D.E.Ü.İ.İ.B.F.Dergisi
Cilt:17 Sayı:2, Yıl:2002, ss:1-17

CEVAP YÜZEYİ TASARIMLARINDA DÖNDÜRÜLEBİLİRLİĞİN ÖLÇÜLMESİ VE ONARILMASI ÜZERİNE BİR İNCELEME

Cenk ÖZLER(*)

ÖZET

Khuri (1988) ve Draper ve Pukelsheim (1990), döndürülebilir olmayan cevap yüzeyi tasarımlarının ne kadar döndürülebilir oldukları hakkında fikir veren birer ölçü geliştirmişlerdir. Bu iki ölçü döndürülebilir olmayan tasarımların döndürülebilir hale getirilmesi amacı ile de kullanılabilmektedir. Bu çalışmada öncelikle, bu iki döndürülebilirlik ölçüsü gözden geçirilmiştir. Ayrıca, bu ölçüler kullanılarak onarılan tasarımların D-etkinlikleri incelenmiştir.

Anahtar kelimeler: *Cevap Yüzeyi Tasarımları, Döndürülebilirlik.*

1. Giriş

Küresel bir deney bölgesi R üzerinde, N adet denemeden oluşan bir tasarım kullanılarak, k adet kodlanmış girdi değişkenli ($x_1, x_2, \ldots, x_k$) ve d'inci dereceden bir cevap yüzeyi modelinin uyumu yapılmak istensin. Bu model matris notasyonunda,

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \qquad (1)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $\mathbf{y}$, N gözlemden oluşan vektör; $\boldsymbol{\beta}$, $p \times 1$ boyutlu parametreler vektörü; $\mathbf{X}$, $N \times p$ boyutlu girdi değişkenlerinin seviye kombinasyonlarından oluşan matris ve ε, $N \times 1$ boyutlu ortalaması sıfır ve sabit varyans σ^2'ye sahip, birbirlerinden bağımsız normal dağılış gösteren hataların oluşturduğu vektördür. Burada girdi değişkenleri aşağıdaki gibi kodlanmıştır:

$$x_{ui} = \frac{\xi_{ui} - \bar{\xi}_i}{S_i}\ , \quad S_i = \left\{ \sum_{u=1}^{N} \frac{\left(\xi_{ui} - \bar{\xi}_i\right)^2}{N} \right\}^{1/2} \qquad u = 1, 2, \ldots, N;\ i = 1, 2, \ldots, k \qquad (2)$$

şeklindedir. Paydadaki S_i, ξ_i ekseninin yönündeki tasarım noktalarının yayılışının bir ölçüsüdür. Model (1)'nin beklenen değeri

$$E(\mathbf{y}) = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \qquad (3)$$

(*) Yrd. Doç. Dr. D.E.Ü. İ.İ.B.F. Ekonometri Bölümü. İzmir şeklinde yazılabilir. **X** matrisinin satır vektörlerinin $\mathbf{z}_u$'lardan oluştuğu varsayılsın (u = 1, 2, …, N). $\boldsymbol{\beta}$'nın en küçük kareler tahminleyicisi

$$\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y} \tag{4}$$

şeklindedir ve burada **b**, $\boldsymbol{\beta}$'nın en iyi doğrusal sapmasız tahminleyicisidir. **b**'nin varyans-kovaryans matrisi

$$\mathrm{Var}(\mathbf{b}) = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\sigma^2 \tag{5}$$

olarak yazılabilir. Kestirim değerleri,

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\mathbf{b} \tag{6}$$

eşitliğinden hesaplanabilir. Bir $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_k)'$ noktasındaki kestirilmiş cevap

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{z}'\mathbf{b} \tag{7}$$

nin varyansı

$$\mathrm{Var}\left[\hat{y}(\mathbf{x})\right] = \mathbf{z}'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{z}\sigma^2 \tag{8}$$

şeklindedir.

Döndürülebilir bir tasarım ile, **x** noktasının yerleşimine bağlı olduğu bilinen $\hat{y}(\mathbf{x})$ 'in varyansı, yalnızca **x** noktasından tasarıma olan uzaklığının bir fonksiyonu olur. Böylece, döndürülebilir bir tasarım ile, kestirim varyansı $\mathrm{Var}\left[\hat{y}(\mathbf{x})\right]$, tasarım merkezinden eşit uzaklıkta olan tüm **x** noktalarında eşit olur. Bundan dolayı, girdi değişkenleri uzayında, sabit kestirim varyansının yüzeyleri, eş merkezli hiper küreler (iki boyutlu Öklid uzayında çemberler, üç boyutlu Öklid uzayında küreler) biçimini alır. İlk olarak Box ve Hunter (1957) tarafından tanıtılan döndürülebilirliğin çekici taraflarından birisi, $\mathrm{Var}\left[\hat{y}(\mathbf{x})\right]$'in büyüklüğü ile ölçülen kestirim kalitesinin, girdi değişkenleri uzayındaki koordinat eksenlerinin döndürülmesi ile değişmemesidir (invariant olmasıdır).

Eşitlik (1) ile verilen modelin uyumu yapılmak istendiğinde, bu model r'inci dereceden k adet girdi değişkeninin bir fonksiyonu ise, $\left[1^{\delta_1}2^{\delta_2}\ldots k^{\delta_k}\right]$ ile gösterilen, $\delta\,(\delta = 0, 1, \ldots, 2d)$'ıncı dereceden bir *tasarım momenti*

$$\left[1^{\delta_1}2^{\delta_2}\ldots k^{\delta_k}\right]=\frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N}x_{u1}^{\delta_1}x_{u2}^{\delta_2}\ldots x_{uk}^{\delta_k} \tag{9}$$

olmaktadır (Khuri ve Cornell, 1987: s. 54). Burada N gözlem sayısı ve δ_1, δ_2, …, δ_k'lar $\sum_{i=1}^{k}\delta_i=\delta$ koşulunu sağlayan negatif olmayan tamsayılardır. Bu tasarım momentleri, *moment matrisi* olarak adlandırılan $N^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}$ matrisinin elemanlarıdır.

