών απόκρισης. Κύριος σκοπός τους ήταν να μειωθεί σημαντικά το πλήθος των απαιτούμενων δοκιμών. Οι σχεδιασμοί αυτοί δημιουργούνται από το συνδυασμό 2^k παραγοντικών σχεδιασμών με ισορροπημένους μη πλήρεις σχεδιασμούς (BIB – Balanced Incomplete Designs). Ένας BIB – σχεδιασμός είναι ο σχηματισμός b ομάδων (blocks) από υ θεραπείες, έτσι ώστε κάθε ομάδα να περιέχει ακριβώς θεραπείες, κάθε θεραπεία να ανήκει σε ακριβώς r ομάδες και κάθε ζευγάρι θεραπειών να ανήκει σε ακριβώς λ ομάδες. Ο BIB-σχεδιασμός συμβολίζεται με τη διατεταγμένη πεντάδα παραμέτρων (υ, b, r, k, λ) οι οποίες δεν είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους.

Οι Box-Behnken είναι σφαιρικοί σχεδιασμοί και πιο συγκεκριμένα όλα τα σημεία τους βρίσκονται σε μια σφαίρα ακτίνας $\sqrt{2}$. Δεν περιλαμβάνουν σημεία που βρίσκονται στις κορυφές, δηλαδή στην υψηλή ή χαμηλή στάθμη της κάθε μεταβλητής ταυτόχρονα, αλλά οι συνδυασμοί βρίσκονται στα κέντρα των ακμών. Αυτό είναι ένα ακόμα πλεονέκτημα των σχεδιασμών αυτών, αφού κάποιες φορές είτε για οικονομικούς είτε για λειτουργικούς λόγους είναι αδύνατο να συνδυάσουμε τις ακραίες στάθμες των παραγόντων. Λόγω της σφαιρικότητας τους, απαιτούνται τουλάχιστον 3 έως 5 δοκιμές για την εύρεση του κεντρικού σημείου. Οι Box-Behnken σχεδιασμοί είναι είτε περιστρέψιμοι είτε σχεδόν περιστρέψιμοι.



Ας υποθέσουμε ότι έχουμε $k = 4$. Ένας ισορροπημένος μη πλήρης σχεδιασμός κατά block με 6 ομάδες μπορεί να αναπαρασταθεί με τη μορφή πίνακα ως εξής:

	Δοκιμή			
Block	1	2	3	4
1	x	x		
2			x	x
3	x			x
4		x	x	
5		x		x
6	x		x	

Ο πίνακας ενός 2^2 παραγοντικού σχεδιασμού είναι

$$\begin{bmatrix} -1 & -1 \\ +1 & -1 \\ -1 & +1 \\ +1 & +1 \end{bmatrix}.$$

Γενικά, οι δοκιμές είναι οι τέσσερις παράγοντες x_1, x_2, x_3, x_4 της επιφάνειας απόκρισης. Για την κατασκευή του ζητούμενου σχεδιασμού αρχικά αντικαθιστούμε τους σταυρούς της πρώτης ομάδας με τις δύο στήλες του 2^2 παραγοντικού σχεδιασμού και εισάγουμε μια στήλη με μηδενικά οπουδήποτε δεν υπάρχει «σταυρός». Επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία για κάθε ομάδα και στο τέλος προσθέτουμε μερικές δοκιμές στο κεντρικό σημείο. Έτσι, κατασκευάζουμε τον ακόλουθο σχεδιασμό Box-Behnken χρησιμοποιώντας συνολικά $24 + n_c$ δοκιμές ($n_c \geq 3$), δηλαδή 27. Ισοδύναμα, θεωρούμε ότι πρόκειται για έναν μη πλήρη 3^4 παραγοντικό σχεδιασμό σε 3 blocks των 9 δόκιμων το καθένα.

$$\left[\begin{array}{cccc} -1 & -1 & 0 & 0 \\ +1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & +1 & 0 & 0 \\ +1 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & +1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & +1 \\ 0 & 0 & +1 & +1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hdashline -1 & 0 & 0 & -1 \\ +1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & +1 \\ +1 & 0 & 0 & +1 \\ 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & +1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & +1 & 0 \\ 0 & +1 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hdashline 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & +1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & +1 \\ 0 & +1 & 0 & +1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 \\ +1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & +1 & 0 \\ +1 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right]$$

Σε σχέση με τους κεντρικούς σύνθετους σχεδιασμούς, οι Box-Behnken σχεδιασμοί απαιτούν λιγότερα επίπεδα ανά παράγοντα. Πιο συγκεκριμένα, χρειάζονται μόνο 3 επίπεδα $(-1, 0, +1)$ έναντι 5 επιπέδων $(-\alpha, -1, 0, +1, +\alpha)$ που χρειάζονται στους κεντρικούς σύνθετους σχεδιασμούς (εκτός της περίπτωσης που $\alpha = 1$, όποτε τα επίπεδα είναι 3). Παρατηρώντας όμως των αριθμό των απαιτούμενων δοκιμών για τις διάφορες τιμές του k συμπεραίνουμε ότι η περίπτωση των σχεδιασμών Box-Behnken για $k = 3$ είναι αρκετά οικονομική. Ωστόσο, όσο αυξάνεται το k συνιστάται να επιλέγεται το ελάχιστο μέγεθος για το n_c.

