T.C.

DOKUZ EYLÜL ÜNİVERSİTESİ
SOSYAL BİLİMLER ENSTİTÜSÜ
EKONOMETRİ ANABİLİM DALI
YÜKSEK LİSANS TEZİ

KARIŞIM DENEYLERİNDE ORTOGONAL BLOK TASARIMLARIN OLUŞTURULMASI ÜZERİNE BİR İNCELEME

Pelin ALTAN

Danışman
Yrd. Doç. Dr. Ali Kemal ŞEHİRLİOĞLU

2007

Yüksek Lisans tezi olarak sunduğum “Karışım Deneylerinde Ortogonal Blok Tasarımların Oluşturulması Üzerine Bir İnceleme” adlı çalışmanın, tarafımdan, bilimsel ahlak ve geleneklere aykırı düşecek bir yardıma başvurmaksızın yazıldığını ve yararlandığım eserlerin bibliyografyada gösterilenlerden oluştuğunu, bunlara atıf yapılarak yararlanılmış olduğunu belirtir ve bunu onurumla doğrularım.

...../...../2007

Pelin ALTAN

YÜKSEK LİSANS TEZ SINAV TUTANAĞI

Öğrencinin
Adı ve Soyadı **:**Pelin ALTAN
Anabilim Dalı **:**Ekonometri
Programı **:**İstatistik
Tez Konusu **:**Karışım Deneylerinde Ortogonal Blok Tasarımların Oluşturulması Üzerine Bir İnceleme
Sınav Tarihi ve Saati **:**

Yukarıda kimlik bilgileri belirtilen öğrenci Sosyal Bilimler Enstitüsü'nün ...../...../2007 tarih ve ……. Sayılı toplantısında oluşturulan jürimiz tarafından Lisansüstü Yönetmeliğinin 18.maddesi gereğince yüksek lisans tez sınavına alınmıştır.

Adayın kişisel çalışmaya dayanan tezini ……. dakikalık süre içinde savunmasından sonra jüri üyelerince gerek tez konusu gerekse tezin dayanağı olan Anabilim dallarından sorulan sorulara verdiği cevaplar değerlendirilerek tezin,

BAŞARILI	O	OY BİRLİĞİ ile	O
DÜZELTME	O*	OY ÇOKLUĞU	O
RED edilmesine	O**	ile karar verilmiştir.	

Jüri teşkil edilmediği için sınav yapılamamıştır. O***
Öğrenci sınava gelmemiştir. O**

* Bu halde adaya 3 ay süre verilir.
** Bu halde adayın kaydı silinir.
*** Bu halde sınav için yeni bir tarih belirlenir.

	Evet
Tez burs, ödül veya teşvik programlarına (Tüba, Fullbrightht vb.) aday olabilir.	O
Tez mevcut hali ile basılabilir.	O
Tez gözden geçirildikten sonra basılabilir.	O
Tezin basımı gerekliliği yoktur.	O

JÜRİ ÜYELERİ				İMZA
……	□ Başarılı	□ Düzeltme	□ Red	……...
……	□ Başarılı	□ Düzeltme	□ Red	…….....
……	□ Başarılı	□ Düzeltme	□ Red	…. ……

T.C YÜKSEK ÖĞRETİM KURULU TEZ MERKEZİ
TEZ VERİ GİRİŞ FORMU

Ref No:

Tez No:

Yazar Adı / Soyadı: Pelin ALTAN

Tezin Özgün Dili: Türkçe

Tezin Adı: Karışım Deneylerinde Ortogonal Blok Tasarımların Oluşturulması Üzerine Bir İnceleme

Tezin İngilizce Adı: A Study on the Construction of the Orthogonal Block Designs in Mixture Experiments

Tezin Yapıldığı Yer:

Üniversite	Dokuz Eylül Üniversitesi
Enstitü / Hastane	Sosyal Bilimler Enstitüsü
Fakülte	
Anabilim Dalı / Bölüm	Ekonometri / İstatistik

Tez Türü: Yüksek Lisans

Tez Yılı: 2007

Sayfa sayıları: 196 (Toplam)
Giriş sayfaları: 18 Ana Bölüm: 178

Tez Danışmanı:

Unvanı	Adı	Soyadı
Yrd. Doç. Dr.	Ali Kemal	ŞEHİRLİOĞLU

Dizin Terimleri:

Türkçe Dizin Terimleri:	**İngilizce Dizin Terimleri**
Deney Tasarımı	Design of Experiment
Karışım Deneyleri	Mixture Experiments
Ortogonal Bloklama	Orthogonal Blocks
D-Optimum Tasarımlar	D-Optimal Designs

Tezin Metin Formatı Dışındaki Ekleri:

Resim
Harita
Görüntü
Ses
Program
Diğer

Tarih:…….

İmza:……..

ÖNSÖZ

Bu çalışmanın hazırlanmasında öneri ve yardımlarını esirgemeyen, tez danışmanım Yrd. Doç. Dr. Ali Kemal ŞEHİRLİOĞLU ‘na yapmış olduğu titiz incelemeler sonrasındaki zengin eleştirileri için çok teşekkür ederim.

Değerli zaman ve yorumları için tez izleme komitemde yer alan hocalarım Prof. Dr. Ali ŞEN, Yrd. Doç. Dr. Samim DÜNDAR ‘a teşekkürü bir borç bilirim.

Çalışmanın şeklinin belirlenmesinde ve gerekli düzeltmelerin yapılmasında emeği geçen, değerli fikirlerinden bolca faydalandığım Ümit AKINCI ‘ya ihtiyaç duyduğum her an desteğini ve ilgisini esirgemediği için, her yanı sonlu değerlerle kurulan bir bileşkenin her evresinde sonsuzluğa taşınan zaman kesintilerinde görüngüsel hatırlattıkları için sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

ÖZET

Tezli Yüksek Lisans
Karışım Deneylerinde Ortogonal Blok Tasarımların Oluşturulması Üzerine Bir İnceleme
Pelin ALTAN

Dokuz Eylül Üniversitesi
Sosyal Bilimler Enstitüsü
Ekonometri Anabilim Dalı
İstatistik Programı

Film, gıda, petrol, ilaç ve lastik gibi sanayileri içeren çeşitli endüstriyel araştırmalarda, ürün bileşenlerin belirli oranlarda karışımından oluşmaktadır. Maksimum üretim performansı açısından değişkenlerin optimum oranlarının bulunması önemli bir problemdir. Karışım deneyleri ise, bu problemlerin çözümüne yönelik etkili yöntemler içermektedir. Bu nedenle, işletmelerin kalite iyileştirme çalışmalarında karışım deneyleri önemli bir rol oynamaktadır.

Bu çalışmada, karışım deneylerinde kullanılan tasarımlar incelenmiştir. Scheffé modelleri temel alınmış ve ardından, Scheffé modellerine alternatif modeller tanıtılmıştır. Daha sonra, iki veya daha fazla ortogonal bloklu $q \geq 3$ bileşene sahip tasarımların oluşturulmasında genel yöntemler incelenmiştir. Tasarımlar spesifik özelliklere sahip Latin kareler ile oluşturulmuş ve Draper ve Prescott tarafından verilen dört ve beş bileşenli tasarım yapıları ile genelleştirilmiştir.

Anahtar Kelimeler: **1)** Deney Tasarımı, **2)** Karışım Deneyleri, **3)** Ortogonal Bloklama, **4)** D-Optimum Tasarımlar

ABSTRACT

Master Thesis

A Study on the Construction of the Orthogonal Block Designs in Mixture Experiments

Pelin ALTAN

Dokuz Eylul University

Institute Of Social Sciences

Department of Econometrics

In varieties of industrial research including film, food, petroleum, pharmaceuticals, and rubber, the product is a mixture of several ingredients. An important problem is to find the optimum proportions of ingredients in order to maximize the product performance. Mixture experiments include effective tools in determining such optimum proportions. So, mixture experiments play an important role in quality improvements studies of the companies.

In this study, the designs that are used in experiments with mixtures are examined. Scheffé models are mentioned and then the alternative models of Scheffé models are introduced. After that, general method of constructing designs for q ≥ 3 mixture components in two or more orthogonal blocks are examined. The designs are built from Latin squares with specific properties and are generalizations of those for four and five components given by Draper and Prescott.

Key Words: **1)** Design of Experiment, **2)** Mixture Experiments, **3)** Orthogonal Blocks, **4)** D-Optimal Designs

İÇİNDEKİLER

KARIŞIM DENEYLERİNDE ORTOGONAL BLOK TASARIMLARIN OLUŞTURULMASI ÜZERİNE BİR İNCELEME

YEMİN METNİ	İİ
TUTANAK	III
ÖNSÖZ	V
ÖZET	VI
ABSTRACT	VII
İÇİNDEKİLER	VIII
KISALTMALAR	IX
TABLOLAR LİSTESİ	X
ŞEKİLLER LİSTESİ	XI
EKLER LİSTESİ	XII
GİRİŞ	XIII

BİRİNCİ BÖLÜM
FAKTÖRİYEL TASARIMLAR

1.1. GENEL DENEY TASARIMININ TARİHSEL GELİŞİMİ	1
1.2. İKİ SEVİYELİ TAM FAKTÖRİYEL TASARIMLAR	2
1.2.1. 2^k Faktöriyel Tasarım	2
1.2.2. Faktöriyel Etkiler için Temel Prensipler	7
1.2.3. Tekrarlı Deneyler	8
1.2.4. 2^k Faktöriyelin Bloklanması	8
1.3. İKİ SEVİYELİ KESİRLİ FAKTÖRİYEL TASARIMLAR	14
1.3.1. Kesirli Faktöriyel Tasarımların Çözünürlüğü	17
1.3.2. Minimum Abartı Kriteri	18

İKİNCİ BÖLÜM
KARIŞIM DENEYLERİ

2.1. KAVRAMLAR VE KISITLAR 20
2.2. FAKTÖRİYEL DENEY VE KARIŞIM DENEYİ 24
2.3. SİMPLEKS KAFES TASARIMLAR VE POLİNOMİYEL MODELLER 24
2.3.1. {*q,m*} Simpleks Kafes Tasarımları 25
2.3.2. Karışım Polinomlarının Kanonik Formu 25
2.4. SİMPLEKS MERKEZ TASARIM VE POLİNOMİYEL MODELLER 30
2.5. EKSENSEL (AXİAL) TASARIMLAR 35
2.6. KARIŞIM DENEYLERİNİN GEOMETRİSİ VE YAPAY BİLEŞENLER 38
2.6.1. Bileşen Oranları Üzerinde Alt Sınır Olması Durumu 39
2.6.2. Bileşen Oranları Üzerinde Üst Sınır Olması Durumu 41
2.6.3. Bileşen Oranları Üzerinde Alt ve Üst Sınır Olması Durumu 43
2.6.4. Tutarsız Kısıtların Neden Olduğu Problemler 46
2.6.5. Sınırların Değiştirilmesinin Etkileri 47
2.7. KARIŞIM DENEYLERİ İÇİN EKSTREM KÖŞELER TASARIMI 52
2.8. DİĞER KARIŞIM DENEYLERİ FORMU 56
2.8.1. Scheffe Polinomlarına Ters Terim Eklenmesi 56
2.8.2. Cox'un Karışım Polinomları 57
2.8.3. Bileşen Oranlarının Birbirlerine Oranlanması 59
2.8.4. Log Kontrast Modeller 62
2.9. KARIŞIM DENEYLERİNDE YER ALAN SÜREÇ DEĞİŞKENLERİ 63
2.10. KARIŞIM DENEYLERİNDE BLOK TASARIM 65
2.10.1. Simpleks Üzerindeki Karışım Noktalarının Uygun Seçiminden Oluşan Tasarımlar 68
2.11. ORTOGONAL BLOK TASARIM 71

ÜÇÜNCÜ BÖLÜM
UYGULAMADA KULLANILAN MATEMATİKSEL TEKNİKLER VE OPTİMALİTE KRİTERLERİ

3.1. OPTİMİZASYON TEORİSİ 84
3.1.1. Tek Değişkenli Durumda Optimizasyon 85
3.1.2. Birden Çok Değişken Durumunda Optimizasyon 87
3.2. NÜMERİK ANALİZ 96

3.3. FONKSİYON OPTİMİZASYONUNDA SİMULATED ANNEALİNG
(BENZETİLMİŞ TAVLAMA) YÖNTEMİ 97
3.3.1. Fonksiyon Minimizasyonu 97
3.3.2. Metropolis Algoritması 98
3.3.3. Benzetilmiş Tavlama 99
3.4. OPTİMALİTE KRİTERLERİ 100
3.5. YANIT YÜZEYLERİ METODOLOJİSİ 102
3.6. OPTİMUM KOŞULLARIN BELİRLENMESİ 109
3.6.1. En Hızlı Artış Metodu 110
3.6.2. Yaklaşık Sabit Bir Alana Geçiş için En Hızlı Artış
Prosedürünün Uygulanması 114
3.7. İKİNCİ DERECEDEN MODELLER VE ANALİZİ 114
3.7.1. Yanıt Yüzeylerinin Karakterize Edilmesi 116

DÖRDÜNCÜ BÖLÜM

5 DEĞİŞKEN İÇİN ORTOGONAL BLOK TASARIM YAPISININ OLUŞTURULMASI

4.1. 2 ORTOGONAL BLOKLU 5 DEĞİŞKEN İÇİN OPTİMUM KARIŞIM
DENEYİNİN OLUŞTURULMASI 120
4.2. OPTİMUM KOŞULLARIN SİMULATED ANNEALİNG ALGORİTMASI
İLE BELİRLENMESİ 133

SONUÇ VE ÖNERİLER 138
KAYNAKLAR 141
EKLER 144

KISALTMALAR

bkz.	Bakınız
EKKY	En Küçük Kareler Yöntemi
s.	Sayfa No

TABLOLAR LİSTESİ

Tablo 1.1. 23 Faktöriyel İçin Tasarım ve Bağımsız Değişkenler Matrisi. s. 4

Tablo 1.2. 2^3 Faktöriyel İçin Tasarım Matrisinin Yapısı ve Ana Etkiler s. 5

Tablo 1.3. Bir 2^3 Tasarımın İki bloğa Bölünmesi s. 9

Tablo 1.4. Bir 2^3 Tasarımın Dört Bloğa Bölünmesi s. 11

Tablo 1.5. 2^4-1 Kesirli Faktöriyel için Tasarım s. 16

Tablo 2.1. 4-üncü dereceden standart Latin kareler s. 79

Tablo 2.2.Tablo 2.1 de verilen 4-üncü Standart Latin Kareden 2, 3 ve 4 Sütunlarının Permütasyonu ile Elde Edilen 6 Kare s. 80

Tablo 2.3.Tablo 2.1 de verilen 3-üncü Standart Latin Kareden 2, 3 ve 4 Sütunlarının Permütasyonu ile Elde Edilen 6 Kare s. 81

Tablo 2.4. Kuadratik Karışım Modeli İçin 2 Kare Çiftinin Kullanılması İle Oluşturulan 2 Ortogonal Blok s. 81

Tablo 2.5. 5-inci dereceden Ayrık Ortogonal Latin Kareler s. 82

Tablo 3.1. n seçim değişkenine sahip fonksiyonunun uçdeğerlerine ilişkin genel sınama koşulları s. 95

Tablo 4.1. 10+n Hacimli 2 Ortogonal Bloklu Tasarım Yapısının Oluşturulması s.121

Tablo 4.2. 2 Ortogonal Bloklu 5 Değişkenli Karışım Deneyi Sınıfı s.122

Tablo 4.3. a= 0.276 d= 0.724 iken Ortogonal Bloklu 5 Değişkenli Karışım Deneyi s.132

Tablo 4.4. Ortogonal Bloklu 5 Değişkenli Karışım Deney İçin Tasarım Yapısı Ve Elde Edilen Gözlemler s.133

Tablo 4.5. Simulated Annealing algoritması ile çalışan program boyunca farklı T değerleri için bulunan minimum değerler ve bu değerleri veren Noktalar s.136

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1. Üç bileşen için simpleks faktör uzayları s. 22

Şekil 2.2. Dört bileşen için simpleks faktör uzayı s. 22

Şekil 2.3. Üç bileşenli sistem için üçgensel koordinat kağıdı s. 23

Şekil 2.4 q=3 ve q=4 için simpleks merkez tasarımlar s. 35

Şekil 2.5. 3 bileşenli üçgende x_i eksenleri i = 1, 2, 3 s. 36

Şekil 2.6. Simpleksin merkezinden noktalara olan uzaklık Δ iken 3 bileşenli eksensel tasarım s. 37

Şekil 2.7. L simpleksi (ABC) ve U* simpleksi (DEF) nin gösterimi s. 41

Şekil 2.8. U simpleksi (ABC) ve L^* simpleksi (DEF) nin gösterimi s. 43

Şekil 2.9. Bileşen i' nin oranındaki artan Δ_i değişimi ve Δ_i için $(1 - s_i)$ üst sınırı s. 58

Şekil 2.10. p=3 için 4 bileşenli tasarımda bloklar için ilk yüze ait noktalar s. 70

Şekil 3.1. Klasik Optimizasyon Yapısı s. 85

Şekil 3.2. (a) Durağan Noktaların Gösterimi s. 86

(b) Maksimum Ve Minimum Noktaların Gösterimi s. 86

Şekil 3.3. Birinci Sıra Koşulu Açısından s. 88

(a) İki Seçim Değişkenli Modelde Maksimum

(b) İki Seçim Değişkenli Modelde Minimum

(c) İki Seçim Değişkenli Modelde Eyer Noktası

Şekil 3.4. İkinci Sıra Koşulu Açısından İki Seçim Değişkenli Modelde Maksimum s. 90

Şekil 3.5. Üç Boyutlu Yanıt Yüzeylerinin Grafiksel Gösterimi s.103

Şekil 3.6. Şekil 3.5. e ait Eş Yükselti Eğrisi Plotu s.104

Şekil 3.7. X_1 Ve X_2 Faktörleri İçin Eş Yükselti Eğrisi ve En Hızlı Artış Yönü s.113

Şekil 3.8. Durağan Nokta Örnekleri s.115

(a) Maksimum nokta

(b) Minimum nokta
(c) Eğer noktası
Şekil 3.9. İkinci Dereceden Modelin Kanonik Formu s.118
Şekil 4.1. Uygulamaya ait (X'X) determinantını maksimum yapan değerlerin 3D Grafik ile Tespiti s.129
Şekil 4.2. Şekil 4.1 e ait Eş Yükselti Eğrisi Plotu s.129
Şekil 4.3 (a) a=0 olarak alındığında elde edilen yeni determinant değerinde, (f_a), b = 1-d yazılması ile elde edilen ifadenin d ye göre grafiksel Gösterimi s.130
(b) b=0 olarak alındığında elde edilen yeni determinant değerinde, (f_b), a = 1-d yazılması ile elde edilen ifadenin d ye göre grafiksel Gösterimi s.131
(c) d=0 olarak alındığında elde edilen yeni determinant değerinde, (f_d), b = 1-a yazılması ile elde edilen ifadenin d ye göre grafiksel Gösterimi s.131
Şekil 4.4. Simulated Annealing Algoritmasının Ürettiği 500 Adımlık Rasgele Yürüyüş Boyunca Fonksiyonun Aldığı Minimum Değerler s.137

EKLER LİSTESİ

Ek 1: Düzeltilmiş Normal Denklemlerin Elde Edilişi

Ek 2: Latin Kare ve Graeco Latin Kare Tasarımlar

Ek 3: Döndürülebilir Dizaynlar için Moment Matrisinin Genel Formu

Ek 4: Tablo 4.1 de Verilen Karelerin Eş Olduğunun Gösterimi

Ek 5: (X'X) Matrisi ve Determinantının Elde Edilişi

GİRİŞ

Birçok ürün, bazı maddelerin karışımından meydana gelir ve bu tür ürünlere ait kalite karakteristiklerinin istenilen sonuçlarını elde edebilmek için, ürünü oluşturan bileşenlerin oranlarının ne olacağını tespit etmek önemli bir problemdir. Endüstriyel araştırmalar kapsamında, istenilen sonuç "en iyi kaliteye" ulaşmaktır. En iyi kalitenin belirlenmesi göreceli bir konudur. Bahsedilen problemi çözümlemek amacıyla 1958 yılında Scheffé karışım deneylerini önermiş ve bu amaçla kanonik polinomlar tanıtmıştır. İzleyen yıllarda Scheffé modellerine alternatif modeller tanıtılmış olup, Womeldorph, Cornell, Lawrance, Box, Draper, McLean, Nigam, Anderson ve Gorman gibi çeşitli bilim adamları karışım deneyleri metodolojisine katkıda bulunan çalışmalar ortaya koymuşlardır.

Birinci bölümde deney tasarımının kısa bir tarihsel gelişimi sunulmuş ve karışım deneylerinin temelini oluşturan deney tasarımı tanıtılmıştır. İki seviyeli tam faktöriyel tasarımlar incelenerek ana ve etkileşim etkilerinin bulunması, ana etkiler ve farklı derecelerden etkileşim etkileri arasındaki ilişki ve göreceli önemi açısından faktöriyel etkiler için temel prensipler anlatılmıştır. Deneysel üniteler arasındaki değişkenlikten kaynaklı olarak deneysel hata artmakta, deney hassasiyeti ise azalmaktadır. Bu problemi ortadan kaldırmak için deney tasarlarken, göreceli olarak homojen deney üniteleri aynı uygulama grubunda toplanır. Bu duruma iki seviyeli tam faktöriyel tasarımların bloklanması konusunda değinilmiştir. Bölümün izleyen yapısı içinde, değişkenlerin bir kısmının önemli sayıldığı eleme çalımlarında, belirli etkilerin ihmal edildiği araştırmalarda, deneylerin ardışık olarak uygulandığı deney programlarında kullanılan ve daha ekonomik olan kesirli faktöriyel tasarımlar incelenmiş olup çözünürlük ve minimum abartı kriterlerine değinilmiştir.

İkinci bölümde, karışım deneylerinin tanıtılması, Simpleks kafes tasarımlar, Simpleks merkez tasarımlar konularına değinilmiş, Scheffé modelleri tanıtılmış ve bu modellere alternatif olan modeller incelenmiştir. Karışım deneylerinde göz önünde bulundurulması gereken önemli bir konu da, deneyler oluşturulurken, deneysel hataya neden olan ve gürültü (süreç) değişkeni olarak adlandırılan birçok gürültü kaynağının mevcut olmasıdır. Bu tarz deneylerde süreç değişkenlerinin farklı kombinasyonları ile deneme setleri bloklar içinde düzenlenerek parametre tahminleri

blok etkisinden bağımsız olarak tahminlenebilir. Bloklama gürültüyü azaltmak için kullanılan bir teknik olup deneysel hatanın azaltılmasını sağlar. Sözü geçen konu çerçevesinde Nigam (1970) tarafından ortaya atılan ve John (1984) tarafından geliştirilen ortogonal bloklama koşulları ayrıntılı olarak incelenmiştir. Bu koşullar dört değişkenli karışım deneyi için tasarımın çeşitliliğini sağlayan Latin Kareler metodunun karakteristik özelliğine bağlı olarak Draper (1993) tarafından kullanılmıştır. Metot, her bir blokta kullanılan Latin Kare çiftlerinin ortogonal bloklama koşullarını sağlamasına bir anlamda karelerin eş olmasına bağlıdır. Eş çiftlerin çeşitli kombinasyonlarını içeren örnekler John (1984), Cornell (1990) ve Draper (1993) tarafından verilmiş olup her iki blokta da yer alan ortak karışımların ortogonal bloklama yapısını bozmadan silinmesi ile toplam deneme sayısında indirgeme sağlandığı gösterilmiştir. Aynı bölüm içinde beş bileşenli karışım deneyleri için bu yapıların gelişimi ele alınmıştır.

Üçüncü bölümde, analitik ve nümerik metotlar ile elde edilen ekstrem noktaların varlığı için gerekli koşulları ve uç değerlerine ulaşan fonksiyonun bağımsız değişkenlerin hangi değerleri için ekstrem noktalar olduğunun bulunmasını konularını içeren optimizasyon teorisi tek değişkenli ve çok değişkenli durumlar için incelenmiş, Analitik çözümle basitleştirmenin imkansız veya kesin çözümün mevcut bilgilerin ötesinde olduğu veya elle çözümünün sıkıntı yarattığı bir çok problemin çözümüne yardımcı olan nümerik analizden bahsedilmiştir. Aynı konu çerçevesinde fonksiyonun optimizasyonunda "Simulated Annealing Yöntemi (Benzetilmiş Tavlama)", "Metropolis Algoritmaları" ele alınmıştır. Optimalite kriterleri, bazı değişkenlerin etkilediği bir yanıtın modellenmesi ve analiz edilmesi problemini çözmek için istatistiksel ve matematiksel tekniklerin bir araya getirilmesinden oluşmuş yanıt yüzeyleri metodolojisine ve yanıt yüzeylerinin karakterize edilmesi hususuna değinilmiştir. Ayrıca, üretim hattında en yüksek kalite seviyesine ulaşma, maliyet minimizasyonu, ürün maksimizasyonu gibi istenilen yanıt değerlerini veren girdi değişkenlerinin oluşturulmasında optimum koşulların elde edilmesi yöntemi olan "En Hızlı Artış Metodu" konuları ifade edilmiştir. Üçüncü bölümde sunulan yöntemler (prosedürler) dördüncü bölümde yer verilecek olan uygulama için temel oluşturmaktadır.

Bölüm 2 de ifade edilen ortogonal bloklama ve Ayrık ortogonal Latin Kareler, Bölüm 3 de verilen optimizasyon teknikleri ve Simulated Annealing Yöntemi

konusunda için gerekli açıklamalar yapılmıştır. Dördüncü bölümde bu yapılar baz alınarak, blok değişkeni içeren kuadratik model için beş değişkenli iki ortogonal bloklu tasarım yapısı ele alınarak değişkenlerin optimum değerleri elde edilmesine yönelik bir uygulamaya yer verilmiştir. 5 değişkenli durum için en iyi tasarım sınıfını bulmak ve ürünün gözlenen kalite karakteristiğinin optimizasyonunu veren karışım bileşenlerinin optimum performans oranlarını bulmak amacıyla gerçekleştirilen uygulama da analitik ve nümerik metotların her ikisi de kullanılmıştır. Son bölümde ise çalışmanın ana hatları incelenmiş ve çeşitli sonuçlar ve öneriler ortaya konmuştur.

Bölüm 1

FAKTÖRİYEL TASARIMLAR

1.1. DENEY TASARIMININ TARİHSEL GELİŞİMİ

Bilimin düzenli deneylere olan ihtiyacı oldukça eski olup Francis Bacon'un gerçekleştirdiği deneylere dayanmaktadır. John Stuart Mill, oldukça modern görüşlü bir deney teorisi geliştirmiştir. Mill 'in geliştirdiği metot, bir defada tek faktörün değiştirilmesine dayanmaktadır. Mill aynı zamanda kontrollü deney ile pasif gözlem arasındaki önemli farka da dikkat çekmektedir. Bir defada tek bir faktör değişiminin göz önüne alındığı basit metotlardan sonra, deney tasarımının gelişimi 1920'lerin ilk yıllarında Fisher 'in çalışmaları ile başlamıştır. Fisher, çok sayıda faktörün ele alındığı deney teorisini ortaya atmıştır. Fisher, bitki türlerinin kalitesini başarılı bir şekilde karşılaştırmıştır. Bu amaçla ilk olarak homojen gübre koşullarında arazileri bir kaç bloğa ayırmıştır. Daha sonra bu blokların her birinin içinde bitki türlerini tesadüfî olarak ekmiştir. Bu yaklaşım, bitki türleri, arazi ve gübre koşulları arasında karşılaştırmaların yapılmasına imkân vermiştir.

Fisher bu çalışmaları sırasında, blokların oluşturulmasına ve deneylerin tesadüfî olarak uygulanmasına ihtiyaç olduğunu fark etmiştir, (Rasgele Blok Tasarımlar, Latin Kare Tasarımlar). Oluşturulan bu yapı deney tasarımının gelişimine baz oluşturmuş ve faktöriyel analizin doğmasına ve gelişmesine olanak sağlamıştır.

Başlangıçta tüm çabalar veri analiz tekniklerinin oluşturulmasına ve geliştirilmesine yönlendirilmiştir. Tarımsal ve biyolojik deneylerin süresinin uzun olması nedeniyle tasarım metotlarının gelişimi daha yavaş olmuştur. Deney tasarımı 1950'lerin başına kadar teknolojik çalışmalarda pek kullanılmamış, fakat bu tarihten itibaren kullanımın artması ile ilerleme ve gelişme çok hızlı olmuştur. Özellikle Japon endüstrisinde kesirli faktöriyel tasarımların yaygın bir şekilde kullanılmaya başlanılması ile oldukça ucuz ve az çaba ile pek çok kontrol edilebilir faktörün etkilerinin güvenilir bir şekilde nasıl belirlenebileceği kanıtlanmıştır.

Daha sonra bu ilk fikirlerin üzerine tam faktöriyel tasarım teorisi geliştirilmiştir. 1930 ve 1940'larda cebirle de ilginç bağlantıları olan kombinasyonlu deneyler keşfedilmiştir. Bu deneyler, Ortogonal Latin Kare, dengeli eksik bloklar, Youden kare, ortogonal diziler, faktöriyel kesirler olarak sıralanabilir. Faktör seviyeleri kombinasyonunun tanımladığı bir uzay ya da bölgenin mevcut olduğu ve bu bölgede denemelerin gerçekleştirilebilir olduğu varsayımına dayalı olarak 1950-1960'larda cevap yüzeyi metodolojisinin geliştirilmiş ve daha karmaşık modellemelere olanak sağlanmıştır.

Deney Tasarımının tarihsel gelişimi en genel yaklaşımla "bir defada bir faktörün değişimi" yönteminden, çok faktörlü tasarımlar yolu ile "bir defada birden fazla faktörün değişimi" yöntemine doğru bir gelişim şeklinde özetlenebilir.

1.2. İKİ SEVİYELİ TAM FAKTÖRİYEL TASARIMLAR

1.2.1. 2^k Faktöriyel Tasarım

İki ya da daha fazla faktörün etkisinin araştırıldığı deney tipleri içinde en etkin olanı faktöriyel tasarımlardır. Faktöriyel tasarımda faktör seviyelerinin tüm mümkün kombinasyonları araştırmada dikkate alınır. Genel olarak 2^k tasarımının seviyeleri, koordinatları $(x_1,..., x_k)$,= $(\mp 1,...,\mp 1)$ olan 2^k adet noktayı temsil etmektedir. Geometrik olarak bir tasarım, her bir boyutu bir faktör ile temsil edilen hiperkübün köşe noktalarının koordinatlarından oluşmaktadır.

Her biri 2 seviyeye sahip *k* adet faktörlü tam faktöriyel deneyler:

$2\times2\ldots\times2=2^k$

ile tanımlanır ve iki seviyeli *k* faktörün tüm mümkün kombinasyonlarından oluşur. Faktörler, iki seviyeye sahip oldukları için, bu tip deneylerde seçilen faktör seviyelerinin sınırları üzerinden, yanıtın sadece doğrusal etkisi ile çalışılır. Amaç; ana etkileri ve farklı derecelerden etkileşim etkileri de dahil olacak şekilde, faktöriyel etkileri belirlemek ve/veya tekrarlı ya da tekrarsız deneyler için; yer ve yayılım modellerinin kurulması amacıyla faktöriyel etkilerin tahminlenmesi ve test edilmesidir.

Faktör seviyelerinin bir kombinasyonu uygulama ya da deneme olarak adlandırılır. Deney süresince değeri değişen ve yanıt üzerinde önemli etkiye sahip olan ve tasarım içinde yer almayan değişkenler gürültü değişkeni olarak adlandırılır.

2^k tasarımların iki önemli özelliğe sahip olup bunlar;

i. Denge (her bir faktörün seviye sayısının eşit olmasıdır).
ii. Ortogonalite (İki faktörün tüm seviye kombinasyonlarının eşit olmasıdır. Eğer tüm faktör çiftleri ortogonal ise tasarım ortogonaldir)

Deneysel uygulamaların listesi *tasarım matrisi* olarak adlandırılır ve **D** ile tanımlanır. Bir 2^k faktöriyel tasarım matrisi k sütun ve $N = 2^k$ sıradan oluşur. k adet değişkenin her biri için bir sütun vardır ve her bir sıra, her bir deneme için uygulama kombinasyonunu tanımlar.

Tablo 1.1 ile verilen denemeler standart düzendedir. Birinci sütunun elemanları, sırasıyla eksi ve artı işaretlerinin dönüşümü ile elde edilir. İkinci sütunun elemanları eksi ve artı çiftlerinin dönüşümü ile elde edilir. Üçüncü sütunun elemanları eksi ve artı işaretlerinin dörderli gruplarının dönüşümü ile elde edilir ve bu işlem grup sayıları iki kat artırılarak devam eder. Son sütun 2^{k-1} eksi işareti takip eden 2^{k-1} artı işaretten oluşur.

Gözlemlerin ilişkisiz ve eşit varyanslı olduğu varsayımı ile 2^k faktöriyel tasarım, genel ortalamanın ve 2^k -1 faktöriyel etkinin birbirinden bağımsız minimum varyanslı tahmininin elde edilmesini sağlar. Etkilerin sayıları şu şekilde ifade edilebilir;

k	adet ana etki
$\frac{k(k-1)}{2}$	adet iki-faktör etkileşim etkisi
$\frac{k(k-1)(k-2)}{2.3}$	adet üç-faktör etkileşim etkisi
$\vdots$	$\vdots$
$\frac{k(k-1)(k-2)\ldots(k-h-1)}{h!}$	adet h-faktör etkileşim etkisi
1	adet k-faktör etkileşim etkisi

Ana etkilerin tanımlandığı tasarım matrisinden *bağımsız değişkenler matrisi* **X** elde edilir, (bkz. Tablo 1.1). Bu matrisin bir diğer adı *model matrisidir*. **X** matrisindeki bir *ij* etkileşim sütunu, *i* ve *j* sütunlarının karşılıklı elamanlarının çarpımından oluşur. Benzer şekilde, *ijk* etkileşim sütunu da *ij* sütununun *k* sütunundaki karşılıklı elemanları çarpılarak elde edilir. **X** matrisinin ilk sütunu tamamen artı işaretinden oluşur ve genel ortalamayı temsil eder. Bir 2^k tasarım için tam model matrisi 2^k sütun ve 2^k sıradan oluşur.

Tablo 1.1 *2^3 Faktöriyel İçin Tasarım ve Bağımsız Değişkenler Matrisi*

Tasarım Matrisi			**Bağımsız Değişekenler Matrisi**								**Gözlemler**
D			**X**								**Y**
1	**2**	**3**	**I**	**1**	**2**	**3**	**12**	**13**	**23**	**123**	
-	-	-	+	-	-	-	+	+	+	-	y_1
+	-	-	+	+	-	-	-	-	+	+	y_2
-	+	-	+	-	+	-	-	+	-	+	y_3
+	+	-	+	+	+	-	+	-	-	-	y_4
-	-	+	+	-	-	+	+	-	-	+	y_5
+	-	+	+	+	-	+	-	+	-	-	y_6
-	+	+	+	-	+	+	-	-	+	-	y_7
+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	y_8

Bir 2^k tasarımındaki ana etki, herhangi bir faktörün düşük seviyedeki ortalama yanıt değeri ile aynı faktörün yüksek seviyedeki ortalama yanıt değeri arasındaki fark ya da faktör seviyesindeki değişimin yanıtta oluşturduğu değişim olarak tanımlanır. *i*-inci uygulamadaki gözlem z_i ile tanımlanacak olursa (z_i, yer ölçüsü ile ilgileniliyor ise $\bar{y}_i$, yayılım ölçüsü ile ilgileniliyor ise $\ln s_i^2$ değerini tanımlar), **A** faktörünün ana etkisi genel olarak:

$$ME(A) = \bar{z}(A+) - \bar{z}(A-)$$

Tam faktöriyel tasarımların simetrik olmaları nedeni ile $\bar{z}(A+)$ ve $\bar{z}(A-)$ değerleri diğer faktörlerin tüm seviye kombinasyonları üzerinden hesaplanır, (Tablo 1.2). Faktöriyel tasarımların bu özelliği tekrar üretilebilirlik olarak adlandırılır ve simetrik

olmayan tasarımlar bu özelliğe sahip değildir. (Her faktörün aynı seviye sayısına sahip olması durumunda, faktöriyel deneyler "Simetrik Faktöriyel Deneyler" olarak adlandırılırlar. En azından, bir faktörün seviye sayısı diğer faktörlerin seviye sayısından farklı ise "Asimetrik faktöriyel deneyler" olarak adlandırılırlar).