Döndürülebilir bir tasarım için moment matrisinin genel formunu tanımlamak için, eşitlik (9) ile gösterilen tasarım momentinin ele alınması gerekmektedir. Bir tasarımın döndürülebilir olabilmesi için gerek ve yeter koşul, δ'ıncı dereceden momentin formunun aşağıdaki gibi olmasıdır (Khuri ve Cornell, 1987: s.60):

$$\left[1^{\delta_1}2^{\delta_2}\ldots k^{\delta_k}\right]=0 \qquad \text{herhangi bir } \delta_i \text{ tek sayı ise}$$

$$=\frac{\lambda_\delta\prod_{i=1}^{k}(\delta_i)!}{2^{\delta/2}\prod_{i=1}^{k}\left(\frac{\delta_i}{2}\right)!} \qquad \text{tüm } \delta_i\text{'ler çift sayı ise} \tag{10}$$

Burada λ_δ, δ'nın bir fonksiyonu olan bir değerdir. Eşitlik (10)'un türetilmesi için bkz. Myers ve Montgomery (1995: Ek 5). En az bir δ_i tek sayı ise, δ'ıncı dereceden tasarım momentine tek, tüm δ_i'ler çift sayı ise, δ'ıncı dereceden tasarım momentine çifttir denir. Eşitlik (10)'daki formülü canlandırmak için, k değişkenli ikinci derece (polinomiyal) bir model ele alınsın. Bu modelin uyumu yapıldığında, ikinci derece döndürülebilir bir tasarım için, momentler $[ii]=\lambda_2$, $[iiii]=3\lambda_4$ ve $[iijj]=\lambda_4$'lerden başka, moment matrisinin diğer tüm elemanları sıfırdır. Eşitlik (2)'deki kodlama dönüşümü kullanıldığında $\lambda_2=1$ olacaktır.

Belli bir deney bölgesinde ortak merkezli hiperkürelerin üzerinde $\hat{y}(\mathbf{x})$'in optimizasyonuna çalışılıyorsa, tasarımın döndürülebilir olması tercih edilir. Aksi halde, optimumun zayıf tahminleri ile karşılaşılabilir. Bir cevap yüzeyi tasarımının döndürülebilirliğinin üç farklı ölçüsü Khuri (1988), Draper ve Guttman (1988) ve Draper ve Pukelsheim (1990) tarafından verilmiştir. Khuri (1988) ve Draper ve Pukelsheim (1990), döndürülebilir olmayan bir tasarımın döndürülebilir (veya yaklaşık döndürülebilir) hale getirilmesi ile ilgili birer prosedür vermişlerdir. Bu çalışmada öncelikle 2. bölümde Khuri (1988) ve 3.

bölümde Draper ve Pukelsheim (1990) tarafından önerilen ölçüler incelenmiştir. Ayrıca, bu iki çalışmada önerilen yaklaşımlara göre döndürülebilirliği onarılan iki tasarımın *D*-etkinlikleri 4. bölümde incelenmiştir.

2. Khuri'nin Döndürülebilirlik Ölçüsü

Khuri (1988), verilen bir cevap yüzeyi tasarımda, döndürülebilirliğinin yüzde olarak açıklanmasına imkan veren bir ölçü vermiştir. Yüzde olarak açıklanabilen bu ölçü, yalnız ve yalnız tasarım döndürülebilir ise 100 değerini almaktadır. Ayrıca, küresel deney bölgesindeki yüzde döndürülebilirliği maksimize eden deneylerin eklenmesi ile, döndürülebilir olmayan bir tasarım onarılarak döndürülebilir ya da yaklaşık döndürülebilir hale getirilebilmektedir.

2.1 Döndürülebilirliğin Ölçüsü

Khuri (1988), $\mathbf{X'X}$ matrisinin elemanlarını tasarım momentleri olarak tanımlamaktadır. Bu tanım eşitlik (10)'da verilen tanımdan farklıdır. Böylece (1) modeli için bir tasarım momenti

$$\left[1^{\delta_1}2^{\delta_2}\ldots k^{\delta_k}\right] = \sum_{u=1}^{N} x_{u1}^{\delta_1}x_{u2}^{\delta_2}\ldots x_{uk}^{\delta_k} \qquad \textbf{(11)}$$

şeklindedir. Burada δ_1, $\delta_2,\ldots,\delta_k$, negatif olmayan tamsayılar ve x_{uj} u'uncu denemede kullanılan j'inci girdi değişkeninin seviyesidir (j = 1, 2,…, k; u= 1, 2,…, N). $\sum_{j=1}^{k}\delta_j$, tasarım momentinin derecesidir ve δ (δ = 0, 1,…, 2d) şeklinde gösterilir. Örneğin ($1^2 3 5^3$), δ = 6'ıncı dereceden bir tasarım momentidir ve $\sum_{u=1}^{N} x_{u1}^2 x_{u3} x_{u5}^3$ 'e eşittir.

Model (1)'in uyumunu yapmak için kullanılan bir tasarımın döndürülebilir olması için gerek ve yeter koşul, δ'ıncı dereceden bir tasarım momentinin

$$\left[1^{\delta_1}2^{\delta_2}\ldots k^{\delta_k}\right] = 0 \qquad \text{herhangi bir } \delta_j \text{ tek ise} \qquad \textbf{(12)}$$

$$= \frac{\theta_\delta \prod_{j=1}^{k}\delta_j\,!}{2^{\delta/2}\prod_{j=1}^{k}(\delta_j/2)!} \qquad \text{tüm } \delta_j\text{'ler çift ise}$$

formunda olmasıdır. Burada θ_δ, d, δ ve N'e bağlı bir değerdir. (bkz. Box ve Hunter, 1957). En az bir δ_j tek ise, tasarım momentine tek, tüm δ_j'ler çift ise tasarım momentine çifttir denir. δ = 0'ıncı dereceden bir tasarım momenti N'e eşittir. Eşitlik (12)'deki koşula uymayan momentlere sahip olan bir tasarım, döndürülebilir olmayan tasarım olarak adlandırılır.