Αριθμός παραγόντων (k)	Αριθμός δοκιμών
3	$12 + n_c$ για $n_c \geq 1$
4	$24 + n_c$ για $n_c \geq 3$
5	$40 + n_c$ για $n_c \geq 2$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

Σύγκριση Σχεδιασμών Αποκριτικών Επιφανειών

4.1 Κριτήρια Βελτιστοποίησης

Τα δύο σημαντικότερα μέτρα αποτελεσματικότητας βασίζονται στην ποσοτικοποίηση της ιδέας του πίνακα πληροφορίας υπολογίζοντας το μέσο όρο (κατά μία έννοια) των ιδιοτιμών ή των διακυμάνσεων και είναι η A-efficiency και η D-efficiency. Το πρώτο κριτήριο εξαρτάται από τον αριθμητικό μέσο όρο των ιδιοτιμών, που είναι επίσης ο αριθμητικός μέσος όρος των διακυμάνσεων, και δίνεται από το ίχνος του (X'X). Είναι πιθανόν το προφανέστερο μέτρο αποτελεσματικότητας. Όσο οι διακυμάνσεις μικραίνουν και ο αριθμητικός μέσος όρος των διακυμάνσεων των παραμετρικών εκτιμητών μειώνεται, τόσος αυξάνεται η αποτελεσματικότητα. Ένα άλλο κριτήριο αποτελεσματικότητας είναι η D-efficiency, η οποία στηρίζεται στο γεωμετρικό μέσο όρο των ιδιοτιμών και δίνεται από την ορίζουσα του πίνακα πληροφορίας (X'X). Ένα τρίτο συχνό μέτρο αποτελεσματικότητας είναι η G-efficiency, η οποία βασίζεται στη μεγιστοποίηση του τυπικού σφάλματος. Και τα τρία από αυτά κριτήρια είναι κυρτές συναρτήσεις των ιδιοτιμών του πίνακα (X'X) και ως εκ τούτου συνήθως συσχετίζονται. Όταν οι τιμές του κριτηρίου αποτελεσματικότητας είναι κοντά στο 100, τότε μπορεί να είναι πλήρως ικανοποιητικές. Επιπλέον, όταν, για παράδειγμα, η D-efficiency πάρει την τιμή 0, αυτό σημαίνει ότι ένας ή περισσότεροι παράμετροι δεν μπορούν να εκτιμηθούν, ενώ αν πάρει την τιμή 100 (ή την τιμή 1, ανάλογα με τον τύπο που χρησιμοποιείται κάθε φορά), τότε οι παράμετροι του μοντέλου εκτιμώνται με τη μέγιστη δυνατή αποδοτικότητα. Στην παρούσα εργασία θα ασχοληθούμε με τη D-efficiency ως μέτρο σύγκρισης των κυριότερων παραγοντικών σχεδιασμών πρώτης και δεύτερης τάξης και ως κριτήριο επιλογής του βέλτιστου σχεδιασμού.

4.1.1 D-efficiency

Η D-efficiency είναι ένα κριτήριο η τιμή του οποίου υπολογίζεται από την ορίζουσα του κανονικοποιημένου πίνακα πληροφορίας. Επιτρέπει την σύγκριση σχεδιασμών με διαφορετικό πλήθος επαναλήψεων.

Πρακτικά, υπολογίζεται αρχικά η ποσότητα D, η οποία στη διεθνή βιβλιογραφία (J. M. Lucas, 1976) αναφέρεται ως «η πληροφορία για κάθε σημείο του σχεδιασμού». Οι τιμές της D (D-values) δίνονται από τον τύπο:

$$D = \frac{1}{n^p} \times |W'W|$$

όπου p είναι ο αριθμός των παραμέτρων του σχεδιασμού. Συνήθως, οι τιμές της D πολλαπλασιάζονται με το 10^9 (N. Draper, 1985).

Στη συνέχεια, υπολογίζεται η τιμή της D-efficiency για τη σύγκριση των σχεδιασμών και την εύρεση του βέλτιστου από τον τύπο

$$D - efficiency = 100 \times D^{-1/p}.$$

Στην πράξη, όμως, προτιμάται ο τύπος

$$D - efficiency \ = \ |(W'W)|^{1/p} = \sqrt[p]{|(W'W)|},$$

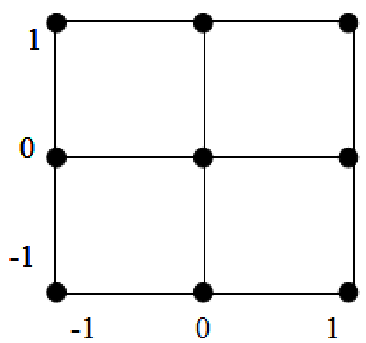
ο οποίος εφαρμόζεται για οποιοδήποτε αριθμό παραγόντων χωρίς ιδιαίτερη δυσκολία. Το μοντέλο θα θεωρείται εκτιμήσιμο όταν η D-efficiency πάρει τιμές μεγαλύτερες του 0. Σε αντίθετη περίπτωση, δηλαδή αν η D-efficiency πάρει τιμές πολύ μικρές, τότε αυτό σημαίνει ότι υπάρχουν σημαντικά προβλήματα που απαιτούν προσοχή και βελτίωση. Ωστόσο, εάν η D-efficiency πάρει ακριβώς την τιμή 0, τότε κανένας από τους δυνατούς σχεδιασμούς δεν μπορεί να εκτιμηθεί.