Tablo 1.2 de verilen 2^3 tasarım ele alınsın: Bir faktörün ana etkisi, diğer faktör kombinasyonlarının her birinde faktörün ortalama yanıtta oluşturduğu değişimdir. Üç faktörlü durum için **A** faktörünün ana etkisi ele alındığında **B** ve **C** için mümkün kombinasyonlar (-;-), (-;+), (+;-), (+;+) olup, **A** faktörünün ana etkisi;
Dört kombinasyonda tekrarsız olduğundan ortalama yanıt;

$$\mathbf{A}=1/4[(y_2-y_1)+(y_4-y_3)+(y_6-y_5)+(y_8-y_7)] \qquad (1.1)$$
$$=1/4[(a-1)+(ab-a)+(ac-c)+(abc-bc)]$$

Tablo 1.2: 2^3 *Faktöriyel İçin Tasarım Matrisinin Yapısı ve Ana Etkiler*

Deney Kombinasyonu	A	B	C	y_i	Kombinasyon	Ortalama Değişim
(1)	**-**	**-**	**-**	y_1	(-;-)	(y_2-y_1)
a	**+**	**-**	**-**	y_2	(-;-)	
b	**-**	**+**	**-**	y_3	(+;-)	(y_4-y_3)
ab	**+**	**+**	**-**	y_4	(+;-)	
c	**-**	**-**	**+**	y_5	(-;+)	(y_6-y_5)
ac	**+**	**-**	**+**	y_6	(-;+)	
bc	**-**	**+**	**+**	y_7	(+;+)	(y_8-y_7)
abc	**+**	**+**	**+**	y_8	(+;+)	

Eşitlik (1.1) yeniden düzenlendiğinde;

$$\mathbf{A}=1/4[(y_2+y_4+y_6+y_8)-(y_1+y_3+y_5+y_7)]$$

elde edilir. Bu ifade,

$$\mathbf{A}=\bar{y}(A+)-\bar{y}(A-)$$

eşitliğine denktir ve A'nın ana etkisinin kontrastla elde edilebileceğini de göstermektedir.

$\text{Kontrast}_A = a + ab + ac + abc - (1) - b - c - bc$

$= -y_1 + y_2 - y_3 + y_4 - y_5 + y_6 - y_7 + y_8$

Genel olarak bir 2^k faktöriyel tasarım için faktöriyel etki, tekrarsız deneyler için,

$$\hat{\theta} = \frac{1}{2^{k-1}}[\text{Kontrast}]$$

$$\hat{I}\,(\text{Genel ortalama}) = \frac{1}{2^k}[\text{Kontrast}]$$

şeklinde olup eğer *m* adet tekrar mevcut ise paydaya *m* çarpanı gelir.

Bir 2^k faktöriyel tasarım kullanıldığında model parametreleri için en küçük kareler tahminleyicisi

$$\mathbf{b} = \frac{1}{2^k}\mathbf{X}'\mathbf{y} = \frac{\text{Faktor Etki}}{2} \qquad (1.2)$$

eşitliği ile ifade edilebilir.

A, B ve C faktörlerinin ana etkilerinin eklenebilir olduğu varsayılır. Eklenebilirlik, her bir faktörün yanıt değişkeni üzerine yaptığı katkının diğer faktörlerin etkilerinden bağımsız olmasıdır. Fakat bazı durumlarda faktörler birbirlerini etkileyebilmektedir. Bu faktör etkilerinden biri, diğer bir faktörün seviyesi tarafından etkileniyorsa bu iki faktör arasında bir etkileşim etkisinin var olduğundan söz edilebilir. Başka bir ifade ile bir faktörün seviyeleri arasında ortalama yanıttaki fark diğer faktörlerin tüm seviyelerinde aynı değilse, faktörler arasında etkileşim mevcuttur. **A**×**B** etkileşim etkisi;

$$\text{INT}(A,B) = \frac{1}{2}\{\bar{z}(B+/A+) - \bar{z}(B-/A+)\} - \frac{1}{2}\{\bar{z}(B+/A-) - \bar{z}(B-/A-)\}$$

$$= \frac{1}{2}\{\bar{z}(A+/B+) - \bar{z}(A-/B+)\} - \frac{1}{2}\{\bar{z}(A+/B-) - \bar{z}(A-/B-)\}$$

Burada $\bar{z}(B+/A+)$, z_i değerlerinin hem **A** hem de **B** 'nin + seviyesindeki ortalamasını belirtir. İlk köşeli parantezin içindeki ifade **A** 'nın + seviyesinde **B** 'nin

ana etkisini belirtir ve **B** 'nin **A** 'nın + seviyesindeki şartlı ana etkisi olarak adlandırılır.

$$ME(B/A+) = \bar{z}(B+/A+) - \bar{z}(B-/A+)$$

A×**B** etkileşim etkisi, **A** 'nın + seviyesindeki **B** 'nin şartlı ana etkisi ile **A** 'nın – seviyesindeki **B** 'nin şartlı ana etkisi arasındaki farkın yarısıdır.

$$INT(A,B) = \tfrac{1}{2}\{ME(B/A+) - ME(B/A-)\}$$
$$= \tfrac{1}{2}\{ME(A/B+) - ME(A/B-)\}$$

Etkileşim etkilerinin tahminlenmesinde kontrastlar da kullanılabilir:

$$\mathbf{AB} = \tfrac{1}{4}[Kontrast_{AB}]$$
$$= \tfrac{1}{4}[(1)+ab+c+abc-a-b-ac-bc]$$
$$= \tfrac{1}{4}[y_1 - y_2 - y_3 + y_4 + y_5 - y_6 - y_7 + y_8]$$

A, **B** ve **C** üç faktör etkileşimi, üç farklı şekilde tanımlanabilir.

$$INT(A,B,C) = 1/2\ INT(A,B/C+) - 1/2 INT(A,B/C-)$$
$$= 1/2\ INT(A,C/B+) - 1/2 INT(A,C/B-)$$
$$= 1/2\ INT(B,C/A+) - 1/2 INT(B,C/A-)$$

1.2.2. Faktöriyel Etkiler İçin Temel Prensipler

Önemli bir soru, ana etkiler ve farklı derecelerden etkileşim etkileri arasındaki ilişki ve göreceli önemin ne olduğudur. Üç temel prensip mevcuttur.

a) Hiyerarşik Sıra Prensibi:

Düşük dereceden etkilerin yüksek dereceden etkilere göre önemli olma olasılıkları daha fazladır. Aynı dereceden etkilerin önemli olma olasılığı eşittir. Bu prensip, pek çok gerçek deneyle doğrulanmış amprik bir prensiptir. Diğer bir neden ise yüksek dereceden etkileşimleri yorumlamak ve değerlendirmek fiziksel olarak

oldukça zordur. Teknik bilgiler aksini belirtmediği sürece bu prensip güvenle kullanılabilir.

b) Etkilerin seyrekliği Prensibi:

Bu prensip, bir faktöriyel deneydeki göreceli olarak önemli etkilerin sayısı ile ilgilidir. Verilerde ortaya çıkan değişkenliğin öncelikle sadece birkaç etki tarafından oluşturulduğu deneysel olarak belirlenmiştir.
“ Bir faktöriyel deneyde Göreceli olarak önemli etkilerin sayısı azdır.”

c) Etkilerin Kalıtım Prensibi:

Bu prensip bir etkileşim etkisi ile onu oluşturan ebeveyn faktörler arasındaki ilişkiyi ele alır.
“ Bir etkileşimin önemli olabilmesi için onun ebeveyn faktörlerinden en az biri önemli olmalıdır.”

1.2.3. Tekrarlı Deneyler

Bir ortogonal tasarımda her bir faktörün etkisi diğer faktörlerin etkisi ile karışmaksızın tahminlenebilir. Bununla birlikte üzerinde çalışılan süreçte aşırı bir değişkenlik söz konusu ise elde edilen tahminler gerçek ortalama değerden daha fazla sapmalı olabilecektir. Deney sonuçlarındaki bu büyük değişkenliğin etkisi aynı deney tasarım noktasında birden fazla deneyin uygulanması ile indirgenebilir. Bu deneylere “tekrarlı deneyler” adı verilir.

1.2.4. 2^k Faktöriyelin Bloklanması

Deneysel üniteler arasındaki değişkenlik deneysel hatanın artmasına neden olarak, deney hassasiyetinin azalmasına sebep olur. Bu problemi ortadan kaldırmak için deney tasarlarken, göreceli olarak homojen deney üniteleri aynı uygulama grubunda toplanır bu gruplar deney tasarımında blok olarak adlandırılır. Bir faktöriyel deneyin bloklanmasında genellikle etkilerin karışması prensibi kullanılır. Aynı bloktaki deneyler homojen, bloklar arasındaki üniteler heterojendir.

Blok etkisi bloklar arasındaki farkın tahminidir. Eğer bloklama etkin ise, blok etkisi büyük olacaktır. 2^3 tasarımının iki blok olarak düzenlenmesi ele alınırsa blok etkisinin tahmini

$$\mathbf{B} = \bar{y}(\text{II}) - \bar{y}(\text{I})$$

şeklinde olup burada $\bar{y}(I)$ ve $\bar{y}(II)$ sırasıyla blok I ve blok II 'de ki gözlemlerin ortalamalarıdır. 2^3 tasarımı yedi serbestlik dereceli olduğundan blok etkisinin tüm yedi faktöriyel etki ile birlikte tahminlenmesi imkânsızdır. Bu nedenle faktöriyel etkilerden biri feda edilmelidir. Hiyerarşik sıra Prensibi'ne göre feda edilecek etki üç-faktör etkileşimidir.

Tablo 1.3 de verilen tasarım baz alınırsa **123** sütunu bloklama planı olarak kullanılabilir; **123** sütunun (-) işaretli olan deneyleri blok I, (+) işaretli olanları blok II 'yi oluşturacak şekilde düzenlenmiştir. 123 sütunu ile blok sütunu karşılaştırıldığında aynı sayısal tahmine sahip oldukları görülür. Bu iki etki aynı tahmine sahip olduğundan, blok etkisi üç-faktör etkileşim etkisi ile karışmaktadır, (**B=123)**.

Tablo 1.3 *Bir 2^3 Tasarımın İki bloğa Bölünmesi*

Deneme	**1**	**2**	**3**	**12**	**13**	**23**	**123**	**Blok**
1	-	-	-	+	+	+	-	I
2	-	-	+	+	-	-	+	II
3	-	+	-	-	+	-	+	II
4	-	+	+	-	-	+	-	I
5	+	-	-	-	-	+	+	II
6	+	-	+	-	+	-	-	I
7	+	+	-	+	-	-	-	I
8	+	+	+	+	+	+	+	II

Bloklama ile önemsiz bir faktöriyel etkinin tahminlenmesinden vazgeçilerek kalan etkilerin daha yüksek kesinlikte tahminleri elde edilir. Her bir ana etki ve iki-faktör etkileşimi için bloklardaki dört denemenin ikisi + seviyede ikisi - seviyededir. Bu prensip kullanılarak her hangi bir 2^k tasarım, blok etkisi k-faktör etkisi ile karışarak iki blok halinde düzenlenebilir.

Bloklama olmadığı durumda **A** ana etkisi:

A = [a + ab + ac + abc - (1) - b - c - bc]

şeklindedir. Etki tahmini bloklamadan etkilenmez; çünkü her bir blokta iki (+) iki de (-) etki mevcuttur. Blok I = [a + abc - b- c] ve Blok II = [ab + ac - (1) - bc]

1.2.4.1 İki Seviyeli Tasarımlarda Dört Blok

2^k tasarımlarını 2^{k-2} hacimli dört blokta oluşturmak mümkündür. Bu tip tasarımlar özellikle $k \geq 4$ iken faydalıdır. İlk olarak iki bloklama değişkeni tanımlanır: Bu tanımlama ile sekiz deney kombinasyonu her biri iki deneyli dört blok olarak ayrıştırılır. ($\mathbf{B}_1$, $\mathbf{B}_2$) = (- , -) , (- , +) , (+ , -) , (+ , +)

		$\mathbf{B}_1$ -	$\mathbf{B}_1$ +
	-	I	III
$\mathbf{B}_2$	+	II	IV

Dört blok arasında üç blok etkisi mevcuttur. Hangi faktöriyel etkilerin blok etkileri ile karıştığı bilinmelidir. **12** iki-faktör etkileşiminin blok etkisi ile karıştığı varsayılsın. Bu etki, III , IV ve I , II blokları arasındaki farkı tanımlar, $\mathbf{B_1} = \mathbf{12}$. Diğeri **13** ise II, IV ve I, III blokları arasındaki farkı tanımlar. Üçüncü blok etkisi ilk iki blok etkisinin etkileşimi olarak ;

$$\mathbf{B_1.B_2} = \mathbf{12} \times \mathbf{13} = \mathbf{1} \times \mathbf{1} \times \mathbf{2} \times \mathbf{3} = \mathbf{I} \times \mathbf{2} \times \mathbf{3} = \mathbf{23}$$

elde edilir, bkz Tablo 1.4.

Tablo 1.4 Bir 2^3 Tasarımın Dört Bloğa Bölünmesi

Deneme	1	2	3	B_1(=12)	B_2(=13)	23	123	Blok
1	-	-	-	+	+	+	-	IV
2	-	-	+	+	-	-	+	III
3	-	+	-	-	+	-	+	II
4	-	+	+	-	-	+	-	I
5	+	-	-	-	-	+	+	I
6	+	-	+	-	+	-	-	II
7	+	+	-	+	-	-	-	III
8	+	+	+	+	+	+	+	IV

Burada $\mathbf{1} \times \mathbf{1} = \mathbf{I}$ olduğuna dikkat edilmelidir.

1	-	-	-	-	+	+	+	+
1	-	-	-	-	+	+	+	+
I	+	+	+	+	+	+	+	+

I tüm elemanları + olan bir sütundur. Çarpmaya göre etkisiz (birim) elemanı tanımlar. Bu işlem sadece ana etkiler için değil etkileşim etkileri içinde geçerlidir.

$$\mathbf{12} \times \mathbf{12} = \mathbf{1} \times \mathbf{1} \times \mathbf{2} \times \mathbf{2} = \mathbf{1}^2 \times \mathbf{2}^2 = \mathbf{I} \times \mathbf{I} = \mathbf{I}$$

12	+	+	-	-	-	-	+	+
12	+	+	-	-	-	-	+	+
I	+	+	+	+	+	+	+	+

bulunur. Sonuç olarak;

12	+	+	-	-	-	-	+	+	-I	-II	+III	+IV
13	+	-	+	-	-	+	-	+	-I	+II	-III	+IV
23	+	-	-	+	+	-	-	+	I	-II	-III	+IV

elde edilir. Dört blok etkisi için tahminlenebilecek doğrusal kombinasyonlar:

½ *l*(**12**-**13**)= IV-I

½ *l*(**12**-**23**)= IV-II

½ *l*(**13**-**23**)= IV-III

Seçilen bloklama değişkenlerinin elde edilebilecek tahminler üzerindeki etkisi bir örnekle açıklanacaktır. Bir 2^6 tasarımının dört blok şeklinde uygulanacağı varsayılsın. Blok jeneratörleri;

$\mathbf{B_1 = 123456}$ $\mathbf{B_2 = 23456}$

olsun. Bloklama planı:

		$\mathbf{B_2 = 23456}$	
		-	+
	-	I	III
$\mathbf{B_1=123456}$	+	II	IV

ve blok etkileşimi

123456	+	-	-	+	-	+	+	-	-	+	+	-	…	-	+
23456	-	-	+	+	+	+	-	-	+	+	-	-	…	+	+
Blok etkileşimi	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	…	-	+

Bu etkileşim incelendiğinde ana etkinin **1'** e eşit olduğu görülür, blok etkisi ana etki ile karıştığında kötü bir plandır.

$$\mathbf{B_1.B_2 = 123456 \times 23456 = 12^2 3^2 4^2 5^2 6^2 = 1 \times I^5 = 1}$$

Bloklarla karışacak tüm etkileşimlerin olabildiğince en yüksek dereceye sahip olabilmesi için jeneratörlerin seçiminde dikkat edilmesi gerekenler:

1. Jeneratörler iki adet dört-faktör etkileşiminden seçilir.

2. Seçilen jeneratörlerin iki adet sembolü eşit olmalıdır.

Örneğin: $\mathbf{B_1 = 1234}$

$\mathbf{B_2 = 3456}$

$\mathbf{B_1 . B_2 = 1256}$

Tasarımlar sekiz blok olarak uygulanabilir; bu durumda seçilmesi gereken blok jeneratörü sayısı üçtür, bu üç jeneratör arasındaki etkileşim sayısı toplamı da yedidir.

Örnek: $\mathbf{B}_1 = \mathbf{1234}$

$\mathbf{B}_2 = \mathbf{3456}$

$\mathbf{B}_1\mathbf{B}_2 = \mathbf{1256}$

$\mathbf{B}_3 = \mathbf{136}$

$\mathbf{B}_1\mathbf{B}_3 = \mathbf{136}$

$\mathbf{B}_2\mathbf{B}_3 = \mathbf{145}$

$\mathbf{B}_1\mathrm{B}_2\ \mathbf{B}_3 = \mathbf{235}$

Blok $\times$ faktör etkileşimleri önemsiz kabul edilmektedir. Diğer bir deyişle, bloklar sadece eklenebilir etkilere sahiptir. Hiçbir ana etki ya da etkileşim etkisi herhangi bir blok etkisi ile karışmaz. Bu varsayım muamele etkilerinin bloktan bloğa değişmediğini belirtir. Örneğin $\mathbf{B}_1 = \mathbf{12}$ ilişkisi ele alınsın. Bloklama planının diğer iki ilişkisi:

$\mathbf{B}_1\mathbf{1} = \mathbf{2}$ ve $\mathbf{B}_1\mathbf{2} = \mathbf{1}$

olup eğer blok etkisi $\mathbf{B}_1$ ile ana etki **1** arasında anlamlı bir etki mevcut ise, ana etki **2**, $\mathbf{B}_1\mathbf{1}$ ile karışacağından tahminlenemez. Benzer bir yorum $\mathbf{B}_1\mathbf{2} = \mathbf{1}$ için de yapılabilir. Bu varsayımın geçerliliği pek çok deneysel çalışmada doğrulanmıştır. Her bir bloktaki tüm muamelelerin artıları plot edilerek kontrol edilebilir. Eğer artıların şekilsel yapısı bloktan bloğa farklılık gösteriyorsa varsayım ihmal edilmiştir. Blok ve muamele etkileşimi, blok ve muamele değişkenleri ile ilgili ilginç bilgiler verebilir.

Bir 2^k tasarımın, her biri 2^{k-q} hacimli, 2^q blok halinde uygulanması için genel yaklaşım şu şekildedir:

İlk olarak 2^q adet bloğu tanımlamak için q adet bağımsız değişken jeneratör olarak, $\mathbf{B}_1$, $\mathbf{B}_2$,…, $\mathbf{B}_q$ tanımlanır. $\mathbf{B}_i$ile karışan faktöriyel etki $\mathbf{v}_i$ olsun;

$\mathbf{B}_1 = \mathbf{v}_1$, $\mathbf{B}_2 = \mathbf{v}_2$, …, $\mathbf{B}_q = \mathbf{v}_q$

Kalan blok etkileri $\mathbf{B}_i$'ler birbirleri ile çarpılarak elde edilebilir.

$$\mathbf{B}_1\mathbf{B}_2 = \mathbf{v}_1\mathbf{v}_2,\ \mathbf{B}_1\mathbf{B}_3 = \mathbf{v}_1\mathbf{v}_3,\ \ldots,\ \mathbf{B}_1\mathbf{B}_2\ldots\mathbf{B}_q = \mathbf{v}_1\mathbf{v}_2\ldots\mathbf{v}_q$$

$\mathbf{B}_i$'lerin 2^q -1 mümkün çarpanı vardır.

Örneğin 2^5 tasarım q=3 olacak şekilde $\mathbf{B}_1$ = **135**, $\mathbf{B}_2$ = **235** ve $\mathbf{B}_3$ = **1234** için sekiz blok uygulanabilir. Blok etkileri ile karışan faktöriyel etkiler:

$$\mathbf{B}_1\mathbf{B}_2 = \mathbf{23},\ \mathbf{B}_1\mathbf{B}_3 = \mathbf{1245},\ \mathbf{B}_2\mathbf{B}_3 = \mathbf{145},\ \mathbf{B}_1\mathbf{B}_2\mathbf{B}_3 = \mathbf{34}$$

şeklindedir. Elde edilen bloklama planı optimum mudur? Hiyerarşik sıra prensibine göre, mümkün olduğunca az sayıda düşük dereceden etkileşim karışmalıdır. Karşılaştırma yapmak amacıyla alternatif bir plan, $\mathbf{B}_1$ = **12**, $\mathbf{B}_2$ = **13** ve $\mathbf{B}_3$ = **45** ele alınsın.

$$\mathbf{B}_1\mathbf{B}_2 = \mathbf{23},\ \mathbf{B}_1\mathbf{B}_3 = \mathbf{1245},\ \mathbf{B}_2\mathbf{B}_3 = \mathbf{1345},\ \mathbf{B}_1\mathbf{B}_2\mathbf{B}_3 = \mathbf{2345}$$

İki plan karşılaştırıldığında, ilk planda iki adet iki-faktör etkileşimi karışırken ikinci planda dört adet iki-faktör etkileşimi karışmaktadır. İki-faktör etkileşimleri muhtemelen üç ve dört faktör etkileşimlerinden daha önemli olduğundan ilk plan daha iyidir.

1.3. İKİ SEVİYELİ KESİRLİ FAKTÖRİYEL TASARIMLAR

2^k tam faktöriyel tasarımlarda 2^k adet deneye ihtiyaç vardır. Büyük k değerleri ($k \geq 7$) için tam faktöriyel deneyler nadiren uygulanır. Bir 2^5 tam faktöriyel tasarım kullanıldığında, 32 deneyli tasarım 31 serbestlik derecesine sahiptir.

2^5 tasarımdaki etki sayıları

Ana etki	2-Faktör	3-Faktör	4-Faktör	5-Faktör
5	10	10	5	1

Görüldüğü üzere, serbestlik derecelerinden 16' sı üç ve daha yüksek etkileşim etkilerine ayrılmıştır. Hiyerarşik sıra prensibine göre, üç-faktör ve daha yüksek dereceden etkileşim etkileri genellikle anlamlı değildir. Bu nedenle tam faktöriyel tasarım kullanmak ekonomik değildir. Kesirli faktöriyel tasarımlar, tam faktöriyel tasarımın bir alt seti ya da kesirinden oluşur. Kesirli faktöriyel tasarımlar; değişkenlerin bir kısmının önemli sayıldığı eleme çalışmalarında, belirli etkilerin ihmal edildiği araştırmalarda, deneylerin ardışık olarak uygulandığı deney programlarında kullanışlıdır. Optimum kesirler çözünürlük ya da minimum abartı kriterine göre seçilir. Faktöriyel etkilerin eş yapısı, kesirli faktöriyel tasarımların kullanılmasının bir sonucu olarak ortaya çıkmaktadır ve etkilerin eş yapı oluşturması daha küçük bir tasarım kullanmanın sonucunda kullanılan bedeldir

Bir 2^k tam faktöriyelin $(1/2)^p$ kesiri 2^{k-p} kesirli faktöriyel olarak adlandırılır ve kesirli faktöriyeli oluşturmak için *p* adet jeneratöre ihtiyaç vardır. Seçilen *p* adet jeneratöre bağlı olarak bu jeneratörlerin 2^p-*p*-1 adet genelleştirilmiş etkileşimi vardır. Kullanılacak olan kesir ise *p* adet tanımlama kontrastı ile belirlenir. Tanımlama kontrastının oluşturduğu grup, tanımlama kontrastı alt grubu olarak adlandırılır ve 2^p-1 eleman ile **I** birim elemanından oluşur. Tasarımın eş yapısı ise tanımlama ilişkilerinin her etkinin bu tanımlama ilişkileri ile çarpılması sonucunda elde edilir. Her bir etki 2^p-1 adet eş yapıya sahiptir. Eş yapıyı basitleştirmek için genellikle yüksek derecen etkileşim etkilerinin önemsiz olduğu varsayılır.

Genel olarak bir 2^{k-p} tasarımın oluşturulmasında, ilk 1, …, *k-p* sütun bir *k-p* tam faktöriyelden, kalan *p* adet sütun ise ilk *k-p* sütunun etkileşimlerinden oluşmaktadır. Bu *p* adet sütunun seçimini, tanımlama kontrastı belirler.

Örneğin 2^{4-1} kesirli faktöriyelinini ele alalım; tasarımı oluşturmak için ilk önce 2^3 temel tasarım elde edilmiştir, (Tablo 1.5). 2^{4-1} deneyi için **D** faktörünün sütunu A**BC** faktörlerinin etkileşim sütununa eşit olacak şekilde seçilmiş olsun. Diğer bir deyişle, **A**, **B** ve **C** sütunlarındaki karşılıklı elemanların çarpım sonucu **D** sütunundaki karşılık gelen eleman ile aynıdır ve yarım kesri tanımlayan jeneratör, **I**=**ABCD** olarak belirlenir.

Tablo 1.5 : 2^{4-1} *Kesirli Faktöriyel için Tasarım*

Deneme	Temel Tasarım			
	A	B	C	D=ABC
1	-	-	-	-
2	+	-	-	+
3	-	+	-	+
4	+	+	-	-
5	-	-	+	+
6	+	-	+	-
7	-	+	+	-
8	+	+	+	+

(Kaynak: Montgomery,1997;378)

D etkisinin tahmini ile **ABC** etkileşim etkisinin tahmini aynı şekilde elde edilir;

$$\bar{y}(\mathbf{D}_+) - \bar{y}(\mathbf{D}_-) = \bar{y}(\mathbf{ABC}_+) - \bar{y}(\mathbf{ABC}_-)$$

Bu tip tasarımlardan elde edilen verilerin, **ABC** 'nin tahmininden **D** 'nin tahminini ayrıştırma yeteneği yoktur. Ana etki **D** 'nin **A** $\times$ **B** $\times$ **C** etkileşimi ile eş yapı oluşturduğu söylenir. notasyonel olarak eş yapı ilişkisi:

D = **ABC** ya da **I** = **ABCD**

Burada **I** tüm elemanları + olan sütun vektörüdür. **ABCD** bu kesrin jeneratörüdür ve dört karakterli bir kelime olarak da tanımlanabilir.
2^{4-1} faktöriyel etkilerin tahminlenmesi için sadece 8 serbestlik derecesine sahip olduğundan 16 faktöriyel etkinin tümü tahminlenemez. Aşağıda gösterildiği gibi 16 etkiden, 7 tanesi 7 eş yapı (**I** = **ABCD**) ile tahminlenebilir.

Deneylerin tekrarlı olması durumunda ise, kalan serbestlik dereceleri hatanın tahminlenmesinde kullanılır.

I = **ABCD** eşitliği 2^{4-1} tasarımının tanımlama ilişkisi olarak adlandırılır. **I** = **ABCD**' nin her iki tarafı **B** ile çarpıldığında **B** = **ACD** ilişkisi elde edilir. **B** ana etkisi **A** $\times$ **C** $\times$ **D** etkileşimi ile karışmaktadır. Aynı yaklaşımı kullanarak 7 eş yapı ilişkisi elde edilir. Burada **I** değeri genel ortalamayı μ temsil etmektedir.

A = BCD	**B = ACD**	**C = ABD**	**D = ABC**
AB = CD	**AC = BD**	**AD = BC**	(1.3)

Eşitlik (1.3) 'in birinci satırında verilen eş yapı için doğrusal kombinasyonlar aşağıda tanımlanmıştır.

l_A = **A** + **BCD**
l_B= **B** + **ACD**
l_C= **C** + **ABD**
l_D = **D** + **ABC**

Eğer ana etkiler iki-faktör etkileşimleri ile eş yapı oluşturmuyorsa temiz, eğer ana etkiler, iki faktör etkileşimleri ya da üç faktör etkileşimleri ile eş yapı oluşturmuyor ise çok temiz olarak adlandırılır.

Kesirlerin elde edilmesi için karışan etkileşim(ler) birim etkileşim grubu ya da tanımlama kontrastı olarak adlandırılır. Birim grup verildiğinde, eş yapı ilişkileri kolaylıkla elde edilir. kesirli faktöriyel tasarımlarda etkilerin sapmasızlık tahminlerinin elde edilmesi eş yapıdaki diğer etkilerin sıfır olduğu varsayımına dayanmaktadır.

1.3.1. Kesirli Faktöriyel Tasarımların Çözünürlüğü

Bir 2^{k-p} tasarım için, tanımlama kontrastı alt grubundaki *i* uzunluktaki kelime sayısı A_i ile belirtilsin.

$$\mathbf{W} = (A_3, \ldots, A_k) \tag{1.4}$$

vektörü kelime uzunluğu örüntüsü olarak adlandırılır. Bir 2^{k-p} tasarımın çözünürlüğü $A_r \geq 1$ olmak üzere tanımlama kontrastı alt grubundaki en kısa kelime uzunluğu *r* ile tanımlanır.

Tasarımın çözünürlüğü *R* ile tanımlansın. Bu tasarım genellikle 2_R^{k-p} şeklinde gösterilir. Çözünürlük *R*, *i*-faktör etkisinin, *R-i* faktör etkisinden daha küçük etkilerle eş yapı oluşturmadığını belirtir. Örneğin çözünürlüğü III olan tasarımlarda ana etkiler (*i*=1) 3-1=2 > 1 ana etkiler ile karışmaz.

Çözünürlüğü IV ve V Olan Tasarımlar İçin Kurallar

1. Çözünürlüğü IV olan bir tasarımda, ana etkiler temizdir.
2. Çözünürlüğü V olan bir tasarımda, ana etkiler çok temizdir, iki-faktör etkileşimleri temizdir.
3. Verilen *k* ve *p*'ye göre, çözünürlüğü IV olan tasarımlar arasında en fazla sayıda iki-faktör etkileşimi temiz olan en iyidir.

Mümkün en yüksek çözünürlükte çalışılmak istenir ancak çözünürlüğü maksimum seviyedeki tüm 2_R^{k-p} tasarımlar eşit oranda iyi değildir. Yanı çözünürlüğe sahip ancak farklı kelime uzunluğu örüntüsüne sahip tasarımlar mevcuttur. Kesirli faktöriyel tasarımları karakterize etmek veya ayrıştırabilmek için Fries ve Hunter (1980)' in önerdiği minimum abartı kriteri kullanılır.

1.3.2. Minimum Abartı Kriteri:

Herhangi iki kesirli faktöriyel tasarım d_1 ve d_2 olsun. $A_r\ (d_1) \neq A_r\ (d_2)$ eşitsizliğini sağlayan en küçük sayı *r* olsun. Eğer $A_r\ (d_1) < A_r\ (d_2)$ ise d_1 tasarımı d_2 'den daha küçük abartıya sahiptir. Eğer d_1 den daha küçük abartıya sahip bir tasarım mevcut değilse d_1 tasarımı minimum abartıya sahiptir. Diğer bir ifade ile tanımlama ilişkisindeki ortak kelime sayısını minimum eden tasarım minimum abartılıdır.

Aşağıda tanımlanan üç farklı 2^{7-2} tasarım ele alınsın:

d_1 : **I = 1236 = 2347 = 1467**

d_2 : **I = 1236 = 1457 = 234567** (1.5)

d_3 : **I = 4567 = 12346 = 12357**

Her üç tasarımında çözünürlüğü IV 'dür. Bununla birlikte farklı kelime uzunluğu örüntüsüne sahiptirler.

W_1 (d_1) = (0, 3, 0, 0, 0) W_2 (d_2) = (0, 2, 0, 1, 0) W_2 (d_2) = (0, 1, 2, 0, 0)

Her üç tasarım içinde tanımlama ilişkisinde ortak bulunan 4 kelime uzunluğudur: d_1 tasarımı için tanımlama ilişkisindeki üç kelimenin (1236, 2347, 1467), d_2 tasarımın da 2 kelimenin (1236, 1457) ve d_3 tasarımında 1 kelimenin (4537) uzunluğu 4 tür. Bu durumda tanımlama ilişkisindeki ortak olana kelime sayısını minimize ettiği için d_3 tasarımı minimum abartılı tasarım olarak seçilir.

Tasarımlar çözünürlük kriterine göre karşılaştırıldıklarında, tanımlama ilişkisindeki en kısa kelime dikkate alınır. Eğer bu uzunluklar eşit ise tasarımların eşit olduğu kabul edilebilir. Minimum abartı kriteri ise bir tasarımın diğerine göre üstün olduğu adledilene kadar tanımlama ilişkilerindeki kelime uzunluğu örüntülerini incelemeye devam eder.

Bölüm 2

KARIŞIM DENEYLERİ

2.1. KAVRAMLAR VE KISITLAR

Birçok ürün, bazı maddelerin karışımından meydana gelir ve bu tür ürünlere ait kalite karakteristiklerinin istenilen sonuçlarını elde edebilmek için, ürünü oluşturan bileşenlerin oranlarının ne olacağını tespit etmek önemli bir problemdir. Endüstriyel araştırmalar kapsamında, istenilen sonuç "en iyi kaliteye" ulaşmaktır. En iyi kalitenin belirlenmesi göreceli bir konudur. Örneğin;

1. Petrol firmaları için benzin karışımının en yüksek oktan oranı (Scheffe, 1968)
2. İlaç kullanımına ait olarak, ilaca güzel bir tat vermesi amacıyla katılan maddelerin etkisi için en uzun süre (Kristl, 1993)
3. Kauçuk endüstrilerinde birkaç bileşene sahip plastiğin en büyük gerilme ve bükülme gücü (Cornell, 1993)

vb. gibi.

Karışım deneylerinde, nihai ürünün ölçülen karakteristiği ile ürünü oluşturan bileşen oranları arasındaki ilişki incelenir. Karışım deneyleri ile ilgili araştırmalar 1950li yıllarda başlamış olup Scheffe 'nin 1958 makalesi tüm çalışmalara öncülük etmiştir.

Karışım deneylerinde, nihai ürünün ölçülen karakteristiği üzerindeki etkisi açısından hangi bileşenlerin önemli olduğuna karar verilir. Bu ise veriden geçerli bilginin çıkarılması için deneyin planlaması gerektiği konusunda yol göstericidir. Veriler toplandıktan sonra, analiz edilir, yorumlanır ve sonuç çıkarılır.

Karışım deneylerinin amacı, kalite karakteristiğini (yanıt) karışım oranlarının terimleri cinsinden temsil edebilecek bir model (genellikle polinomiyel bir model) bulmaktır.

Genel karışım probleminde, ölçülen yanıt sadece karışımdaki bileşenlerin oranlarına bağlıdır, karışımın miktarına bağlı değildir.

Karışımda yer alan maddelerin oranları "bileşen oranı" olarak adlandırılır. Karışım deneylerinin ayırt edici özelliği, bağımsız veya kontrol edilebilir değişkenlerin, ses, ağırlık… gibi oranların sınırsız miktarlarından ziyade karışım miktarının oranlarını temsil etmesidir. Bileşen oranları pozitiftir ve toplamları bir birimdir. Bu koşullar karışımdaki bileşenlerin sayısı q ile gösterilir ve i 'inci bileşenin oranı x_i ile tanımlanırsa,

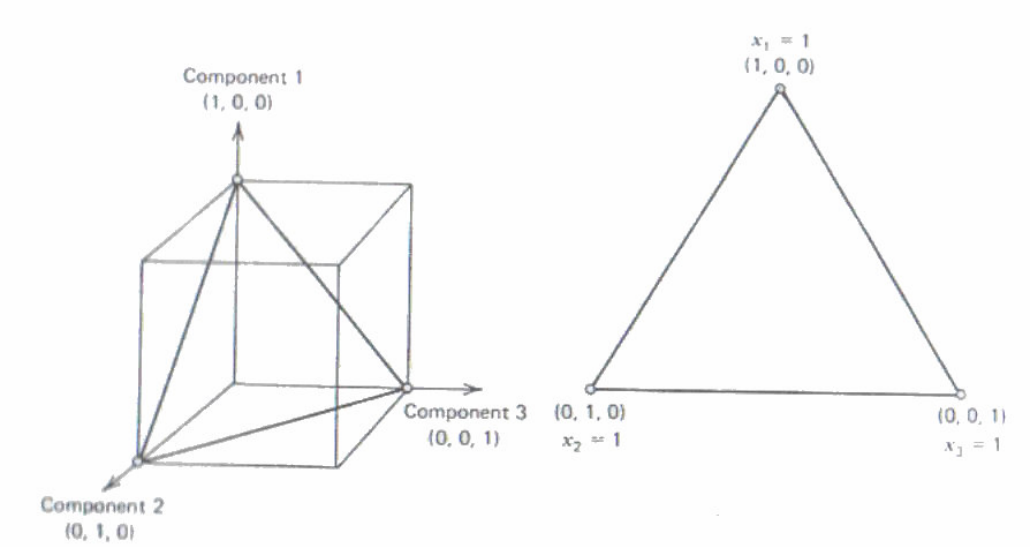
$$x_i \geq 0, \quad i = 1, 2, ..., q \tag{2.1}$$

$$\sum_{i=1}^{q} x_i = x_1 + x_2 + ... + x_q = 1 \tag{2.2}$$

şeklinde ifade edilebilir.