(1) modeli tekrar ele alınsın (d'inci dereceden) ve girdi değişkenleri şu şekilde kodlanmış olsun:

$$\sum_{u=1}^{N} z_{uj} = 0 \ , \ j = 1, 2, \ldots, k$$

$$\sum_{u=1}^{N} z_{uj}^2 = a \ , \ j = 1, 2, \ldots, k \qquad \textbf{(13)}$$

Burada z_{uj}, ξ_{uj}'nin kodlanmış değeridir; a ise pozitif bir sabittir. Kodlama $z_{uj} = (\xi_{uj} - \bar{\xi}_j) / S_j$ şeklinde gerçekleştirilebilir. Burada $\bar{\xi}_j = \sum_{u=1}^{N} \xi_{uj} / N$ ve $S_j = \left[\sum_{u=1}^{N} (\xi_{uj} - \bar{\xi}_j)^2 / a\right]^{1/2}$'dir. Buradan,

$$[j] = 0 \ , \ j = 1, 2, \ldots, k$$

$$[j^2] = a \ , \ j = 1, 2, \ldots, k \qquad \textbf{(14)}$$

yazılabilir.

Kodlanmış değişkenlerin terimleri ile, eşitlik (3)

$$E(\mathbf{y}) = \mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma} \qquad \textbf{(15)}$$

şeklinde yazılabilir.

Khuri (1988), verilen bir cevap yüzeyi tasarımı için döndürülebilirlik ölçüsünün aşağıdaki gibi olması gerektiğini vurgulamıştır:

1. Tasarımda kullanılan girdi değişkenlerinin seviyelerinin bir fonksiyonu,

2. Formül (13)'deki ölçek parametresi a'nın değerine karşı değişmeyen,

3. Tasarım merkezine nokta eklenmesine karşı değişmeyen.

Önerilen döndürülebilirlik ölçüsünün üç ana adımının detayları aşağıdaki gibidir (Khuri, 1988: ss. 97-98):

Adım 1: Tüm Tasarım Momentlerinin Ölçekten Bağımsız Değerlere İndirgenmesi. $\mathrm{v}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$ elemanları, $\mathbf{Z}'\mathbf{Z}$'nin köşegen ve köşegen elemanlarının sağındaki elemanlardan oluşan bir vektördür. Burada bu vektörün boyutu $p^* = p(p + 1) / 2$'dir. (p, eşitlik (15)'deki parametre sayısı) Bu vektörün elemanları, önce $\mathbf{Z}'\mathbf{Z}$'nin köşegen ve köşegen elemanlarının sağındaki elemanlar için birinci; daha sonra ikinci vs. satırlarının yazılmasıyla elde edilir. (i, j)'inci pozisyonda bulunan eleman, $\mathrm{v}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$ vektörünün l'inci elemanıdır. Burada $l = f(i, j)$

$$f(i, j) = (i - 1)[p - (i / 2)] + j \qquad j \geq i \tag{16}$$

şeklindedir. Örneğin, $p = 6$ olan

$$E(y) = \gamma_0 + \gamma_1 z_1 + \gamma_2 z_2 + \gamma_{12} z_1 z_2 + \gamma_{11} z_1^2 + \gamma_{22} z_2^2$$

modeli için, $\mathrm{v}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$ 21×1 boyutlu olur ve $\mathbf{Z}'\mathbf{Z}$'nin (3, 5)'inci elemanı (tasarım momenti $[1^2 2]$'ye eşittir), $\mathrm{v}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$'nin 14'üncü elemanına eşittir.

$\mathrm{v}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$, formül (13)'de kullanılan a'nın değerine bağlıdır. Bu bağımlılığı ortadan kaldırmak için her bir δ ($\delta = 0, 1, \ldots, 2d$)'inci dereceden tasarım momenti τ^{δ}'ya bölünür. Burada τ,

$$\tau = \left[\sum_{j=1}^{k} \left[j^2 \right] / k \right]^{1/2} \tag{17}$$

şeklindedir. τ^2, 2'inci dereceden tüm çift tasarım momentlerinin ortalamasıdır. (13)'deki kodlama ile $\tau = a^{1/2}$ olduğu görülebilir. $\mathrm{v}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$ vektörü, sol taraftan $p^* \times p^*$ boyutlu, köşegen elemanları $1 / \tau^{\delta}$'lardan oluşan bir köşegen matris $\mathbf{A}$ ile soldan çarpıldığında

$$\mathbf{u}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z}) = \mathbf{A}\mathrm{v}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z}) \tag{18}$$

şeklinde ölçekten bağımsız değerler elde edilir.

Adım 2: Döndürülebilir Bir Tasarım İçin $\mathbf{Z}'\mathbf{Z}$ matrisinin Kanonik Hale Getirilmesi. Eşitlik (15) için kullanılan tasarım döndürülebilir ise, δ ($\delta = 0, 1, \ldots, 2d$)'ıncı dereceden tasarım momentleri (12)'de tanımlanan özellikleri taşımalıdır. Buradan, $\mathrm{v}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$'nin tek tasarım momentlerine karşılık gelen tüm elemanları 0, çift tasarım momentlerine karşılık gelen tüm elemanları $\theta_{\delta} c(\delta_1, \delta_2, \ldots, \delta_k)$ şeklinde olmalıdır. Burada

$$c(\delta_1, \delta_2, \ldots, \delta_k) = \prod_{j=1}^{k} \delta_j ! \Bigg/ \left[2^{\delta/2} \prod_{j=1}^{k} (\delta_j \,/\, 2)! \right],$$

$$\sum_{j=1}^{k} \delta_j = \delta \ , \ \ \delta = 0, 2, \ldots, 2d \tag{19}$$

şeklindedir. $\mathbf{Z}_r$ tasarım döndürülebilir olduğu durumlardaki $\mathbf{Z}$ matrisini göstersin. Bu durumda