4.1.1.1 Παράδειγμα

Η σύγκριση σχεδιασμών στην πράξη απαιτεί εφαρμογή αλγορίθμων σε γλώσσες προγραμματισμού λόγω της πολυπλοκότητας των πράξεων και του μεγάλου αριθμού επαναλήψεων. Ωστόσο, θα χρησιμοποιήσουμε ένα παράδειγμα από τη διεθνή βιβλιογραφία (Eriksson, L., Johansson, E., Kettaneh-Wold, N., Wikstrom, C. & Wold, S., 2000) με έναν παραγοντικό σχεδιασμό δεύτερης τάξης με δύο παράγοντες, 3^2, ο οποίος υπό ορισμένες προϋποθέσεις μπορεί να αναπαρασταθεί και να καταγραφεί με τη βοήθεια πινάκων. Σκοπός είναι η εύρεση του βέλτιστου 3^2 σχεδιασμού. Το σύνολο τιμών για τους δύο παράγοντες των τριών επιπέδων δίνεται από τον ακόλουθο πίνακα.

Αριθμός δοκιμής	1	2	3	4	5	6	7	8	9
x_1	-1	-1	-1	0	0	0	$+1$	$+1$	$+1$
x_2	-1	0	$+1$	-1	0	$+1$	-1	0	$+1$

Ο σχεδιασμός περιέχει $3^2 = 9$ θεραπείες, οι οποίες μπορούν να αναπαρασταθούν με τα παρακάτω 9 σημεία.



Για την απλοποίηση της εφαρμογής θεωρούμε ένα σχεδιασμό με 3 μόνο δοκιμές. Υπάρχουν 84 πιθανοί συνδυασμοί. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα επιλέγουμε να εξετάσουμε 4 πιθανούς πίνακες ($\xi_{3A}, \xi_{3B}, \xi_{3C}, \xi_{3D}$) και στη συνέχεια δημιουργούμε τους αντίστοιχους πίνακες πληροφορίας και επιλέγουμε το βέλτιστο με το κριτήριο D-efficiency.

$$\xi_{3A} = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 0 \\ +1 & +1 \end{bmatrix}, \xi_{3B} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \\ 0 & +1 \end{bmatrix}, \xi_{3C} = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ +1 & 0 \\ 0 & +1 \end{bmatrix}, \xi_{3D} = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix}$$

$$(X_A{}'X_A) = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}, (X_B{}'X_B) = \begin{bmatrix} 3 & -1 & -2 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix},$$

$$(X_C{}'X_C) = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}, (X_D{}'X_D) = \begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & 3 \end{bmatrix}$$

$$|X_A{}'X_A| = 0,\ |X_B{}'X_B| = 4,\ |X_C{}'X_C| = 9,\ |X_D{}'X_D| = 16$$

Επομένως, ο τέταρτος πίνακας φαίνεται πως έχει τη μεγαλύτερη ορίζουσα και κατά συνέπεια θα έχει και τη μεγαλύτερη τιμή στη D-efficiency. Οπότε ο σχεδιασμός D θεωρείται ο αποτελεσματικότερος και αποτελεί το βέλτιστο σχεδιασμό για τη συγκεκριμένη εφαρμογή.

4.2 Σύγκριση 3^k παραγοντικών σχεδιασμών, Κεντρικών Σύνθετων Σχεδιασμών και Box- Behnken σχεδιασμών

Θέλοντας να συγκρίνουμε τους διαφορετικούς παραγοντικούς σχεδιασμούς δεύτερης τάξης δημιουργήσαμε στη γλώσσα προγραμματισμού Matlab κατάλληλες συναρτήσεις ώστε να μπορέσουμε τελικά να βρούμε τις επιθυμητές ορίζουσες και συνεπώς τις τιμές της D-efficiency. Η σύγκριση πραγματοποιείται μεταξύ πλήρων παραγοντικών σχεδιασμών, 3^k ορθογώνιων σχεδιασμών, κεντρικών σύνθετων σχεδιασμών και σχεδιασμών Box-Behnken για 3, 4 και 5 παράγοντες, αντίστοιχα. Εφαρμόζοντας τις κατάλληλες εντολές και τους απαραίτητους αλγορίθμους δημιουργούμε τους πίνακες πληροφορίας, τους οποίους κανονικοποιούμε διαιρώντας το κάθε στοιχείο της στήλης με την ευκλείδεια νόρμα της στήλης, και στη συνέχεια τις απαιτούμενες για τη σύγκριση ορίζουσες $|(W'W)|$ για καθέναν από τους υπό εξέταση σχεδιασμούς. Η σύγκριση της αποτελεσματικότητας με τη χρήση του κριτηρίου της D-efficiency ισοδύναμα μπορεί να αναχθεί, απλούστερα, σ' ένα πρόβλημα μεγιστοποίησης της ορίζουσας $|(W'W)|$. Επομένως, αποτελεσματικότερος σχεδιασμός θεωρείται εκείνος που έχει τη μεγαλύτερη τιμή στην ορίζουσα $|(W'W)|$.

Το πρακτικό μέρος της εφαρμογής θα διεξαχθεί σε τρία βήματα αλλάζοντας κάθε φορά τον αριθμό των παραγόντων.