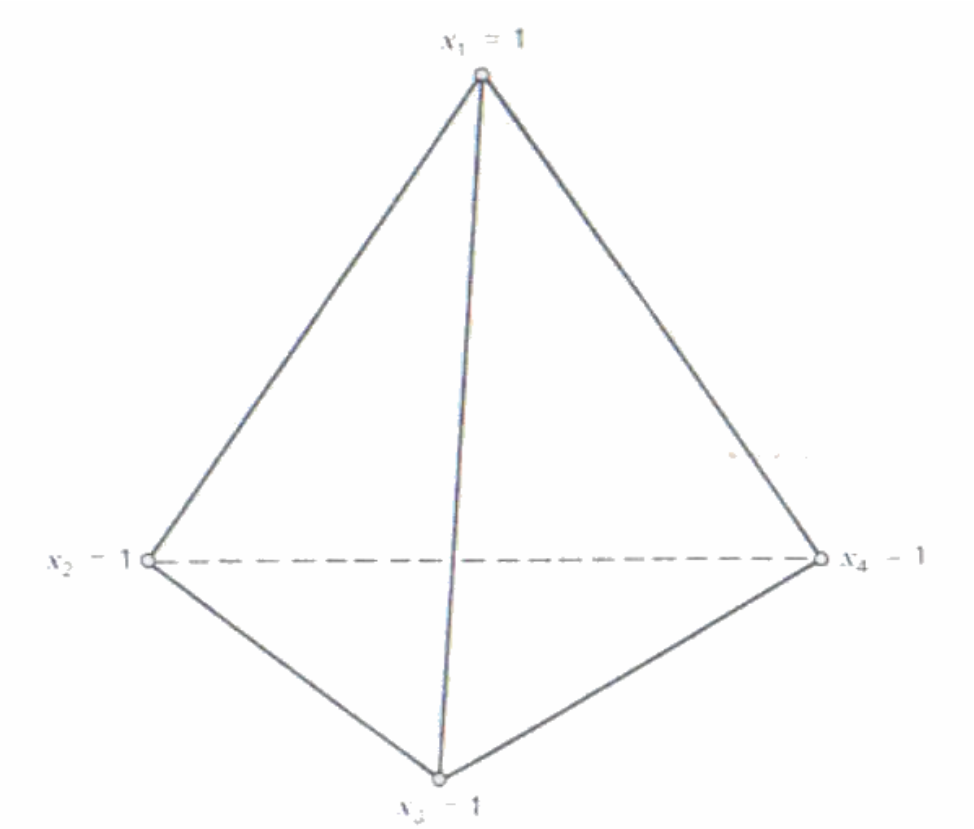
Bir bileşenden oluşan karışımlar "saf karışım" veya "tek bileşenli karışım" olarak adlandırılır. Saf karışımlar çok bileşenli karışımların karşılaştırılmasında standart veya kıstas oluşturmak için kullanılırlar.

Bileşen oranları, denetim altında tutulan değişkenlerdir, yani deneydeki bir bileşenin oranı azaltılırsa (ya da arttırılırsa) diğer bileşenlerden en az biri de uygun oranda arttırılır (ya da azaltılır). Bu nedenle, karışım deneylerinde ilgilenilen deneysel bölge ya da faktör uzayı, faktöriyel deneylerdeki faktör uzayından farklıdır. Örneğin, 2^q faktöriyel denemesinde x_i, ± 1 değerleriyle kodlanmış değişkenler olmak üzere, faktör uzayı q boyutlu bir kübiktir. Karışım deneylerinde ise faktör uzayı, (q-1) boyutlu bir simplekstir. Üç bileşen için (q=3) faktör uzayı, bir eşkenar üçgen ve dört bileşen için (q=4) faktör uzayı, bir dört yüzlüdür. Şekil 2.1 ve Şekil 2.2 de üç bileşen ve dört bileşen için faktör uzaylarını göstermektedir.



(Kaynak: *Cornell,1990, 6)*

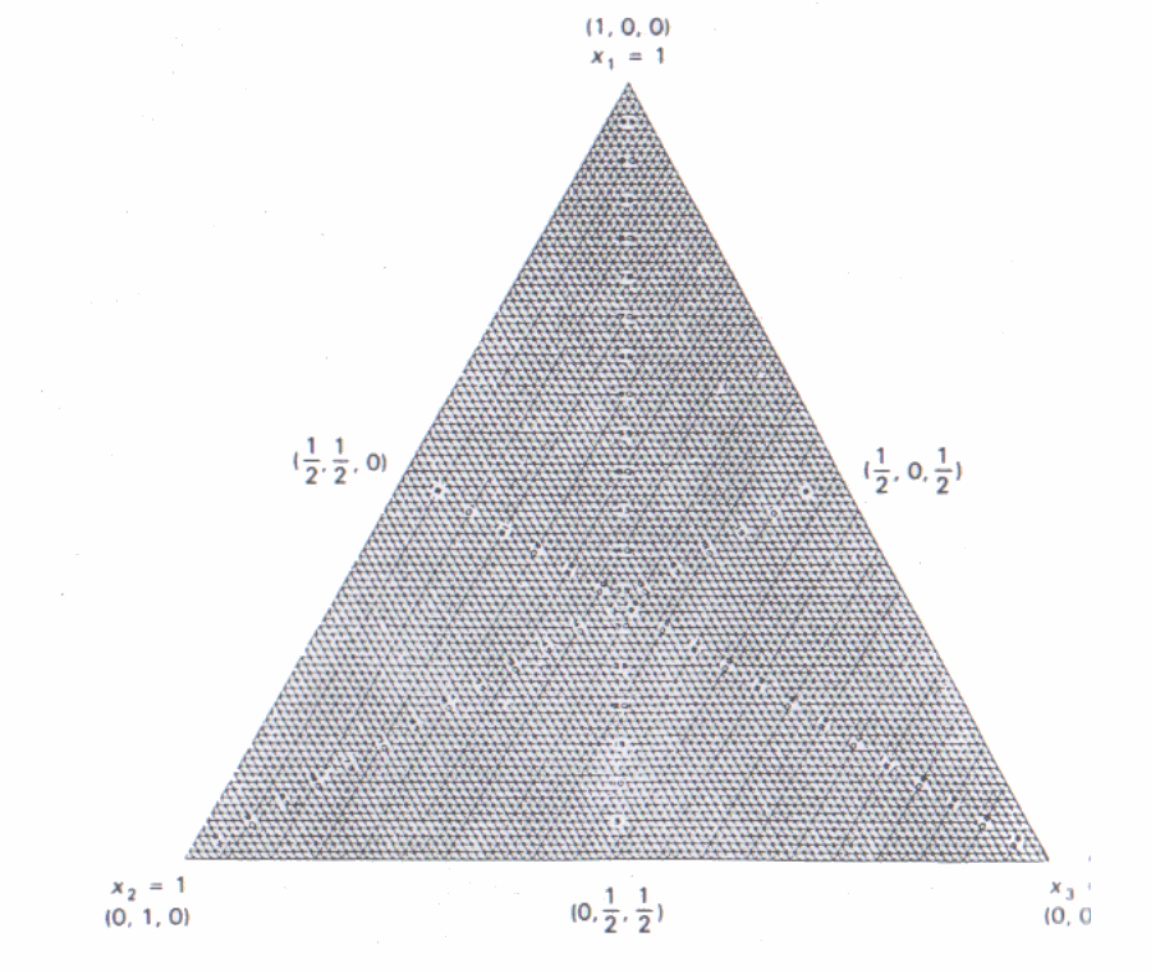
Şekil 2.1. *Üç bileşen için simpleks faktör uzayları*



(Kaynak: *Cornell,1990, 7)*

Şekil 2.2. *Dört bileşen için simpleks faktör uzayı*

Karışım problemi için koordinat sistemi “simpleks koordinat sistemi” olarak adlandırılır. Örneğin üç bileşen için koordinatlar, üçgensel grafik kâğıdı üzerinde çizilir. Bu grafik kağıdı, üç kenarına paralel çizgilere sahip olan bir eşkenar üçgendir ve Şekil 2.3 ’de gösterilmiştir. Üçgenin köşeleri saf ya da tek bileşeni tanımlar ve $x_i = 1$, $x_j = x_k = 0$ $(i, j, k = 1,2,3$ ve $i \neq j \neq k)$ şeklinde ifade edilir. Üçgenin içindeki noktaların hiç biri kayıp değildir yani, $x_1 > 0, x_2 > 0$ ve $x_3 > 0$’dır. Üçgenin merkezi üç bileşenden de eşit oranların alındığı $(⅓, ⅓, ⅓)$ karışımı ifade eder.



(Kaynak: Cornell, 1990; 8)

Şekil 2.3. *Üç bileşenli sistem için üçgensel koordinat kağıdı*

2.2. FAKTÖRİYEL DENEY VE KARIŞIM DENEYİ

Karışım deneyinde yanıtın karışımda var olan bileşenlerin relatif oranına bağlı olduğu ve karışım miktarına bağlı olmadığı varsayılır. Karışım deneylerinde eğer toplam miktar sabit tutulur ve karışımı meydana getiren bileşenlerin relatif oranları değiştirilerek yanıtın değeri değiştirilirse yanıtın davranışı, karışımı oluşturan bileşenlerin ortak karışım özelliğinin ölçümü olur.

Faktöriyel deney; iki ya da daha çok faktörün değiştirilmesinin bazı gözlenebilir nitelikleri üzerindeki etkileri inceler. Her bir faktörün seviye veya değer serisi seçilir ve faktör seviyelerinin belirli kombinasyonları test edilir. Faktöriyel deneyin amacı diğer faktörler sabitken herhangi bir faktörün seviyesi değiştirildiğinde yanıttaki değişmeyi ölçmektir.

2.3. SİMPLEKS KAFES TASARIMLAR VE POLİNOMİYEL MODELLER

2.3.1 {*q,m*} Simpleks Kafes Tasarımları

{*q,m*} simpleks kafes tasarımları simpleks bölgesindeki yanıt yüzeylerini temsil eden en iyi seçilmiş polinomiyel bir denklem ve deneysel alandaki noktaların tek düzen olarak yayıldığı tasarımlardır.

Scheffe (1958) tarafından verilen {*q,m*} simpleks kafes tasarımları $\binom{q+m-1}{m}=\frac{(q+m-1)!}{m!(q-1)!}$ adet nokta içerir ve bileşen oranları $x_i = 0,\frac{1}{m},\frac{2}{m},...,1;$ i =1,2,…,q olup 0 ile 1 aralığında değişmektedir. Burada *m*, kullanılan polinomiyel modelin derecesidir.

q=3 bileşenli bir sistem için bütün mümkün karışımların faktör uzayı bir eşkenar üçgendir.{3,2} simpleks kafes tasarımı $\binom{q+m-1}{m}=\frac{(q+m-1)!}{m!(q-1)!}$=6 noktadan oluşur. Her bir x_i, (m+1)=3 mümkün değer alır, $x_i = 0, \frac{1}{2}, 1$. Olası tasarım noktaları ise;(x_1, x_2, x_3) = (1,0,0), (0,1,0), (0,0,1), (1/2, 1/2, 0), (1/2, 0, 1/2), (0, 1/2, 1/2) olacaktır. (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 0) noktaları saf karışımları tanımlar ve bu üç nokta üçgenin üç köşesidir. $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0),(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$, $(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ noktaları ise ikili

karışımları ya da iki bileşenli karışımları tanımlar ve bu noktalar, üçgenin kenarlarının orta noktalarıdır.

{*q,m*} simpleks kafes tasarımlarının avantajlarını aşağıdaki gibi sıralanabilir (Cornell, 1990; 16).

1) Kafes, simpleks üzerindeki noktaların simetrik ve uniform bir düzeninden meydana gelir ve bu nedenle de sistemdeki her bir bileşene eşit ağırlık verilir.
2) Bu tasarımla bileşen kombinasyonlarını hesaplamak oldukça kolaydır.
3) Regresyon modeli katsayılarının en küçük kareler tahminleri, kafes noktalarındaki gözlemlerin ortalamalarından kolaylıkla hesaplanabilir.

Bu avantajların yanı sıra {*q,m*} simpleks kafes düzenlemelerinin istenmeyen iki özelliği vardır (Cornell, 1990; 16). Bunlar;

1) {*q,m*} simpleks kafesinin *q* bileşenlerin en fazla *m* tanesinden meydana gelmesi nedeniyle tamamen sınırlı bir tasarımdır.
2) *q* 'nun büyük değerleri ve $m \geq 2$ için kafes noktalarının sayısı aşırı derecede fazladır.

Karışım deneylerinde uyumu yapılan polinomiyel model, alışılmış regresyon modellerinden farklıdır. Scheffé (1958), {*q,m*} simpleks kafes tasarımlarında kullanmak amacıyla kanonik polinomların kullanılmasını önermiştir.

2.3.2. Karışım Polinomlarının Kanonik Formu

Karışım deneylerinde ürünün istenen karakteristiği üzerindeki ölçülen yanıt y ile ifade edilmektedir ve bileşen oranları $x_1, x_2, ..., x_q$ lar deneyde yer alan q faktörün seviyesidir. Gerçek yanıt ise;

$$0 \leq x_i \leq 1 \qquad i = 1,...,q$$
$$\sum_{i=1}^{q} x_i = 1 \tag{2.3}$$

doğal kısıtlarını sağlayan $\eta = \phi(x_1, x_2, ..., x_q)$ dır.

Karışım deneylerindeki bu doğal kısıtlamalar yanıt yüzeyleri metodolojisi uygulamaları üzerinde doğrudan etkiye sahiptir. En büyük etkisi ise modelin formunun oluşturulmasında görülmektedir. Yanıt yüzeyleri metodolojisinde standart polinomiyel modellerin kullanılması yerine Scheffe (1958, 1963) tarafından önerilen kanonik polinomiyel model kullanılmaktadır. Kanonik form, standart polinomlardaki terimlere $x_1 + x_2 + ... + x_q = 1$ kısıtı uygulanarak elde edilir.

Aşağıda, dört bileşen (q = 4) için birinci ve ikinci dereceden polinomiyel modellerin kanonik formları elde edilmiştir.

$x_1, x_2, x_3, x_4,$ oranları ve $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ kısıtı altında dört bileşen için birinci dereceden ve ikinci dereceden model,

$$\eta = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + w_4x_4 \tag{2.4}$$

ve

$$\begin{aligned}\eta = {} & w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + w_4x_4 \\ & + w_{11}x_1^2 + w_{22}x_2^2 + w_{33}x_3^2 + w_{44}x_4^2 \\ & + w_{12}x_1x_2 + w_{13}x_1x_3 + w_{14}x_1x_4 \\ & + w_{23}x_2x_3 + w_{24}x_2x_4 + w_{34}x_3x_4\end{aligned} \tag{2.5}$$

şeklindedir ve (2.4) ve (2.5) modellerinde w_0 yerine $w_0(x_1+x_2 + x_3 + x_4)$ ve ikinci dereceden model için x_i^2 yerine $x_i(1 - x_j - x_k - x_p)$ yazarsak, $(i \neq j \neq k \neq p)$ ve $(i, j, k, p = 1,...,4)$, (2.4) modeli;

$$\eta = \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \beta_3x_3 + \beta_4x_4 \tag{2.6}$$

olur ve bu eşitlikte $\beta_i = w_0 + w_i$ (i = 1,..,4 için) dir.

Benzer şekilde (2.5) modeli $\beta_i = w_0 + w_i + w_{ii}$ ve $\beta_{ij} = w_{ij} - w_{ii} - w_{jj}$ (i,j=1,2,3,4 , i≠j için) olarak ifade edildiğinde;

$$\begin{aligned}\eta = {} & \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \beta_{12}x_1x_2 + + \beta_{13}x_1x_3 + \beta_{14}x_1x_4 \\ & + \beta_{23}x_2x_3 + \beta_{24}x_2x_4 + \beta_{34}x_3x_4\end{aligned} \tag{2.7}$$

haline gelir. (2.6) ve (2.7) deki eşitlikler sırasıyla, birinci dereceden ve ikinci dereceden kanonik model olarak ifade edilir.

Karesel terimler ve β_0 sabit terimi modelde yer almadığından kanonik karışım modelleri aynı dereceli standart polinomlardan daha az terim sayısına sahiptir.

{*q,m*} polinomiyelindeki veya kanonik polinomiyeldeki terim sayısı **($^{q+m-1}C_m$)** dir ve bu sayı {*q,m*} simpleks kafes tasarımında oluşturulan nokta sayısına eşittir. Örneğin m = 1 için doğrusal kanonik model;

$$\eta = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_{ui} \tag{2.8}$$

(2.8) deki terim sayısı q olup {q,1} simpleks kafes tasarımındaki nokta sayısıdır.

m = 2 için İkinci dereceden kanonik model:

$$\eta = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_{ui} + \sum\sum_{i<j}^{q} \beta_{ij} x_{ui} x_{uj} \tag{2.9}$$

şeklinde olacaktır. (2.9) deki terim sayısı, q+q(q-1)/2 = q(q+1)/2 dir.

Kübik kanonik polinomiyel ve ya {q,3} polinomiyel;

$$\eta = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i + \sum\sum_{i<j}^{q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum\sum_{i<j}^{q} \delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum\sum\sum_{i<j<k}^{q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k \tag{2.10}$$

şeklinde olup terim sayısı $q(q+1)(q+2)/6$ dir.

$\delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)$ teriminin dikkate alınmadığı kübik modelin özel bir formu olan özel kübik polinomiyel;

$$\eta = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i + \sum\sum_{i<j}^{q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum\sum\sum_{i<j<k}^{q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k \tag{2.11}$$

olup terim sayısı $q(q^2+5)/6$ dır.

Kanonik formlarda β_i parametresi $x_i = 1, x_j = 0$, $i \neq j$ iken saf bileşendeki beklenen yanıtı, β_{ij} parametresi ise x 'ler arasındaki etkileşimi temsil etmektedir. i ve j bileşenleri eşitlik (2.9) ile temsil edildiğinde artış söz konusu olacaktır. Burada ifade edilen artış, eşitlik (2.9) ile (2.8) arasındaki fark olan $\beta_{ij}x_{ui}x_{uj}$ terimi ile temsil edilmektedir. Eğer yanıtın pozitif değere sahip olması isteniyorsa ve $\beta_{ij}>0$ ise artış sinerjiktir. Diğer bir ifade ile i ve j bileşenlerinin karışımı sinerjik etkiye sahiptir. Diğer taraftan $\beta_{ij}<0$ ise karışım antagonistiktir.

Kanonik polinomlardaki katsayı tahminleri yanıtların gözlenen değerlerinin basit fonksiyonlarıdır. Bunu görmek amacıyla, tek bileşenli karışımlarda (x_i=1, x_j=0, $i \neq j$) yanıtın tahminlenen değeri y_i ile ve ikili karışımlarda (x_i=½, x_j=½, x_k=0, $i<j<k$) ise y_{ij} ile gösterilsin. Eğer r_i ve r_{ij} tekrarlı gözlemleri, x_i=1, x_j=0'da ($i \neq j$) ve x_i=x_j=½, x_k=0'da ($i<j<k$) elde edilirse ve eğer gözlemlerin ortalamaları sırasıyla, $\bar{y}_i$ ve $\bar{y}_{ij}$ ile gösterilirse ikinci dereceden polinomiyel modeldeki b_i ve b_{ij} katsayılarını tahminlemek amacıyla (2.9) modelinden faydalanarak,

$$\begin{aligned} \bar{y}_i &= b_i\,(x_i = 1) \\ \bar{y}_{ij} &= b_i\,(x_i = 1/2) + b_j\,(x_j = 1/2) + b_{ij}\,(x_i x_j = 1/4) \end{aligned} \qquad (2.12)$$

elde edilir ve bu formüllerden yola çıkarak parametre tahminleri,

$$\begin{aligned} b_i &= \bar{y}_i \quad , i = 1,2,\ldots,q \\ b_{ij} &= 4\bar{y}_{ij} - 2(\bar{y}_i + \bar{y}_j) \quad i,j = 1,2,\ldots,q \quad i < j \end{aligned} \qquad (2.13)$$

olarak hesaplanır (Cornell, 1990; 36).

Bir kafesin n adet noktasında alınan verilere uyumu yapılan bir polinomiyel modeldeki parametre tahminlerini hesaplamak için prosedürler, n adet denklemin birlikte çözümünü içerirler. Bu parametreler için ortalama ve varyans formülleri aşağıda verilmiştir (Cornell, 1990; 36).

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

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

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

$$Var(b_{ij}) = \frac{16\sigma^2}{r_{ij}} + \frac{4\sigma^2}{r_i} + \frac{4\sigma^2}{r_j} \qquad (2.14)$$

$$Cov(b_i, b_j) = 0$$

$$Cov(b_i, b_{ij}) = E\left[\bar{y}_i(4\bar{y}_{ij} - 2\bar{y}_i - 2\bar{y}_j)\right] - E[\bar{y}_i]\,E\left[4\bar{y}_{ij} - 2\bar{y}_i - 2\bar{y}_j\right] = \frac{-2\sigma^2}{r_i}$$

$$Cov(b_{ij}, b_{ijk}) = \frac{4\sigma^2}{r_i}, j \neq k \qquad i, j, k = 1,2,...,q \;\; i < j,k$$

Eğer hataların normal dağıldığı varsayılırsa ve tasarım noktalarındaki tekrar sayısı $r_i=r_j=r$ ise $b_i \sim N(\beta_i, Var(\beta_i))$ ve $b_{ij} \sim N(\beta_{ij}, Var(\beta_{ij}))$ olacaktır.

b_i ve b_{ij}, rasgele değişkenlerin (y_i ve y_{ij}) doğrusal fonksiyonlarıdır ve bu nedenle, b_i ve b_{ij} parametreleri rasgele değişkenlerdir. x'deki yanıtın tahmini olan $\hat{y}(x)$ de rasgele bir değişkendir. Bununla birlikte, $\hat{y}(x)$'in beklenen değeri $E[\hat{y}(x)] = \eta$'dür.

$\hat{y}(x)$'in varyansı kafes noktalarındaki $\bar{y}_i$ ve $\bar{y}_{ij}$ ortalamalarının varyansı yardımıyla bulunabilir. Bunun nedeni,

$$\hat{y}(x) = \sum_{i=1}^{q} a_i \bar{y}_i + \sum\sum_{i<j}^{q} a_{ij} \bar{y}_i \bar{y}_{ij} \qquad (2.15)$$

olmasıdır. Bu formülde, $a_i = x_i(2x_i - 1)$ ve $a_{ij} = 4x_i x_j$ $i, j = 1,2,...,q$ $i < j$'dir. Eğer $\bar{y}_i$ ve $\bar{y}_{ij}$, sırasıyla, r_i ve r_{ij} gözlemlerinin ortalamaları ise

$$Var[\hat{y}(x)] = \sigma^2 \left[\sum_{i=1}^{q} \frac{a_i^2}{r_i} + \sum\sum_{i<j}^{q} \frac{a_{ij}^2}{r_{ij}} \right] \qquad (2.16)$$

ve $r_i=r_j=r$ koşulu altında,

$$Var[\hat{y}(x)] = \frac{\sigma^2}{r}\left[\sum_{i=1}^{q} a_i^2 + \sum\sum_{i<j}^{q} a_{ij}^2\right] \qquad (2.17)$$

olacaktır. (2.17) denkleminde σ^2/r değeri, σ^2 nedeniyle deneysel gözlemlerin hassaslığına bağlıdır. Oysa ki,

$$\left[\sum_{i=1}^{q} a_i^2 + \sum\sum_{i<j}^{q} a_{ij}^2\right]$$

terimi, a_i'ler ve dolayısıyla x_i'ler nedeniyle, sadece göz önünde bulundurulan karışımın yapısına bağlıdır. σ^2 bilinmediğinde, tekrarlı gözlemler ile s^2 tahminlenir.

2.4. SİMPLEKS MERKEZ TASARIM VE POLİNOMİYEL MODELLER

q bileşenli tasarımlar ile yapılan deneyler için simpleks kafes tasarıma alternatif bir tasarım, Scheffe (1963) tarafından önerilen, q adet bileşenin bütün mümkün alt setlerini içeren karışımları tanıtan ve 2^q–1 adet noktaya sahip olan simpleks merkez tasarımdır.

Simpleks merkez tasarımındaki noktalar, q adet saf karışım, eşit oranlarla $\binom{q}{2}$ adet ikili karışım, eşit oranlarla $\binom{q}{3}$ adet üçlü karışım, ..., eşit oranlarla $\binom{q}{q}$ adet q'lu karışım şeklindedir. Diğer bir deyişle, tasarım noktalarının q adedi (1, 0, 0, ..., 0)'ın permütasyonlarından, $\binom{q}{2}$ adedi $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, ..., 0)$ 'ın permütasyonlarından, $\binom{q}{3}$ adedi $(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0, ..., 0)$'ın permütasyonlarından, ..., ve merkez noktası $(\frac{1}{q}, \frac{1}{q}, ..., \frac{1}{q})$'dan oluşmaktadır.

Scheffe simpleks merkez tasarımlarında kullanmak amacıyla simpleks kafes tasarımlarında olduğu gibi, kanonik polinomlarını tanıtmıştır. q'uncu dereceden bir polinom 2^q-1 adet parametre (tasarım noktası) içerecektir ve aşağıdaki gibi ifade edilecektir.

$$\eta = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i + \sum\sum_{i<j}^{q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum\sum\sum_{i<j<k}^{q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k + ... + \beta_{12...q} x_1 x_2 ... x_q \qquad (2.18)$$

(2.18) regresyon denklemindeki 2^q-1 adet katsayı, simpleks merkez tasarımının 2^q-1 noktalarındaki yanıtlar yardımıyla hesaplanabilir. Saf bileşen i'deki yanıt;

$$\eta = \eta_i, \quad x_i = 1, x_j = 0 (i \neq j) \tag{2.19}$$

i ve *j* bileşenlerinin eşit oranları ile ikili karışımdaki yanıt,

$$\eta = \eta_{ij}, \quad x_i = x_j = \tfrac{1}{2}, x_k = 0 (k \neq i, j) \tag{2.20}$$

i, *j* ve *k* bileşenlerinin eşit oranları için üçlü karışımlardaki yanıt,

$$\eta = \eta_{ijk}, \quad x_i = x_j = x_k = \tfrac{1}{3}, x_m = 0 (m \neq i, j, k) \tag{2.21}$$

ve genel olarak, i_1, i_2, ..., i_r bileşenlerinin eşit oranları ile *r*'li karışımlardaki yanıt,

$$\eta = \eta_{i_1 i_2 \ldots i_r}, \quad x_{i_1} = x_{i_2} = \ldots = x_{i_r} = \tfrac{1}{r}, x_i = 0 (i \neq i_1, i_2, \ldots, i_r) \tag{2.22}$$

olacaktır. Eğer (2.19) denklemi (2.18)'de yerine yazılırsa,

$$\beta_i = \eta_i \tag{2.23}$$

olur ve eğer, (2.20) denklemi (2.18)'de yerine koyulursa,

$$\eta_{ij} = 2^{-1}(\beta_i + \beta_j) + 2^{-2}\beta_{ij} \tag{2.24}$$

denklemi elde edilir ve (2.20) denklemi bu denklemde yerine koyulursa,

$$\beta_{ij} = 2\left[2^1 \eta_{ij} - 1^1(\eta_i + \eta_j)\right] \tag{2.25}$$

sonucuna ulaşılabilir. Eğer (2.21) denklemi (2.18)'de yerine koyulursa,

$$\eta_{ijk} = 3^{-1}(\beta_i + \beta_j + \beta_k) + 3^{-2}(\beta_{ij} + \beta_{ik} + \beta_{jk}) + 3^{-3}\beta_{ijk} \tag{2.26}$$

denklemi elde edilir ve (2.20) ve (2.21) denklemleri yardımıyla,

$$\beta_{ijk} = 3\left[3^2\eta_{ijk} - 2^2\left(\eta_{ij} + \eta_{ik} + \eta_{jk}\right) + 1^2\left(\eta_i + \eta_j + \eta_k\right)\right] \tag{2.27}$$

olacaktır.

Genel olarak {1,2,…,q} nin r adet elemanlarının $(i_1,i_2,\ldots,i_r)$ alt setleri S_r ile belirtilirse model parametreleri için genel formülasyon;

$$\begin{aligned}\beta_{rs} &= r\{r^{r-1}L_r(S_r) - (r-1)^{r-1}L_{r-1}(S_r) + \ldots + (-1)^{r-1}1^{r-1}L_1(S_r)\} \\ &= r\{\sum_{t=1}^{r}(-1)^{r-t}t^{r-1}L_t(S_r)\end{aligned} \tag{2.28}$$

$L_t(S_r)$ tüm ${}^rC_t$ yanıtlarının toplamıdır.

Eşitlik (2.18) deki parametre tahminleri için formülasyonlar, Eşitlik (2.28) de sırasıyla $\eta_i, \eta_{ij}, \eta_{ijk}$ için $\bar{y}_i, \bar{y}_{ij}, \bar{y}_{ijk}$ yerine yazılması ile elde edilen formülasyonlardır. Bunu ifadeyi açıklamak için 3 bileşenli Simpleks merkez tasarımın noktalarındaki beklenen yanıtları gösteren Şekil 2.4 (a) ele alınsın:

Eğer η_i yerine $\bar{y}_i$, η_{ij} yerine $\bar{y}_{ij}$ ve η_{ijk} yerine de $\bar{y}_{ijk}$ yazılırsa, β_{12} nin tahmini olan b_{12}, $S_r = 12$ ve r = 2 oluşumu ile şu şekilde ifade edilir;

$$\begin{aligned}b_{12} &= 2[(-1)^{2-1}1^{2-1}L_1(12) + (-1)^{2-2}2^{2-1}L_2(12)] \\ &= 2[-(\bar{y}_1 + \bar{y}_2) + 2\bar{y}_{12}]\end{aligned}$$

ve ya

$$b_{12} = 4\bar{y}_{12} - 2(\bar{y}_1 + \bar{y}_2) \tag{2.29}$$

Bu eşitliklerde $L_1(12) = \bar{y}_1 + \bar{y}_2$ ve $L_2(12) = \bar{y}_{12}$ dir. (2.29) formülasyonu; Simpleks kafes tasarımda b_{12} nin hesaplanmasında kullanılan (2.14) ve (2.15) eşitlikleri ile benzerdir.

Eşitlik (2.28) de η_{ij}, η_{ijk} yerine sırasıyla $\bar{y}_{ij}, \bar{y}_{ijk}$ yazılması ile parametre tahminlerinin varyansı ve kovaryansları şu şekilde elde edilir:

(1, 2, …, q) nun r ve r′ adet elemanının, S_r ve $S_{r'}$ şeklinde iki alt seti ele alınsın ve h da S_r ve $S_{r'}$ deki ortak eleman sayısı olsun (Örneğin, S_r =12 ve $S_{r'}$=123 ise h = 2 dir). Eşitlik (2.28) de β_{S_r} ve $\beta_{S_{r'}}$ tahminlenirken, h =0 ise yani b_{S_r} ve $b_{S_{r'}}$ in her ikisi içinde gözlenen yanıtların hiç biri kullanılmamışsa katsayı tahminleri korelasyonsuzdur. Eğer $h > 0$ ve $r \le r'$ oluşturulmuşsa; $S_r = \{1,...,r\}$ ve $S_{r'} = \{1,...,h,r+1,...,r+r'-h\}$ dır.

b_{S_r} ve $b_{S_{r'}}$ de meydana gelen yanıtlar $y_i, y_{ij},...$ ile gösterilsin. b_{S_r} ve $b_{S_{r'}}$, tahminlerinin her ikisi içinde, h tane y_i $(1 \le i \le h)$, $\binom{h}{2}$ tane $y_{ij}(1 \le i \le j \le h);\ldots;$ $\binom{h}{t}$ tane $y_{j_1 j_2 \ldots j_t}$ $(1 \le j_1 \le \ldots \le j_t \le h)$ yanıt vardır ve Eşitlik (2.28) den $y_{j_1 j_2 \ldots j_t}$ lerin katsayıları b_{S_r} de $r(-1)^{r-t}t^{r-1}$ ve $b_{S_{r'}}$ de $r'(-1)^{r'-t}t^{r'-1}$ dir. Bu nedenle;

$$\mathrm{Cov}(b_{s_r}, b_{s_{r'}}) = \sum_{t=1}^{h}\binom{h}{t} r(-1)^{r-t}t^{r-1}r'(-1)^{r'-t}t^{r'-1}\sigma^2$$

dir.

q = 3 için hesaplanan katsayıların varyans ve kovaryans formülleri ise;

b_i; $\quad i = 1,2,3 : \mathrm{cov}(b_i, b_j) = \sigma^2 \qquad i = j,\ h = 1,\ r = r' = h$

$\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\quad = 0 \qquad i \ne j,\ h = 0,\ r = 1,\ r' = 1$

b_{ij}; $\quad i < j : \mathrm{cov}(b_i, b_{i'j}) = -2\sigma^2 \qquad i = i',\ h = 1,\ r = 1,\ r' = 2$

$\qquad\qquad\qquad\qquad\quad = 0 \qquad i \ne i',\ h = 0,\ r = 1,\ r' = 2$

$\qquad\qquad\qquad \mathrm{cov}(b_{ij}, b_{i'k}) = 4\sigma^2 \qquad i = i',\ j < k,\ h = 1,\ r = 2,\ r' = 2$

$\qquad\qquad\qquad\qquad\quad = 24\sigma^2 \qquad i = i',\ j = k,\ h = 2,\ r = r' = h$

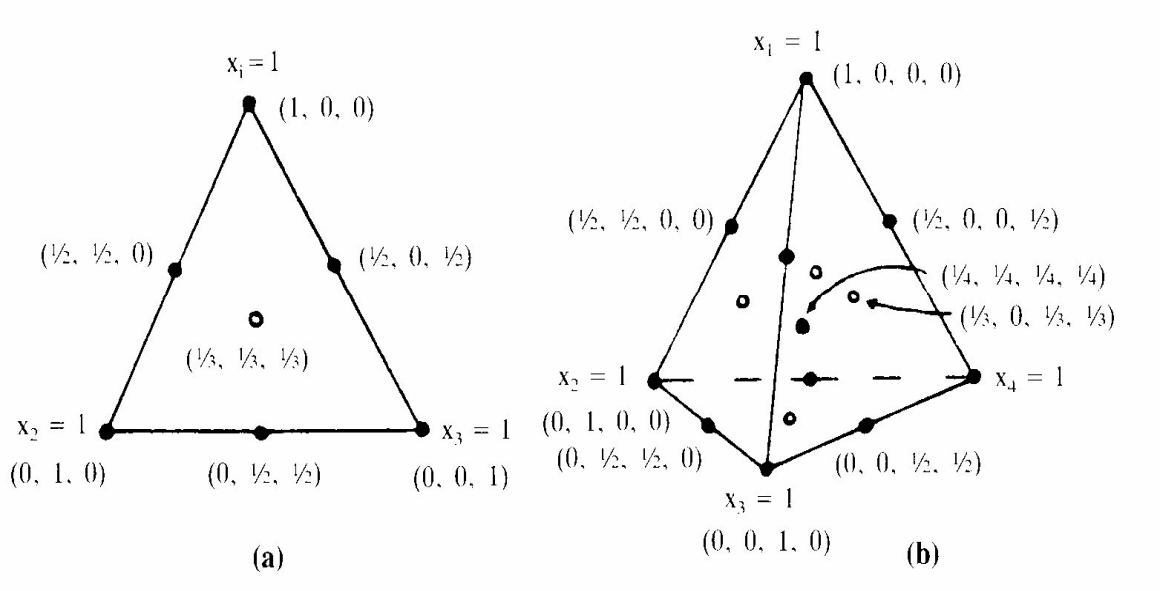
$\qquad\qquad\qquad\qquad\quad = 0 \qquad i \ne i',\ j \ne k,\ h = 0,\ r = 2,\ r' = 2$

b_{123}; $\quad \mathrm{cov}(b_i, b_{123}) = 3\sigma^2 \qquad h = 1,\ r = 1,\ r' = 3$

$\qquad\qquad \mathrm{cov}(b_{ij}, b_{123}) = -60\sigma^2 \qquad h = 2,\ r = 2,\ r' = 3$

$\qquad\qquad \mathrm{cov}(b_{123}, b_{123}) = 1188\sigma^2 \qquad h = 3,\ r = r' = h$

olacaktır (Cornell, 1990; 64).



(Kaynak: Cornell, 1990; 62)

Şekil 2.4. q=3 ve q=4 için simpleks merkez tasarımlar

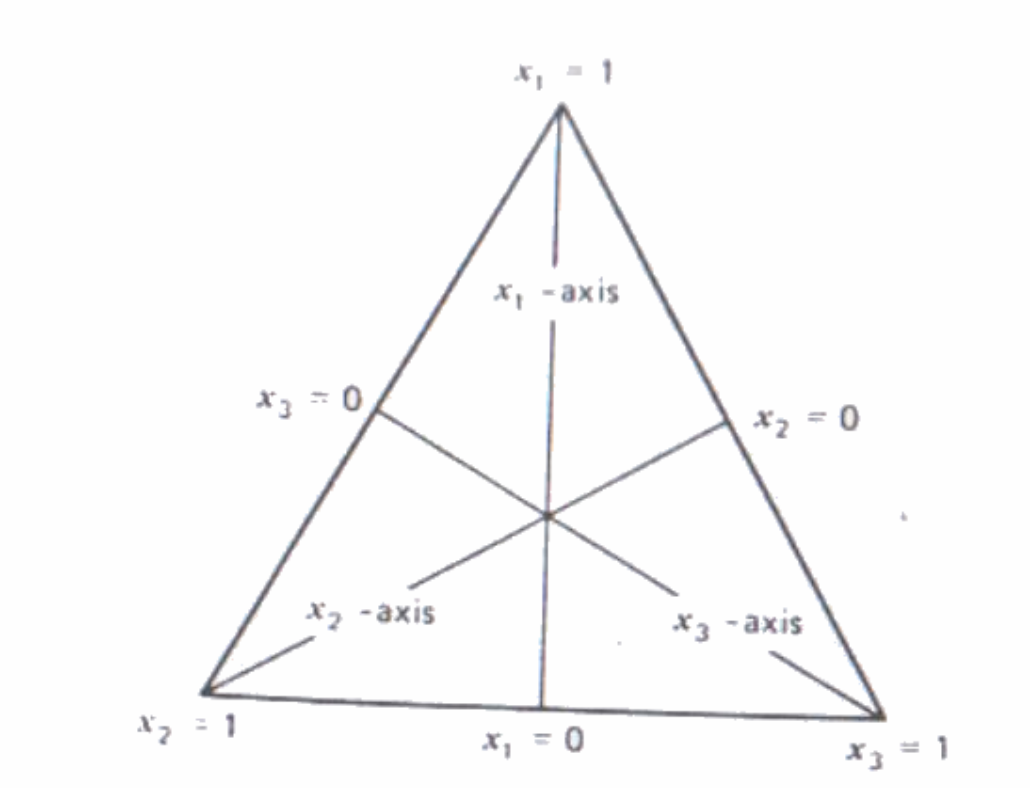
Üç ve dört bileşen içeren (sırasıyla, q=3 ve q=4) simpleks merkez tasarımlar için kullanılan noktalar Şekil 2.4'de gösterilmiştir.