$$\mathrm{v}(\mathbf{Z}_r'\mathbf{Z}_r) = \theta_0 \omega_0 + \theta_2 \omega_2 + \ldots + \theta_{2d} \omega_{2d} \tag{20}$$

ile temsil edilebilir. Burada ω_δ (δ = 0, 2,…, 2d), elemanları $\mathrm{v}(\mathbf{Z}_r'\mathbf{Z}_r)$ 'nin elemanları ile birebir karşılık gelen, $p^* \times 1$ boyutlu bir vektördür: Bu vektörün diğer δ'dan olan tasarım momentleri ve δ'ıncı dereceden tek tasarım momentleri sıfırdır; buna karşın δ'ıncı dereceden çift tasarım momentleri formül (20)'den bulunduğu gibidir. (20)'den, ω_0'ın birinci elemanın 1 diğer elemanlarının 0 olduğu görülebilir. Ayrıca (12)'den $\theta_0 = \gamma$ ve $\theta_2 = a$ olduğu görülebilir.

(18)'deki köşegen matris **A**'nın elemanları 1 / τ^{δ}'ya eşit olduğu için, (18) ve (20)'den $\mathbf{u}(\mathbf{Z}_r'\mathbf{Z}_r)$ 'nin kanonik gösterimi aşağıdaki gibi elde edilebilir:

$$\mathbf{u}(\mathbf{Z}_r'\mathbf{Z}_r) = \sum_{m=0}^{d} \theta_{2m} \ \omega_{2m} / \ \tau^{2m}$$

$$= N\omega_0 + \omega_2 + \sum_{m=2}^{d} \kappa_{2m} \ \omega_{2m} \tag{21}$$

Burada $\kappa_{2m} = \theta_{2m} / \tau^{2m}$ veya

$$\kappa_{2m} = \theta_{2m} / \ \theta_2^m \ , \ \ m = 2, 3, \ldots, d \tag{22}$$

şeklindedir. θ_{2m}, δ = 2m'inci dereceden bir tasarım momenti olduğu için κ_4, κ_6,…, κ_{2d} parametreleri, deney yapan kişi tarafından döndürülebilir tasarımın sahip olması istenen ekstra özelliklerine bağlı olarak seçilebilir. Ayrıca ω_{2m}'lerin ikili olarak ortogonal oldukları görülebilir (m = 0, 1,…, d). Sonuçta, ω_4, ω_6,…, ω_{2d} vektörleri (d - 1) boyutlu bir Öklid uzayını tanımlar. m = 2, 3,…, d için $\kappa_{2m} \geq 0$ olmasından dolayı

$$\mathbf{\nu} = \sum_{m=2}^{d} \kappa_{2m}\, \omega_{2m} \tag{23}$$

bu öklid uzayında kapalı bir konveks koni K içerisinde bir vektörü göstermektedir. Öklid uzayının kapalı bir altseti S, S'deki herhangi iki vektör $\mathbf{x}_1$ ve $\mathbf{x}_2$ ve herhangi negatif olmayan iki skaler λ_1 ve λ_2 için $\lambda_1\mathbf{x}_1 + \lambda_2\mathbf{x}_2$ S'ye ait ise, kapalı bir konveks konidir. Khuri (1988), K konisini *döndürülebilirlik konisi* olarak adlandırmaktadır.

Adım 3: Döndürülebilirlik Ölçüsünün Türetilmesi. N noktalı bir tasarım olan **D**, (12) modelinin uyumunu yapmak için ele alındığında ve girdi değişkenleri (13)'deki gibi kodlandığında, (18)'e karşılık gelen vektör $\mathbf{u}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$ aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\mathbf{u}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z}) = N\omega_0 + \omega_2 + \mathbf{u}^*(\mathbf{Z}'\mathbf{Z}) \tag{24}$$

Tasarım **D**'nin döndürülebilirliğini ölçmek için, $\mathbf{u}^*(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$ vektörüne ν vektörü ile ne kadar yaklaşılabildiğini bulmak gerekmektedir. Bu da $\mathbf{u}^*(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$'ya en yakın (Öklid normu terimleri cinsinden) bir $\nu \in K$ vektörünün bulunmasına denktir. Bu amaçla (23)'deki $\kappa_4, \kappa_6, \ldots, \kappa_{2d}$ parametreleri

$$Q_N(\mathbf{D}) = \|\mathbf{u}^*(\mathbf{Z}'\mathbf{Z}) - \sum_{m=2}^{d} \kappa_{2m}\, \omega_{2m}\|^2 \tag{25}$$

eşitliğini minimum yapacak şekilde seçilebilir. Burada $\|\,.\,\|$ Öklid normunu diğer bir deyişle bir vektörün uzunluğunu göstermektedir. Khuri (1988: s. 103), $Q_N(\mathbf{D})$'nin minimum değerinin aşağıdaki formülden elde edilebileceğini göstermiştir:

$$\min[Q_N(\mathbf{D})] = \left\|\mathbf{u}^*(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})\right\|^2 - \sum_{m=2}^{d} \left[\mathbf{u}^{*\prime}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})\omega_{2m}\right]^2 \Big/ \left\|\omega_{2m}\right\|^2 \tag{26}$$