4.2.1. Τρεις παράγοντες ($k = 3$)

Στην περίπτωση που μελετάμε $k = 3$ στο μοντέλο 2ης τάξης:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{3} \beta_i x_i + \sum_{\substack{i=1 \\ i<j}}^{2} \sum_{j=1}^{3} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{3} \beta_{ii} x_i^2 + \varepsilon_i$$

υπάρχουν $p = \frac{(3+1)(3+2)}{2} = 10$ παράμετροι προς εκτίμηση. Μελετάμε και συγκρίνουμε τους ακόλουθους σχεδιασμούς:

1) Ο πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός 3^3, με $3^3 = 27$ εκτελέσεις.
2) Ένας εκ των 4 ορθογώνιων σχηματισμών με 3 επίπεδα και 18 εκτελέσεις.
3) Ένας κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός

   α) περιστρέψιμος με $\alpha = 1{,}681$ και 17 εκτελέσεις, ($n_f = 8, n_a = 6, n_c = 3$)

   β) σφαιρικός με α= 1,732 και 17 εκτελέσεις ($n_f = 8, n_a = 6, n_c = 3$)

   γ) κυβοειδής με $\alpha = 1$ και 15 εκτελέσεις. ($n_f = 8, n_a = 6, n_c = 1$)
4) Ένας Box-Behnken σχεδιασμός με 13 εκτελέσεις.

Ο πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός 3^3, με $3^3 = 27$ εκτελέσεις, έχει τη μεγίστη ορίζουσα και εξαιρείται από τη σύγκριση. Όπως είναι φυσικό πρόκειται για την πλέον αντιοικονομική επιλογή σε κόστος και χρόνο αφού οι δοκιμές είναι περισσότερες από όλους τους επομένους σχεδιασμούς.

Παρακάτω θα περιγράψουμε αναλυτικά τη μεθοδολογία εργασίας.

Δίνουμε στο πρόγραμμα το αρχείο με τους 4 ορθογώνιους σχεδιασμούς 18 εκτελέσεων. Ακολούθως αφού δημιουργηθεί ο πινάκας πληροφορίας X, κανονικοποιείται (W) και εν συνεχεία δίνονται οι τιμές των οριζουσών του πίνακα W'W. Μεγαλύτερη είναι η ορίζουσα του σχεδιασμού 1 με :

$$|(W'W)|_2 = 0{,}0234375$$

Οπότε από τους τέσσερεις σχεδιασμούς για την σύγκριση που θα ακολουθήσει κρατάμε αυτόν.

Στη συνέχεια, δημιουργούμε τρεις σύνθετους κεντρικούς σχεδιασμούς ως εξής, με έναν 2^3 παραγοντικό σχεδιασμό, 6 αξονικά σημεία με τρία διαφορετικά α) και τα κεντρικά σημεία που απαιτούνται ανά περίπτωση. . Εχει επιλεχθεί για το α η τιμή 1,6818 η οποία δίνει στο σχεδιασμό την ιδιότητα της περιστρεψιμότητας, ακολούθως εχει γίνει έλεγχος και για τον αντίστοιχο σφαιρικό σχεδιασμό με $\alpha = 1{,}732$ αλλα και για τον κυβοειδη με $\alpha = 1$. Σε όλες τις περιπτώσεις επιλέχθηκαν τα ελάχιστα κεντρικά σημεία που προτείνονται στη βιβλιογραφία όπως φαίνεται και στον πίνακα (σελ 23).

Ο σχεδιασμός εχει τη μορφή (παραλείπονται δυο κεντρικά σημεία στην περίπτωση της κυβοειδούς μορφής):

-1	-1	-1
-1	1	-1
1	-1	1
1	1	-1

-1	-1	1
1	-1	-1
1	1	1
-1	1	1
α	0	0
-α	0	0
0	α	0
0	-α	0
0	0	α
0	0	-α
0	0	0
0	0	0
0	0	0

Παρακάτω δίνεται ο πίνακας *X* του κεντρικού σύνθετου σχεδιασμού σχεδιασμού με σφαιρική μορφή:

1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	1,732	0	0	2,9998	0	0	0	0	0
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	1
1	0	0	-1,732	0	0	2,9998	0	0	0
1	0	-1,732	0	0	2,9998	0	0	0	0
1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	1,732	0	0	2,9998	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	1,732	0	0	2,9998	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
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	-1,732	0	0	2,9998	0	0	0	0	0
1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1

.

Για διευκόλυνση των πράξεων, χρησιμοποιούμε τους κανονικοποιημένους πίνακες *W*, οι οποίοι προκύπτουν διαιρώντας τα στοιχεία κάθε στήλης με την ευκλείδεια νόρμα της:

0,2236	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,2236	0,4629	0	0	0,5883	0	0	0	0	0
0,2236	0,2673	0,2673	0,2673	0,1961	0,1961	0,1961	0,3536	0,3536	0,3536
0,2236	-0,2673	0,2673	0,2673	0,1961	0,1961	0,1961	-0,3536	-0,3536	0,3536