2.5. EKSENSEL (AXIAL) TASARIMLAR

{q,m} Simpleks kafes ve q-bileşenli simpleks merkez tasarımlar sınırlı tasarımlar olup genel merkez noktası hariç tasarım noktaları simpleks faktör uzayının sınırları (köşe, kenar, yüz vb.) üzerine yerleştirilmiştir. Diğer taraftan Eksensel Tasarımlar tüm karışımı içerecek veya q-bileşenli karışımın birçok noktası simpleksin içinde yer alacak şekilde tasarlanmıştır, (Cornell,1990).

Tasarım noktaları, bileşen eksenleri üzerinde olup, sanal doğru baz noktaları, x_i=0, x_j=1/(q-1) ∀ i≠j den x_i=1, x_j=0 ∀ i≠j köşelerine kadar uzatılan tasarım eksensel tasarım olarak ifade edilir.

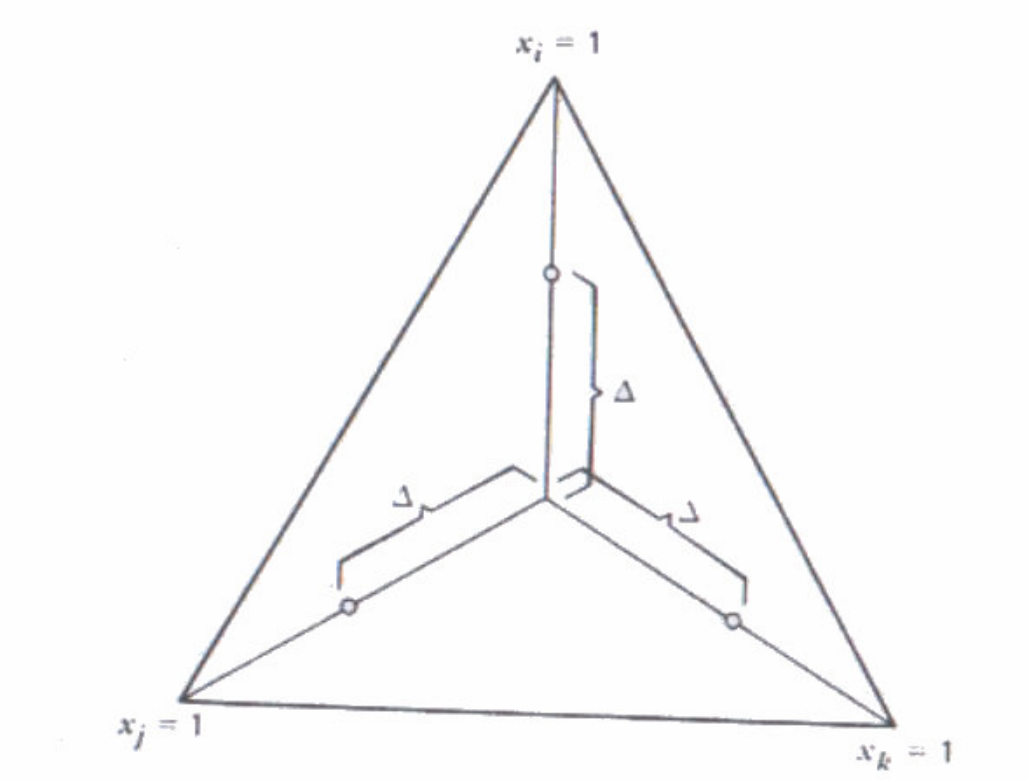
Baz noktalar (q-2) boyutlu sınırın (q-2 düzlemi olarak da adlandırılır) merkezi olup x_i=1, x_j=0 ∀ i≠j köşelerinin tersidir. Eksen uzunluğu, zıt (q-2) boyutlu sınır ile köşe arasındaki en kısa uzaklıktır. Bu uzaklık Simpleks koordinat sisteminde 1 br olarak tanımlanır. Şekil 2.5 de 3 bileşenli üçgende bileşen 1, 2, 3 için eksenler gösterilmiştir.



(Kaynak: Cornell 1990, 70)

Şekil 2.5 *3 bileşenli üçgende x_i eksenleri i = 1, 2, 3*

Eksensel tasarım noktaları sadece bileşen eksenlerine yerleştirilir. Eksensel tasarımın en basit formu, tasarım noktaları (1/q, 1/q,…, 1/q) merkezinden köşelerin her birine eşit uzaklıkta yerleştirilmesidir. Bu merkezden uzaklık x_j birimleri ile ölçülmektedir ve Δ ile gösterilir. Δ nın maksimum değeri ise $\left(\frac{q-1}{q}\right)$ dur. Üç bileşenli eksensel Şekil 2.6 de gösterilmiştir.



(Kaynak: Cornell 1990, 70)

Şekil 2.6: S*impleksin merkezinden noktalara olan uzaklık* Δ *iken 3 bileşenli eksensel tasarım*

Birinci dereceden $\eta = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i$ modeli, $\mathbf{x}=(x_1,x_2,\ldots,x_q)'$ iken matris formatında $\boldsymbol{\eta}=\mathbf{x}'\boldsymbol{\beta}$ olarak yazılsın. Şekil 2.5 de gösterilen eksensel tasarıma göre, eğer noktaların her birinden r adet gözlem elde edilirse, modeldeki parametre tahmin vektörü $\mathbf{b}=(b_1,b_2,\ldots,b_q)'$ nin varyans kovaryans matrisi ;

$$V(\mathbf{b}) = [d\mathbf{I} + e\mathbf{J}]\,\sigma^2 \qquad (2.30)$$

şeklindedir. (2.30) eşitliğinde **I** q-uncu dereceden birim matris **J** de (qxq) boyutlu 1 lerden oluşan matristir. Ayrıca $d = (q-1)^2/(r\Delta^2q^2)$ ve $e = \Delta^2q^2 - (q-1)^2/(r\Delta^2q^3)$ dir. V(**b**) nin matris formu (2.30) de verilmiştir, her bir parametre tahmini , b_i nin varyansı ise;

$$V(b_i) = (d+e)\sigma^2 = \left\{\frac{(q-1)^3 + \Delta^2q^2}{r\Delta^2q^3}\right\}\sigma^2 \qquad (2.31)$$

ayrıca b_i ve b_j tahmin çiftleri arasındaki kovaryans ise $cov(b_i,b_j) = e\sigma^2$ dir.Δ nın değeri artıkça $V(b_i)$ nin ve $cov(b_i,b_j)$ nin değeri küçülür. Eğer noktalar köşelere yerleştirilmişse $\Delta=\left(\frac{q-1}{q}\right)$ ve $cov(b_i,b_j)$ =0 olacaktır. Bu durumda;

$$V(b_i) = \left\{\frac{(q-1)^3 + (q-1)^2}{r(q-1)^2 q}\right\}\sigma^2 = \frac{\sigma^2}{r}$$

Eğer köşeler simpleksin merkezi ile her bir köşenin ortasına yerleştirilmişse $\Delta=\left(\frac{q-1}{2q}\right)$ ve $cov(b_i,b_j) = \frac{-3\sigma^2}{rq}$ olacaktır. Bu durumda ise;

$$V(b_i) = \left\{\frac{(4q-3)}{rq}\right\}\sigma^2$$

olacaktır.

2.6. KARIŞIM DENEYLERİNİN GEOMETRİSİ VE YAPAY BİLEŞENLER

$0 \le x_i \le 1$ şeklindeki kısıt için deney bölgesi, tüm köşeleri birbirinden eşit uzaklıkta olan düzenli simplekstir. Fakat bazı durumlarda bileşenlere alt ve/veya üst sınırlar konulabilir:

$$0 \le L_i \le x_i \le U_i \le 1 \qquad (2.32)$$

kısıtı kullanıldığında, sınırlardan oluşan kısıtlamalardan dolayı orijinal bileşenler (x_i) yapay bileşenler olarak adlandırılan yeni bir değişken setine dönüştürülür. Geleneksel yapay bileşen transformasyonu;

$$Z_i = \frac{(x_i - L_i)}{\left(1 - \sum_{j=1}^{q} L_j\right)} \qquad (2.33)$$

şeklinde olup, standart tasarımları (2.32) kısıtı ile tanımlanan simplekse uyarlamak için kullanılır.

Yapay bileşen transformasyonu aynı zamanda deneysel bölgenin bir simpleks olmadığı durumlarda Scheffe 'nin polinom model uyumunda ortaya çıkan "kötü şartlanmayı" da azaltmaktadır. Kötü şartlanma ile ifade edilmek istenen Scheffé tipi karışım modellerinin sabit terim içermemesinden dolayı parametre tahminlerinin (ve onların varyanslarının) kesinliğinin artırılamamasıdır.

Sabit terim eklenmesi; modeldeki bazı ve ya tüm terimlerin ortalanmasına izin vermektedir. Terimin ortalanması ile anlatılmak istenen, bu terimin alınan tüm gözlemlerin değerinden ortalamasının çıkarılmasıdır. Model de terimlerin ortalanması genellikle, modelde terimler arasındaki korelasyonu azaltarak parametre tahmin kesinliğini artırır. Ne yazık ki Scheffé tipi karışım modellerinde, sabit terim ekleyerek bir tane doğrusal karışım terimini silmeden bileşen oran terimlerinin değerlerini merkezlemek mümkün değildir.

(2.33) transformasyonu bazı durumlarda kötü şartların azaltılmasında etkin olmamaktadır. Genel olarak deneysel bölgenin ve bileşen aralıklarının üst sınırını dikkate almamaktadır. Piepel (1983) alt ve üst sınırlar tutarsız iken üst sınırlar bazı alt sınırları tutarsız yapacağından (2.33) transformasyonunun kullanılmamasını önermiştir. Scheffé tipi karışım modellerinde katsayı tahmin kesinliğini artırmak amacıyla Snee ve Rayner (1982) tarafından önerilen model formlarından biri de L-yapay bileşenli modeldir.

2.6.1 Bileşen Oranları Üzerinde Alt Sınır Olması Durumu

Koşul (2.32) sadece alt sınıra sahip iken, tüm i ler için U_i =1 ise tüm durumlarda deneysel alan simplekstir. Deney aralığı, bileşenlerin herhangi birinin değişim aralığı (herhangi bir bileşenin maksimum ve minimum değeri arasındaki fark) olarak tanımlanır. Deney aralığı sadece alt sınır mevcut iken şu şekilde gösterilir;

$$R_L = 1 - \sum L_i \qquad (2.34)$$

$\sum L_i > 1$ olması fiziksel olarak mümkün değilken $\sum L_i = 1$ olması deney bölgesinin tek bir noktadan oluştuğunu ifade eder. Geleneksel yapay bileşen transformasyonu sadece alt sınır mevcut iken uygundur.

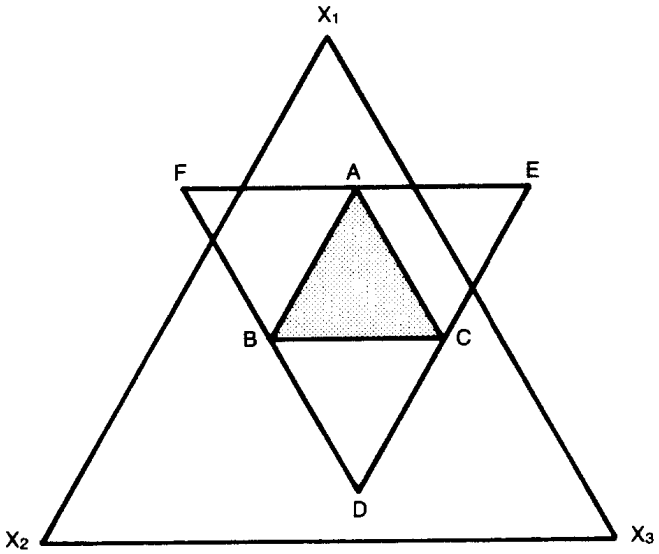
Alt sınırlar tarafından oluşturulan sınırlı düzlem (teknik olarak q -1 boyutlu hiper düzlem) $0 \le x_i \le 1$ şeklinde tanımlanan orijinal simpleksin içinde yer alır. Alt sınırlar tarafından oluşturulan simpleks L- simplekstir. R_L ise orijinal simplekse göre L simpleks büyüklüğünün doğrusal ölçüsüdür.

Alt sınırların kullanılması yapay üst sınırı (U^*) yaratır. Yapay üst sınır;

$$U_i^* = L_i + R_L \qquad (2.35)$$

ile gösterilir.

Yapay üst sınırın kısıtlı alanı Şekil 2.7 de görüldüğü üzere ters simpleks olarak şekillenir.



(Kaynak: Crosier 1984, 210)

ŞEKİL 2.7 : *L simpleksi (ABC) ve U* simpleksi (DEF) nin gösterimi için örnek. Alt sınır kısıtları:* $0.4 \le X_1,\ 0.1 \le X_2, 0.2 \le X_3$. *Yapay üst sınırlar:* $X_1 \le 0.7,\ X_2 \le 0.4,\ X_3 \le 0.5$

L simpleksinin ve U* simpleksinin bileşen eksenleri aynı doğru üzerindedir ancak köşeleri zıt eksen uçlarındadır: L- simpleksi ve U* simpleksi zıt yerleşime sahiptir. U* simpleksinin sınırları orijinal simpleksin sınırlarının dışına genişleyebilir.

2.6.2 Bileşen Oranları Üzerinde Üst Sınır Olması Durumu

Üst sınırlar tarafından şekillenen simpleks U – simpleksidir. U-simpleksinin köşeleri orijinal simpleksin sınırları dışında olabilir. Bu durumda, oluşturulan karışımların deneysel bölgesi, orijinal ve ters simplekslerin kesişim bölgesidir ve bu bölge simpleks değildir. İlgilenilen bölge, sadece orijinal simpleksin içinde yer aldığında deneysel bölgedir ve bu

$$\sum_{i=1}^{q} U_i - U_{min} \le 1 \qquad (2.36)$$

olduğunda mümkündür. (2.36) denklemindeki U_{min} terimi, üst sınırların en küçüğüdür.

U-simpleksi orijinal simpleksin içinde yer aldığında deney aralığı;

$$R_u = \sum_{i=1}^{q} U_i - 1 \qquad (2.37)$$

şeklinde tanımlanır ve bu denklemde $0 < R_u \le q - 1$'dir. U-simpleksi orijinal simpleksin içinde yer aldığında $R_u \le \frac{1}{2}$'dir U-simpleksi orijinal simpleksin içinde yer almadığında R_u deney aralığı değildir ancak U-simpleksinin büyüklüğünün doğrusal ölçüsü olarak kullanışlıdır.

Sadece üst sınır mevcut iken yapay bileşen transformasyonu;

$$Z_i = \frac{(U_i - X_i)}{R_U} = \frac{(U_i - X_i)}{\sum_{i=1}^{q} U_i - 1} \qquad (2.38)$$

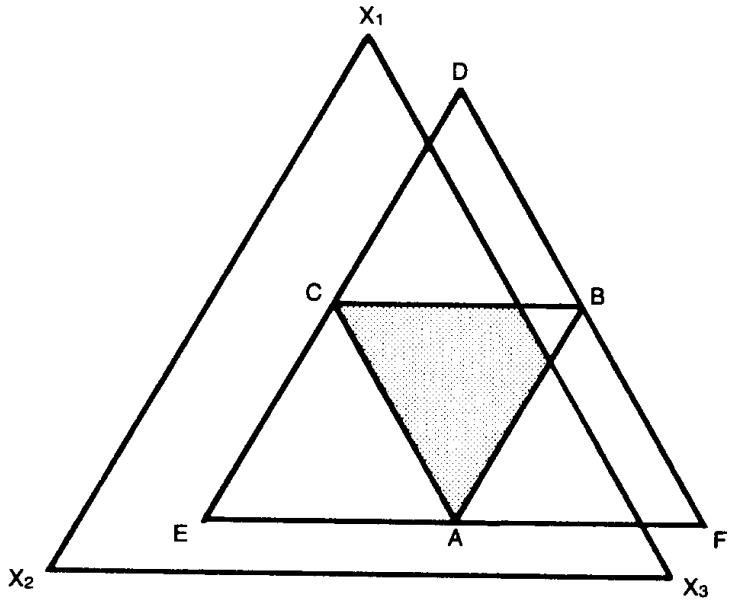
U simpleksinin yapay bileşen yerleşimi orijinal simpleksin yerleşiminin zıttıdır; bu yüzden, yapay bileşenler orijinal bileşenlerin zıt etkisine sahiptir. Bir başka ifade ile eğer yanıt X_i ile artıyorsa Z_i ile azalır. Eşitlik (2.38) deki yapay bileşen transformasyonu ile (2.33) deki yapay bileşen transformasyonu karşılaştırılırsa (2.38) deki U yapay bileşen transformasyonu (2.33) deki ise L yapay bileşen transformasyonudur.

U yapay bileşen transformasyonu, $R_U < 1$ iken Scheffe 'nin polinom model uyumunda ortaya çıkan kötü şartlanmayı da azaltmaktadır.

Üst sınırın kullanılması yapay alt sınırı (L^*) yaratır.

$$L_i^* = U_i - R_U$$

Yapay alt sınırların sınırlı düzlemi (L^*) simpleks oluşturur ve U simpleksinin üstünde yer alır, (Şekil 2.8). Orijinal simpleksin dışında bulunan U simpleksinin her bir köşesi için bir tane negatif alt sınır olacaktır.



(Kaynak: Crosier 1984, 211)

ŞEKİL2.8 *U simpleksi (ABC) ve L* simpleksi (DEF) nin gösterimi için örnek. Deney alanını gösteren taralı kısım ise simpleks değildir. Üst sınır kısıtları:* $X_1 \le 0.5$, $X_2 \le 0.3$, $X_3 \le 0.6$ *Yapay alt sınırlar:* $1 \le X_1$, $-0.1 \le X_2, 0.2 \le X_3$

2.6.3 Bileşen Oranları Üzerinde Alt Ve Üst Sınır Olması Durumu

Alt ve üst sınırların her ikisi de mevcut iken uygun yapay bileşen transformasyon metodunun seçimi alt ve üst sınırların tutarlılığına dayanır, (Piepel 1983).

Piepel, $0 \le L_i \le x_i \le U_i \le 1$ ile verilen sınırların tutarlılığını kontrol etmek amacıyla bazı formüller tanıtmıştır. $0 \le L_i \le x_i \le U_i \le 1$ sınırlaması, her bir bileşen oranı alt sınıra (x_i=L_i) ve üst sınıra (x_i=U_i) ulaştığında "tutarlı" olarak adlandırılır.

Bileşen kısıtlarının sağlaması gereken temel durumlar;

$$\sum_{i=1}^{q} L_i \le 1$$
$$\sum_{i=1}^{q} U_i \ge 1 \qquad (2.39)$$

olup, bu durumların sağlanması kısıt bölgesinin boş küme olmadığını gösterir. Eğer her iki durumda sağlanmıyorsa $\sum_{i=1}^{q} x_i = 1$ olması imkânsızdır.

Sınırların tutarlılığını kontrol etmek ya da sınırlardaki bazı tutarsızlıkları ortaya çıkarmak amacıyla ilk adımda her bir x_i 'nin aralık genişliği hesaplanır.

$$R_i = U_i - L_i, \qquad i = 1,2,...,q$$
$$R_i' = \frac{R_i}{1 - \sum_{i=1}^{q} L_i}, \quad i = 1,2,...,q \qquad (2.40)$$

formülü, L-yapay bileşenin (x_i') aralık genişliğini tanımlar. Eğer bazı i'ler için R_i' >1 ise,

$$R_i > 1 - \sum_{i=1}^{q} L_i \text{ ya da } U_i + \sum_{i \neq j}^{q} L_j > 1 \qquad (2.41)$$

olur ve U_i erişilmezdir. Bununla birlikte, bazı *i*'ler için

$$\sum_{i \neq j}^{q} R_j' < 1 \text{ ya da } L_i + \sum_{i \neq j}^{q} U_j < 1 \qquad (2.42)$$

ise L_i erişilmezdir.

Erişilmez bir L_i'ye neden olan kararsız sınırları belirlemenin diğer bir yolu da U-yapay bileşenlerini (u_i) kullanmaktır. U simpleksinin büyüklüğü,

$$R_U = \sum_{i=1}^{q} U_i - 1 \qquad (2.43)$$

olarak tanımlanır. Eğer bazı i 'ler için $R_i > R_u$ ise L_i erişilmezdir (Crosier, 1984).

Sınırlar tutarlı olmadığında ve tutarlı sınırları oluşturmak için sınırlarda ayarlamalar yapıldığında, bu ayarlamalar erişilmez olan sınırlarda yapılabildiği kadar, diğer x_i'ler üzerindeki sınırların bazılarında da yapılabilir.

Sınırların tutarlılığını kontrol etmek için diğer bir metot da bileşen aralıklarının hesaplanmasıdır. Bu işlem her bir $R_i = U_i - L_i$ aralığının karşılaştırılması ile yapılır. Eğer bazı $R_i > R_L$ ise tutarlı olmayan bir üst sınır vardır ve eğer $R_i > R_U$ ise tutarlı olmayan bir alt sınır vardır.

Deneysel bölge, U simpleksi ile L simpleksinin ara kesiti olup ancak ve ancak bu simplekslerden biri tamamen diğerinin içinde yer alıyorsa simplekstir. Eğer $R_L = R_U$ ise L simpleksi ile U simpleksi aynı büyüklüğe sahiptir ve dolayısıyla ilgilenilen alan simpleks değildir. (L simpleksi ve U simpleksi zıt oryantasyona sahiptir).

Eğer $R_L < R_U$ ise L simpleksi daha küçüktür ve U simpleksinin içinde yer alıp almadığı üst sınırlar ile yapay üst sınırlar karşılaştırılarak belirlenir. Eğer herhangi bir $U_i < U_i^*$ ise L simpleksinin köşesi U simpleksinin dışında yer alır ve bu durumda deneysel alan simpleks değildir. Eğer $R_U < R_L$ ise U-simpleksi daha küçüktür ve herhangi bir $L_i > L_i^*$ ise U simpleksinin köşesi L simpleksinin dışındadır ve durumda

da ilgilenilen deneysel alan simpleks değildir. Ayrıca bileşen aralıkları da deneysel bölgenin simpleks olup olmadığını gösterir. Eğer herhangi bir bileşen aralığı, R_L ve R_U 'nun en küçük değerinden daha küçük ise deneysel alan simpleks olmayacaktır.

L-yapay bileşeni ya da U-yapay bileşeni ile çalışma seçimi deneysel bölgenin şekline bağlıdır. Eğer $R_L<R_U$ ise yapay bileşen olarak L yapay bileşen transformasyonu seçilir. Eğer $R_U<R_L$ ise U yapay bileşen olarak seçilir. Simplekslerden hiç biri diğerinin içinde yer almıyorsa ya da eğer $R_L=R_U$ ise (yani deneysel bölge bir simpleks değilse) tasarımı kurmak amacıyla yapay bileşen olarak *L* seçilir.

2.6.4 Tutarsız Kısıtların Neden Olduğu Problemler

Tutarsız kısıtlar belirlenmez ve düzeltilmez ise karışım deneylerinin tasarım ve analizinde bazı problemler ortaya çıkabilir. (Piepel 1983)

1. Piepel (1982) ile Snee ve Marquardt (1976) tarafından sunulan Simpleks eleme tasarımı için kullanılan teknikler, tutarsız kısıtlar durumunda yanlış sonuç verir. Çünkü eleme tasarımlarının etkisi deneysel alanın şekline bağlıdır.
2. Tutarsız kısıtların problem çıkardığı diğer bir durum da Saxena ve Nigam (1977) tarafından önerilen karışım bileşenlerinin belirlenmesinde doğrusal transformasyonların kullanılması şeklindeki tasarım prosedüründe ortaya çıkar.

Buna karşın, aşağıda belirtilen diğer tasarım ve analiz prosedürleri tutarsız kısıtlardan etkilenmez.

1. Mc Lean ve Anderson 'un önerdiği ekstrem köşeler algoritması, Snee ve Marquardt(1974) ve Snee (1979) tarafından önerilen algoritmaların tümü tutarsız kısıtların mevcut olduğu durumlarda bile etkin kısıt bölgesi için doğru ekstrem köşeler oluşturmaktadır.

2. Yapay bileşen kullanılarak uyumu yapılan bir modelin geliştirilmesi de tutarsız kısıtlardan etkilenmez. Tutarsız kısıtlar, yanlış bir yapay bileşen transformasyonuna neden olabilir ancak yanlış yapay bileşen transformasyonu yeni noktaları kullanmakta olup bu yeni noktalar için kestirilmiş yanıt doğru olabilmektedir.

Her ne kadar tutarsız kısıtların tanımlandığı bir deney için tasarım ve analiz prosedürlerinin doğru çalışıp çalışmadığı ile ilgilenilse de asıl konu bu değildir. Yanlış veri seti analiz edildiğinde ilgilenilebilecek konu, sadece veri setini analiz edecek prosedürün belirli bir kısmıdır. İlgilenilmesi gereken en önemli konu; tutarsız kısıtlar setindeki etkin kısıt bölgesi, çalışmayı yürüten bilim adamlarının ilgilendikleri bölgeden önemli ölçüde farklı olabilir. Tutarsız kısıtlar kullanılarak oluşturulan bir tasarım araştırmacının ilgilendiği karışım oranlarını araştırmaya imkân vermeyebilir. Bu nedenle bilim adamı uyumu yapılan modelin extrapolasyonu olmaksızın bu bölgeyle ilgili bir bilgiye sahip olmaz. Eğer ilgilenilen alanda gerçek yanıt davranışı araştırılan bölgedekinden farklı ise modelin extrapolasyonu yanlış sonuçların elde edilmesine neden olur.

2.6.5 Sınırların Değiştirilmesinin Etkileri

Sınırlardaki küçük bir değişiklik deneysel bölgenin şeklinde ve büyüklüğünde önemli değişikliklere yol açabilir. Sınırlamalar, tutarlı olmayan sınırların tutarlı hale getirmek ve deneysel bölgenin köşe sayısını azaltmak için değiştirilir. Eğer köşe sayısı az ise tüm köşeler deney tasarımına nokta olarak dâhil edilirken köşe sayısının çok olduğu durumlarda ise alt setler seçilerek tasarıma dahil edilir. Köşe sayısının çok olduğu durumlarda alt setlerin seçimi oldukça zordur. Ayrıca köşe sayısını azaltmak için sınırların nasıl değiştirileceğinin bilinememesinden dolayı sınırlar üzerindeki küçük değişiklikler köşe sayıları üzerinde büyük etkilere yol açabilmektedir.

Sınırlandırılan bölgenin şeklini tanımlamak amacıyla alt bölgenin köşe sayıları belirlenmeli ve bu köşelerin koordinatları hesaplanmalıdır. Crosier (1984), sınırlandırılmış bölgenin köşe sayılarını hesaplamak için bir formül tanıtmıştır. Bu formül, q adet bileşenin alt setlerinin toplamından ibarettir. $0 \le L_i \le x_i \le U_i \le 1$ denkleminde tanımlanan limitlere sahip olan q adet bileşen göz önünde bulundurulsun. Bu durumda, i-inci bileşenin aralık genişliği $R_i = U_i - L_i$ olacaktır. R_U, R_L ve R_P değerleri ise,

$$
\begin{aligned}
R_L &= 1 - \sum_{i=1}^{q} L_i \\
R_U &= \sum_{i=1}^{q} U_i - 1 \\
R_P &= \text{Min}\{R_L, R_U\}
\end{aligned}
\qquad (2.44)
$$

formülleri ile hesaplanacaktır. Daha sonra $C(q, r)$ değerleri, $r \le q$ olmak üzere, hesaplanır. Burada $C(q, r) = q! / r!(q-r)!$'dir ve üç farklı grupta incelenir. Bu gruplar,

Grup 1. R_P'den daha küçük aralık genişliğine sahip olan r adet bileşenin kombinasyonu.

Grup 2. Aralık genişliği R_P'ye eşit olan r adet bileşenin kombinasyonu.

Grup 3. R_P'den daha büyük aralık genişliğine sahip olan r adet bileşenin kombinasyonu olarak ayrılmıştır.

Grup 1, 2 ve 3'deki kombinasyonlar sırasıyla, $L(q, r)$, $E(q, r)$ ve $G(q, r)$'dir. Sınırlandırılan bölgenin köşe sayısı,

$$N_V = q + \sum_{r=1}^{q} L(q,r)(q-2r) + \sum_{r=1}^{q} E(q,r)(1-r) \qquad (2.45)$$

formülü ile hesaplanır. Bu denklem yardımıyla köşe sayısı bulunduktan sonra orijinal bileşenlerden oluşan sistemdeki köşelerin koordinatları tanımlanır. Sadece üç ya da dört bileşen içeren karışımlar için köşelerin koordinatlarını hesaplamak kolaydır. Üç bileşenli durumda, sadece sınırlandırılmış bir bölgeye ihtiyaç duyulur. Dört bileşen olduğunda ise, hem bölge çizilir ve bu bölgenin koordinatları hesaplanır hem de alt ve üst sınırların 2^4=16 mümkün kombinasyonu oluşturularak köşeler bulunur. Bu 16 mümkün kombinasyon,

(L_1, L_2, L_3, L_4)	(U_1, L_2, L_3, L_4)
(L_1, L_2, L_3, U_4)	(U_1, L_2, L_3, U_4)
(L_1, L_2, U_3, L_4)	(U_1, L_2, U_3, L_4)
(L_1, L_2, U_3, U_4)	(U_1, L_2, U_3, U_4)
(L_1, U_2, L_3, L_4)	(U_1, U_2, L_3, L_4)
(L_1, U_2, L_3, U_4)	(U_1, U_2, L_3, U_4)
(L_1, U_2, U_3, L_4)	(U_1, U_2, U_3, L_4)
(L_1, U_2, U_3, U_4)	(U_1, U_2, U_3, U_4)

(2.46)

şeklinde oluşturulur ve bunlardan kabul edilebilir olanları seçilir. Kabul edilebilirlik, $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ koşulunu sağlayan kombinasyonları ifade etmektedir. Bölgenin köşeleri sadece (2.46) denkleminde yer alan kombinasyonlar değildir. Bu denklemdeki kombinasyonlar, kabul edilebilir kombinasyonlardır. (2.46) denkleminde L_i ya da U_i'nin sadece bir tanesi kabul edilebilir kombinasyonu elde etmek için ayarlanabilir.

(2.45) formulasyonunu örneklendirmek açısından X fabrikasının üretmiş olduğu ürünün 5 farklı hammaddenin belirli oranlarda karışımından oluştuğu ve bu oranların, x_1, x_2, x_3, x_4 ve x_5 ile ifade edilmiş olduğu varsayılsın. Ürünü oluşturan bileşenlere ait alt ve üst sınırlar şu şekildedir.

$0.80 < x_1 < 0.90$

$0.05 < x_2 < 0.15$

$0.02 < x_3 < 0.10$

$0.03 < x_4 < 0.05$

$0.5 < x_5 < 0.15$

ilk aşama da verilen sınırların tutarlılığının kontrol edilmesi gerekmektedir. (2.40) deki $R_i = U_i - L_i$ denkleminden faydalanarak ;

$R_1 = 0.90 - 0.80 = 0.10$

$R_2 = 0.15 - 0.05 = 0.10$

$R_3 = 0.10 - 0.02 = 0.08$

$R_4 = 0.05 - 0.03 = 0.02$

$R_5 = 0.15 - 0.5 = 0.10$

olarak bulunur.

İkinci aşamada, L simpleksinin ve U simpleksinin doğrusal büyüklükleri, $R_L = 1 - \sum_{i=1}^{q} L_i$ ve $R_u = \sum_{i_1}^{q} U_i - 1$ formülleri kullanılarak,

$R_L = 1 - (0.80 + 0.05 + 0.02 + 0.03 + 0.5) = 1 - 0.95 = 0.05$

$R_U = (0.90 + 0.15 + 0.10 + 0.05 + 0.15) - 1 = 1.35 - 1 = 0.35$

şeklinde hesaplanır.

$R_P = \text{Min}\{R_L, R_U\} = 0.05$ olarak elde edilir.

C(5,1)

$x_1, R_1 = 0.10$

$x_2, R_2 = 0.10$

$x_3, R_3 = 0.08$

$x_4, R_4 = 0.02$

$x_5, R_5 = 0.10$

C(5,2)

$x_1, x_2, R_1 + R_2 = 0.10 + 0.10 = 0.20$

$x_1, x_3, R_1 + R_3 = 0.10 + 0.08 = 0.18$

$x_1, x_4, R_1 + R_4 = 0.10 + 0.02 = 0.12$

$x_1, x_5, R_1 + R_5 = 0.10 + 0.10 = 0.20$

$x_2, x_3, R_2 + R_3 = 0.10 + 0.08 = 0.18$

$x_2, x_4, R_2 + R_4 = 0.10 + 0.02 = 0.12$

$x_2, x_5, R_2 + R_5 = 0.10 + 0.10 = 0.20$

$x_3, x_4, R_3 + R_4 = 0.08 + 0.02 = 0.10$

$x_3, x_5, R_3 + R_5 = 0.08 + 0.10 = 0.18$

$x_4, x_5, R_4 + R_5 = 0.02 + 0.10 = 0.12$

C(5,3)

$x_1, x_2, x_3, R_1 + R_2 + R_3 = 0.10 + 0.10 + 0.08 = 0.28$

$x_1, x_2, x_4, R_1 + R_2 + R_4 = 0.10 + 0.10 + 0.02 = 0.22$

$x_1, x_2, x_5, R_1 + R_2 + R_5 = 0.10 + 0.10 + 0.10 = 0.30$

$x_1, x_3, x_4, R_1 + R_3 + R_4 = 0.10 + 0.08 + 0.02 = 0.20$

$x_1, x_3, x_5, R_1 + R_3 + R_5 = 0.10 + 0.08 + 0.10 = 0.28$

$x_1, x_4, x_5, R_1 + R_4 + R_5 = 0.10 + 0.02 + 0.10 = 0.22$

$x_2, x_3, x_4, R_2 + R_3 + R_4 = 0.10 + 0.08 + 0.02 = 0.20$

$x_2, x_3, x_5, R_2 + R_3 + R_5 = 0.10 + 0.08 + 0.10 = 0.28$

$x_2, x_4, x_5, R_2 + R_4 + R_5 = 0.10 + 0.02 + 0.10 = 0.22$

$x_3, x_4, x_5, R_3 + R_4 + R_5 = 0.08 + 0.02 + 0.10 = 0.20$

C(5,4)

$$x_1, x_2, x_3, x_4, R_1 + R_2 + R_3 + R_4 = 0.10 + 0.10 + 0.08 + 0.02 = 0.30$$

$$x_1, x_2, x_3, x_5, R_1 + R_2 + R_3 + R_5 = 0.10 + 0.10 + 0.08 + 0.10 = 0.38$$

$$x_1, x_2, x_4, x_5, R_1 + R_2 + R_4 + R_5 = 0.10 + 0.10 + 0.02 + 0.10 = 0.32$$

$$x_1, x_3, x_4, x_5, R_1 + R_3 + R_4 + R_5 = 0.10 + 0.08 + 0.02 + 0.10 = 0.30$$

$$x_2, x_3, x_4, x_5, R_2 + R_3 + R_4 + R_5 = 0.10 + 0.08 + 0.02 + 0.10 = 0.30$$

C(5,5)

$$x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, R_1 + R_2 + R_3 + R_4 + R_5 = 0.10 + 0.10 + 0.08 + 0.02 + 0.10 = 0.40$$

$L(q,r): L(5,1) = 1$	$E(q,r): E(5,1) = 0$	$G(q,r): G(5,1) = 4$
$L(5,2) = 0$	$E(5,2) = 0$	$G(5,2) = 10$
$L(5,3) = 0$	$E(5,3) = 0$	$G(5,3) = 10$
$L(5,4) = 0$	$E(5,4) = 0$	$G(5,4) = 5$
$L(5,5) = 0$	$E(5,5) = 0$	$G(5,5) = 1$

(2.45) denklemi kullanıldığında,

$$N_V = 5 + [5 \times (5-2)] + 0$$
$$= 5 + 15$$
$$= 20$$

olarak bulunur.

Beş ya da daha fazla bileşen içeren karışım deneylerinde, sınırlandırılan bölgenin köşe sayısı çok fazla olabilir. Bu gibi durumlarda, sınırlandırılan bölgenin köşe sayısını bulmak için oluşturulmuş olan algoritmalar kullanılır. Bu algoritmalardan bazıları, XVERT (Snee ve Marquardt, 1974), UNIEXP (Goel, 1980), XVERT1 (Nigam, Gupta ve Gupta, 1983), CONVRT (Piepel, 1988)

2.7 KARIŞIM DENEYLERİ İÇİN EKSTREM KÖŞELER TASARIMI

Ölçülen yanıt karışım bileşen oranlarına bağlı olup karışım miktarına bağlı değildir. Bu yüzden q bileşenin seviyeleri 0 ile 1 arasındadır ve bileşen oranlarının toplamı 1'dir. Bileşen oranı x_i ile alt sınır L_i ile ve üst sınır U_i ile gösterildiğinde kısıtlar;

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

$$0 \le L_i \le x_i \le U_i \le 1$$

şeklinde olduğu daha önce ifade edilmişti. Bu kısıtlar iki farklı türde deneysel bölge oluşturur.