Khuri (1988: s. 103)'de, $\sum_{m=2}^{d} \kappa_{2m}\, \omega_{2m}$ vektörünün, $\mathbf{u}^*(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$ vektörünün döndürülebilirlik konisi k üzerine izdüşümü olduğu gösterilmiştir. Bu izdüşümün öklid normunun karesi (26)'nın sağ tarafındaki ikinci terimin mutlak değeri ile verilmiştir ve $\left\|\mathbf{u}^*(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})\right\|^2$'nin döndürülebilirliğe atfedilebilecek parçasını temsil etmektedir. Buradan, **D** tasarımı için döndürülebilirlik ölçüsü olarak Khuri (1988),

$$\Phi_N(\mathbf{D}) = 100\left\{\left\|\mathbf{u}^*(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})\right\|^2 - \min\left[Q_N(\mathbf{D})\right]\right\} \Big/ \left\|\mathbf{u}^*(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})\right\|^2$$

$$= 100\left\{\sum_{m=2}^{d}\left[\mathbf{u}^{*'}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})\boldsymbol{\omega}_{2m}\right]^2 \Big/ \left\|\boldsymbol{\omega}_{2m}\right\|^2\right\} \Big/ \left\|\mathbf{u}^*(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})\right\|^2 \qquad \textbf{(27)}$$

değerini kullanmıştır. Bu değer, döndürülebilirliğin $\left\|\mathbf{u}^*(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})\right\|^2$'nin büyüklüğüne olan yüzde katkısını temsil etmektedir. Diğer bir deyişle $\Phi_N(\mathbf{D})$, **D** tasarımında bulunan yüzde döndürülebilirliği temsil etmektedir. Bu durum regresyonda belirlilik katsayısı R^2'nin kullanımını andırmaktadır. **D** döndürülebilir ise, $\mathbf{u}^*(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$ döndürülebilirlik konisi K'ya ait olacaktır ve $\min[Q_N(\mathbf{D})] = 0$ ve $\Phi_N(\mathbf{D}) = 100$ değerini alacaktır. $\Phi_N(\mathbf{D})$'nin büyük değeri, **D** tasarımının yaklaşık döndürülebilir olduğunun bir göstergesidir. Döndürülebilirlik ölçüsü 1,2, ve 3 koşullarını sağlamaktadır. $\mathbf{u}^*(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$ vektörü ölçekten bağımsız olduğu ve elemanları 2 veya daha yüksek derecede tasarım momentlerine bağlı olduğu için, merkez noktalarının eklenmesinden etkilenmemektedir.

2.2 Döndürülebilirliğin Onarılması

Kısım 2.1'de açıklanan ölçü, döndürülebilir olmayan bir tasarımın döndürülebilirlik yüzdesini, uygun ekstra deney noktalarının eklenmesiyle artırmak amacı ile kullanılabilir. Döndürülebilir olmayan bir tasarıma eklenecek noktaların seçimi şu şekilde gerçekleştirilebilir: $\mathbf{D}^{(0)}$ verilen N_0 noktalı döndürülebilir olmayan bir tasarım olsun. Deney bölgesi R'deki herhangi bir $\mathbf{x}$ noktası için $\mathbf{D}^{(0)}_{\mathbf{x}}$ tasarımı, $\mathbf{D}^{(0)}$'a $\mathbf{x}$'in eklenmesiyle elde edilir. $\mathbf{D}^{(0)}_{\mathbf{x}}$'ın döndürülebilirlik yüzdesi $\Phi_{N_0+1}(\mathbf{D}^{(0)}_{\mathbf{x}})$ şeklindedir. Yeni bir tasarım noktası $\mathbf{x}_1$, $\mathbf{D}^{(0)}$ tasarımına $\mathbf{D}^{(0)}_{\mathbf{x}_1}$ tasarımını elde etme amacıyla eklensin. Bu yeni nokta, $\mathbf{D}^{(0)}_{\mathbf{x}}$ tasarımının döndürülebilirlik yüzdesini R'de maksimize edecek şekilde seçilir. Basitlik açısından $\mathbf{D}^{(0)}_{\mathbf{x}_1}$ $\mathbf{D}^{(1)}$ olarak yazılsın. Böylece

$$\Phi_{N_0+1}(\mathbf{D}^{(1)}) = \max_{\mathbf{x}\in R}\,[\Phi_{N_0+1}(\mathbf{D}^{(0)}_{\mathbf{x}})]$$

elde edilir. İkinci bir tasarım noktası $\mathbf{x}_2$, aynı süreç tekrar edilerek $\mathbf{D}^{(1)}$'e eklenir. Burada $\mathbf{D}^{(0)}$ yerine $\mathbf{D}^{(1)}$ konulur.$\mathbf{D}^{(1)}$'e $\mathbf{x}_2$'nin eklenmesiyle $\mathbf{D}^{(2)}$ elde edilir. Bu sürece devam edilerek $\mathbf{D}^{(2)},\ldots,\mathbf{D}^{(i)},\ldots$ elde edilir. $\mathbf{D}^{(i)}$ $\mathbf{x}_i$ (i = 1, 2,…) noktasının $\mathbf{D}^{(i-1)}$'ye eklenmesiyle elde edilir.

$\mathbf{D}^{(i)}$ tasarımının döndürülebilirlik yüzdesi $\Phi_{N_i}(\mathbf{D}^{(i)})$ 'dir. Burada $N_i = N_0 + i$ ($i = 0, 1,\ldots$). Khuri (1988: ss. 103-104) Ek B'de

$$\Phi_{N_i}(\mathbf{D}^{(i)}) \leq \Phi_{N_i+1}(\mathbf{D}^{(i+1)}),\ i = 0, 1,\ldots \qquad \textbf{(28)}$$

olduğunu göstermiştir. Eşitlik (28), $\left\{ \Phi_{N_i}(\mathbf{D}^{(i)}) \right\}_{i=0}^{\infty}$ serisinin monoton olarak arttığının göstergesidir. Bu seri 100 ile sınırlı olduğundan, 100'e yakınsamaktadır:

$$\lim_{i\to\infty} \Phi_{N_i}(\mathbf{D}^{(i)}) = 100$$

3. Draper-Pukelsheim Döndürülebilirlik Ölçüsü

Draper ve Pukelsheim (1990), hesaplanması kolay ve tasarımın döndürülmesine karşı değişmeyen bir kriter vermişlerdir.