0,2236	0	0	-0,4629	0	0	0,5883	0	0	0
0,2236	0	-0,4629	0	0	0,5883	0	0	0	0
0,2236	0,2673	0,2673	-0,2673	0,1961	0,1961	0,1961	0,3536	-0,3536	-0,3536
0,2236	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,2236	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,2236	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,2236	0	0	0,4629	0	0	0,5883	0	0	0
0,2236	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,2236	0	0,4629	0	0	0,5883	0	0	0	0
0,2236	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,2236	0,2673	-0,2673	0,2673	0,1961	0,1961	0,1961	-0,3536	0,3536	-0,3536
0,2236	-0,2673	0,2673	-0,2673	0,1961	0,1961	0,1961	-0,3536	0,3536	-0,3536
0,2236	-0,2673	-0,2673	-0,2673	0,1961	0,1961	0,1961	0,3536	0,3536	0,3536
0,2236	0,2673	-0,2673	-0,2673	0,1961	0,1961	0,1961	-0,3536	-0,3536	0,3536
0,2236	-0,4629	0	0	0,5883	0	0	0	0	0
0,2236	-0,2673	-0,2673	0,2673	0,1961	0,1961	0,1961	0,3536	-0,3536	-0,3536

Έτσι, ο ζητούμενος πίνακας πληροφορίας είναι ο $W'W$:

1	0	0	0	0,614	0,614	0,614	0	0	0
0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
0,614	0	0	0	1	0,3077	0,3077	0	0	0
0,614	0	0	0	0,3077	1	0,3077	0	0	0
0,614	0	0	0	0,3077	0,3077	1	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	1

.

Η ορίζουσα του πίνακα πληροφορίας είναι:

$$|W'W|_{3\beta} = 0{,}136624$$

Αντίστοιχα όταν ο κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός είναι :

α) περιστρέψιμος με $\alpha = 1{,}681$ έχουμε:

$$|(W'W)|_{3\alpha} = 0{,}13123 \text{ και}$$

γ) κυβοειδής με $\alpha = 1$ έχουμε:

$$|(W'W)|_{3\gamma} = 0{,}023999.$$

Τέλος, για το σχεδιασμό Box – Behnken ο οποίος είναι:

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

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

η τιμή της ορίζουσας του κανονικοποιημένου πίνακα πληροφορίας $(W'W)$ είναι:

$$|(W'W)|_4 = 0{,}038468$$

Στη συνέχεια, το αρχικό πρόβλημα ανάγεται σε σύγκριση ανάμεσα στον βέλτιστο ορθογώνιο σχηματισμό 18 εκτελέσεων, στο κεντρικό σύνθετο σχεδιασμό και στον Box-Behnken σχεδιασμό χρησιμοποιώντας το κριτήριο της D-efficiency.

Έτσι, έχουμε

$$D_2 - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_2} = \sqrt[10]{0{,}0234375} = 0{,}6870544$$

$$D_{3\alpha} - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_{3\alpha}} = \sqrt[10]{0{,}131231} = 0{,}8195$$

$$D_{3\beta} - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_{3\beta}} = \sqrt[10]{0{,}136624} = 0{,}8162$$

$$D_{3\gamma} - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_{3\gamma}} = \sqrt[10]{0{,}023999} = 0{,}6886$$

$$D_4 - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_5} = \sqrt[10]{0{,}038468} = 0{,}7219.$$

Όπως φαίνεται από τις παραπάνω τιμές τη βέλτιστη D-efficiency εχει ο σφαιρικός κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός με 81,95%, χωρίς όμως ουσιαστική διαφορά από τον περιστρέψιμο ο οποίος εχει 81,62%. Οι δυο αυτοί σχεδιασμοί έχουν 17 εκτελέσεις ο καθένας, δηλαδή 10 λιγότερες από τον πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό 3^3. Είναι φανερό, ότι το όφελος σε χρόνο και χρήμα είναι μεγάλο κατά την περάτωση ενός τέτοιου πειράματος. Ωστόσο, οι σχεδιασμοί αυτοί απαιτούν πέντε επίπεδα ανά παράγοντα $(\pm 1, \pm\alpha, 0)$, έναντι των τριών του πλήρους παραγοντικού. Μεγάλη προσοχή θα πρέπει να δοθεί στην περίπτωση που αποφασιστεί η εκτέλεση ενός σύνθετου κεντρικού σχεδιασμού σχετικά με την ύπαρξη του συγκεκριμένου απαιτούμενου επιπέδου.

Στους δυο συγκεκριμένους σχεδιασμούς όπως αναφέρθηκε ήδη έγινε χρήση του ελαχίστου πλήθους κεντρικών σημείων (3). Μετά από αύξηση των κεντρικών σημείων στο μέγιστο πλήθος (5), παρατηρήθηκε αύξηση της D-efficiency κατά 3% περίπου. Επομένως, όταν οι συνθήκες και οι πόροι το επιτρέπουν είναι προτιμότερο να επιλέγουμε περισσότερα κεντρικά σημεία για πιο ακριβείς εκτιμήσεις.

Στην περίπτωση της κυβοειδούς μορφής, η D-efficiency ελαττώνεται σημαντικά, αυτό βέβαια είναι μερικώς αποτέλεσμα του μειωμένου πλήθους επαναλήψεων αλλά και της χρήσης λιγότερων επιπέδων για τους παράγοντες, σχετικά με την περίπτωση του σφαιρικού και του περιστρέψιμου. Ωστόσο, για καλύτερη σύγκριση αυξήσαμε τα κεντρικά σημεία ώστε το σύνολο των επαναλήψεων στις τρεις περιπτώσεις να είναι ίδιο. Φυσικά, παρατηρήθηκε αύξηση του ποσοστού (71,18%) η οποία όμως δεν είναι ικανή να μας οδηγήσει σε επιλογή του συγκεκριμένου σχεδιασμού. Βεβαίως, υπό συνθήκες, ο συγκεκριμένος ορθογώνιος σχεδιασμός θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί αφού μπορεί να μας δώσει όπως φαίνεται ικανοποιητικές εκτιμήσεις με περιορισμένο αριθμό επαναλήψεων και χρήση τριών επιπέδων ανά παράγοντα.