1.Tür: Tüm bileşenler alt sınıra sahip ya da tüm bileşenler üst sınıra sahip ya da tüm bileşenler alt ve üst sınıra sahip ve eşit aralıkta ise elde edilen deneysel bölge q köşeye sahip olup yapay bileşenlere göre simplekstir.

Bu durumda kuadratik model için tavsiye edilen tasarım "Yapay Bileşen Simpleks Tasarım" olup, tasarım;

i. q adet saf bileşen noktası
ii. $\frac{q(q-1)}{2}$ adet 50:50 karışım noktası
iii. Genel merkez noktası
iv. q adet simpleks kontrol noktasından

$$\begin{array}{cccc} \frac{q+1}{2q} & \frac{1}{2q} & \cdots & \frac{1}{2q} \\ \frac{1}{2q} & \frac{q+1}{2q} & \cdots & \frac{1}{2q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{1}{2q} & \frac{1}{2q} & \cdots & \frac{q+1}{2q} \end{array}$$

oluşur.

Kontrol noktaları; genel merkez noktasına, (50:50) karışım noktalarına ve saf bileşen noktalarına eşit uzaklıkta olup modelin uyum yetersizliğinin testi için kullanılır.

2.Tür: Alt ve üst sınırların bulunması durumunda dejenerasyon şu iki durumda ortaya çıkmaktadır;

$$\sum_{i=1}^{q} L_i \geq 1$$

veya

$$\sum_{i=1}^{q} U_i \leq 1$$

Bu iki eşitsizliğin herhangi birinde eşitlik söz konusu olduğunda çözüm bölgesi sadece bu eşitliği oluşturan kombinasyonun tanımladığı tek bir noktadır

$L_i = U_i$ durumunda faktör uzayının boyutu 1 azalır ve kalan bileşenler $(1 - L_i)$ toplamına eşit olma zorunluluğu taşır. Bununla birlikte herhangi bir i = 1,2,…,q için $L_i \neq U_i$ olduğu varsayılır.

Alt ve üst sınırlar mevcut ve birbirinden farklı ise elde edilen deney bölgesi düzensiz çok yüzlü olup (q–1) boyutlu simpleksin alt uzayıdır.

Mc Lean ve Anderson bu durumlarda simpleks tasarımın genellikle uygun olmadığını söylemiş ve "Ekstrem Köşeler Tasarımı"nı önermişlerdir.

Ekstrem köşeler tasarımı çok yüzlünün köşeleri ve çok yüzlünün farklı yüzlerinin merkez noktalarından oluşur. Köşelerin hesaplanması için Snee ve Marquardt (1974) XVERT Algoritmasını önermişlerdir. Tasarımda kullanılabilecek aday köşelerin sayısı fazla olduğundan bir alt setinin belirlenmesi açısından XVERT Algoritması oldukça uygundur. Bu algoritma genellikle küçük iz (trace) değerine sahip $(X'X)^{-1}$ matrisi oluşturmaktadır. Bu da kullanılan model doğrusal olduğunda tahminlenen katsayıların varyanslarının küçük olmasını sağlamaktadır.

Tasarımda kullanılan yüzlerin merkezleri bu yüzleri oluşturan köşelerdeki bileşen değerlerinin ortalaması alınarak belirlenir.

Ekstrem köşeler tasarımı pratikte kullanışlıdır ancak q ≥5 için çok sayıda deney noktasına sahiptir ve ayrıca bu deney noktaları bileşen uzayının belirli bir noktasında kümelenmiş olabilir. Mc Lean ve Anderson (1966), bu tasarımlarda deney sayısını azaltmak için bazı yöntemler önermişlerdir.

- Belirli yüzey merkezlerinin silinmesini; örneğin çift boyutlu yüzeylerin silinmesi
- Tasarım noktaları arasındaki normalize uzaklığın hesaplanması ve diğer tasarım noktalarına göre belirli bir minimum uzaklıktan daha az olan noktaların rassal olarak silinmesidir. Normalizasyon $(x_{i1},...,x_{iq})$ ve $(x_{j1},...,x_{jq})$ şeklindeki iki nokta arasındaki uzaklık olup

$$d_{ij} = \left(\sum_{r=1}^{q} \left(\frac{x_{ir} - x_{jr}}{U_r - L_r} \right)^2 \right)^{1/2} \qquad (2.47)$$

şeklinde tanımlanır.

Normalizasyon metodu, her bir faktör duyarlılığının faktörün kısıt aralığının uzunluğu ile ters orantılı olduğunu varsayar.

Wheeler (1972), kısıtlı uzaylar için tasarımların oluşturulmasında Exchange (değişim) ve Wynn algoritmalarının kullanılmasını önermektedir.

Wynn (1970) Algoritması: Tasarımı geliştirmek amacı ile tasarıma noktalar ilave eder. (Her bir adımda ilave edilecek nokta maksimum v değerine sahip noktadır. v = $x(X'X)^{-1}x'$ dır ve buradaki $(X'X)^{-1}$ tasarımda mevcut noktalardan oluşmaktadır). Maksimum v değerine sahip nokta aynı zamanda $|X'X|$ daki en büyük artışı oluşturan aday noktadır.

Exchange (Değişim) Algoritması: Maksimum v değerleri bir noktayı, verilen bir n deneyli tasarıma ekleyerek tasarımın $|X'X|$ değerini artırır. İkinci adımda ise (n+1) nokta arasından minimum v değerine sahip nokta tasarımından çıkartılır.

Değişim algoritmasında genelde her bir döngüde t adet nokta değiştirilebilir. Bu durumda tasarım büyüklüğü, maksimum v değerli t nokta ilave edildiğinden n 'den (n + t) ye ulaşır. Daha sonra minimum v değerli t adet noktanın silinmesiyle tasarım büyüklüğü tekrar n değerine indirgenir. Proses $|X'X|$ değerinde artış sağlanamayıncaya kadar devam eder. Değişim algoritması tasarım büyüklüğünü kontrol altında tuttuğu için özellikle faydalıdır.

Her iki algoritmanın da başlangıcında tekil olmayan bir tasarıma ihtiyaç vardır.

Tekil olmayan tasarım belirlendikten sonra, Wynn algoritmasına seçilen noktaların ilavesi ile başlanır. Bu aşamada tasarımın büyüklüğüne kadar verilmelidir. Karar için tasarımdaki nokta sayısına karşı G-etkinlik, (bkz Bölüm 3.4) ve maksimum kestirim varyansı plot edilir.

G- etkinlik tasarımın global etkinliği olup;

$$\%\text{G-etkinlik} = 100\frac{p}{n.d} \qquad (2.48)$$

şeklinde ifade edilir. (2.48) eşitliğinde p, parametre sayısını, n tasarım büyüklüğünü, d ise v nin maksimum değerini belirtmektedir. Ekonomik ve zaman kısıtları dikkate alınarak tasarımın büyüklüğü n belirlenir.

Pratik olarak G-etkinlik ≥ %50 ve / veya maksimum kestirim varyansı ≤ $1.0\sigma^2$ olması iyi bir tasarım göstergesidir. Daha sonra seçilen n için tasarım geliştirmek amacıyla değişim algoritması uygulanabilir.

Kullanılan tasarım algoritmaları uygun bir tasarım geliştirilmesine yardımcı olur; bir tasarımın kullanılmasında dikte edici değildir.

2.8 DİĞER KARIŞIM MODELLERİ

2.8.1.Scheffe Polinomlarına Ters Terim Eklenmesi

Bir ve ya birkaç bileşenin göstermiş olduğu eğilimden dolayı (örneğin bir veya birkaç $x_i \rightarrow 0$) yanıt davranışında meydana gelen ekstrem (sapan) bir değişikliği modellemek için, ters terim içeren modeller önerilmiştir, (Draper ve John, 1977). Bu modeller,

$$\eta = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{q} \beta_{-i} x_i^{-1} \tag{2.49}$$

$$\eta = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i + \sum \sum_{i<j}^{q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{q} \beta_{-i} x_i^{-1} \tag{2.50}$$

$$\eta = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i + \sum \sum_{i<j}^{q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum \sum \sum_{i<j<k}^{q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \sum_{i=1}^{q} \beta_{-i} x_i^{-1} \tag{2.51}$$

$$\eta = \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i + \sum \sum_{i<j}^{q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum \sum \sum_{i<j<k}^{q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \sum \sum_{i<j}^{q} \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{i=1}^{q} \beta_{-i} x_i^{-1} \tag{2.52}$$

şeklindedir (Cornell, 1990; 291). Bu modellerde x_i 'nin değerinin asla sıfır olmayacağı fakat sıfıra çok yakın olabileceği varsayılmaktadır. Yani, $x_i \rightarrow \varepsilon_i > 0$'dır ve ε_i, bu modellerin her bir uygulaması için tanımlanan çok küçük bir niceliktir.

2.8.2. Cox 'un Karışım Polinomları

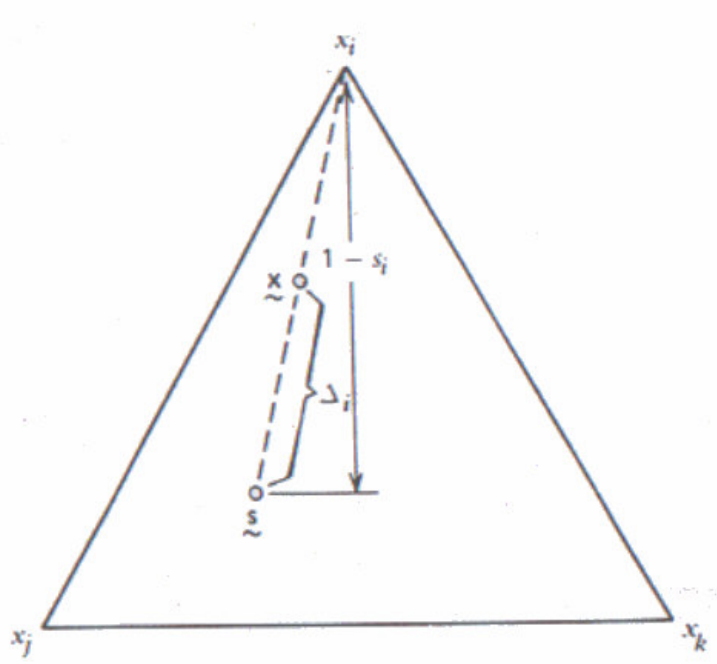
En genel formu ile birinci ve ikinci dereceden

$$\eta(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i \tag{2.53}$$

$$\eta(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{q} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{q} \sum_{j=1}^{q} \beta_{ij} x_i x_j \tag{2.54}$$

polinomları göz önünde bulundurulsun. Bu polinomlardaki $\eta(x)$, x noktasındaki beklenen ortalama yanıttır. Bu polinomlardaki bireysel parametrelerin yorumları, bileşen oranları üzerinde sınırlamaların yer aldığı Scheffé polinomları ile yapılan yorumlardan farklıdır. (2.53) ve (2.54) denklemlerindeki parametreler, standart bir karışımdan alınan yanıt değerlerine karşın simpleks noktalarındaki yanıtların karşılaştırılması ile oluşturulan yanıtlardaki nisbi değişmeleri açıklar (Cox, 1971).

(2.53) denklemindeki β_i parametresi, i bileşeninin oranındaki değişmenin yanıt üzerindeki etkisini açıklar. Bileşen i' deki değişmeye karşın diğer q-1 adet bileşenden en az bir tanesinin oranı da değişecektir. Bunu görmek amacıyla, simpleksteki bazı noktalarda standart bir karışım seçilsin ve **s** ile tanımlansın. Daha sonra, simpleks üzerinde **s**'den farklı **x** noktaları seçilsin. Eğer **x** noktası, **s** noktası ile $x_1 = 1$ köşesini bağlayan ışın üzerinde seçilirse, bileşen i'nin **x**'deki oranı $x_i = s_i + \Delta_i \ (\Delta_i > 0)$ olacaktır. Bu denklemdeki s_i, bileşen i'nin **s**'deki oranını ifade eder ve bunu daha rahat görebilmek için Şekil 2.9 incelenebilir. **x**, **s**'den $x_i = 1$'e doğru uzanan ışın üzerinde yer alıyorsa, geri kalan q-1 adet bileşen **s**'deki bileşenlerden birine eşit, göreli oranlardadır. Bu oranlar, $x_j = s_j - \Delta_i s_j /(1 - s_j) = s_j(1 - x_i)/(1 - s_i)$, $i \neq j$'dir.



(Kaynak: Cornell, 1990; 316)

Şekil 2.9. Bileşen i' nin oranındaki artan Δ_i değişimi ve Δ_i için $(1 - s_i)$ üst sınırı

(2.53) denklemi kullanıldığında, beklenen yanıttaki değişim $\eta(\mathbf{x})$ - $\eta(\mathbf{s})$ farkı alınarak bulunabilir. Bu işlem,

$$\Delta\eta(\mathbf{x}) = \eta(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{s})$$

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

$$= \beta_i \Delta_i + \sum_{i=1}^{q} \beta_j \left(x_j - s_j \right)$$

şeklinde olacaktır. Eğer β_i'ler üzerinde $\sum_{i=1}^{q} \beta_i s_i = 0$ sınırlaması varsa, beklenen yanıttaki değişim,

$$\Delta\eta(\mathbf{x}) = \frac{\beta_i \Delta_i}{(1 - s_i)} \tag{2.55}$$

olarak ifade edilir. β_i, $\Delta\eta(\mathbf{x})$'in bir fonksiyonu olarak tanımlandığında (2.55) denklemi, $\beta_i = \Delta\eta(\mathbf{x})(1 - s_i)/\Delta_i$ halini alır ve 'bileşen i'nin etkisinin tahmini' olarak adlandırılan β_i tahmini,

$$b_i = \frac{(1 - s_i)}{\Delta_i} \{ y(\mathbf{x}) - y(\mathbf{s}) \}, \; i = 1, 2, ..., q \tag{2.56}$$

olur. Bu denklemdeki y(**x**) ve y(**s**) ifadeleri, **x**'de ve **s**'de gözlenen yanıt değerleridir.

b_i formülünde, **x**'deki ve **s**'deki yüzeyin yüksekliklerindeki farklılık, bileşen i'nin oranında yapılan artan Δ_i değişimi ile ağırlıklandırılır. $(1 - s_i)/\Delta_i$ ağırlığı, 1birimdir ya da 1'den büyüktür. Şekil 2.8'de i, j ve k bileşenlerini içeren bir sistem için ağırlık yaklaşık olarak 2 birimdir.

Beklenen yanıttaki değişimi bulabilmek için (2.53) denklemi yerine (2.54) denklemi kullanılırsa, $\Delta\eta(\mathbf{x})$ denklemi diğer terimlerin yanı sıra $\beta_{ii}\Delta_i^2/(1 - s_i)^2$ terimini de içerir. Diğer bir deyişle, (2.55) denklemi

$$\Delta\eta(\mathbf{x}) = \frac{\beta_i \Delta_i}{(1 - s_i)} + \frac{\beta_{ii} \Delta_i^2}{(1 - s_i)^2} \qquad (2.57)$$

halini alacaktır ve parametreler üzerinde $\sum_{i=1}^{q} \beta_i s_i = 0$ ve $\sum_{k=1}^{q} \beta_{jk} s_k = 0 \;\; j = 1,2,...,q$ sınırlamaları olacaktır.

2.8.3. Bileşen Oranlarının Birbirlerine Oranlanması

Bazı durumlarda, bileşen oranları yerine bu oranların birbirlerine oranlanmasının kullanılması daha anlamlıdır. Örneğin, porselen bardakların özel bir modelinin imalatında silisin sodaya oranının ve silisin kirece oranının kullanımı bu üç karışımın her birinin oranının kullanımından daha anlamlıdır.

q bileşenli bir karışım deneyinde, bileşen oranlarının toplamı 1 birim iken, sistemi tanımlamak için sadece q-1 adet oranlamaya ihtiyaç duyulur. Üç bileşenli bir karışımda oranlanan değişkenlerin bazı mümkün setleri,

$$\begin{aligned}
&\text{Set 1}: \; r_1 = \frac{x_1}{x_2}, \qquad r_2 = \frac{x_1}{x_3} \\
&\text{Set 2}: \; r_1 = \frac{x_1}{x_2}, \qquad r_2 = \frac{x_2}{x_3} \qquad (2.58) \\
&\text{Set 3}: \; r_1 = \frac{x_1}{x_2 + x_3}, \quad r_2 = \frac{x_2}{x_3}
\end{aligned}$$

şeklinde tanımlanabilir (Cornell, 1990; 312).

Her bir oran setinde, her r_i oranı, i = 1 veya 2, aynı setteki diğer oranda kullanılan bileşenlerden en az birini içerir. Her bir setteki oran sayısı r_i , sistemdeki bileşen sayısından az olmalıdır. Eğer setteki oran sayısı q 'ya eşit ise, bileşen oranları toplamının bir olmasından dolayı oranların gereksiz bir set oluşturduğu söylenebilir.

r_1 ve r_2 yi içeren birinci dereceden model;

$$\eta = \alpha_0 + \alpha_1 r_1 + \alpha_2 r_2$$

şeklinde olup eşitlik (2.58) deki Set 1 in kullanılması ile

$$\eta = \alpha_0 + \alpha_1\left(\frac{x_2}{x_1}\right) + \alpha_2\left(\frac{x_2}{x_3}\right)$$

olarak ifade edilir. r_1 ve r_2 açısından x_i seti ise;

$$x_1 = \frac{r_2}{r_1 + r_1 r_2 + r_2}$$

$$x_2 = \frac{r_1 r_2}{r_1 + r_1 r_2 + r_2}$$

$$x_3 = \frac{r_1}{r_1 + r_1 r_2 + r_2}$$

olacaktır.

Standart faktöriyel tasarımlar, oranlanan değişkenlerle oluşturulabilir ve bu değişkenlerle standart polinomiyel modeller kurulabilir. Eğer üç bileşenli bir deneyde bileşen oranlarının birbirlerine oranlarını,

$$r_1 = \frac{x_3}{x_1}$$

$$r_2 = \frac{x_3}{x_2}$$

olarak alınırsa, $r_1 = 0.5, 1.0 \text{ ve } 1.5$ ve $r_2 = 1.0, 2.0 \text{ ve } 3.0$ oranları ile tanımlanan bölge üzerinden alınan verilerle uyumu yapılan ikinci dereceden model,

$$y = \alpha_0 + \alpha_1 r_1 + \alpha_2 r_2 + \alpha_{11} r_1^2 + \alpha_{22} r_2^2 + \alpha_{12} r_1 r_2 + \varepsilon \qquad (2.59)$$

olacaktır. Gözlemler 3^2 tasarım noktasından toplanmıştır. Tasarım ilk olarak r_1 ve r_2 ile kurulur. Daha sonra, karışım bileşenleri tekrar elde edilir ve çözülür. Üç bileşenli sistem için bu süreç şu şekildedir;

(r_1, r_2) = (0.5, 1.0) kombinasyonlarına uyan çözülecek eşitlikler

$$r_1 = \frac{x_3}{x_1} = 0.5, \quad r_2 = \frac{x_3}{x_2} = 1.0, \quad x_1 + x_2 + x_3 = 1$$

şeklindedir. Bu eşitliklerden $x_1=0.5,\ x_2=0.25,\ x_3=0.25$ olarak elde edilir. Benzer şekilde 9 tasarım noktasına uyan bileşen oranları tekrar elde edilir, (Cornell, 1990; 314).

2.8.4. Log Kontrast Modeller

Karışım modelinde, doğrusal karışım terimleri (x_i) arasındaki sabit-toplam sınırlamasını uzaklaştırmanın bir yolu, bileşen oranlarını orantılayarak bu oranları standart polinomiyel modelin değişkenleri olarak kullanmaktır. Diğer bir yol ise (q-1) log oran değişkenleri kullanmaktır.

$$z_i = \log\left(\frac{x_i}{x_q}\right) \qquad i = 1,2,\ldots, q\text{-}1 \tag{2.60}$$

dır. Birinci ve ikinci dereceden polinomiyel modeller ise;

$$\eta(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{q-1} \beta_i z_i$$

$$\eta(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{q-1} \beta_i z_i + \sum_{i=1}^{q-1}\sum_{j=1}^{q-1} \beta_{ij} z_i z_j \tag{2.61}$$

(2.61) deki modellerin simetrik formları ise;

$$\eta(x) = \gamma_0 + \sum_{i=1}^{q} \gamma_i \log x_i \tag{2.62}$$

ve

$$\eta(x) = \gamma_0 + \sum_{i=1}^{q} \gamma_i \log x_i + \sum_{i=1}^{q-1}\sum_{j=i+1}^{q} \gamma_{ij} (\log x_i - \log x_j)^2 \tag{2.63}$$

(2.62)-(2.63) modellerinde $\gamma_1 + \gamma_2 + \cdots + \gamma_q = 0$ dır. (2.63) daki γ_{ij} parametreleri (2.61) deki β_{ij} parametreleri ile ilişkilidir. Bu ilişki su şekildedir;

$$\gamma_{ij} = -\frac{1}{2}\beta_{ij}, \qquad i = 1.2,\ldots,q-1;\ j = i+1,\ldots q$$

$$\gamma_{iq} = \beta_{ii} + \frac{1}{2}\sum_{k<i}\beta_{ki} + \frac{1}{2}\sum_{k>i}\beta_{ik}, \qquad i = 1.2,\ldots,q-1 \tag{2.64}$$

Sıfırıncı logaritma alınamadığı için (2.62) ve (2.63) modellerindeki terimlerin log x_i açısından açıklanabilmesi için pozitif simpleks karışımlarına uygulanmış olması gerekmektedir.

(2.62) –(2.64) eşitliklerindeki modeller Aitchinson ve Bacon-Shone (1984) tarafından bileşenlere ait alt bileşenlerin etkilerinin toplanabilirliğini ve etkisizliğinin hipotez testleri için oluşturulmuştur.

2.9 Karışım Deneylerinde Yer Alan Süreç Değişkenleri

Birçok karışım deneyinde, yanıt sadece karışımda yer alan bileşen oranlarına bağlı olmayıp süreç koşullarına da bağlıdır. Süreç değişkenleri deneyde yer alan faktörler olup karışımın herhangi bir bölümünü oluşturmazlar ancak seviyelerindeki değişim karışım bileşenlerinin özelliklerini etkiler.

Süreç değişkeni içeren bir karışım deneyinde kullanılabilecek en standart tasarım, $\{q, m\}$ simpleks kafes tasarımı ya da simpleks merkez tasarımdır. Örneğin, x_1, x_2 ve x_3 oranlarına sahip olan bir karışım deneyinde, her biri iki seviyeli olan ve z_1 ve z_2 şeklinde tanımlanan iki süreç değişkeninin yer aldığı var sayılsın. Eğer uyumu yapılan altı terimli karesel bir model, {3, 2} simpleks kafesinin noktalarında alınan verilerle oluşturuluyorsa, kombine edilen {3, 2} kafes$\times 2^2$ faktöriyel düzenleme kullanılabilir.

Karışım bileşen oranları ve proses değişkenleri ile uyumu yapılan modeldeki terimler, karışım bileşenleri modeli ile süreç değişkenleri modelindeki terimlerin sonuçları alınarak elde edilir. Üç bileşen için altı terimli karesel model,

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \varepsilon \tag{2.65}$$

olacaktır. z_1 ve z_2 için ana etkiler ve etkileşim etkilerinden oluşan dört terimli model ise,

$$y = \alpha_0 + \alpha_1 z_1 + \alpha_2 z_2 + \alpha_{12} z_1 z_2 + \varepsilon \qquad (2.66)$$

denklemi ile gösterilebilir. (2.65) ve (2.66) denklemleri kombine edildiğinde, 24 terimli model,

$$y = \sum_{i=1}^{3}\left[\gamma_i^0 + \sum_{l=1}^{2}\gamma_i^l z_l + \gamma_i^{12} z_1 z_2\right] x_i + \sum\sum_{i<j}^{3}\left[\gamma_{ij}^0 + \sum_{l=1}^{2}\gamma_{ij}^l z_l + \gamma_{ij}^{12} z_1 z_2\right] x_i x_j + \varepsilon \qquad (2.67)$$

şeklinde ifade edilir.

Bu denklemde, $\gamma_i^l = \beta_i \alpha_l$, $\gamma_{ij}^l = \beta_{ij}\alpha_l$, $\gamma_i^{12} = \beta_i \alpha_{12}$ ve $\gamma_{ij}^{12} = \beta_{ij}\alpha_{12}$'dir. γ_i^0 (i=1, 2, 3) ve γ_{ij}^0 (i<j) katsayıları, her iki süreç değişkeninin bütün seviyelerinin kombinasyonlarının ortalamaları alındığında sırasıyla, bileşen *i*'nin doğrusal karışımının ve bileşen *i* ve *j*'nin doğrusal olmayan karışımının ölçümleridir. γ_i^l ve $\gamma_{ij}^l\ (l = 1,2)$ katsayıları sırasıyla, bileşen *i*'nin doğrusal karışımı ve bileşen *i* ve *j*'nin doğrusal olmayan karışımındaki z_l'nin ana etkisinin ölçüsüdür. Benzer şekilde γ_i^{12} ve γ_{ij}^{12} katsayıları sırasıyla, bileşen i 'nin doğrusal karışımı ve bileşen i ve j 'nin doğrusal olmayan karışımındaki z_1 ve z_2'nin etkileşim etkilerini tanımlar.

n adet süreç değişkenine sahip olan bir tasarımda, Scheffe tipi karışım modelleri kullanıldığında, büyük q ($q \geq 4$) ve n ($n \geq 3$) değerleri için tasarım noktalarının sayısı oldukça fazla olabilir. Tam kafes$\times 2^n$ tasarımdaki noktaların bir alt seti oluşturularak (kesirli hale getirilerek), tasarım noktalarının sayısı azaltılabilir. Bu alt set, süreç değişkenlerini içeren bir 2^{n-p} ($p \geq 1$) kesirli faktöriyel tasarımını seçerek ya da kafes noktalarının bir alt setini seçerek elde edilebilir. İkinci durumda yani kafes noktalarının bir alt setinin seçiminde örneğin, iki seviyeli bir süreç değişkeni (z) ile birlikte,

$$y = \gamma_1^0 x_1 + \gamma_2^0 x_2 + \gamma_3^0 x_3 + \gamma_{12}^0 x_1 x_2 + \gamma_{13}^0 x_1 x_3 + \gamma_{23}^0 x_2 x_3 + \gamma_1' x_1 z + \gamma_2' x_2 z + \gamma_3' x_3 z + \varepsilon$$

şeklindeki üç bileşenli karesel model kullanılarak, iki tane 10 noktalı tasarımın uyumu yapılır ve bu iki tasarım, IX'XI değeri bakımından eşdeğerdir.

2.10 KARIŞIM DENEYLERİNDE BLOK TASARIM

Karışım deneyleri oluşturulurken, deneysel hataya neden olan ve gürültü (süreç) değişkeni olarak adlandırılan birçok gürültü kaynağı vardır ve bu gürültü değişkenlerinin bazıları deneyde kontrol edilirken bazıları kontrol edilememektedir. Karışım bileşenlerine ek olarak deneyler genellikle süreç değişkenlerini içermektedir ve karışım bileşenlerinin etkilerinin süreç değişkenlerinden bağımsız olarak tahminlenmesi gerekmektedir. Süreç değişkenleri fiziksel olarak karışım seviyelerine bağlı değildir ve süreç değişkenlerinin seviye kombinasyonları tasarım bloğu olarak kabul edilmektedir. Bloklama gürültüyü azaltmak için kullanılan bir teknik olup deneysel hatanın azaltılmasını sağlar.

Murty (1966) simetrik simpleks tasarımları bloklanmasında ampirik olmakla beraber gerçek bloklamanın sadece tasarımın tekrarlanması ile gerçekleşeceğini belirtmiştir. Nigam (1970) ise; regresyon parametrelerinin blok etkisinden bağımsız tahminlenebilmesi için karışım değişkenlerinin transformasyonu yapılarak ortogonal bloklamaya gidilmesi gerektiği sonucuna ulaşmıştır.

Bloklamayı açıklamak için Scheffe' nin blok etkisi içeren kuadratik modeli ele alınsın;

$$Y_u = \sum_{1\le i\le n}\beta_i x_{iu} + \sum_{1\le i\le j\le n}\beta_{ij} x_{iu} x_{ju} + \sum_{w=1}^{t}\beta_w z_{wu} \qquad (2.68)$$

(2.68) ifadesin de, Y_u u-uncu deney noktasındaki yanıt (u = 1, 2 , …, N), β_i ve β_{ij} regresyon katsayıları ve X_{iu} 'lar karışım bileşenleri olup her u = 1, 2, …, N için $0 \le x_{iu} \le 1$ ve $\sum_{1\le i\le n} x_{iu} = 1$ dir. β_w ise w- inci bloğun etkisinin tanımlanan parametresidir, w = 1, 2,…, t ve

$$z_{wu} = \begin{matrix} 1 & \text{w - inci bloktaki noktalar icin} \\ 0 & \text{diger tum noktalar icin} \end{matrix}$$

dir.

t bloklu N deneme noktası içeren tasarım Murty ve Das(1968)' ın simetri koşullarını sağladığı varsayılsın.

$$\begin{array}{lll} \sum x_{iu}^2 = A & \sum x_{iu}x_{ju} = B & \sum x_{iu}^2 x_{ju} = C \\ \sum x_{iu}x_{ju}x_{ku} = D & \sum x_{iu}^2 x_{ju}^2 = E & \sum x_{iu}^2 x_{ju}x_{ku} = F \\ \sum x_{iu}x_{ju}x_{ku}x_{lu} = G & & \text{tum } i \neq j \neq k \neq l \text{ icin} \end{array} \qquad (2.69)$$

(2.69) de Murty ve Das tarafından belirtilen bu koşullar kuadratik model parametrelerinin EKKY ile tahmininde, **(X'X)** matrisinin tersinin alınmasında yaşanan zorluklar nedeniyle (özellikle bileşen sayısının çok olduğu durumlarda) sunmuş olduğu alternatif tahminleme metodunda tasarım matrisinin sağladığını varsaydığı sabitlerdir.

Murt ve Das (1968) ın parametre tahminleri için oluşturdukları EKK yöntemine alternatif metot prosedürüne benzer bir şekilde yola çıkılarak (2.68) modelinin parametrelere göre (β_λ ve $\beta_{\lambda\mu}$ olarak adlandırılsın) türevlendirilip sıfıra eşitlenmesi ile Nigam (1970) tarafından normal denklemler şu şekilde elde edilmiştir.

$$\sum_u \left(Y_u - \sum_t \beta_i x_{iu} - \sum_{i<j} \beta_{ij} x_{iu} x_{ju} - \sum_w \beta_w z_{wu} \right)^2 \qquad (2.70)$$

Eşitlik (2.70), herhangi bir β_λ ve $\beta_{\lambda\mu}$ ye göre türevlenirse;

$$\sum_u x_{\lambda u} y_u = Ab_\lambda + B \sum_{1\le i\le n\neq\lambda} b_i + C \sum_{1\le i\le n\neq\lambda} b_{\lambda i} + D \sum_{1\le i\le n\neq\lambda} b_{ij} + \sum_w b_w \left(\sum_{u=1}^{m_w} x_{\lambda u} \right) \qquad (2.71)$$

$$\begin{aligned} \sum_u x_{\lambda u} x_{\mu u} y_u = {} & C(b_\lambda + b_\mu) + D \sum_{1\le i\le n\neq\lambda,\mu} b_i + Eb_{\lambda\mu} + F\left(\sum b_{\lambda i} + \sum b_{\mu i}\right) \\ & + G \sum_{1\le i\le j\le n\neq\lambda,\mu} b_{ij} + \sum_w b_w \left(\sum_{u=1}^{m_w} x_{\lambda u} x_{\mu u} \right) \qquad i \neq \lambda, \mu \end{aligned} \qquad (2.72)$$

b' lar β parametrelerinin tahminidir. Eşitlik (2.70), β_w ye göre türevlenirse;

$$\sum_{u=1}^{m_w} y_{iu} = \left(\sum_{u=1}^{m_w} x_{iu}\right)\sum_{1\le i\le n} b_i + \left(\sum_{u=1}^{m_w} x_{iu}x_{ju}\right)\sum_{1\le i\le j\le n} b_{ij} + m_w b_w \qquad (2.73)$$

m_w w-inci bloktaki nokta sayısıdır.

(2.71), (2.72) ve (2.73) den gözlendiği üzere;

$$\sum_{u=1}^{m_w} x_{iu} = 0 \text{ ve } \sum_{u=1}^{m_w} x_{iu}x_{ju} = 0 \qquad (w = 1, 2,\ldots, t \text{ ve } i \neq j \text{ için}) \qquad (2.74)$$

koşulları sağlandığında ortogonal bloklamaya erişilmektedir. Aksi taktirde regresyon parametreleri blok parametresinden bağımsız tahminlenemeyecektir.

Ancak karışım deneyleri $x_{iu} \geq 0$ olmasını gerektirir. Açıkça görüldüğü üzere (2.74) koşulları tüm x_{iu} lar sıfır olduğunda sağlanmaktadır ki bu ise imkansızdır. Bu yüzden ortogonal bloklamanın elde edilmesi için karışım değişkenlerine transformasyon uygulanmalıdır. Nigam (1970) blok etkileri için parametreleri düzenleyerek ortogonal olmayan bloklama sorununu çözmeye çalışmıştır.

Normal denklemlerin çözümünü basitleştirmek için;

$$\begin{aligned} &\sum_{u=1}^{m_w} x_{iu} = \text{sabit} = k_1 \\ &\sum_{u=1}^{m_w} x_{iu}x_{ju} = \text{sabit} = k_2 \\ &\qquad w = 1,2..., t \text{ ve } i \neq j; i, j = 1,2,.., n \text{ icin} \end{aligned} \qquad (2.75)$$

olduğunu varsayarak blok etkileri için düzeltilmiş normal denklemleri elde etmiştir. Düzeltilmiş normal denklemlerin elde edilişi Ek 1 de verilmiştir.

2.10.1 Simpleks Üzerindeki Karışım Noktalarının Uygun Seçiminden Oluşan Tasarımlar

Toplam karışım (1/q 1/q 1/q… 1/q) hariç Scheffe' nin q-bileşenli Simpleks Merkez tasarımı ele alınsın. Eşit oranlı ikili karışımların ilavesi ile köşeleri

$\left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2} 0\,0 \ldots 0\right)$ olan simpleksin $\binom{q}{3}$ adet yüzünün her biri üzerinde üçgen oluşturulabilir.

Üçgenin köşesinden 1/p uzaklıktaki noktalar köşeleri $\left(\frac{1}{2}\ \frac{p-1}{2p}\ \frac{1}{2p}\ 0\,0 \ldots 0\right)$ şeklindeki $\binom{q}{3}$ adet üçgen seti ile oluşturulur. $\frac{p-1}{p}$ uzaklıktaki diğer noktalar köşeleri $\left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2p}\ \frac{p-1}{2p}\ 0\,0 \ldots 0\right)$ şeklindeki $\binom{q}{3}$ adet üçgen seti ile oluşturulur.

Teorem: Üçgenin iki setinin köşe noktaları iki bloklu karışım tasarımı olarak ele alınır ve köşe noktalarının her bir seti kompakt blok oluşturur.

İspat: Her bir bloktaki $\binom{q}{3}$ nokta sıfırın yeri hesaba katılmaksızın aynı devirli sırada meydana gelen ve değerleri sıfır olmayan 3 adet nokta türetir. Her bir blok$\binom{q}{3}$taki nokta adeti $3\binom{q}{3}$ olup (2.69) ve (2.75) koşullarını sağlar. İki bloktaki toplam $6\binom{q}{3}$ adet nokta (2.69) koşullarını sağlamaktadır.

Örneğin p=3 için 4 bileşenli tasarım ele alınsın. Simpleksin 4 yüzü için 2 bloklu tasarım şu şekilde oluşturulur.