Moment matrisleri

$$\mathbf{A} = N^{-1}\,\mathbf{X}'\mathbf{X} = N^{-1}\sum_{u=1}^{N} \mathbf{z}_u \mathbf{z}'_u \qquad \textbf{(29)}$$

olarak alındığında, ikinci derece modeldeki **X** matrisinin bir satırı aşağıdaki terimlerden oluşmaktadır:

$$1;\ x_1, x_2,\ \ldots, x_k;\ x_1^2, x_2^2,\ldots, x_k^2;\ x_1x_2,\ldots, x_{k-1}x_k. \qquad \textbf{(30)}$$

Bu terimler $\mathbf{z}'$ 'u oluşturmaktadır. İkinci derece terimlerden diğer terimlere hareket etmede bu notasyonun belli bazı dezavantajları vardır. Box ve Hunter (1957) bu dezavantajların farkına varmışlardır ve Draper (1984) tarafından ilk kez tanıtılan Shläflian notasyonunda terimler aşağıdaki gibidir:

$$1;\ x_1, x_2,\ \ldots, x_k;\ x_1^2, x_2^2,\ldots, x_k^2;\ 2^{1/2}x_1x_2,\ldots, 2^{1/2}x_{k-1}x_k. \qquad \textbf{(31)}$$

bu notasyonun bir dezavantajı, daha yüksek dereceli terimler eklendiğinde, çeşitli uygun sabitlerin hesaplamalara dahil edilmesi gerekliliğidir (Draper ve Pukelsheim, 1990: s. 196).

Draper ve Pukelsheim (1990) tarafından kullanılan kavramsal olarak daha basit bir notasyon şu şekildedir: $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_k)'$ olduğunda ikinci derece modeldeki terimler $\mathbf{z}(\mathbf{x})'$ 'in elemanları

$$1;\ \mathbf{x}';\ \mathbf{x}' \otimes \mathbf{x}' \qquad \textbf{(32)}$$

şeklindedir. Burada ⊗ sembolü Kronecker çarpımını göstermektedir. Böylece $(1 + k + k^2)$ terim aşağıdaki gibidir:

$$1;\ x_1, x_2, \ldots, x_k;\ x_1^2, x_1x_2, \ldots, x_1x_k;\ x_2x_1, x_2^2, \ldots, x_2x_k;\ \ldots;\ x_kx_1, x_kx_2, \ldots, x_k^2 \qquad \textbf{(33)}$$

Bu notasyonun dezavantajı çapraz çarpım terimlerinin iki kez ortaya çıkmasıdır; bu yüzden $\mathbf{X'X}$ matrisi tekil duruma gelir. Bununla birlikte, kullanışlı bir genelleştirilmiş ters kullanılabilir. Ayrıca bu notasyon daha yüksek derecelere kolaylıkla uyarlanabilir. Örneğin, üçüncü derece terimler $\mathbf{x}' \otimes \mathbf{x}' \otimes \mathbf{x}'$ 'un eklenmesi ile elde edilebilir.

$\lambda_2 = N^{-1} \sum_u x_{iu}^2$ ve $\lambda_4 = N^{-1} \sum_u x_{iu}^2 x_{ju}^2$ olan ikinci derece döndürülebilir bir tasarım ele alınsın. Bu tasarımın $(1 + k + k^2) \times (1 + k + k^2)$ boyutlu moment matrisi $\mathbf{V}$, aşağıdaki gibi yazılabilir (Draper ve Pukelsheim, 1990: s.198):

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_0 + \lambda_2(3k)^{1/2}\mathbf{V}_2 + \lambda_4[3k(k+2)]^{1/2}\mathbf{V}_4 \qquad \textbf{(34)}$$

Burada $\mathbf{V}_0$, (1, 1)'inci elemanı 1, diğerleri sıfır olan matristir; $\mathbf{V}_2$, $\mathbf{V}$'de ikinci derece momentlere karşılık gelen $3k$ pozisyonda herbiri $(3k)^{-1/2}$ ve diğer elemanları sıfır olan matristir; ve $\mathbf{V}_4$, $\mathbf{V}$'de saf dördüncü derece momentlere karşılık gelen k pozisyonda $3[3k(k + 2)]^{-1/2}$, karma çift dördüncü derece momentlere karşılık gelen $3k(k - 1)$ pozisyonda $[3k(k + 2)]^{-1/2}$ olan ve diğer elemanları sıfır olan matristir. $\mathbf{V}_0$, $\mathbf{V}_2$ ve $\mathbf{V}_4$ simetrik ve ortogonal oldukları için $\mathbf{V}_i\mathbf{V}_j = 0$ ve aynı zamanda $\|\mathbf{V}_i\| = [\mathrm{tr}(\mathbf{V}_i\mathbf{V}_i)]^{-1/2} = 1$ şeklindedir.

Moment matrisi $\mathbf{A}$ olan herhangi bir tasarım ele alındığında, Draper, Gaffke ve Pukelsheim (1990) x uzayında $\mathbf{A}$'nın tüm olası döndürmeleri üzerinden ortalaması alındığında

$$\overline{\mathbf{A}} = \mathbf{V}_0 + \mathbf{V}_2\mathrm{tr}(\mathbf{AV}_2) + \mathbf{V}_4\mathrm{tr}(\mathbf{AV}_4) \qquad \textbf{(35)}$$

olduğunu göstermiştir. Draper ve Pukelsheim (1990) $\overline{\mathbf{A}}$ 'yı, $\mathbf{A}$'nın *döndürülebilir bileşeni* olarak adlandırmaktadır ve aşağıdaki gibi bir ölçüyü önermişlerdir:

$$Q^* = \|\overline{\mathbf{A}} - \mathbf{V}_0\|^2 / \|\mathbf{A} - \mathbf{V}_0\|^2$$

$$= \{\mathrm{tr}(\overline{\mathbf{A}} - \mathbf{V}_0)^2\} / \{\mathrm{tr}(\mathbf{A} - \mathbf{V}_0)^2\} \quad \textbf{(36)}$$

Buradaki döndürülebilirlik ölçüsü Q^*, Khuri (1988, s. 98)'nin ölçüsü gibi esas olarak, **A**'daki ikinci ve dördüncü derece tasarım momentlerinin, **V** ile gösterilen *ideal* tasarım momentleri üzerindeki regresyonu için bir R^2 istatistiğidir. Bununla birlikte, Draper ve Pukelsheim önemli farklılıkların bulunduğunu belirtmiştir. Khuri'nin regresyonu **V**'ye benzer bir matrisin üst üçgen parçasından seçilmiş vektörlere dayandığı için, buradaki regresyon katsayıları ve R^2 değeri, Draper ve Pukelsheim'ınkinden farklı şekilde ağırlıklandırılmıştır. Bu nedenle, Khuri'nin istatistiği tasarımın *x* uzayında döndürülmesine karşı değişmez değildir. Ayrıca Draper ve Pukelsheim (1990: s. 198), döndürülebilirliğin onarılması için Q^*'da maksimum artışı sağlayacak noktaların tasarıma eklenebileceğini belirtmişlerdir.