Ο ορθογώνιος σχεδιασμός με 18 εκτελέσεις και D-efficiency=68,7%, δίνει και αυτός ασυσχέτιστες εκτιμήσεις για τις κύριες επιδράσεις με αρκετά ικανοποιητικό πλήθος εκτελέσεων, ωστόσο δεν είναι αποτελεσματικότερος από τους κεντρικούς σύνθετους σχεδιασμούς.

Ο σχεδιασμός Box-Behnken εχει D-efficiency=72,19% και 13 εκτελέσεις, δηλαδή τις λιγότερες από όλους όσους συγκριθήκαν. Αν και δεν εχει τη μεγαλύτερη αποτελεσματικότητα όπως φαίνεται, υπάρχουν περιπτώσεις όπου μπορεί να προτιμηθεί είτε λόγο πολύ περιορισμένου χρόνου ή ανάγκης χαμηλού κόστους, είτε λόγο της προς αποφυγή δοκιμών που συνδυάζουν τα ακραία επίπεδα των παραγόντων για λόγους παραδείγματος χάριν επικίνδυνων χημικών αντιδράσεων.

4.2.2 Τέσσερεις παράγοντες ($\boldsymbol{k = 4}$)

Στην περίπτωση που μελετάμε $k = 4$ παράγοντες υπάρχουν $p = \frac{(4+1)(4+2)}{2} = 15$ παράμετροι προς εκτίμηση στο μοντέλο 2ης τάξης:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{4} \beta_i x_i + \sum_{\substack{i=1 \\ i<j}}^{3} \sum_{j=1}^{4} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{4} \beta_{ii} x_i^2 + \varepsilon_i$$

Μελετάμε και συγκρίνουμε τους ακόλουθους σχεδιασμούς:

1) Ο πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός 3^4, με $3^4 = 81$ εκτελέσεις,
2) Ένας εκ των 12 ορθογώνιων σχηματισμών με 3 επίπεδα και 18 εκτελέσεις.
3) Ένας εκ των 712 ορθογώνιων σχηματισμών με 3 επίπεδα και 27 εκτελέσεις.
4) Ένας εκ των 221.510 ορθογώνιων σχηματισμών με 3 επίπεδα και 36 εκτελέσεις.
5) Ένας κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός:

   α) σφαιρικός και περιστρέψιμος με $\alpha = 2$ και 27 εκτελέσεις, $(n_f = 16, n_a = 8, n_c = 3)$

   β) κυβοειδής με $\alpha = 1$ και 25 εκτελέσεις, $(n_f = 16, n_a = 8, n_c = 1)$
6) Ένας Box-Behnken σχεδιασμός με 27 εκτελέσεις.

Και σε αυτήν την περίπτωση ο πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός 3^4 με 81 εκτελέσεις, εχει τη μεγίστη ορίζουσα και εξαιρείται από τη σύγκριση για λόγους οικονομίας χρόνου και χρήματος, αν και μπορεί να δώσει τις βέλτιστες εκτιμήσεις ανάμεσα στους υπό σύγκριση σχεδιασμούς.

Η μέγιστη, λοιπόν, τιμή της ορίζουσας του κανονικοποιημένου πίνακα $(W'W)$ για τους υπόλοιπους σχεδιασμούς είναι:

$$|(W'W)|_2 = 0{,}000969$$

$$|(W'W)|_3 = 0{,}005803$$

$$|(W'W)|_4 = 0{,}008305$$

$$|(W'W)|_{5\alpha} = 0{,}065843$$

$$|(W'W)|_{5\beta} = 0{,}001079$$

$$|(W'W)|_6 = 0{,}001079$$

Και οι αντίστοιχες τιμές της D-efficiency είναι:

$$D_2 - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_2} = \sqrt[15]{0{,}000969} = 0{,}62963$$

$$D_3 - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_3} = \sqrt[15]{0{,}005803} = 0{,}70943$$

$$D_4 - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_4} = \sqrt[15]{0{,}008305} = 0{,}72658$$

$$D_{5\alpha} - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_{5\alpha}} = \sqrt[15]{0{,}65843} = 0{,}83413$$

$$D_{5\beta} - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_{5\beta}} = \sqrt[15]{0{,}01079} = 0{,}73938$$

$$D_6 - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_6} = \sqrt[15]{0{,}011328} = 0{,}74178$$

Παρατηρούμε ότι, στους ορθογώνιους σχεδιασμούς με 18, 27 και 36 εκτελέσεις η D-efficiency αυξάνεται όσο αυξάνεται και το πλήθος των επαναλήψεων. Το ποσοστό 72,65% είναι πολύ ικανοποιητικό, αφού ο σχεδιασμός αυτός εχει λιγότερες από τις μισές επαναλήψεις που απαιτούνται στον πλήρη σχεδιασμό 3^4.