Yüz	Blok 1	Blok 2
	$\frac{1}{p}=\frac{1}{3}$	$\frac{p-1}{p}=\frac{2}{3}$
1	$\frac{1}{2}\ \frac{2}{6}\ \frac{1}{6}\ 0$ $\frac{2}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ 0$ $\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ \frac{2}{6}\ 0$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ \frac{2}{6}\ 0$ $\frac{1}{6}\ \frac{2}{6}\ \frac{1}{2}\ 0$ $\frac{2}{6}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ 0$

2	$\frac{1}{2}\ \frac{2}{6}\ 0\ \frac{1}{6}$ $\frac{2}{6}\ \frac{1}{6}\ 0\ \frac{1}{2}$ $\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ 0\ \frac{2}{6}$	$\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ 0\ \frac{2}{6}$ $\frac{1}{6}\ \frac{2}{6}\ 0\ \frac{1}{2}$ $\frac{2}{6}\ \frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{6}$
3	$\frac{1}{2}\ 0\ \frac{2}{6}\ \frac{1}{6}$ $\frac{2}{6}\ 0\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}$ $\frac{1}{6}\ 0\ \frac{1}{2}\ \frac{2}{6}$	$\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{6}\ \frac{2}{6}$ $\frac{1}{6}\ 0\ \frac{2}{6}\ \frac{1}{2}$ $\frac{2}{6}\ 0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}$
4	$0\ \frac{1}{2}\ \frac{2}{6}\ \frac{1}{6}$ $0\ \frac{2}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}$ $0\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ \frac{2}{6}$	$0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ \frac{2}{6}$ $0\ \frac{1}{6}\ \frac{2}{6}\ \frac{1}{2}$ $0\ \frac{2}{6}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}$

Oluşturulan bu tasarım yapısında her iki blokta (2.69) simetri koşullarını sağlamaktadır:

$$\sum x_1^2 = \sum x_2^2 = \sum x_3^2 = \sum x_4^2 = 7/18 = \mathbf{A}$$

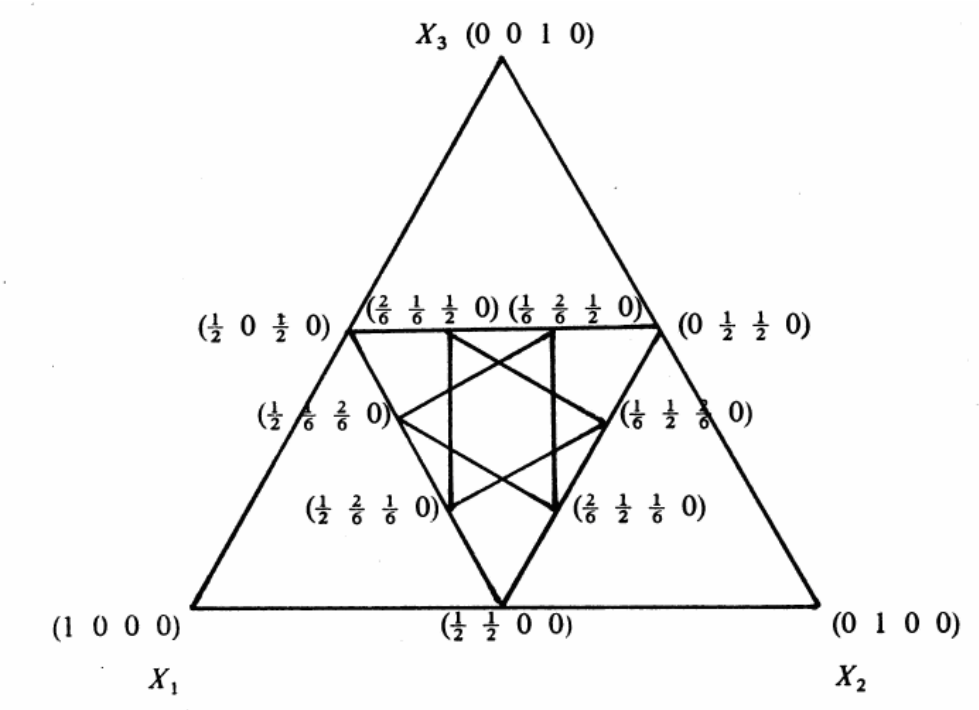
$$\sum x_1x_2 = \sum x_1x_3 = \sum x_1x_4 = \sum x_2x_3 = \sum x_2x_4 = \sum x_3x_4 = 11/18 = \mathbf{B}$$

$$\left.\begin{aligned}&\left(\sum x_1^2x_2 + \sum x_1^2x_3 + \sum x_1^2x_4\right) = \left(\sum x_2^2x_1 + \sum x_2^2x_3 + \sum x_2^2x_4\right)\\ &= \left(\sum x_3^2x_1 + \sum x_3^2x_2 + \sum x_3^2x_4\right) = \left(\sum x_4^2x_1 + \sum x_4^2x_2 + \sum x_4^2x_3\right)\end{aligned}\right\} = 2/3 = \mathbf{C}$$

$$\sum x_1x_2x_3 = \sum x_1x_2x_4 = \sum x_1x_3x_4 = \sum x_2x_3x_4 = 1/12 = \mathbf{D}$$

$$\left.\begin{aligned}&\left(\sum x_1^2x_2^2 + \sum x_1^2x_3^2 + \sum x_1^2x_4^2\right) = \left(\sum x_2^2x_1^2 + \sum x_2^2x_3^2 + \sum x_2^2x_4^2\right)\\ &= \left(\sum x_3^2x_1^2 + \sum x_3^2x_2^2 + \sum x_3^2x_4^2\right) = \left(\sum x_4^2x_1^2 + \sum x_4^2x_2^2 + \sum x_4^2x_3^2\right)\end{aligned}\right\} = \frac{49}{216} = \mathbf{E}$$

F = 1/36 ve **G =** 0 olarak elde edilir.



(Kaynak: *Nigam, 1970)*

ŞEKİL 2.10: *p=3 için 4 bileşenli tasarımda bloklar için ilk yüze ait noktalar,*

Bu yüzden q bileşenli karışımlarda, tasarım her bir blokta $3\binom{q}{3}$ karışım içeren $6\binom{q}{3}$ noktadan oluşacaktır.

2.11 ORTOGONAL BLOK TASARIM

Scheffe' nin kuadratik modeli baz alındığında ortogonalitenin başarılı olabilmesi için John (1984), Nigam' ın koşullarını modifiye ederek şu koşulların yeterli olduğunu göstermiştir;

$$\sum_{u=1}^{n_w} x_{ui} = k_i \qquad i = 1,2,...,q$$
$$\sum_{u=1}^{n_w} x_{ui}x_{uj} = k_{ij} \qquad i,j = 1,2,...,q \quad i \neq j \tag{2.76}$$

Eşitlik (2.76) daki $(x_{u1}, x_{u2}, ..., x_{uq})$ ifadesi w-inci bloktaki u-uncu deneme olup w-inci blok n_w deneme içermektedir, (w=1,2,…,b). Ayrıca b blok sayısı, k_i ve k_{ij} ler ise sabittir.

Eşitlik (2.76) de John tarafından ifade edilen ilk ortogonalite koşulu, bileşen i için oran toplamının blokların her birinde aynı olması gerektiğini ancak $k_1 = k_2 = \ldots = k_q$ olmasının şart olmadığını belirtmektedir. İkinci koşulda benzer şekilde $k_{12} = k_{13} = \cdots$ olmasının gerekmediğini göstermektedir.

Birinci dereceden model için ilk koşul yeterli olup kuadratik model için ikinci koşula gereksinim vardır. Kübik model için ise ilave koşul;

$$\sum x_{iu}x_{ju}x_{zu} = k_{ijl} \text{ (her bir blok için } i, j, k=1,2, \ldots,4) \tag{2.77}$$

gerekli olup k herhangi bir sabittir.

q bileşen için tasarım elde etmekte kullanılan bir yöntem ACED gibi bilgisayar algoritmalarıdır ancak her bir bloktaki deneme karışımların aynı seçimleri olmaz ise karışım ortogonalitesine ve süreç değişkenlerine ulaşmak zor olur. Diğer bir ifade ile ortogonaliteyi sağlamanın bir yolu tüm bloklarda aynı tasarımın uygulanmasıdır. Bu amaç doğrultusunda en uygun tasarımlar simpleks kafes ve simpleks merkez tasarımlardır. q=4 için en küçük simpleks kafes tasarım {4,2} tasarım olup 10 nokta içerir, (Cornell 1990, 21). q=4 için simpleks merkez tasarım 10 noktaya sahiptir, (Cornell 1990, 62). Bu yaklaşımların en büyük dezavantajı blok büyüklüğünün çok geniş olmasıdır.

John (1984)'de her blok için aynı tasarım kullanılmasını gerektirmeyen ortogonal bloklarda oluşan alternatif method olarak q x q Latin Kareler tasarımını sunmuştur. Latin Karelerin yapısı hakkında bilgi Ek 2 de verilmiştir.

Latin karelerden oluşturulan tasarım şu şekilde yapılandırılmaktadır;

$L=(a_{ij})$ q-uncu dereceden Latin Kareyi ifade etmektedir. $\{x_{uj} = a_{uj};\ j = 1,2,...,q\}$, a_{uj} j-inci bileşen oranının u-uncu karışımda olduğu, karışım deneylerindeki denemeyi ifade etmektedir. Her bir bloğa bir ya da daha fazla farklı kare tahsis edilir, ek olarak, bir ve ya daha fazla ortak karışım (common blend) **X'X** matrisinin tekil olmaması için ilave edilir. Çünkü **X** matrisinin çapraz çarpım terimlerine karşılık gelen sütunlar ana değişkenlerin yer aldığı sütunlar ile doğrusal bağımsız değildir.

Eşitlik (2.76) da ifade edilen koşullardan Koşul 1 gerçekleştikten sonra ikinci koşulun gerçekleşmesi için aynı çapraz çarpım yapısına sahip Latin kare çiftleri araştırılmalıdır.

Çapraz Çarpım Yapısı: q-uncu dereceden Latin Kare $L=(a_{ij})$ nin iki sütunu c_{j_1} ve c_{j_2} nin çapraz çarpımları

$$c'_{j_1} c_{j_2} = \sum_{u=1}^{q} a_{uj_1} a_{uj_2}$$

dır ve L' nin elemanları sembolik çarpım altında birbirleri ile yer değiştirir. L 'nin çapraz çarpım yapısı, $1 \le j_1, j_2 \le q$ için (j_1, j_2)-inci elemanı $c'_{j_1} c_{j_2}$ ($j_1 \neq j_2$) ve 0 ($j_1 = j_2$) olan q x q boyutlu matristir.

Her bir blokta $qk_1 + k_2$ denemesine sahip ortogonal tasarımlar bu şekilde oluşturulur. $(k_1 = 1, 2, ...;\ 1 \le k_2 \le q)$. Aynı çapraz çarpım yapısına sahip bazı Latin kare çiftleri bir ve ya daha fazla ortak sembol satırına sahiptir. Bu satırlar her iki kare çiftinden de ortogonalite koşullarını bozmayacak şekilde silinebilir.

q-uncu dereceden aynı çapraz çarpım yapısına sahip q! – 1 adet kareye giden yapı satır (sıra) permütasyonu ile oluşturulur. Tüm bu kareler karışım deneylerinde benzer şekilde oluşturulmuş denemeleri tanımladığından Latin karelerin sahip olduğu özellikler sınırlandırılabilir;

1. İlk sütundaki elemanlar doğal sırada ise Latin kare satır-indirgenmiştir.
2. q-uncu dereceden iki Latin Kare satır indirgenmiş ve benzer çapraz çarpım yapısına sahip ise eş (mates) dir.

Örneğin; q = 6 için 0,1,…,5 şeklinde etiketlendirilen 2 Latin kareyi ele alarak eş olup olmadıkları aşağıdaki gibi incelenebilir;

Kare 1						**Kare 2**						**Çapraz Çarpım Yapıları**					
0	3	4	1	5	2	0	1	2	5	4	3	0	A_1	A_2	A_1	A_3	A_2
1	0	3	2	4	5	1	2	5	4	3	0	A_1	0	A_1	A_2	A_2	A_3
2	1	0	5	3	4	2	5	4	3	0	1	A_2	A_1	0	A_3	A_1	A_2
3	4	5	0	2	1	3	0	1	2	5	4	A_1	A_2	A_3	0	A_3	A_1
4	5	2	3	1	0	4	3	0	1	2	5	A_3	A_2	A_1	A_2	0	A_1
5	2	1	4	0	3	5	4	3	0	1	2	A_2	A_3	A_2	A_1	A_1	0

A_1 =03 + 01 + 12 + 34 + 45 + 25

A_2 =04 + 13 + 02 + 35 + 24 + 15

A_3 =2(05) + 2 (14) + 2(23) ve 2(ij) = ij + ij olarak tanımlanmıştır.

Kare 1 için çapraz çarpım yapısının oluşturulması;

11 = **0**

12 = 03 + 01 +12 + 34 + 45 + 25 = **A_1**

13 = 04 + 13 + 02 + 35 + 24 + 15 = **A_2**

14 = 01 + 12 + 25 + 03 + 34 + 45 = **A_1**

15 = 05 + 14 + 23 + 23 + 14 + 05 = 2(05) + 2 (14) + 2(23) = **A_3**

16 = 02 + 15 + 24 + 13 + 04 + 35 = **A_2**

21 = 12 = **A_1**

22 = **0**

23 = 34 + 03 + 01 + 45 + 25 + 12 = **A_1**

24 = 13 + 02 + 15 + 04 + 35 + 24 = **A_2**

25 = 35 + 04 + 13 + 24 + 15 + 02 = **A_2**

$26 = 23 + 05 + 14 + 14 + 05 + 23 = 2(05) + 2\,(14) + 2(23) = \mathbf{A_3}$

.

.

.

$56 = 25 + 45 + 34 + 12 + 01 + 03 = \mathbf{A_1}$

Aynı işlemleri ikinci kareye de uyguladığımızda çapraz çarpım yapılarının aynı olduğunu görürüz. Sonuç olarak benzer çapraz çarpım yapısına sahip oldukları için Kare 1 ve Kare 2 eştir.

3. Standart formdaki Latin kareler, elemanları ilk sütun ve ilk satırda doğal sırada meydana gelen karelerdir. Standart devirli Latin kare ise şu şekilde tanımlanır; L_q elemanları 0,1,..,q-1 olan q-uncu dereceden standart devirli Latin kare olup (i,j)- inci elemanları ilk sütunun i-inci elemanının ve ilk satırın j-inci elemanın toplamı olup mod q ya indirgenir. ($2 \le i, j \le q$)

4. Biri; satırların, sütunların ya da elemanların permütasyonu ile diğerinden oluşuyorsa 2 Latin kare denktir. Standart devirli Latin Kareye denk olan kareye devirli denklik denir

Standart devirli Latin kare L_q nun ($q \ge 3$) eşi bulunurken, L_q da i-inci sütun ile $(q - i + 2)$-inci sütunun karşılıklı olarak yer değiştirir ($i = 2, 3, \ldots, q$) ve tüm mümkün değişim mod göz önüne alınarak yapılır. Bu durum aşağıda ifade edilen Lemma ile doğrulanabilir.

Lemma : $P : \ell_q \to \ell_q$ ve ℓ_q elemanları 0, …, q-1 olan tüm Latin kare setleri olsun. ($i = 0,1,\ldots,q-1$) iken **i** elemanlarının her biri **(q - i - 1)** elemanları ile yer değiştirirse $P(L_q)$ ve L_q aynı çapraz çarpım yapısına sahip olur.

İspat: l_i ve p_i sırasıyla L_q ve $P(L_q)$ nin (i+1) inci sütunları olsun. ($i = 0,1,\ldots,q-1$). $[\,]_q$ q modülüne indirgemeyi belirtmek üzere;

$l_i' = (i[i+1]_q \ldots [i+q-1]_q)$ ve $p_i' = ([q-i-1]_q\ [q-i-2]_q \ldots [q-i]_q)$ dir.

$0 \le i < j \le q-1$ için $u = (q-1-w)$ yerine konulursa;

$$p_i' p_j = \sum_{w=0}^{q-1} [q-i-1-w]_q [q-j-1-w]_q = \sum_{u=0}^{q-1} [u-1]_q [u-j]_q$$

Bu toplam, her $[r]_q$ elemanının $[r+i+j]_q$ ile yer değiştirmesi sabit olduğunda şu şekilde ifade edilir.

$$p_i' p_j = \sum_{u=0}^{q-1} [i+u]_q [j+u]_q = l_i' l_j$$

L_q nun eşi, $P(L_q)$ satırının standart sıralamaya dönüştürülmesi ile bulunur.

Örneğin; sekizinci dereceden standart devirli Latin karenin eşinin bulunmasını ele alınsın, (S.M. Lewis; A.M. Dean; N.R. Draper; P. Prescott, 1994).

0	1	2	3	4	5	6	7
1	2	3	4	5	6	7	0
2	3	4	5	6	7	0	1
3	4	5	6	7	0	1	2
4	5	6	7	0	1	2	3
5	6	7	0	1	2	3	4
6	7	0	1	2	3	4	5
7	0	1	2	3	4	5	6

şeklinde verilen devirli Latin karenin eşini bulmak için i-inci sütun ile (q-i+2)-inci sütunun elemanları mod dikkate alınarak yer değiştirilir. Buna göre;

i = 1 ise q-i+2 = 9 (mod8) = birinci sütuna tekabül edecektir yani ilk sütunda değişme olmayacaktır.

i = 2 ise q-i+2 = 8 (ikinci sütun ile sekizinci sütun yer değiştirecektir)

i = 3 ise q-i+2 = 7 (üçüncü sütun ile yedinci sütun yer değiştirecektir)

i = 4 ise q-i+2 = 6 (dördüncü sütun ile altıncı sütun yer değiştirecektir)

i = 5 ise q-i+2 = 5 (değişim olmayacaktır)

i = 6 ise q-i+2 = 4 (i = 4 ile benzer soncu vermektedir yani altıncı sütun ile dördüncü sütün yer değiştirecektir)

i = 7 ise q-i+2 = 3 (i = 3 ile aynı sonuç elde edilir.)

i = 8 ise q-i+2 = 2 (i = 2 ile aynı sonuç elde edilir)

Buna göre standart devirli Latin karenin eşi;

0	7	6	5	4	3	2	1
1	0	7	6	5	4	3	2
2	1	0	7	6	5	4	3
3	2	1	0	7	6	5	4
4	3	2	1	0	7	6	5
5	4	3	2	1	0	7	6
6	5	4	3	2	1	0	7
7	6	5	4	3	2	1	0

şeklinde elde edilir.

B_1 = 01 + 12 + 23 + 34 + 45 + 56 + 67 + 70

B_2 = 02 + 13 + 24 + 35 + 46 + 57 + 60 + 71

B_3 = 03 + 14 + 25 + 36 + 47 + 50 + 61 + 72

B_4 = 2(04) + 2 (15) + 2(26) + 2(37) olarak tanımlandığında çapraz çarpım yapıları şu şekildedir;

0	B_1	B_2	B_3	B_4	B_3	B_2	B_1
B_1	0	B_1	B_2	B_3	B_4	B_3	B_2
B_2	B_1	0	B_1	B_2	B_3	B_4	B_3
B_3	B_2	B_1	0	B_1	B_2	B_3	B_4
B_4	B_3	B_2	B_1	0	B_1	B_2	B_3
B_3	B_4	B_3	B_2	B_1	0	B_1	B_2
B_2	B_4	B_4	B_3	B_2	B_1	0	B_1
B_1	B_2	B_3	B_4	B_3	B_2	B_1	0

Teorem: Her devirli eşitlik q ≥ 3 derecesinde satır indirgenmiş Latin karesi sadece tek bir eşe sahiptir.

İspat: Eğer bir devirli eşitlik karesi L, M ve N şeklinde iki eşe sahip ise devirli kare L_q $(L \to L_q)$, M ve N ye satır, sütun ve eleman permütasyonlarının

uygulanması ile oluşturulan M_q ve N_q şeklinde iki eşe sahiptir. Sonuç olarak kanıtlanması gereken L_q nun tek eşinin M_q olduğudur. c elemanları sırasıyla 0, 1, …, q-1 olan sütun, R de q-devir (0, 1, …, q-1) olsun.

$$L_q = \{c, R(c), R^2(c), \ldots, R^{q-1}(c)\}$$

ve

$$M_q = \{c, R^{-1}(c), R^{-2}(c), \ldots, R^{-q+1}(c)\}.$$

$N_q = \{P_1(c), P_2(c), P_3(c), \ldots, P_q(c)\}$ ise P_i c deki elemanların permütasyonu olduğunda (i=1,…, q) L_q nun diğer eşi olsun.

Herhangi bir i= 1, …, q-1 için, L_q nun (i+1)-inci ve i-inci sütunlarındaki (r, s_L) ve (t_L, r) elemanlarının çiftleri şöyledir;

$$s_L = R^{i+1}R^{-i}(r) = R(r) = r + 1 \mod q$$

ve

$$t_L = R^{i}R^{-i-1}(r) = R^{-1}(r) = r - 1 \mod q$$

Bu ifadeler q-devirli R de r 'ye komşu iki elemandır. N_q, L_q nun eşi ise N_q nun komşu sütunlarında r olarak (r+1) ve (r-1) aynı satırda yer almalıdır. r keyfi olarak seçildiğinde, $P_{i+1}P_i^{-1}$ r ye komşu (r+1) ve (r-1) ile q- devir olmalıdır. Bu yüzden $P_{i+1}P_i^{-1}$, R ve ya R^{-1} dir.

j = 1, 2, …, q-2 için $P_{j+1}P_j^{-1} = R$ ve $P_{j+2}P_{j+1}^{-1} = R^{-1}$ olamaz. Aksi takdirde $P_j(c) = P_{j+2}(c)$ dir. Eğer, $P_{i+1}P_i^{-1} = R$ ise $N_q = L_q$; eğer $P_{i+1}P_i^{-1} = R^{-1}$ ise $N_q = M_q$ dir. Sonuç olarak L_q sadece bir tane eşe sahiptir.

Herhangi bir devirli denklik karesi L nin sahip olduğu tek eş şu prosedür ile elde edilir;

i-inci sütunu elde etmek için (i = 1, 2,…, q)

a. L de herhangi bir eleman " odak (focus) eleman" olarak seçilir ve j satırı sütun i de meydana geldiği yere yazılır.

b. (j, 1) pozisyonundaki eleman indeks eleman olup e_i ile ifade edilir.

c. i-inci sütun ilk girişi e_i olan L' nin sütunudur.

d. Satırlar standart sıraya getirilir

Yukarıda bahsedilen prosedür;

2	5	4	0	1	3
3	1	2	5	0	4
5	2	0	4	3	1
0	4	1	3	2	5
4	0	3	1	5	2
1	3	5	2	4	0

şeklinde verilen kareye uygulansın ve odak eleman 4 olarak alınsın; (odak elamanın olduğu tüm durumlar göz önüne alınmalıdır.)

İlk sütundaki 4 ü dikkate alınırsa; j = 5-inci satıra tekabül etmekte (j,1) = (5,1) = 4 yani beşinci satırın ilk elmanı e_i = 4 dür. Devirli eşitlikte 4 ile başlayan sütun 3-üncü sütun olduğundan ilk sütunla üçüncü sütün yer değiştirecektir.

İkinci sütundaki 4 ü dikkate alındığında; j = 4-üncü satır olup (j,1) = (4,1) = 0 = e_i; 0 ile başlayan sütun 4-üncü sütun olduğundan 2-inci sütunla 4-üncü sütun yer değiştirecektir.

Üçüncü sütundaki 4 ele alındığında ise j = 1-inci satır olup (j,1) = (1,1) = 2; ilk sütunla üçüncü sütun yer değiştirecek

Dördüncü sütundaki 4 ü ele alındığında; j =3-üncü satır olup (j,1) = (3,1) = 5; dördüncü sütunla ikinci sütun yer değiştirecek

Beşinci sütunda ise j = 6-ıncı satır olup (j,1) = (6,1) = 1; 1 ile başlayan sütun 5-inci sütun olduğu için bu durumda değişim söz konusu değildir.

Ve son olarak altıncı sütun dikkate alındığında j = 2-inci satır (j,1) = (2,1) = 3; değişim söz konusu değil.

Devirli eşitliğin eşi ise;

4	0	2	5	1	3
2	5	3	1	0	4
0	4	5	2	3	1
1	3	0	4	2	5
3	1	4	0	5	2
5	2	1	3	4	0

olarak elde edilir.

John(1984) tarafından önerilen ve Cornell(1990) tarafından belirtilen Scheffe 'nin kuadratik modeli için ortogonal blok çiftlerinin oluşturulmasında özel bir yöntem olarak Latin karelerin kullanılmasında bahsedildi. q=4 için John, standart Latin kareler ile başlayan ortogonal Latin karelerin elde edildiği blok düzenlemesini sunmuştur.

Tablo 2.1: *4-üncü dereceden standart Latin kareler*

Kare 1	Kare 2	Kare 3	Kare 4
abcd	abcd	abcd	abcd
badc	bdac	bcda	badc
cdab	cadb	cdab	cdba
dcba	dcba	dcba	dcab

Tablo 2.1'de gösterilen 4 standart Latin kareyi ele alalım. Standart karelerde ilk sütun ve ilk satır alfabetik sıradadır. 2-inci, 3-üncü ve 4-üncü sütunların permütasyonu ile bu karelerin her biri 5 farklı kare daha üretir ve toplamda 24 kare eder.

Bu kareler için x_1x_2, x_1x_3, x_1x_4, x_2x_3, x_2x_4 ve x_3x_4 çapraz çarpım toplamları;

A = 2(ab + cd)

B = (ac + ad + bc + bd)

olarak alınırsa tüm kareler için A, B, B, B, B, A şeklinde olduğundan bu kareler eştir ve benzer çapraz çarpım yapılarına sahiptir, (M.L. Aggarwal, ISI, Kolkata 2002).

Tablo 2.2'de Cornell tarafında dördüncü karenin kullanılması ile oluşturulan ($S_1(4)$) 6 kare gösterilmiştir.

Tablo 2.2: *2, 3 ve 4 Sütunlarının Permütasyonu ile 4-üncü Kareden Elde Edilen 6 Kare*

SI(4)	SII(4)	SIII(4)	SIV(4)	SV(4)	SVI(4)
abcd	acdb	adbc	abdc	adcb	acbd
badc	bdca	bcad	bacd	bcda	bdac
cdba	cbad	cadb	cdab	cabd	cbda
dcab	dabc	dbca	dcba	dbac	dacb

Eğer Tablo 2.2 'deki 6 kareden birinci ve dördüncü kareyi seçer ve karelerden birini bir blokta yer alan 4 karışımdaki karışım oranlarını belirtmek için ve diğer kare 2-inci bloktaki karışımları belirtmek için kullanılırsa (2.76) koşullarının sağlandığı görülür. Bu yüzden bu 2 kare, kuadratik model için her biri 4 hacimli 2 ortogonal blok sağlar. Bu kareler Tablo 2.2'in üst kısmında SI(4) ve SIV(4) olarak gösterilmiştir (Cornell 1990, 449). Kuadratik modelin 10 parametresini ve blok farkını tahminlemek için en azından 2 karışım noktası iki karenin her birine eklenmelidir.

İlave karışımların nasıl seçildiğini göstermek amacıyla, Tabo 2.1 den Kare 3 alınsın; Kare 3 'ün kullanılması ile oluşturulan 6 kareden herhangi bir eşi seçilerek (bkz Tablo 2.3) bloklara eklenir. Böylece her birinde 8 karışım olan 2 bloklu tasarım yapısı oluşturulmuştur.

Tablo 2.3: *2, 3 ve 4 Sütunlarının Permütasyonu ile 3-üncü Kareden Elde Edilen 6 Kare*

SI(3)	SII(3)	SIII(3)	SIV(3)	SV(3)	SVI(3)
abcd	acdb	adbc	abdc	adcb	acbd
bcda	bdac	bacd	bcad	badc	bdca
cdab	cabd	cbda	cdba	cbad	cadb
dabc	dbca	dcab	dacb	dcba	dbac

Bu kareler keyfi olarak seçilmemekte, daha önce ifade edildiği üzere genellikle eşlerin, eşleşmiş çiftlerinden gelmektedir. Herhangi bir sırada seviyeleri a,b,c,d olmayan yeni ortak (common) karşım, tasarımın tekil olmamasını sağlamak amacıyla her bir bloğa eklenmelidir. Birçok deneyci, karışıma merkezini eklemeyi tercih etmektedir.

Tablo 2.4: *Kuadratik Karışım Modeli İçin 2 Kare Çiftinin Kullanılması İle Oluşturulan 2 Ortogonal Blok*

	BLOK I		**BLOK II**	
SI(4)	a b c d	**SIV(4)**	a b d c
	b a d c		b a c d
	c d b a		c d a b
	d c a b		d c b a
SI(3)	a b c d	**SV(3)**	a d c b
	b c d a		b a d c
	c d a b		c b a d
	d a b c		d c b a

(b, a, d, c) ve (c, d, a, b) karışımlarının her ikisi de her bir blokta birer defa görülmektedir. Eğer bu karışımlar silinirse her biri 6 karışım içeren 2 blok kalır ve bu karışımlar (2.76) bloklama koşullarını sağlar. Her bir bloğa ortak karışım olarak merkez noktalar, q = 4 için (¼, ¼, ¼, ¼) eklenirse 7 karışımlı 2 bloklu tasarım oluşur ve daha öncede bahsedildiği üzere bu bloklar ortogonaldir.

q = 5 için, karışımlar Ayrık Ortogonal Latin Karelerin (MOLS) setine dayanmaktadır. Tablo 2.5 da kare setleri gösterilmiştir. Bu karelerin her birinden, ilk sütun sabit kabul edilerek diğer dört sütunun permütasyonunun oluşturulması ile 5 farklı kare elde edilir. Her bir karedeki sütunlarda yer alan kodlamalar ya da harfler devirli sırada meydana gelmektedir.

Tablo 2.5: *5-inci dereceden Ayrık Ortogonal Latin Kareler*

Kare 1	Kare 2	Kare 3	Kare 4
abdec	adecb	aecbd	acbde
bcead	beadc	badce	bdcea
cdabe	cabed	cbeda	cedab
debca	dbcae	dcaeb	daebc
eacdb	ecdba	edbac	ebacd

q = 5 için kuadratik model 5 doğrusal 10 çapraz çarpım terimi içermektedir. Eşit hacimli 2 bloklu tasarım en azından 16 farklı karışım içermelidir. q =5 olduğu durumlar için 2, 3 ve 4 bloklu bazı olası tasarım yapıları mevcuttur. Bloklardaki ortak karışım sayısını **n** ile ifade edilir ve Tablo 2.4 deki kareler kullanılırsa mümkün tasarımlar şu şekilde yapılandırılır;

A. 5 + n hacimli 2 bloklu (n ≥ 3)
- **i.** Blok 1: Kare 1 +n
  Blok 2: Kare 2 + n veya Kare 4 + n
- **ii.** Blok 1: Kare 3 +n
  Blok 2: Kare 4 + n veya Kare 2 + n

B. 10 + n hacimli 2 bloklu (n ≥ 1)
- **i.** Blok 1: Kare 1 ve 2 +n
  Blok 2: Kare 3 ve 4 + n

C. 10 + n hacimli 3 bloklu (n ≥ 1)
- **i.** Blok 1: Kare 1 ve 2 +n
  Blok 2: Kare 3 ve 4 + n
  Blok 3: Kare 1 ve 2 + n

D. 10 + n hacimli 4 bloklu (n ≥ 1)
- **i.** Blok 1: Kare 1 ve 2 +n

Blok 2: Kare 3 ve 4 + n

Blok 3: Kare 1 ve 2 + n

Blok 4: kare 3 ve 4 + n

Bölüm 3

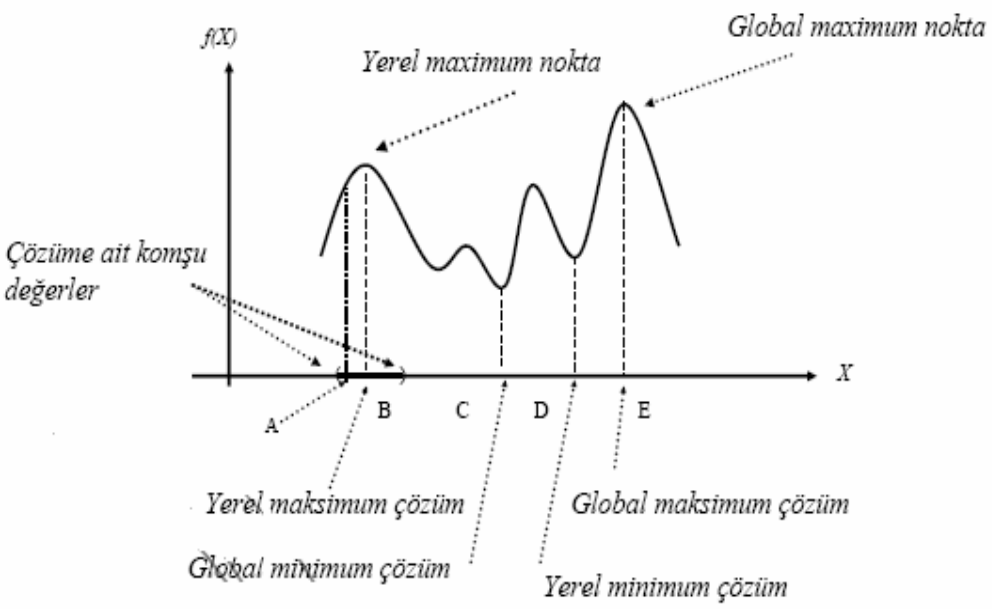
UYGULAMADA KULLANILAN MATEMATİKSEL TEKNİKLER VE OPTİMALİTE KRİTERLERİ

3.1. OPTİMİZASYON TEORİSİ:

Optimizasyon Teorisi fonksiyonun uç değerlerinin (maksimum, minimum) incelenmesi olup bu teori, analitik ve nümerik metotlar ile elde edilen ekstrem noktaların varlığı için gerekli koşulları ve uç değerlerine ulaşan fonksiyonun bağımsız değişkenlerin hangi değerleri için ekstrem noktalar olduğunun bulunması konularını içermektedir.

Optimizasyon sürecinde amaç fonksiyonun minimum veya maksimum değerini oluşturan şartlar bulunur. Bir x_0 noktası f(x) fonksiyonunun minimum değeri ise, aynı nokta –f(x) fonksiyonunun maksimum değeridir. Klasik optimizasyon teorisi maksimum veya minimumun bulunmasında amaç fonksiyonun sürekli ve türevlenebilir olduğunu varsaymaktadır.

Çok küçük pozitif ve negatif bütün ***h*** değerleri için, ***f(***x_0***)*** ≤ ***f(***x_0 ***+h)*** ise ***f(x)*** fonksiyonu x_0 'da yerel minimuma; ***f(***x_0***)*** ≥ ***f(***x_0 ***+h)*** ise ***f(x)*** fonksiyonu x_0 'da yerel maksimuma sahiptir. ***f(x)*** fonksiyonu tanımlı olduğu bölgede bütün ***x*** 'ler için ***f(***x_0***)*** ≤ ***f(x)*** ise, ***f(x)*** fonksiyonu x_0 'da mutlak veya tanımlı olduğu bölgede minimuma sahiptir. ***f(***x_0***)*** ≥ ***f(x)*** ise, ***f(x)*** fonksiyonu x_0 'da mutlak veya bölgesel maksimuma sahiptir.

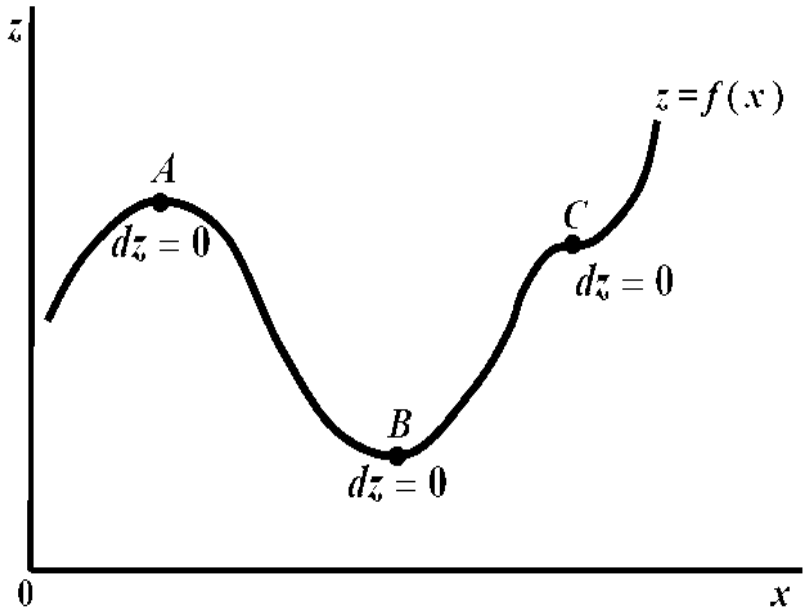


Şekil 3.1: *Klasik Optimizasyon Yapısı*

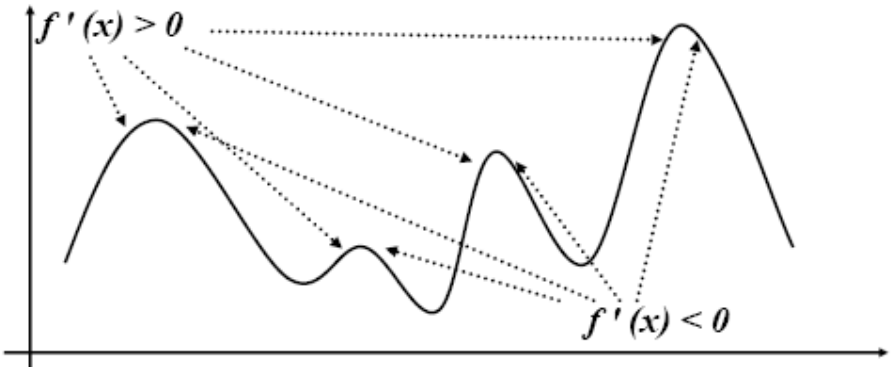
3.1.1 Tek Değişkenli Durumda Optimizasyon

δ > 0 ve $|x - x_0| < \delta$ iken ***f(x)*** ≥ ***f(*** x_0 ***)*** ise x_0 yerel minimum olup **δ** bölge aralığını ifade etmektedir. Eğer bütün ***x*** 'ler için ***f(x)*** ≥ ***f(*** x_0 ***)*** ise x_0 global minimumdur. Minimum ve maksimum değerlerin bulunmasında birinci dereceden ve ikinci dereceden türev testleri kullanılır. Minimum noktalarda ***f '(x)*** negatiften pozitife geçerken maksimum noktalarda ***f '(x)*** pozitiften negatife geçmektedir.. Minimum ve maksimum noktaların bulunmasında ilk koşul $\frac{d}{dx} f(x) = f'(x) = 0$ olmasıdır ancak birinci türevin çözümü maksimum, minimum veya büküm noktası olabilir ve amaç fonksiyonun durağan noktası olarak adlandırılır. Şekil 3.2 (a) dikkate alınırsa maksimum nokta olan A ve minimum nokta olan B 'de z = f(x) fonksiyonunun bir durgunluk değeri vardır. Bir başka ifadeyle, z 'nin bir uçdeğerinin (minimum ya da maksimum) olabilmesi için, x değişirken dz=0 olmalıdır. Ancak bu koşul tek başına bir minimum ya da maksimum için yeterli değildir; C noktasına baktığımızda dz = 0 olmakla beraber, bir uçdeğer oluşmamaktadır. Bu yüzden birinci dereceden türev koşuluna ek olarak ikinci dereceden türevler incelenmelidir.