4. Khuri ve Draper-Pukelsheim'in Tasarimlarinin *D*-Etkinlikleri

Bir tasarım için moment matrisi $\mathbf{A} = \mathbf{X'X} / N$ olduğunda, $|\mathbf{A}|$'yı maksimize eden $\mathbf{D}^*$ tasarımı *D-optimum tasarım* olarak adlandırılmaktadır. *D*-optimum tasarımların özellikleri ile ilgili detaylar Atkinson ve Donev (1992)'de bulunmaktadır. $\mathbf{A}^*$, *D*-optimum tasarım matrisinin moment matrisi olduğunda, herhangi bir **D** tasarımının *D-etkinliği* ise,

$$D_{etk} = \left\{ \frac{|\mathbf{A}|}{|\mathbf{A}^*|} \right\}^{1/p} = \left\{ \frac{|\mathbf{X'X}| / N^p}{|\mathbf{A}^*|} \right\}^{1/p} \quad \textbf{(37)}$$

şeklinde tanımlanmaktadır. *D*-etkinlik kriteri, tasarımların iyi bir tasarım olup olmadığının değerlendirilmesi için sık kullanılan bir kriterdir. Uygulamalarda kullanılan bazı tasarımların (faktöriyel ve merkezi bileşik tasarımlar) *D*-etkinlikleri Atkinson ve Donev (1992)'de verilmiştir.

Bu kısımda, Draper ve Pukelsheim (1990) ve Khuri (1988) tarafından döndürülebilirliği onarılan iki tasarımın *D*-etkinlikleri incelenmiştir. *D*-etkinliğin değerlendirilmesi, bu iki çalışmada tasarımlara eklenmiş olan her bir tasarım noktası için, $|\mathbf{A}|$ hesaplanarak gerçekleştirilmiştir. $|\mathbf{A}|$'nın değerinin artması veya azalması, *D*-etkinliğin artması veya azalması demektir.

Örnek 1: Burada ilk olarak Khuri (1988), daha sonra Draper ve Pukelsheim (1990) tarafından incelenen, ikinci derece bir modelin katsayılarını tahminlemek için kullanılabilen bir Roquemore Tasarımını ele alınmıştır. Tasarım Tablo 1'de, Q^*'ı en çok iyileştiren tasarım noktaları ise Tablo 2'de verilmiştir. Orijinal tasarım ve eklenen noktalar ile genişletilmiş olan tasarım için $|\mathbf{X}'\mathbf{X}|/N^p$ değerleri Tablo 3'te verilmiştir.

Tablo 3'e bakıldığında, orijinal tasarıma 11. noktanın eklenmesi ile *D*-etkinliğinin arttığı, 12., 13. ve 14. noktaların eklenmesi ile *D*-etkinliğinin azaldığı görülmüştür.

Tablo 1. Onarılacak Tasarım (Q^*=0.9496)

Tasarım Noktası	x_1	x_2
1	-1.00	1.35
2	1.00	1.25
3	-1.60	-0.85
4	1.00	1.00
5	-1.50	0.00
6	1.55	0.00
7	0.00	-1.00
8	0.00	1.55
9	0.55	0.30
10	0.00	0.00

Kaynak: Draper ve Pukelsheim (1990)

Tablo2. Q^*'ı En Çok İyileştiren Noktalar

Tasarım Noktası	x_1	x_2	Q^*
11	-0.10	-1.50	0.9861
12	0.20	0.40	0.9875
13	-0.10	0.00	0.9876
14	0.00	0.00	0.9876

Kaynak: Draper ve Pukelsheim (1990)

Tablo 3. $|\mathbf{X}'\mathbf{X}|/N^p$ Değerleri

Tasarım	$|\mathbf{X}'\mathbf{X}|/N^p$
Tablo 1'deki orijinal tasarım (10 Noktalı)	0.084842
11 Noktalı Tasarım	0.175904
12 Noktalı Tasarım	0.149276
13 Noktalı Tasarım	0.125459
14 Noktalı Tasarım	0.101158

Örnek 2: İkinci olarak yine Khuri (1988) ve Draper ve Pukelsheim (1990) tarafından döndürülebilirliği onarılan, Tablo 4'de verilen tasarım ele alınmıştır. Bu tasarım ikinci derece bir modelin katsayılarını tahminlemek için

kullanılabilen, üç faktörlü, bir kısmı değiştirilmiş bir merkezi bileşik tasarımdır. Bu tasarım için, $|\mathbf{X}'\mathbf{X}| / N^p = 3.83 \times 10^{-3}$ olarak elde edilmiştir. Khuri'nin Φ'sini en iyileştiren iki tasarım noktası Tablo 5 ve bu noktaların eklenmesiyle elde edilen onarılmış tasarım için $|\mathbf{X}'\mathbf{X}| / N^p$ değerleri Tablo 6'da verilmiştir. Draper-Pukelsheim'ın Q^*'ını en iyileştiren üç tasarım noktası Tablo 7 ve bu noktaların eklenmesiyle elde edilen onarılmış tasarım için $|\mathbf{X}'\mathbf{X}| / N^p$ değerleri ise Tablo 8'de verilmiştir. Tablo 6 ve Tablo 8'e bakıldığında döndürülebilirliği onarmak amacı ile tasarım noktaları eklendikçe tasarımların etkinliğinin azaldığı görülmektedir.