Ωστόσο, όπως και στην περίπτωση των τριών παραγόντων οι κεντρικοί σύνθετοι σχεδιασμοί φαίνεται να είναι D-αποτελεσματικότεροι. Το μεγαλυτερο ποσοστό επιτυγχάνεται με τον σφαιρικό και ταυτόχρονα περιστρέψιμο σχεδιασμό, 83,41%, ο οποίος απαιτεί 27 εκτελέσεις, δηλαδή το 1/3 του πλήρους σχεδιασμού. Ο κυβοειδής με 25 δοκιμές και ο Box-Behnken ακολουθούν με ποσοστά 73,73% και 74,17% αντίστοιχα, ωστόσο αυτή τη φορά ο Box-Behnken δεν εχει λιγότερες επαναλήψεις από τους κεντρικούς σύνθετους σχεδιασμούς όπως στην περίπτωση των τριών παραγόντων. Αξίζει να σημειωθεί, ότι στην περίπτωση αυτή ο Box-Behnken σχεδιασμός είναι περιστρεψιμος.

Μετά από κατάλληλη αύξηση των κεντρικών σημείων των σύνθετων κεντρικών σχεδιασμών κατά δυο, συνολικά δηλαδή πέντε, παρατηρείται αύξηση της τιμής της ορίζουσας και κατ' επέκταση της D-efficiency (85,89%) κατά 2,48%. Η χρήση κεντρικών σημείων συμβάλλει στην εκτίμηση του καθαρού σφάλματος καθώς στην καλύτερη εκτίμηση των δευτεροβάθμιων όρων του μοντέλου.

4.2.3 Πέντε παράγοντες ($\boldsymbol{k = 5}$)

Στην περίπτωση που μελετάμε $k = 5$ παράγοντες υπάρχουν $p = \frac{(5+1)(5+2)}{2} = 21$ παράμετροι προς εκτίμηση στο μοντέλο 2$^{\eta\varsigma}$ τάξης:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{5} \beta_i x_i + \sum_{\substack{i=1 \\ i<j}}^{4} \sum_{j=1}^{5} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{5} \beta_{ii} x_i^2 + \varepsilon_i$$

Μελετάμε και συγκρίνουμε τους ακόλουθους σχεδιασμούς:

1) Ο πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός 3^5, με $3^5 = 243$ εκτελέσεις,
2) Ένας κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός 3^{5-1}, με $3^{5-1} = 3^4 = 81$ δοκιμές,

3) Ένας εκ των 187.188 ορθογώνιων σχηματισμών με 3 επίπεδα και 27 εκτελέσεις.
4) Ένας κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός:
α) περιστρέψιμος με $\alpha = 2{,}378$ και 45 εκτελέσεις,($n_f = 32, n_a = 10, n_c = 3$)
β) σφαιρικός με $\alpha = 2{,}236$ και 45 εκτελέσεις, ($n_f = 32, n_a = 10, n_c = 3$)
γ) κυβοειδής με $\alpha = 1$ και 43 εκτελέσεις. ($n_f = 32, n_a = 10, n_c = 1$)
5) Ένας Box-Behnken σχεδιασμός με 46 εκτελέσεις.

Ο πλήρης σχεδιασμός και ο πρώτος κλασματικός σχεδιασμός απαιτούν πολύ χρόνο για τη διεξαγωγή τους και μεγάλο κόστος για τη διεκπεραίωσή τους και γι' αυτό το λόγο παραλείπονται αν και οι ορίζουσες τους είναι μεγάλες. Η μέγιστη, τιμή της $|W'W|$ για τους υπόλοιπους σχεδιασμούς είναι:

$$|(W'W)|_3 = 0$$
$$|(W'W)|_{4\alpha} = 0{,}023598$$
$$|(W'W)|_{4\beta} = 0{,}03196$$
$$|(W'W)|_{4\beta} = 0{,}0000097$$
$$|(W'W)|_5 = 0{,}0301$$

Παρατηρούμε ότι στον ορθογώνιο σχεδιασμό με 27 εκτελέσεις η τιμή της ορίζουσας είναι 0, δηλαδή κανένας από τους υπό εξέταση σχεδιασμούς δεν μπορεί να εκτιμηθεί, πρακτικά, δε θα είναι αποτελεσματικός. Επομένως, η αρχική ανάλυση ανάγεται σε σύγκριση ανάμεσα στο σύνθετο κεντρικό σχεδιασμό και τον Box-Behnken σχεδιασμό χρησιμοποιώντας το κριτήριο της D-efficiency. Έτσι, έχουμε

$$D_{4\alpha} - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_{4\alpha}} = \sqrt[21]{0{,}023598} = 0{,}8366$$
$$D_{4\beta} - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_{4\beta}} = \sqrt[21]{0{,}03196} = 0{,}84877$$
$$D_{4\gamma} - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_{4\gamma}} = \sqrt[21]{0{,}0000097} = 0{,}5771$$
$$D_5 - efficiency = \sqrt[p]{|(W'W)|_5} = \sqrt[21]{0{,}0301} = 0{,}8463$$

Επομένως, ο ζητούμενος βέλτιστος σχεδιασμός για 5 παράγοντες είναι και σε αυτήν την περίπτωση κεντρικός σύνθετος σχεδιασμός με την ιδιότητα της περιστρεψιμότητας. Η κυβοειδής μορφή φαίνεται να είναι η πλέον αναποτελεσματική.