$\frac{d^2}{dx^2} f(x) = f''(x) > 0$ ise bulunulan nokta minimum $\frac{d^2}{dx^2} f(x) = f''(x) < 0$ ise bulunulan nokta maksimumdur. (Barnett, Ziegler ve Byleen, 2002)



(a)



(b)

(Kaynak: Gill, Murray, Wright 1981)

Şekil 3.2: (a) *Durağan Noktaların Gösterimi* **(b)** *Maksimum Ve Minimum Noktaların Gösterimi*

Şekil 3.2 (a)'da A noktasının soluna (dx<0) ve sağına (dx>0) gidildiğinde her iki durumda da z 'nin değeri azalmaktadır (dz <0). Diğer bir ifadeyle, farklı x

değerleri için d(dz) < 0 ya da $d^2z < 0$ 'dır diyebiliriz. $d^2z < 0$ koşulu, maksimum için ikinci sıra koşulun (yeterlik koşulu) diferansiyelidir. Bunu şöyle gösterebiliriz:

$$\frac{d(dz/dx)}{dx} = \frac{d^2z}{dx^2} = f''(x) < 0, \qquad dx \neq 0$$

$$d^2z = f''(x)dx^2 < 0 \tag{3.1}$$

d^2z ifadesi açılarak yazılırsa; $dx^2 (\equiv (dx)^2)$ teriminin bir karesel terim (dolayısıyla pozitif) olduğunu görülebilir:

$$d^2z = d(dz) = d[\, f'(x)dx \,] = (\, df'(x))\, dx$$

$$d^2z = (\, f''(x)\, dx \,)\, dx = f''(x)\, (dx)^2$$

Dolayısıyla maksimizasyon için yeterli olan $d^2z < 0$ ikinci sıra koşulu ile $f''(x) < 0$ eşdeğerdir.

3.1.2 Birden Çok Değişken Durumunda Optimizasyon

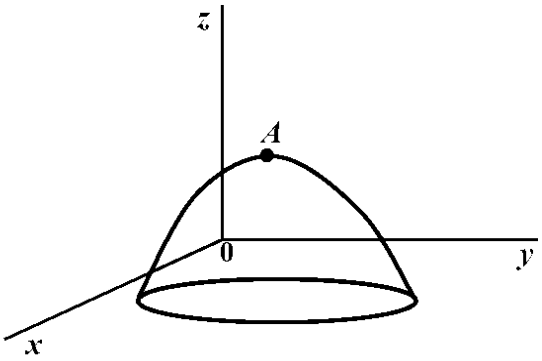
z = f (x,y) iki değişkenli fonksiyonu ele alındığında;İkisi birden sıfır olmamak koşuluyla farklı dx ve dy değerleri için dz = 0 birinci sıra koşulu oluşturur. Fonksiyonun birinci sıra toplam diferansiyeli;

$$dz = f_x\, dx + f_y\, dy = 0, \qquad dx \neq 0, dy \neq 0$$

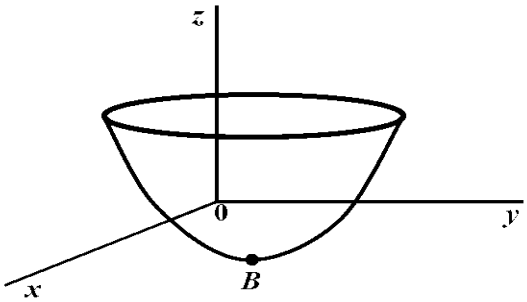
şeklinde olup bu koşul altında diferansiyel denklemin sıfır olabilmesi için

$$f_x = \frac{\partial z}{\partial x} = 0 \qquad\qquad f_y = \frac{\partial z}{\partial y} = 0$$

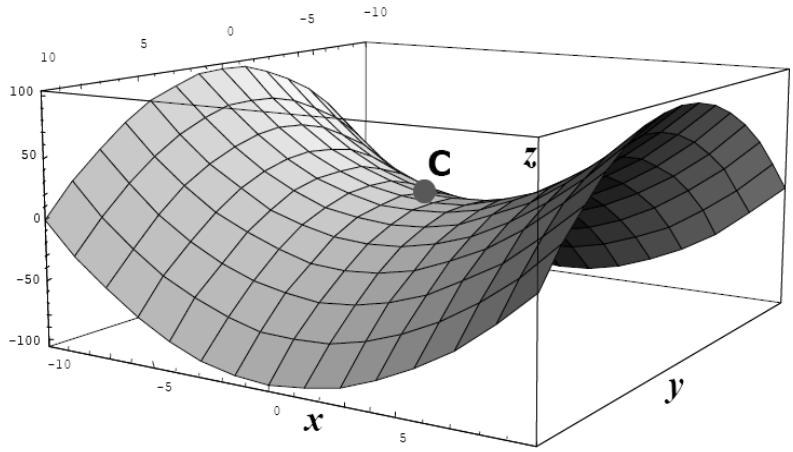
olmalıdır.



(a)



(b)



(c)

(Kaynak: Ateş, S., 2003)

Şekil 3.3 Birinci *Sıra Koşulu Açısından* **(a)** *İki Seçim Değişkenli Modelde Maksimum* **(b)** *İki Seçim Değişkenli Modelde Minimum* **(c)** *İki Seçim Değişkenli Modelde Eyer Noktası*

Şekil 3.3 birinci sıra koşul açısından incelenirse; Şekil 3.3 (a) 'da A noktasında, Şekil 3.3 (b)'de B noktasında ve Şekil 3.3 (c) 'de C noktasında dz = 0 birinci sıra koşulu sağlanmaktadır. Bu noktalarda

$$f_x = f_y = 0 \qquad \text{ya da} \qquad \frac{\partial z}{\partial x} = \frac{\partial z}{\partial y} = 0 \tag{3.2}$$

sağlanmaktadır. Ancak birinci sıra koşul uçdeğer için gerekli olmakla birlikte yeterli değildir.

Şekil 3.3 (a) 'da ve Şekil 3.3 (b)'de sırasıyla maksimum ve minimumun oluşmasına rağmen, 3.3 (c) 'de bir eyer noktası oluşmaktadır. *z, x* 'e göre bir maksimum vermekle birlikte, *y* 'e göre bir minimumdur. Çok değişkenli durumda ikinci sıra koşuluna geçmeden önce ikinci dereceden kısmi türev kavramı incelensin. $z = f(x,y)$ fonksiyonunun iki tane birinci dereceden kısmi türevi vardır:

$$f_x = \frac{\partial z}{\partial x} \ , \quad f_y = \frac{\partial z}{\partial y}$$

y sabit kalırken, f_x 'in x 'e göre türevi, x 'in ikinci dereceden kısmi türevi olup;

$$f_{xx} = \frac{\partial \left(\partial z/\partial x \right)}{\partial x} = \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}$$

şeklinde ifade edilir. Benzer şekilde *x* sabit kalırken, f_y 'in *y* 'e göre türevi, *y* 'nin ikinci dereceden kısmi türevidir

$$f_{yy} = \frac{\partial \left(\partial z/\partial y \right)}{\partial y} = \frac{\partial^2 z}{\partial y^2}$$

Ayrıca f_x ve f_y 'nin hem x hem de y 'nin birer fonksiyonu olduğu da göz önünde tutulursa, çapraz ikinci dereceden kısmi türevler elde edilir;

$$f_{xy} = \frac{\partial\,(\,\partial z/\partial y\,)}{\partial x} = \frac{\partial^2 z}{\partial x\,\partial y}$$

$$f_{yx} = \frac{\partial\,(\,\partial z/\partial x\,)}{\partial y} = \frac{\partial^2 z}{\partial y\,\partial x}$$

İkinci Sıra Toplam Diferansiyeli

dz 'nin diferansiyeli alınarak, d^2z ikinci sıra toplam diferansiyeli elde edilir;

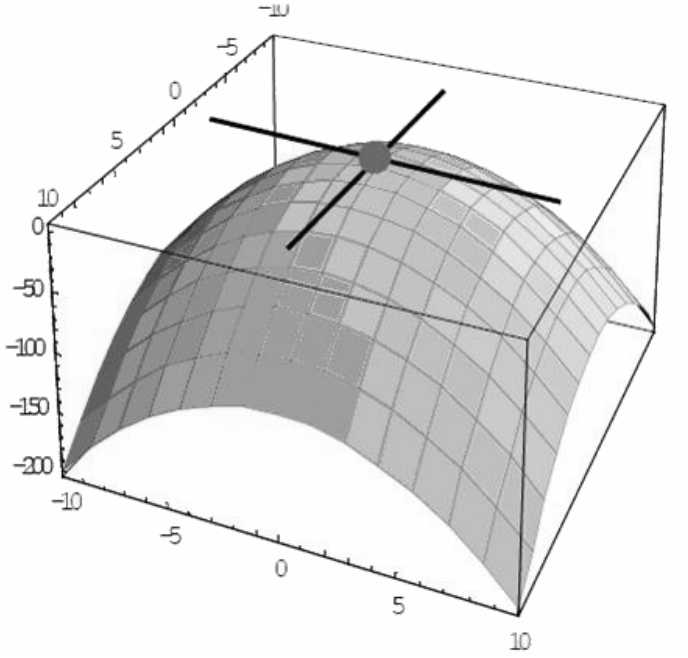
$$d^2z = d(dz) = \frac{\partial\,(dz)}{\partial x}dx + \frac{\partial\,(dz)}{\partial y}dy$$

$$= \frac{\partial\,(f_x\,dx + f_y\,dy)}{\partial x}dx + \frac{\partial\,(f_x\,dx + f_y\,dy)}{\partial y}dy$$

$$= [f_{xx}\,dx + f_{xy}\,dy]\,dx + [f_{yx}\,dx + f_{yy}\,dy]\,dy$$

$$= f_{xx}\,dx^2 + f_{xy}\,dy\,dx + f_{yx}\,dx\,dy + f_{yy}\,dy^2$$

$$d^2z = f_{xx}\,dx^2 + 2f_{xy}\,dy\,dx + f_{yy}\,dy^2$$



(Kaynak: Ateş, S., 2003)

Şekil 3.4 İkinci *Sıra Koşulu Açısından İki Seçim Değişkenli Modelde Maksimum*

Şekil 3.4 'de işaretlenen alanda birinci sıra koşulların sağlanmış olduğunu varsayıldığında eğer dx ve dy rasgele farklı değerler alırken, dz sürekli azalıyorsa (yani $d^2z<0$), bu noktada bir maksimum vardır. Tersi durumda bir minimum vardır. Ancak bazı durumlarda $d^2z=0$olabileceğini de göz önünde bulundurarak, genel kural şu şekilde belirtilebilir;

z 'nin maksimum değeri için: $d^2z \leq 0$

z 'nin minimum değeri için: $d^2z \geq 0$

Uç değeri belirlemek için kullanılacak olan yukarıdaki kural şimdilik ispat verilmeksizin ikinci derece kısmi türevler cinsinden açık olarak yazıldığında;

$$f_{xx}<0, \quad f_{yy}<0, \quad f_{xx}f_{yy}<f_{xy}^2 \Rightarrow d^2z<0$$

$$f_{xx}>0, \quad f_{yy}>0, \quad f_{xx}f_{yy}<f_{xy}^2 \Rightarrow d^2z>0$$

Şekil 3.4 de şeklin durgunluk noktasında çizilen doğu-batı ve kuzey-güney yönlü oklardaki hareketler bu koşullarda f_{xx} ve f_{yy} ikinci derece kısmi türevleriyle gösterilmektedir. Ancak dx ve dy rasgele değişirken bir uçdeğerin garanti altına alınabilmesi için, diğer olası yönlerde de dz 'nin ya sürekli azalıyor (maksimum için) ya da sürekli artıyor (minimum için) olması gerekir. Bu, f_{xy} çapraz türevi ile simgelenmiştir.

d^2z teriminin işaretinin pozitif mi, negatif mi olduğunu belirlemek için, karesel biçim kavramı kullanılarak, iki ya da daha çok seçim değişkeninin yer aldığı modellerde uçdeğer sınamasını daha kolaylıkla yapılabilinecek kurallara ulaşılacaktır.. Öncelikli olarak, biçim ve karesel biçim kavramlarını tanıtmak gerekirse; her bir terimin aynı derecen olduğu polinoma, biçim denir. Örneğin 4x-9y+z polinomu, üç değişkenli doğrusal bir biçimdir. $4x^2 - xy + 3y^2$ polinomu da, ikinci dereceden (karesel) bir biçimdir.

$q \equiv d^2z$, $u \equiv dx$, $v \equiv dy$, $a \equiv f_{xx}$, $b \equiv f_{yy}$, $h \equiv f_{xy} = f_{yx}$ kısıtlamaları kullanılarak $d^2z = f_{xx}\,dx^2 + 2f_{xy}\,dy\,dx + f_{yy}\,dy^2$ ifadesini karesel biçim çerçevesinde incelensin. İkinci sıra uçdeğer koşula göre, dx ve dy'nin kendisinin ve değişimlerinin hangi değer aldıklarından bağımsız olarak, bir minimum için $d^2z > 0$, bir maksimum için $d^2z < 0$ olması gerektiğinden bahsedilmişti. Bu durumda, q>0ya da q<0elde edebilmek için, u ve v herhangi bir değer alabilirken, a, b ve h katsayılarına hangi kısıtlamaların koyulması gerektiği belirlenmelidir.

q karesel biçimindeki değişkenlerin değeri ne olursa olsun (tümü aynı anda sıfır olmamak koşuluyla);

q > 0 ise pozitif belirli

q ≥ 0 ise pozitif yarı belirli

q < 0 ise negatif belirli

q ≤ 0 ise negatif yarı belirlidir.

Değişkenler farklı değerler alırken q işaret değiştiriyorsa, q belirsizdir. $q = d^2z$ belirsiz ise, bir eyer noktası vardır.

İki seçim değişkenli durumda determinant sınamasını elde edebilmek için, q karesel biçimi kullanılacaktır:

$$q = au^2 + 2huv + bv^2$$

u^2 ve v^2 pozitif olduklarından, a ve b katsayılarının işaretlerine konulacak kısıtlamalardan, işaretin rahatça ne olabileceğini söylenebilir ancak bu haliyle *2huv* teriminin işaretiyle ilgili kesin bir şey söylenemeyecektir. Bu nedenle de q 'nun kesin negatif belirli mi ya da pozitif belirli mi olduğunu söylenemez. Bu belirsizlikten kurtulmak için q karesel biçimine h^2v^2/a terimi eklenip çıkarılırsa;

$$q = au^2 + 2huv + \frac{h^2v^2}{a} + bv^2 - \frac{h^2v^2}{a}$$

Eşitliğin sağındaki ilk üç terim a ortak parantezine, son iki terim de v^2 ortak parantezine alınarak düzenlenirse;

$$q = a\left[u^2 + \frac{h}{a}v\right]^2 + \left[\frac{ab - h^2}{a}\right]v^2$$

dir.

a ve v^2 değişkenleri birer karesel ifade olduklarından, q 'nun işareti tümüyle a, b ve h katsayılarının işaretine bağlıdır.

$a > 0$ ve $ab - h^2 > 0$ ise $q > 0$ (pozitif belirli)

$a < 0$ ve $ab - h^2 > 0$ ise $q < 0$(negatif belirli).

Matris biçimini kullanarak, işaret belirliliği kuralını yeniden yazarsak;

$$a > 0 \text{ ve } |D| = \begin{vmatrix} a & h \\ h & b \end{vmatrix} = ab - h^2 > 0 \qquad \text{ise } q > 0$$

$$a < 0 \text{ ve } |D| = \begin{vmatrix} a & h \\ h & b \end{vmatrix} = ab - h^2 > 0 \qquad \text{ise } q < 0$$

a terimini de D determinantının bir alt determinantı (birinci ana minör determinantı) olarak düşünülebilir ve $|D_1|$ şeklinde yazılabilir. Buna göre işaret belirliliği koşulları;

$|D_1| > 0$ ve $|D| > 0$ ise $q > 0$ (3.3)

$|D_1| < 0$ ve $|D| > 0$ ise $q < 0$

Matris biçimiyle verilen q karesel biçiminin kısaltmaları yerlerine yazılarak yeniden düzenlenirse;

$$d^2z = [dx \quad dy]\begin{bmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{yx} & f_{yy} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix}$$

şeklinde ifade edilir.

$\begin{bmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{yx} & f_{yy} \end{bmatrix}$ ifadesi bir denklem sisteminin ikinci derece kısmi türevlerinden oluşan matris olup Hessian matris olarak adlandırılır. Hessian matrisi kullanarak, d^2z 'nin işaret belirliliği hakkında yorum yapılabilir.

$$f_{xx} > 0 \text{ ve } \quad |H| = \begin{bmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{yx} & f_{yy} \end{bmatrix} = f_{xx}f_{yy} - f_{xy}^2 > 0 \text{ ise } d^2z > 0$$

$$f_{xx} < 0 \text{ ve } \quad |H| = \begin{bmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{yx} & f_{yy} \end{bmatrix} = f_{xx}f_{yy} - f_{xy}^2 > 0 \text{ ise } d^2z < 0 \qquad (3.4)$$

n değişkenli karesel biçimi, doğrudan D matrisinin ana minörlerini yazarak işaret belirliliği için genel koşulu oluşturabilir;

$$|D_2| = d_{11}, \quad |D_2| = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{bmatrix}, \ldots,$$

$$|D_n| = |D| = \begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} & \cdots & d_{1n} \\ d_{21} & d_{22} & \cdots & d_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ d_{n1} & d_{n2} & \cdots & d_{nn} \end{vmatrix}$$

- Pozitif belirlilik için tüm ana minörlerin determinantları pozitif olmalıdır.
  $|D_1| > 0$, $|D_2| > 0$, …., $|D_n| > 0$
- Negatif belirlilik için ise tüm ana minörlerin determinantlarının işaretleri;
  $|D_1| < 0$, $|D_2| > 0$, …., $|D_n| > 0$
- n. ana minör $|D_n|$, eğer n çift sayı ise pozitif, tek sayı ise negatif olmalıdır.

$z = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ şeklindeki n seçim değişkenli bir fonksiyonda birinci sıra koşulunu belirlemek için toplam diferansiyel alınarak sıfıra eşitlenir. Birinci sıra koşulunu sağlayan x_i değerlerinin bulunması, ilgili noktada (ya da noktalarda) durağanlığı gösterir ancak bu durgunluğun bir uçdeğer ya da eyer noktası olduğunu söylemek için yeterli değildir. Bunu açığa çıkartmak için ise ikinci sıra koşula gereksinim duyulur. İkinci sıra koşul, dz diferansiyelinin bir kere daha diferansiyeli alınarak, işaretinin incelenmesini gerektirir.

n seçim değişkenine sahip fonksiyonunun uçdeğerlerine ilişkin genel sınama koşullarını oluşturmadan önce ikinci sıra koşuluna ait Hessian matrisinin yapısını ele alınsın.

$$\frac{\partial^2 z}{\partial x_1^2} = f_{11} \qquad \frac{\partial^2 z}{\partial x_2^2} = f_{22} \qquad \frac{\partial^2 z}{\partial x_3^2} = f_{33} \qquad \frac{\partial^2 z}{\partial x_n^2} = f_{nn}$$

$$\frac{\partial^2 z}{\partial x_1 \partial x_2} = f_{12} \qquad \frac{\partial^2 z}{\partial x_1 \partial x_3} = f_{13} \qquad \frac{\partial^2 z}{\partial x_1 \partial x_n} = f_{1n}$$

$$\frac{\partial^2 z}{\partial x_2 \partial x_1} = f_{21} \qquad \frac{\partial^2 z}{\partial x_2 \partial x_3} = f_{23} \qquad \frac{\partial^2 z}{\partial x_2 \partial x_n} = f_{2n}$$

şeklinde ifade edilmek üzere;

$$|H| = \begin{vmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} & \cdots & f_{1n} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} & \cdots & f_{2n} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} & \cdots & f_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ f_{n1} & f_{n2} & f_{n3} & \cdots & f_{nn} \end{vmatrix}$$

$$|H_1| = f_{11}$$

$$|H_2| = \begin{vmatrix} f_{11} & f_{12} \\ f_{21} & f_{22} \end{vmatrix}$$

$$|H_3| = \begin{vmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} \end{vmatrix}$$

$$|H_n| = |H|$$

Tablo 3.1: *n Adet Değişkene Sahip Fonksiyonunun Uçdeğerlerine İlişkin Genel Sınama Koşulları*

Koşul	**Maksimum**	**Minimum**
Birinci sıra koşul	$f_1 = f_2 = \cdots = f_n = 0$	$f_1 = f_2 = \cdots = f_n = 0$
İkinci sıra koşul	$\|H_1\| < 0, \|H_2\| > 0,$ $\|H_3\| < 0, \cdots, (-1)^n \|H_n\| > 0$	$\|H_1\| > 0, \|H_2\| > 0,$ $\|H_3\| > 0, \cdots, \|H_n\| > 0$

Bölüm 4 de anlatılacak olan uygulamada amaç fonksiyonunu Bölüm 3.4 de tanıtılan D – optimalite kriterine göre oluşturulmuş olup fonksiyonu maksimum yapan değişken değerleri nümerik analiz ile belirlenmiştir.

3.2 NÜMERİK ANALİZ

Analitik çözümle basitleştirmenin imkansız veya kesin çözümün mevcut bilgilerin ötesinde olduğu veya elle çözümünün sıkıntı yarattığı bir çok problem söz konusudur. Böyle durumlarda problemi sınırlı sayıda bilinmeyen içerecek şekilde düzenlemek için nümerik analiz kullanılır ve bilgisayar algoritmaları ile nihai eşitlikler çözülür. Nümerik analizin amacı, matematiksel modellerle ifade edilmiş, çok çeşitli alanlara ait problemlerin çözümünde belli sayıda ve sırası belirlenmiş işlemleri bilgisayar yardımıyla yaparak belirli bir hassaslığa sahip sonuçlar elde etmek için kullanılabilecek yöntemlerin bulunması, geliştirilmesi, var olanların irdelenmesi ve en etkin olanların saptanmasıdır.

Bir problemin çözümü için gerekli olan sonlu sayıdaki işlemleri adım adım belirli bir sıra ile tanımlayan düzene veya hesaplama yöntemine algoritma denilir. Bu tanım ışığında nümerik analiz, verilen girdi bilgilerini bir algoritma ile isleyerek çıktı bilgileri elde etme olarak düşünülebilir. Bazı temel hesaplamaların en iyi şekilde nasıl yapılabilineceğinin tanımlanması ile işleme başlanır. Bir problemin matematiksel modeli birden çok algoritma ile çözülebilir. Hangi algoritmanın kullanılacagını belirleyen etmenler:

a. Algoritmanın hızı
b. Algoritma ile elde edilen sonuçların hassaslığıdır.

Algoritmanın hassaslığı sayısal çözümlemenin en önemli konularından biridir ve elde edilecek sonucun ne kadar güvenilir olduğunu belirler. Sayısal hesaplamalarda farklı kaynaklardan gelen hatalar vardır. Örneğin girdi olarak kullanılan sayılar bir ölçüm sonucunda elde edilmiş olabilir, doğal olarak bu sayılarda ölçüm yanlışları olacaktır. Algoritmada kullanılan matematiksel modelden dolayı kesme yanlışları olabilir. Algoritmanın uyarlandığı bilgisayarda da yuvarlama yanlışları olacaktır.

3.3. FONKSİYON OPTİMİZASYONUNDA BENZETİLMİŞ TAVLAMA (SIMULATED ANNEALING) YÖNTEMİ

Verilen bir f (x) fonksiyonun minimumunu bulmak ile –f (x) in maksimumunu bulmak aynı problem olduğundan yapı minimum bulma problemi olarak ele alınacaktır.

3.3.1 Fonksiyon Minimizasyonu

N değişkenli $f(\vec{x})$ fonksiyonunun sayısal yöntemlerle minimumunu bulmak oldukça zor bir problemdir. Fonksiyonun alabileceği değerler uzayı büyük olduğunda bu problem daha da zorlaşır.

1. Fonksiyon argümanı $\vec{x}$, N boyutlu uzayda sürekli değer alan bir vektördür. Sayısal yöntem kullanıldığında uzayın kesikli hale getirilmesi söz konusu olduğundan iyi bir sonuç için N boyutlu uzayda çok küçük aralıklı bir ızgara (grid) oluşturulmalıdır. Bu da uzayda çok fazla sayıda nokta olması demektir. Fonksiyonun tüm bu noktalarda aldığı değer bulunup, bu değerler arasında karsılaştırma yapılır.
2. N boyutlu uzayda fonksiyon minimumunu daha hızlı bulan bir algoritma şöyle olabilir. Bir başlangıç noktasından başlanıp, nokta rasgele değiştirilebilir. Yeni noktadaki fonksiyon değeri eski noktadakinden daha küçükse yeni nokta kabul edilir, değilse kabul edilmez. Bu nokta yine rasgele değiştirilir, elde edilen nokta için aynı işlem ile secim yapılır. Böylece daha kısa surede fonksiyon minimizasyonu yapılabilir.

   2.1. $\vec{x}_i$ başlangıç noktası (i = 0)seçilir, $f(\vec{x}_i)$ hesaplanır.

   2.2. Nokta $\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i + \Delta\vec{x}_i$ seklinde rasgele bir hareketle ötelenir, $f(\vec{x}_{i+1})$ hesaplanır.

   2.3. $f(\vec{x}_{i+1}) < f(\vec{x}_i)$ ise yeni hareket noktası $\vec{x}_{i+1}$ olur, değilse yeni hareket noktası $\vec{x}_i$ olarak kalır.

   2.4. 2,3 işlemleri yeni hareket noktası için yinelenir.

   2.5. Hareketin durduğu *i* zaman adımında fonksiyonun minimumu bulunmuş olacaktır

3. Bu ve benzeri yöntemlerin hepsi birden çok minimumlu fonksiyonlarda çalışmaz. Algoritma bulduğu ilk minimumda takılacak (yerel minimum), büyük ihtimalle global minimumu bulamadan sonlanacaktır.

3.3.2 Metropolis Algoritması

Metropolis algoritması birden çok minimumlu fonksiyonun global minimumu bulunabilir.

Metropolis Algoritması, N boyutlu uzaydaki bir noktayı argüman kabul eden fonksiyon minimumu bulma problemi için kullanılabilir. Bir önceki algoritmaya göre üstünlüğü, yerel minimumlarda takılmayıp diğer minimumlara doğru aramaya devam edebilmesidir.

Minimum arama sırasında, fonksiyonun argümanı olan $\vec{x}$, N boyutlu uzayında hareket ettirilir, $\vec{x}_0, \vec{x}_1, ..., \vec{x}_i, \vec{x}_{i+1}, ..., \vec{x}_s$ noktaları boyunca olan hareket sonunda $\vec{x}_s$ aranan minimum değerini veren nokta olması beklenir.

Olası bir algoritma şu adımları içermektedir:

1. $\vec{x}_i$ başlangıç noktası (i = 0)seçilir, $f(\vec{x}_i)$ hesaplanır.
2. Nokta $\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i + \Delta\vec{x}_i$ seklinde rasgele bir hareketle ötelenir, $f(\vec{x}_{i+1})$ hesaplanır.
3. $f(\vec{x}_{i+1}) < f(\vec{x}_i)$ ise yeni hareket noktası $\vec{x}_{i+1}$ olur, değilse
   (a) $\omega = \exp[-(f(\vec{x}_{i+1}) - f(\vec{x}_i)/T]$ önceden seçilen ve program boyunca sabit olan bir T değeri için hesaplanır.
   (b) $0 < r < 1$ olacak biçimde bir r rasgele sayısı üretilir.
   (c) $\omega > r$ ise hareket kabul edilir, değilse reddedilir.
4. 2,3 işlemleri yeni hareket noktası için yinelenir.
5. Hareketin durduğu önceden belirlenmiş olan s zaman adımında (yeterince büyük seçilmişse) fonksiyonun minimumu bulunmuş olacaktır.

Bu tür bir algoritmanın üstünlüğü $f(\vec{x}_{i+1}) > f(\vec{x}_i)$ olması durumunda da harekete belli bir ölçüde izin vermesi ve böylece olası bir yerel minimumda takılmayı

önlemesidir. Ancak böyle bir algoritmada kritik olan şey T parametresinin secimidir. T seçiminde iki uç durum,

1. T çok büyük seçilirse $f(\vec{x}_{i+1}) > f(\vec{x}_i)$ durumunda algoritmadaki 3(c) adımı her zaman gerçekleneceğinden hareketin sonlandığı yer fonksiyonun belli bir minimum değeri olmayacaktır.
2. T çok küçük seçilirse $f(\vec{x}_{i+1}) > f(\vec{x}_i)$ durumunda algoritmadaki 3(c) adımı hiç bir zaman gerçeklenmeyecek bu durumda hareketin sonlandığı yer fonksiyonun bulunan ilk minimumu olacaktır. Bu durumda bu tur bir algoritmanın ilk bölümdeki algoritmadan bir farkı olmayacaktır.

Fonksiyon minimumu bulma probleminde kullanılan Metropolis Algoritmasında bir kaç kritik nokta vardır.

i. T değerinin seçimi
ii. Hareketin adım sayısının seçimi
iii. Rasgele hareketin oluşturulması (özellikle adım büyüklüğü secimi)

Tüm bu değişkenler hakkında birkaç deneme sonunda sağlıklı bir secim yapılabilir.

3.3.3 Benzetilmiş Tavlama (Simulated Annealing)

Metropolis Algoritmasında, program boyunca T parametresinin sabit kalmasının sakıncalarından bir önceki bolümde bahsedilmişti. T 'nin küçük seçilmesi, hareketin yerel bir minimumdan kurtulamamasını, büyük seçilmesi ise hareket global minimumdan geçse dahi global minimumu veren noktayı hassas bir bicimde bulamamasını getiriyordu.

Benzetilmiş Tavlama yöntemi ile bu sorunlar giderilir. Program, uzayda belli bir $\vec{x}$ başlangıç vektöründen ikinci kısımda anlatıldığı gibi yüksek bir T parametresi için hareket başlatır. Hareket sırasında ziyaret edilen noktalardan en küçük $f(\vec{x})$ değerini veren nokta bir sonraki hareketin başlangıç noktası olur. Bir sonraki harekette T değeri belli bir miktar azaltılır. T 'nin belli bir değerine varıldığında program sonlanır.

Olası bir algoritma şu şekildedir.

1. T için başlangıç değeri seçilir.
2. N boyutlu uzayda $\vec{x}_i$ başlangıç noktası (i = 0) seçilirve $f(\vec{x}_i)$ hesaplanır.
3. Nokta $\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i + \Delta\vec{x}_i$ seklinde rasgele bir hareket ğerçekleştirir, $f(\vec{x}_{i+1})$ hesaplanır
4. $f(\vec{x}_{i+1}) < f(\vec{x}_i)$ ise hareket kabul edilir, değilse
   (a) $\omega = \exp[-(f(\vec{x}_{i+1}) - f(\vec{x}_i)/T]$ programın bu adımı için sabit olan T değeri ile hesaplanır.
   (b) $0 < r < 1$ olacak biçimde bir r rasgele sayısı üretilir.
   (c) $\omega > r$ ise hareket kabul edilir, değilse reddedilir.
5. 3,4 işlemleri yeni hareket noktası için yinelenir.
6. Fonksiyonun en küçük değerini veren $\vec{x}$ bulunur $(\vec{x}')$.
7. T azaltılır.
8. Yeni T için 2-6 arası işlemler, hareketin başlangıç noktası 6 da bulunan $\vec{x}'$ olacak şekilde uygulanır.
9. T programın başında belirlenen değere indiğinde program durur.

Bu algoritmanın Metropolis Algoritmasına göre üstünlüğü şuradadır: T 'nin çok büyük değeri için başlayan hareket uzaydaki birçok noktayı gezer. Bir sonraki harekette T belli bir miktar azaltıldığında hareket yine uzayın büyük -ama bir önceki harekete göre daha küçük- bir bölümünde ve bir önceki harekette bulunan minimum noktasından başlayarak gerçekleşir. Eğer bu başlangıç noktası global minimum değilse program hareketi sırasında bir önceki hareketten biraz düşük olan T sayesinde bir çok yerel minimumu aşacak ve global minimumu bulacaktır. Belli bir T den daha düşük değerdeki T ler için ise hareket artık uzayın küçük bir kısmında ve hep global minimum civarında olacak böylece program sonlandığında global minimumu veren $\vec{x}$ iyi bir hassasiyet ile belirlenmiş olacaktır.

3.4 OPTİMALİTE KRİTERLERİ

Matris notasyonunda $E(Y) = X\beta$ modeli ele alınsın. X, (Nxp) boyutlu tasarım matrisi, β ise (px1) boyutlu bilinmeyen parametre vektörünü ifade etmektedir.

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'y$$

Varyans kovaryans matrisi ise

$$\mathbf{V}\text{ar}(\hat{\beta}) = \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$$

şeklinde ifade edilir. Kestirilmiş yanıt değeri ,

$$\hat{y} = \mathbf{x}'_p\,\mathbf{b} \tag{3.5}$$

varyansı,

$$\text{Var}(\hat{y}) = \mathbf{x}'_p(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}'_p\sigma^2 \tag{3.6}$$

ile hesaplanır. Burada $\mathbf{x}'_p$, $\mathbf{X}$ matrisinin bir sırasıdır.

Amaç $\mathbf{V}\text{ar}(\hat{\beta})$ nin minimizasyonudur. Ancak $\mathbf{V}\text{ar}(\hat{\beta})$ nin minimizasyonu imkansız olduğundan dolayı, $\mathbf{V}\text{ar}(\hat{\beta})$ nin tüm minimizasyonu üzerinden optimum tasarımlar bulunmuştur. $\sigma^{-2}\mathbf{V}\text{ar}(\hat{\beta}) = (X'X)^{-1}$ in anlamlı fonksiyonlarını minimize etmek daha pratiktir. $(X'X)^{-1}$ in iki anlamlı fonksiyonu olup bunlar $(X'X)^{-1}$ matrisinin izi ve determinantıdır; sırasıyla A ve D optimal tasarımları verir.

λ_i , i = 1, …, k olmak üzere $(X'X)^{-1}$ nin özdeğerleri olsun.

$$\text{tr}(X'X)^{-1} = \sum_{i=1}^{k}\lambda_i \tag{3.7}$$

ve

$$\left|(X'X)^{-1}\right| = \prod_{i=1}^{k}\lambda_i \tag{3.8}$$

Kolayca fark edilebilineceği üzere optimum tasarımların bulunması için A ve D optimalite kriterleri $(X'X)^{-1}$ nin öz değerlerinin aritmetik ve geometrik ortalamasına dayanmaktadır.

Genel anlamda tasarım seçiminde optimalite kriterleri şu şekilde belirtilmiştir. (John Cornell, 1990; 404)

i. ***A – optimalite :*** $(X'X)^{-1}$ matrisinin izinin minimizasyonu
ii. ***D – optimalite:*** $|X'X|$ in maksimizasyonu veya $\det(X'X)^{-1}$ minimizasyonu
iii. ***G – optimalite:*** Maksimum kestirim varyansının minimizasyonu
Minimize max $[d: x' (X'X)^{-1} x\sigma^2]$
iv. ***V- optimalite***: Ortalama kestirim varyansının minimizasyonu

D- optimalitenin yapılacak deney sayısı ile ilgili sınırlama getirmemesi ve farklı örnek hacimlerine sahip tasarımların karşılaştırılmasına imkan tanıması nedeniyle daha kullanışlı olduğu söylenebilir, (Vitali R., 2000; 70)

3.5 YANIT YÜZEYİ METODOLOJİSİ

Yanıt yüzeyi metodolojisi (RSM), bazı değişkenlerin etkilediği bir yanıtın modellenmesi ve analiz edilmesi problemini çözmek için istatistiksel ve matematiksel tekniklerin bir araya getirilmesinden oluşmuştur. Amaç, ilgilenilen yanıtın optimizasyonudur.