Tablo 4. Onarılacak Tasarım
($|\mathbf{X}'\mathbf{X}| / N^p = 3.83 \times 10^{-3}$)

Tasarım Noktası	x_1	x_2	x_3
1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1
3	-1	1	-1
4	1	1	-1
5	-1	-1	1
6	1	1	1
7	-1	1	1
8	0.48	1	1
9	-1.682	0	0
10	1	0	0
11	0	-1.682	0
12	0	1.682	0
13	0	0	-1.682
14	0	0	1.682
15	0	0	0
16	0	0	0

Kaynak: Khuri (1988)

Tablo 5. Φ'yi En İyileştiren Noktalar

Tasarım Noktası	x_1	x_2	x_3
17	0.828	0.506	0.506
18	966	.151	.151

Kaynak: Khuri (1988)

Tablo 6. Φ'yi En İyileştiren Noktalar İçin $|\mathbf{X}'\mathbf{X}| / N^p$

Tasarım	$\lvert\mathbf{X}'\mathbf{X}\rvert / N^p$
17 Noktalı Tasarım	2.84×10^{-3}
18 Noktalı Tasarım	2.39×10^{-3}

Tablo 7. Q^*'ı En İyileştiren Noktalar

Tasarım Noktası	x_1	x_2	x_3
17	0.95	0.25	0.25
18	1	0	0
19	0.6	0.2	0.2

Kaynak: Draper ve Pukelsheim (1990)

Tablo 8. Q^*'ı En İyileştiren Noktalar Noktalar İçin $|\mathbf{X}'\mathbf{X}| / N^p$

Tasarım	$|\mathbf{X}'\mathbf{X}| / N^p$
17 Noktalı Tasarım	3.15×10^{-3}
18 Noktalı Tasarım	2.37×10^{-3}
19 Noktalı Tasarım	1.97×10^{-3}

4. Sonuç ve Değerlendirme

Bu çalışmada öncelikle cevap yüzeyi tasarımlarında istenen bir özellik olan döndürülebilirliğin derecesinin tespiti ve iyileştirilmesi için Khuri (1988) ve Draper ve Pukelsheim (1990) tarafından geliştirilen yöntemler sunulmuştur. İki yöntemin birbirlerine göre avantajları ve dezavantajları ise Draper ve Pukelsheim tarafından değerlendirilmiş ve bu değerlendirmeler Kısım 3'te verilmiştir.

Döndürülebilirliğin onarılması ile tasarımların D-etkinliklerinin nasıl bir eğilim gösterdiği ise her iki çalışmada ele alınan örnekler üzerinde incelenmiş ve sonuçları Kısım 4'te verilmiştir.

Örnek 1'e bakıldığında, döndürülebilirliği onarmak amacı ile ilk tasarım noktası eklendiğinde etkinliğin arttığı, diğer noktalar eklendiğinde ise sürekli azaldığı gözlenmiştir. Eklenen noktalara bakıldığında, ilk noktanın küresel deney bölgesinin sınırlarına daha yakın olduğu, diğer eklenen noktaların ise tasarımın merkezine yakın hatta merkez noktasında olduğu görülmektedir. Merkez noktası sayısının $2 / \{(d + 1)(d + 2)\}$ civarında olduğu durumlarda tasarımın D-etkinliğinin iyi olduğu, ancak bu sayının artması ile D-etkinliğinin zayıflayacağı Atkinson ve Donev (1992) tarafından da belirtilmiştir. Dolayısıyla, Örnek 1'de karşılaşılan durumun beklenen bir durum olduğu söylenebilir.

Örnek 2'de ise, Khuri ve Draper-Pukelsheim'ın döndürülebilirlik onarımı yaklaşımları, genişletilen tasarımların D-etkinlikleri hesaplanarak karşılaştırılmıştır. Eklenen tasarım noktalarının deney bölgesinin sınırlarına yakın olmaması nedeni ile, tasarım noktaları eklendikçe D-etkinliğinin azaldığı gözlenmektedir. Ancak Tablo 6 ve 8'deki değerlere bakıldığında etkinlikteki azalma miktarlarının her iki yöntem için de birbirlerine yakın oldukları gözlenmektedir. Buradan, Khuri ve Draper-Pukelsheim'ın döndürülebilirlik onarım yöntemlerinin *D*-etkinlik kriteri bakımından birbirlerine karşı bir avantajından sözetmek mümkün görünmemektedir.

ABSTRACT

Khuri (1988) and Draper and Pukelsheim (1990) have provided ways to measure "how rotatable" a response surface design may be when it is not perfectly rotatable. One of the main advantages of these measures is that it can be used to "repair" a nonrotatable design by the addition of experimental runs that maximize the percent rotatability over a spherical region of interest. In this article, these two measures are reviewed and, it is assessed the *D*-efficiencies of some repaired response surface designs.

KAYNAKÇA

ATKINSON, A. C. ve DONEV, A. N. (1992), *Optimum Experimental Designs*, Oxford: Clarendon Press.

BOX, G. E. P. ve HUNTER, J. S. (1957), "Multifactor Experimental Designs for Exploring Response Surfaces," *The Annals of Mathematical Statistics*, 28, 195-241.

BOX, G. E. P. ve WILSON, K. B. (1951), "On the Experimental Attainment of Optimum Conditions," *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, 13, 1-45.

DRAPER, N. R. (1984), "Schlaflian Rotatability," *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, 46, 406-411.

DRAPER, N. R. ve GUTTMAN, I. (1988), "An Index of Rotatability," *Technometrics*, 30, 105-111.

DRAPER, N. R. ve PUKELSHEIM, F. (1990), "Another Look at Rotatability," *Technometrics*, 32, 195-201.

KHURI, A. I. (1988), "A Measure of Rotatability for Response-Surface Designs," *Technometrics*, 30, 95-104.

KHURI, A. I. ve CORNELL, J. A. (1987), *Response Surfaces: Designs and Analyses*, New York: Marcel Dekker.

MYERS, R. H. ve MONTGOMERY, D. C. (1995), *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, New York: John Wiley.