4.3 Συμπεράσματα

Παρακάτω δίνεται ένας πίνακας με τα συγκεντρωτικά αποτελέσματα όλων των σχεδιασμών που ελέχθησαν :

k=3	**Σχεδιασμός**	**Εκτελέσεις**	**D-efficiency**
	• Ορθογώνιος σχεδιασμός με 18 εκτελέσεις	18	0,687054405
	Κεντρικοί Σύνθετοι		
	• CCD σφαιρικός (α=1,732)	17	0,819507061
	• CCD περιστρέψιμος (α=1,681)	17	0,816213256
	• CCD κυβοειδής (α=1)	15	0,688682924
	• Box Behnken	13	0,711782543
k=4	**Σχεδιασμός**	**Εκτελέσεις**	**D-efficiency**
	• Ορθογώνιος με 18 εκτελέσεις	18	0,629634116
	• Ορθογώνιος με 27 εκτελέσεις	27	0,709431015
	• Ορθογώνιος με 36 εκτελέσεις	36	0,726589821
	Κεντρικοί Σύνθετοι		
	• CCD σφαιρικός & περιστρέψιμος (α=2)	27	0,834130447
	κυβοειδής	25	0,739380677
	• Box Behnken	27	0,741783011
k=5	**Σχεδιασμός**	**Εκτελέσεις**	**D-efficiency**
	• Ορθογώνιος με 27 εκτελέσεις	27	0
	Κεντρικοί Σύνθετοι		
	• CCD σφαιρικός (α=2,236)	45	0,836600012
	• CCD περιστρέψιμος (α=2,378)	45	0,848772785
	• CCD κυβοειδής (α=1)	43	0,577131587
	• Box Behnken	42	0,846396927

Συγκρίνοντας τα παραπάνω αποτελέσματα μπορούμε να συμπεράνουμε ότι οι σύνθετοι κεντρικοί σχεδιασμοί είναι προτιμότεροι και αποδοτικότεροι συγκριτικά με τους υπόλοιπους. Οι σχεδιασμοί αυτοί και οι Box-Behnken σχεδιασμοί απαιτούν σχετικά μικρό αριθμό δοκιμών και δίνουν ικανοποιητικές τιμές για το κριτήριο της D-efficiency. Εντούτοις, παρατηρήσαμε ότι, όσο οι παράγοντες αυξήθηκαν, οι επαναλήψεις των Box-Behnken σχεδιασμών έχουν παρόμοιο πλήθος με αυτές των σύνθετων κεντρικών σχεδιασμών.

Όπως είναι φυσικό το κριτήριο αυτό δεν είναι ο μοναδικός παράγοντας που οδηγεί στην επιλογή ενός σχεδιασμού. Πολλοί είναι οι παράγοντες και οι συνθήκες που μπορούν να επηρεάσουν την επιλογή αυτή. Από τον πλέον προφανή, που είναι το υψηλό κόστος πραγματοποίησης των πειραμάτων, και άλλους λογικούς παράγοντες, όπως τον χρόνο που απαιτείται για να ολοκληρωθεί ο σχεδιασμός, έως και παράγοντες που μπορεί να φανερωθούν μέσω βαθύτερης ανάλυσης. Πέραν αυτών όμως, η προσθήκη νέων συγκεκριμένων επιπέδων των παραγόντων μπορεί να μην είναι πάντοτε υλοποιήσιμη ή ασφαλής.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. Wu C. F. Jeff and Hamada Michael S., Experiments Planning, Analysis, and Optimization, Wiley Series in Probability and Statistics
2. Box George E. P., Hunter Stuart J. and Hunter William G., Statistics for experimenters: Design, Innovation, and Discovery, Wiley Series in Probability and Statistics, second edition
3. Box George E. P. and Draper Norman R., Response Surfaces, Mixtures, and Ridge Analyses, Wiley Series in Probability and Statistics, second edition
4. Montgomery D. C. - Design and Analysis of Experiments 5th Edition, John Wiley and Sons, New York (2000)
5. Ευαγγελάρας, Χ., Ορθογώνιοι σχηματισμοί και προβολικές ιδιότητες, Διδακτορική Διατριβή, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Αθήνα (2004)
6. Χρήστος Κουκουβίνος - Γραμμικά μοντέλα και Σχεδιασμοί, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Αθήνα (2003)
7. Angelopoulos P., Evangelaras H., Koukouvinos C., Small, balanced, efficient and rotatable central composite designs, Journal of Statistical Planning and inference (2009), 139, 2010-2013
8. Draper Norman R. , Center Points in Second-Order Response Surface Designs (May, 1982), Technometrics, Vol 24, No 2, 127-133
9. Deniz Bas, Ismail H. Boyacyi, Modeling and optimization I: Usability of response surface methodology, Journal of Food Engineering 78 (2007) 836-845
10. Norman R. Draper, Dennis K. J. Lin, Small Response-Surface Designs, Technometrics, Vol 32, No 2 (May 1990), pp. 187-194
11. Lucas, J.M., 1976. Which response surface design is best. Technometrics 18, 411– 417
12. Draper, N. R., “Center points in second-order response surface designs” (1982) – Technometrics, vol. 24, no. 2, pp. 127-133
13. Box, G. E. P. and Behnken, D., “New three level designs for study of quantitative variables” (1960) - Technometrics, vol. 2, no. 4, pp. 455-475
14. G. E. P. Box and N. R. Draper in "Empirical Model Building and Response Surfaces," John Wiley and Sons, New York, 1987