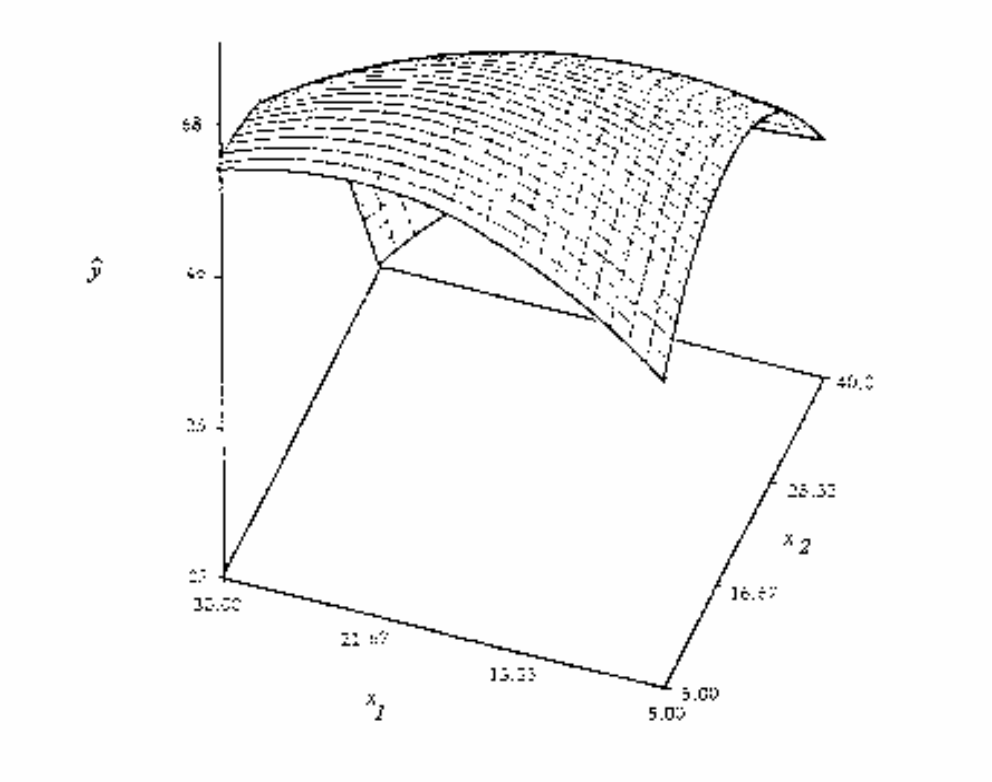
Matematiksel olarak ölçülen karakteristik ile bileşen oranları arasındaki ilişki şu şekilde temsil edilebilir;

$$\eta = \phi(x_1, x_2, ..., x_k), \tag{3.9}$$

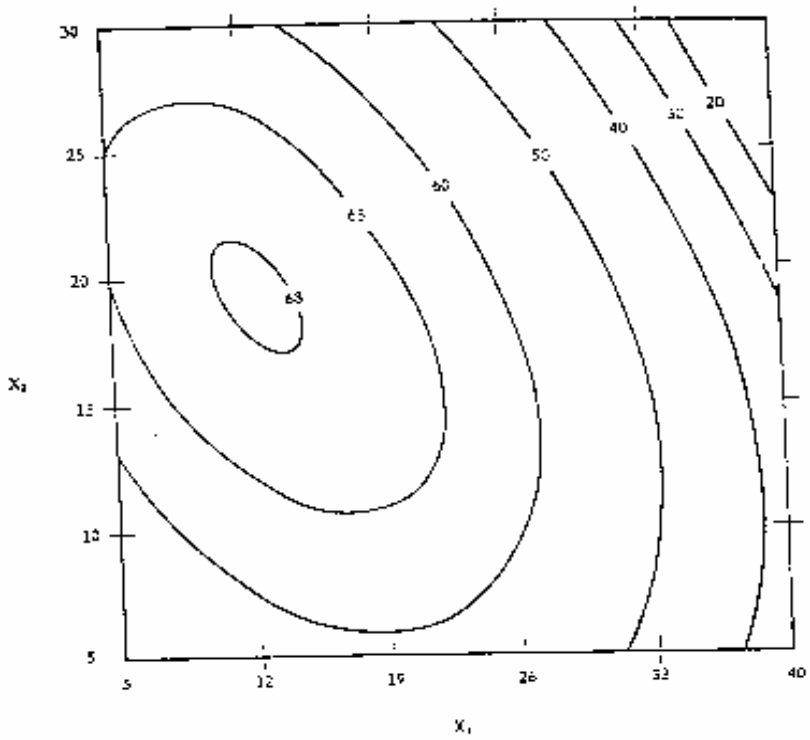
Eşitlikte η, k bileşenin oranına dayanan gerçek yanıttır. Bu eşitlik, bileşenlerin $x_1, x_2, ..., x_k$ oranlarına yanıtın (η) bağımlılığını tanımlar. ϕ fonksiyonu, gerçek yanıt fonksiyonu olarak adlandırılır ve bu fonksiyonun $(x_1, x_2, ..., x_k)$ de sürekli bir fonksiyondur ve karışım sistemlerin çoğu için standart bir polinomiyel ile tanımlanabilir (Cornell, 1990; 7).

Yanıt yüzeyleri grafiksel olarak gösterimi genellikle Şekil 3.5 deki gibidir. Yanıt yüzeyi eğrisini görsel olarak ifade etmekte kolaylık sağlayan bir teknik, yanıt yüzeyi eş yükselti eğrilerini plot etmektedir. Bir eş yükselti eğrisi plotu koordinatları

faktör seviyelerini temsil eden bir düzlem ya da grafik üzerinde eşit yanıt yüzeyi değerlerinin doğru veya eğrilerinin çizilmesidir. Şekil 3.5'in eş yükselti eğrisi plotu Şekil 3.6'de verilmiştir.



Şekil 3.5 *Üç Boyutlu Yanıt Yüzeylerinin Grafiksel Gösterimi*



Şekil 3.6 *Eş Yükselti Eğrisi Plotu*

Genellikle $\phi(.)$ 'nun yapısı bilinmez. Bu nedenle yanıt yüzeyleri metodolojisinde cevap ile bağımsız değişkenler seti arasındaki gerçek fonksiyonel ilişki için uygun bir yaklaşım bulunur. Genellikle bağımsız değişkenlerin belirli bir bölgesinde düşük dereceli bir polinomiyel yaklaşım veya bazı ampirik model eşitlik türleri uygulanır. Eğer $\phi(.)$ 'ya yaklaşmak için birinci dereceden polinomiyel kullanılırsa,

$$\eta = \phi(x_1, x_2, ..., x_k) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_{ui} \qquad (3.10)$$

Modelde, yanıt değişkeninin

$$y = \eta + \varepsilon \qquad (3.11)$$

olduğu varsayılır. Eşitlikte verilen ε ise gürültü veya yanıttaki hata olarak adlandırılır. Hatalar arasındaki ilişkinin sıfır olduğu ve sıfır ortalama ve σ^2 sabit

varyansla normal dağılış gösterdiği varsayılır. Diğer bir ifadeyle, $E(\varepsilon) = 0$, $E(\varepsilon^2) = \sigma^2$ ve $E(\varepsilon\varepsilon') = 0$ varsayılmaktadır Model birinci dereceden yanıt yüzeyleri modeli olarak bilinir ve

$$y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_{ui} + \varepsilon \qquad (3.12)$$

eşitliği ile verilir. Modelin beklenen yanıtı ise,

$$E(y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_{ui} \qquad (3.13)$$

Eğer sistemde eğrisel bir yapı mevcut ise daha yüksek dereceden bir polinom, örneğin ikinci dereceden bir model kullanılmalıdır.

$$y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_{ui} + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} x_{ui}^2 + \sum_{i<j}^{k} \sum^{k} \beta_{ij} x_{ui} x_{uj} + \varepsilon \qquad (3.14)$$

Model parametrelerinin tahminlenmesinde genellikle EKK metodu kullanılır. Daha sonra uyumu yapılmış yüzeye göre yanıt yüzeyi analizi gerçekleştirilir. Eğer uyumu yapılmış yüzey gerçek yanıt fonksiyonuna yeterli bir yaklaşım gösteriyorsa, uyumu yapılan yüzeyin analizi, gerçek sistemin analizine yaklaşık olarak eş değerdir.

Yanıt Yüzeyi Metodolojisi ardışık bir prosedür olup sistemi tanımayı ve optimum çalışma koşullarını belirlemeyi amaçlanmaktadır. Bir yanıt yüzeyi tasarımının bazı özellikleri Box ve Draper (1975) tarafından verilmiştir. Tasarım;

1. İlgilenilen bölgenin tamamı ile ilgili olarak yeterli bir bilgi dağılımı sağlamalıdır.
2. Uyum yetersizliğini ve modelin yeterliliğinin incelenmesini sağlamalıdır.
3. Deneylerin bloklar şeklinde uygulanmasına olanak vermelidir.

4. Artan dereceli tasarımların ardışık olarak oluşturulmasına imkân vermelidir
5. Hatanın içsel bir tahminin elde edilmesine imkân vermelidir.
6. Çok fazla sayıda deneme gerektirmemelidir.
7. Bağımsız değişkenler için fazla sayıda seviye gerektirmemelidir.
8. Model parametrelerinin hesaplanmasında basitlik sağlamalıdır.

Ortogonalite ve Döndürülebilirlik: Yukarıda listelenen özelliklere ek olarak tasarımın ortogonalite ve/veya döndürülebilirlik özelliğine sahip olması istenir. Ortogonal tasarımlarda, uyumu yapılan modeldeki terimler birbiriyle ilişkisiz olduğundan parametre tahminleri de korelâsyonsuz olarak elde edilir. Bu durumda, deneysel bölgede herhangi bir x noktasında tahminlenen yanıtın varyansı, parametre tahmin varyansının ağırlıklı toplamı olarak açıklanabilir. Örneğin birinci dereceden model sadece ve sadece **X'X** matrisi diagonal iken ortogonaldir.

Döndürülebilir tasarımlarda ise; x 'i noktasının konumuna bağlı olduğu bilinen $\hat{Y}(x)$ in varyansı, sadece tasarımın merkezinden x noktasına olan uzaklığın fonksiyonudur. Bu yüzden döndürülebilir tasarımlarda, kestirim varyansı var[$\hat{Y}(x)$] tasarım merkezine eşit uzaklıkta olan tüm x noktaları için aynıdır. Sonuç olarak girdi değişkenleri uzayında, sabit kestirim varyansının yüzeyi ortak merkezli hiperküreleri oluşturur (daireler ve küreler sırasıyla 2-boyutlu ve 3-boyutlu Euclidean uzaylarıdır).

Döndürülebilirlik kavramı ilk olarak Box ve Hunter (1957) tarafından ifade edilmiş olup o tarihten itibaren önemli tasarım kriteri haline gelmiştir.

Tasarımın döndürülebilme özelliği hakkında daha çok bilgi edinebilmek için tasarım momentleri olarak adlandırılan tasarım noktalarının dağılışının belirli parametreleri incelenmelidir. Matris notasyonunda $Y = X\beta + \varepsilon$ modeli ele alınsın. Model d-inci dereden ve k adet girdi değişkenin fonksiyonu ise δ-uncu dereceden ($\delta = 0,1,...,2d$) tasarım momentleri $\left\lfloor 1^{\delta_1} 2^{\delta_2} ... k^{\delta_k} \right\rfloor$ ile gösterilir ve

$$\left[1^{\delta_1} 2^{\delta_2} ... k^{\delta_k}\right] = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N} x_{u1}^{\delta_1} x_{u2}^{\delta_2} ... x_{uk}^{\delta_k} \qquad (3.15)$$

dir. Eşitlikte N toplam gözlem sayısını, $\delta_1, \delta_2, ..., \delta_k$ negatif olmayan tam sayıları olup $\sum_{i=1}^{k} \delta_i = \delta$ dir. Bu tasarım momentleri moment matrisi olarak adlandırılan $N^{-1}X'X$ matrisinin elemanlarıdır. $x_1, x_2, ..., x_k$ şeklinde kodlanan k adet girdi değişkeni içeren birinci dereceden model ele alındığında;

$$x_{ui} = \frac{X_{ui} - \overline{X}_i}{s_{X_i}}, \text{ ve } s_{X_i} = \left\{ \sum_{u=1}^{N} \frac{(X_{u_i} - \overline{X}_i)^2}{N} \right\}^{1/2} \tag{3.16}$$

(u=1,2,…,N ve i =1,2,…,k)

Paydadaki s_{X_i} ifadesi X_i ekseni yönündeki tasarım noktalarının yayılım ölçüsüdür. Moment matrisi ise;

$$\frac{1}{N}X'X = \begin{array}{c} \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_k \end{array} \begin{bmatrix} 1 & [1] & [2] & [3] & \cdots & [k] \\ & [11] & [12] & [13] & \cdots & [1k] \\ & & [22] & [23] & \cdots & [2k] \\ & & & [33] & \cdots & [3k] \\ & \text{simetrik} & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & [kk] \end{bmatrix} \tag{3.17}$$

şeklinde olup eşitlikte;

$$[i] = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N} x_{ui} \qquad [ii] = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N} x_{ui}^2 \qquad [ij] = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N} x_{ui}x_{uj} \qquad i,j = 1,2,\ldots,k$$

[i] momenti N gözlem üzerinden toplanan x_{ui} nin ortalaması olup birinci dereceden moment olarak adlandırılır. [ii] momenti tüm u=1,2,…,N üzerinden x_{ui}^2 değerlerinin ortalaması olup saf ikinci dereceden moment olarak adlandırılır. Bu moment ayrıca [i^2] şeklinde de gösterilmektedir. Moment [ij] ise, i≠j iken karma ikinci dereceden

moment olarak adlandırılmaktadır. Ayrıca (3.16)deki kodlama konvansiyonu ile $\sum_{u=1}^{N} x_{ui} = 0$ $\sum_{u=1}^{N} x_{ui}^2 = N$ eşitlik (3.17) da i =1,2,…,k için [i] =0 ve [ii] = 1 elde edilir. Bu durumda moment matrisi şu şekilde basitleştirilebilinir;

$$\frac{1}{N}X'X = \begin{array}{c} \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_k \end{array} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ & 1 & [12] & [13] & \cdots & [1k] \\ & & 1 & [23] & \cdots & [2k] \\ & & & 1 & \cdots & [3k] \\ & \text{simetrik} & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & 1 \end{bmatrix} \tag{3.18}$$

Uyumu yapılan model ikinci dereceden olduğunda $N^{-1}X'X$ matrisi dördüncü dereceye kadar moment içerecektir.

$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_1 x_1 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \varepsilon$ iki değişkenli modeli ele alındığında (3.16)deki kodlama konvansiyonu ile elde edilen moment matrisi şu şekilde olacaktır;

$$\frac{1}{N}X'X = \begin{array}{c} \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_2^2 \\ x_1x_2 \end{array} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & [12] \\ & 1 & [12] & [111] & [122] & [112] \\ & & 1 & [112] & [222] & [122] \\ & & & [1111] & [1122] & [1112] \\ & \text{simetrik} & & & [2222] & [1222] \\ & & & & & [1122] \end{bmatrix} \tag{3.19}$$

(3.19) de gösterilen moment matrisindeki bazı momentlerin açılımı şu şekildedir:

$$[111] = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N} x_{u1}^3 \qquad [122] = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N} x_{u1}x_{u2}^2$$

$$[1111] = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N} x_{u1}^4 \qquad [1122] = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N} x_{u1}^2 x_{u2}^2$$

Ayrıca bu momentler, sırasıyla $[1^3], [12^2], [1^4]$ ve $[1^2 2^2]$ şeklinde gösterilebilir.

Döndürülebilir tasarımlar için moment matrisinin özel bir formu Ek 3 de verilmiştir. Bu form ve (3.16) deki kodlama yapısı kullanıldığında birinci dereceden dürülebilir tasarım [i] ve [ij] momentleri sıfır [ii] momenti 1 değerine sahip olacak şekilde indirgenir. Bu yüzden birinci dereceden dürülebilir tasarımda, x_i eksenleri yönünde ölçülen tasarım noktalarının dağılışı $(x_1, x_2, ..., x_k) = (0, 0, ..., 0)$ da merkezlenmiştir ve varyansı 1 dir.

3.6 OPTİMUM KOŞULLARIN BELİRLENMESİ

Üretim hattında en yüksek kalite seviyesine ulaşma, maliyet minimizasyonu, ürün maksimizasyonu gibi istenilen yanıt değerlerini veren girdi (açıklayıcı) değişkenlerinin oluşturulması optimum koşulların elde edilmesidir, (Khuri, Cornell, 1987;149).

Optimum koşulların araştırılması prosedüründe ilk adım yanıt üzerinde en büyük etkiye sahip girdi değişkenlerinin belirlenmesidir. Genellikle yanıt üzerinde etkili olan değişken sayısı az olduğunda belirlenmesi kolaydır. Önemli değişkenlerin tespitinden sonra diğer adım, değişkenlerin fonksiyonu olarak ilgilenilen yanıtı açıklayacak model varsayımının oluşturulmasıdır.

Eğer ilgilenilen yanıtın davranışları, *k* adet faktörün sınırlanmış bir uzayında inceleniyor ise, bir deneyin başlangıç aşamasında yüzeyin eğriselliği ile ilgili mevcut bir bilgi yoksa ve en iyi yanıt değerlerinin yeri bilinmiyorsa en basit model formuna (genellikle birinci dereceden model) sahip olduğu varsayılır. Birinci dereceden model deneyin başlangıç setinin oluşturulmasında temel oluşturmaktadır ve eğer gerekli ise ilave deneme ile farklı model uyumunun yapılması önerilmektedir. Model gelişim sürecine ilave denemenin ekonomik olmadığı belirlenirse sürece son verilir. Model formlarının ardışık olarak uyumunun yapılması, test edilmesi ve nihai modelin seçimi, optimum koşulların belirlenmesi sürecinin temelini oluşturmaktadır.

Ardışık deneme programı boyunca ampirik modelin geliştirilme stratejileri şu şekildedir; (Khuri, Cornell,1987):

1. Birinci dereceden tasarım noktalarından toplanan veri seti için en basit polinomiyel model oluşturulur ($y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_{ui} + \varepsilon_u$). Toplanan verilere ekstra nokta ilavesi ile hata varyansını tahminlemek mümkünse modelin uyum testi yapılır.
2. Birinci dereceden modelin yeterli olduğuna dair bilgi, uyumu yapılan modelin deneysel bölge içinde yer alması veya deney alanının dışında ancak belirlenen sınırların içinde olması ile sağlanır.
3. Birinci dereceden bir modelin uyum yetersizliği, yanıt yüzeyinde muhtemelen bir eğriselliğin mevcut olduğunu ve modelin bu eğriselliği belirleyemediği, başka bir deyiş ile yeterli uyum sağlayamadığı anlamına gelmektedir. Eğer birinci dereceden modelin uyum yetersizliği testinde yüzey şekillerinde kavis bulunursa model çapraz çarpım terimlerinin veya saf kuadratik terimlerin eklenmesi ile geliştirilebilir ve yeni modeldeki terimleri tahminlemek için ilave tasarım noktaları gerekiyor ise model gözden geçirilerek yeni tasarım noktaları ilave edilir
4. Eğrisel yüzey tespit edilirse, ikinci dereceden model yüzeyin şeklinin açıklanması açısından uygun bir yaklaşımdır.
5. Son olarak istenilen yanıt değerinin bulunup bulunmadığını görmek için ilave denemeler yapılır.

3.6.1 En Hızlı Artış Metodu

Sistemin optimum çalışma şartlarının başlangıç tahmini, gerçek optimumdan uzak olabilir. Böyle durumlarda araştırmacının amacı optimumun bulunduğu noktaya doğru araştırmayı yöneltmektir. Araştırmacılar, basit ve ekonomik olarak etkin bir deney prosedürü kullanmak ister. Optimum nokta araştırılırken, x uzayının küçük bir bölgesinde birinci dereceden bir modelin yanıt yüzeyi için yeterli bir yaklaşım olduğu varsayılır.

En hızlı artış metodu, en hızlı artış yönünü izleyen ardışık bir araştırma prosedürüdür. En hızlı artış yönü yanıttaki maksimum artışın yönünü belirler. Eğer istenilen durum minimizasyon ise metot en hızlı azalış metodu olarak ifade edilir.

En hızlı artış yönteminde, artan yanıt değerleri yüzeyinde artış yönünde hareket edilerek, yüzeyde eğriselliğin oluştuğu bir bölgeye yaklaşılabilir, yanıttaki artış yüzeyin belirli bir yöndeki en yüksek noktasında bitecektir. Eğer bu yönde yüzey bir maksimumdan sonra azalmaya başlıyor ise bu bölgede yeni bir araştırma birinci dereceden bir model kullanılarak gerçekleştirilir. Yanıt değerlerinin arttığı yeni bir yön bu deney kullanılarak bulunur eğer birinci derece model yetersiz ise tasarım genişletilerek ikinci dereceden bir model uyumu yapılır. Bu araştırmalar yanıttaki artış duruncaya ya da belli değerden azalıncaya kadar devam eder.

En hızlı artış yönteminin matematiksel olarak tanıtımı şu şekildedir, (Box ve Wilson,1951). İlgilenilen alan içinde cevap fonksiyonun türevlerinin sürekli olduğu varsayılmaktadır. Maksimum yanıtı elde etmek için, k boyutlu uzayda 0 noktasından 0 dan r birim uzaklıkta olan P noktasına doğru ilerleme sağlanır. Kolaylık açısından **0** 'ı orijin olarak alınırsa, orijindeki yanıt φ(0) ve P deki yanıt φ(P) = φ(x_1, x_2, …, x_k) olacaktır. 0P nin r 'ye eşit olduğundan;

$$\sum_{t=1}^{k} x_t^2 = r^2 \qquad (3.20)$$

Koşul (3.20) 'ye bağlı olarak maksimum için, φ(P) - φ(0) 'a gereksinim vardır. Lagrange Metodu uygulanarak fonksiyon şu şekilde ifade edilir;

$$\psi = \varphi(P) - \varphi(0) - \frac{1}{2}\mu \sum x_t^2 \qquad (3.21)$$

$\frac{\partial \Psi}{\partial x_t}$ lerin tümü sıfır iken maksimum gerçekleşir.

$$\mu X_t = \varphi_t(P) \qquad t = 1,2,\ldots,k \qquad (3.22)$$

$\varphi_t(P)$ notasyonu; fonksiyonun x_t ye göre türevlendiğini ifade eder.

(3.20) ve (3.22) den;

$$\mu = \pm \left\{ \sum [\varphi_t(P)]^2 \right\}^{1/2} \Big/ r \qquad (3.23)$$

elde edilir ve bu eşitlik P için, maksimumun elde edildiği 0 dan r uzaklıktaki noktayı gösterir. P 'nin koordinatları P 'nin birinci türevleri için orantılı olmalıdır. (hepsinin sıfır olmadığı varsayılmaktadır). Bu ifade, maksimum kazanç noktasının yarıçapı r ve 0 merkezi eş yükselti yüzeyine teğet olan hiperküredeki noktalardan biri olduğunu söylemeye eşdeğerdir. P deki türevler genellikle bilinmez. Ancak φ'nın Taylor serisinin (terim dereceleri d 'den büyük olanlar ihmal edilir) yardımı ile orijini temsil ettiği varsayılarak P 'deki türevleri aşağıdaki eşitlik ile 0 açısından açıklanabilir;

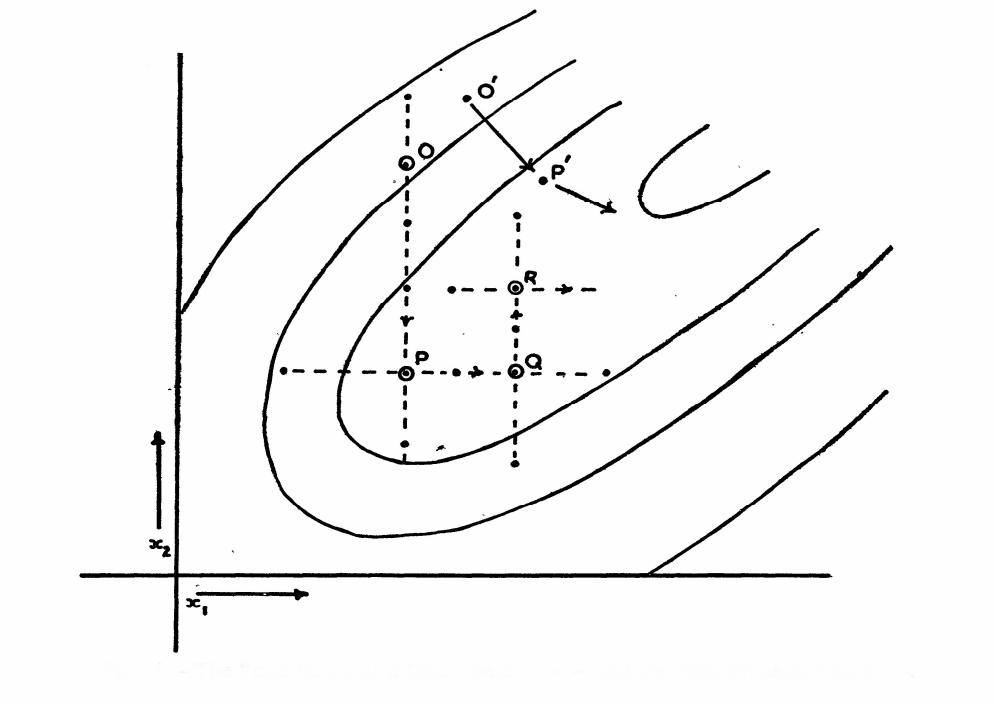
$$\varphi_t(P) = \left[D_t \sum_{s=0}^{d-1} \{(D_1 x_1 + D_2 x_2 + ... + D_k x_k)^s / s!\} \right] \varphi(0) \qquad (3.24)$$

D_t, x_t 'ye göre farkı ifade etmektedir. Köşeli parantez içindeki ifade ise genişletilmiş olup φ üzerinden işlem yapılması sağlanmıştır.

0 'daki türevler açısından 0 dan r uzaklıkta elde edilen maksimum P noktasının koordinatlarını açıkça belirten formül, eşitlik (3.24) in (3.22) de yerine yazılarak μ 'nün çekilmesi ile elde edilir. Bu işlemden sonra eşitlik (3.22) ün çözümü maksimumu verir. İlgilenilen alanda iki ve daha yüksek dereceden terimlerin önemsiz olduğu varsayılırsa k tane eşitliğe sahip olunur.

$$\mu X_t = \varphi_t(0) \qquad t = 1,2,\ldots,k \qquad (3.25)$$

Bu eşitlikler "en hızlı artış" ya da 0 'daki en büyük eğim eşitlikleri olarak ifade edilir. 0 'daki, birinci dereceden kısmi türevler için faktör oranlarının değiştirilmesi ile lokal olarak paralel ve eşit uzaklıkta olduğu varsayılan eş yükselti eğrilerinde sağ açı yönünde hareket edilir. Bu yüzden 0'daki birinci türevler belirlenerek P 'deki daha iyi yanıt değerine geçmek için kullanılır. Şekil 3.7 de x_1 ve x_2 faktörleri için "bir kerede bir faktör" yaklaşımı ile OPQR yolu ve $O'P'$ yolu boyunca "en hızlı artış yaklaşımı" gösterilmiştir.



(Kaynak: Box ve Wilson,1951)

Şekil 3.7: *X_1 Ve X_2 Faktörleri İçin Eş Yükselti Eğrisi ve En Hızlı Artış Yönü*

Deneysel hataların büyük olması nedeni ile daha fazla deney noktası kullanılarak daha geniş bir alanı kapsayan denemeler daha ekonomik bir davranış gösteriyorlar ise ikinci dereceden tahmin kullanılabilir. P 'nin geometrik yeri, k tane doğrusal eşitlik çözülerek elde edilebilir. k tane doğrusal eşitliğin çözülmesi ile P nin meydana getirdiği yüzey elde edilir;

$$\mu X_t = \varphi_t + X_1\varphi_{1t} + X_2\varphi_{2t} + ... + X_k\varphi_{kt} \qquad (3.26)$$

μ 'nün değerlerinin uygun seti için türevlerin değerleri 0 noktasında alınır.

3.6.2 Yaklaşık Sabit Bir Alana Geçiş için En Hızlı Artış Prosedürünün Uygulanması

Eğer deneysel hata küçük ise araştırmacı deneyi faktör uzayının küçük bir alt alanını sınırlayarak diferansiyel katsayılarını belirleyebilmektedir. Böyle durumlarda en azından başlangıçta birinci dereceden daha büyük türevler ihmal edilebilir. Bundan sonra yapılacak işlem ise En Hızlı Artış formülü (3.25) ile ardışık uygulamalara geçmek olacaktır.

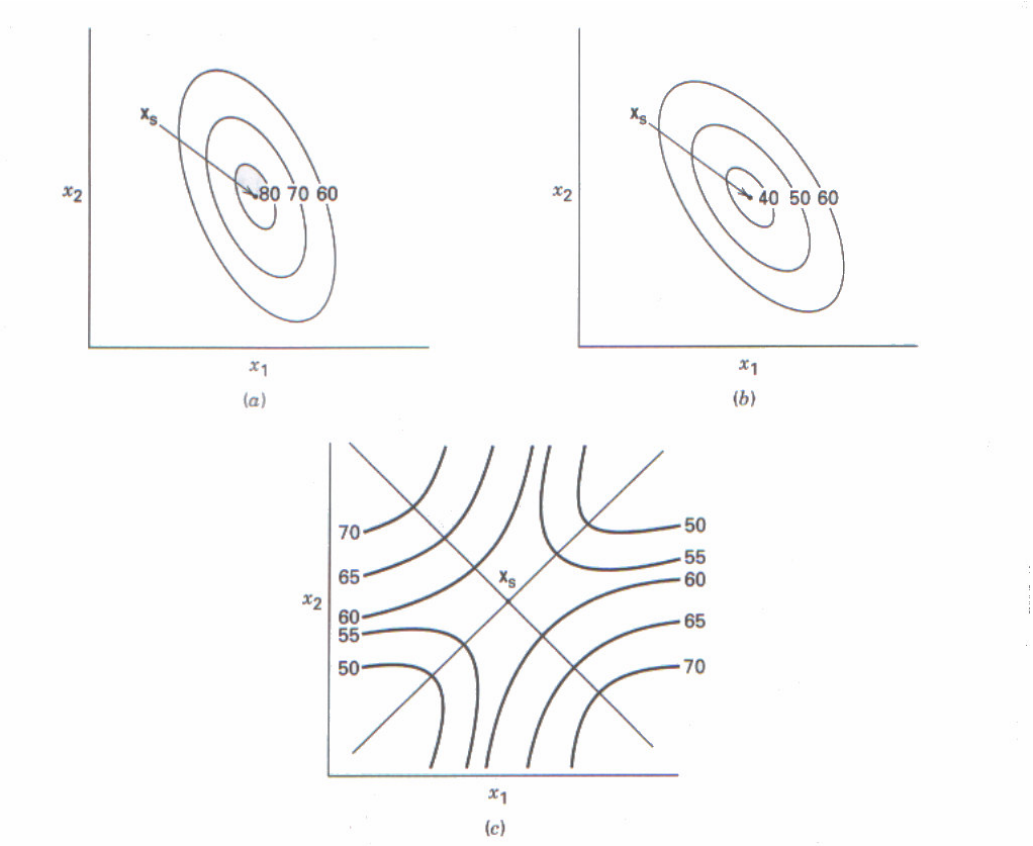
Bu hızlı ilerlemelerdeki sonuçlar; deneylerin ardışık setlerinde ortalama yanıtta artma ve birinci dereceden türevlerin büyüklüğündeki azalma ile gösterilir. Birinci dereceden etkilerdeki azalma çok fazla olduğunda daha yüksek dereceden etkilerle karşılaştırılamaz ve daha uzağa ilerlemek mümkün olmaz. Bu aşamada araştırmacı yaklaşık sabit bir alana gelmiş olur.

3.7 İKİNCİ DERECEDEN MODELLER VE ANALİZİ

Gerçek yanıt yüzeyi ile ilgili yeterli bilginin mevcut olmaması durumunda, araştırmacılar genellikle yanıt değerlerine ilk olarak birinci dereceden bir modelin uyumunu gerçekleştirirler. Bununla birlikte yüzeyin eğriselliğinin mevcut olması durumunda birinci dereceden modelde uyum yetersizliğinin ortaya çıkması daha yüksek dereceden bir modelin kullanılması zorunluluğunu ortaya çıkarır. Bu nedenle ilk olarak dikkate alınacak model ikinci dereceden bir modeldir. Bu model Eşitlik (3.14)'de tanımlanmıştır. Amaç kestirilmiş yanıtı optimize eden $x_1,...,x_k$ seviyelerinin bulunmasıdır. Eğer mevcut ise bu nokta

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x_1} = \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_2} = \cdots = \frac{\partial \hat{y}}{\partial x_k} = 0$$

kısmi türevleri ile elde edilir. Bu nokta ; $x_{1,s}, x_{2,s},..., x_{k,s}$ durağan nokta olarak adlandırılır. Durağan nokta (i) bir maksimum yanıt noktasını, (ii) bir minimum yanıt noktasını, (iii) bir eğer noktasını, temsil edilebilir. Bu üç olası durum Şekil 3.8'de gösterilmektedir.



(Kaynak: Montgomery,1996;586)

Şekil 3.8 *Durağan Nokta Örnekleri*

(a) Maksimum nokta

(b) Minimum nokta

(c) Eğer noktası

Sabit noktanın yeri için genel matematiksel çözüm elde edilebilir. Uyumu yapılmış ikinci dereceden model matris notasyonunda

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \mathbf{x}'\mathbf{b} + \mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x} \tag{3.27}$$

şeklinde tanımlanmış olsun. Bu eşitlikte;

$$\mathbf{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ . \\ . \\ x_k \end{bmatrix} \qquad \mathbf{b}=\begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \\ . \\ . \\ \hat{\beta}_k \end{bmatrix} \quad \text{ve} \quad \mathbf{B}=\begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \hat{\beta}_{12}/2 & \cdots & \hat{\beta}_{12}/2 \\ & \hat{\beta}_{22} & \cdots & \hat{\beta}_{2k}/2 \\ & & \ddots & \vdots \\ & \text{simetrik} & & \hat{\beta}_{kk} \end{bmatrix}$$

olarak verilmiştir. Birinci dereceden terimlerin tahminlenmiş parametre vektörü **b,** $k\times1$ boyutlu, ikinci dereceden terimlerin tahminlerinin parametre matrisi **B ise** $k\times k$ boyutlu simetrik matris olup köşegen elemanları saf bileşenler ($\hat{\beta}_{ii}$), köşegen dışında kalan bileşenler ise ikili karışım etkileri($\hat{\beta}_{ij}$) dir. Açıklayıcı değişkenleri ifade eden **x** vektörüne göre $\hat{y}$'nin türevi, alınıp sıfıra eşitlenerek,

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x} = \mathbf{b} + 2\mathbf{Bx} = \mathbf{0}$$

durağan noktanın koordinatlarını veren $k\times1$ boyutlu x_s vektörü,

$$\mathbf{x_s} = -\frac{\mathbf{B}^{-1}\mathbf{b}}{2} \tag{3.28}$$

elde edilir. Bir eşitlikteki x_s vektörünün elemanları durağan noktada yanıt yüzeyinin doğası ile ilgili herhangi bir bilgi vermez. Eşitlik (3.28) yi Eşitlik (3.27) de yerine yazarsak sabit noktadaki $\hat{y}$ elde edilir.

$$\hat{\mathbf{y}} = \hat{\beta}_0 + \frac{1}{2}\mathbf{x}'_\mathbf{s}\mathbf{b} \tag{3.29}$$

3.7.1 Yanıt Yüzeylerinin Karakterize Edilmesi

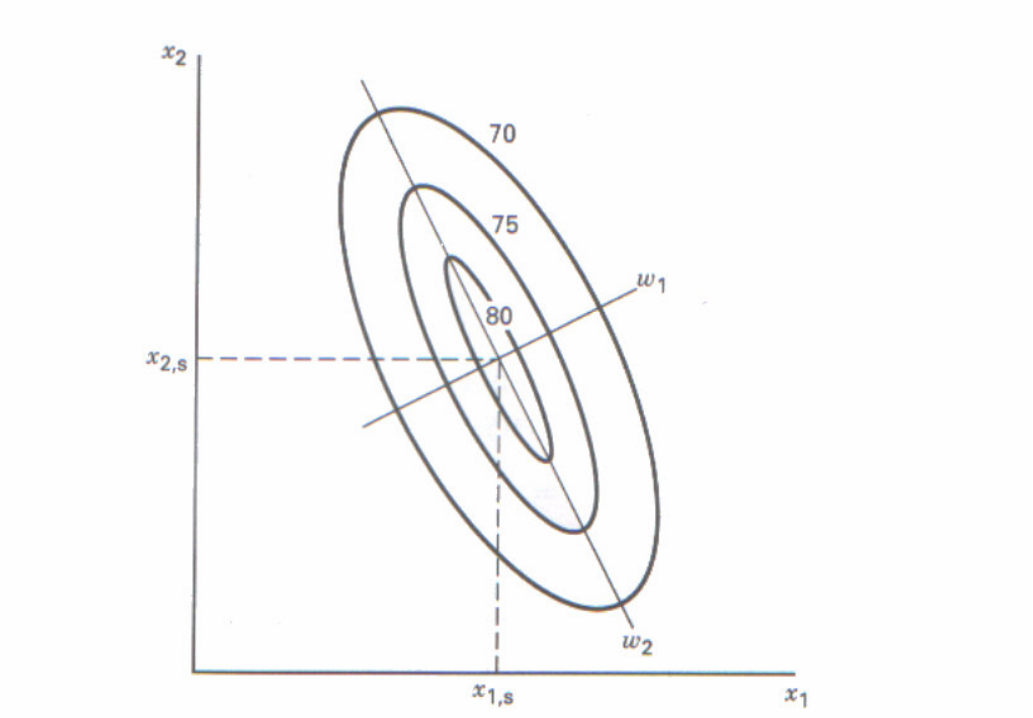
Yanıt yüzeyleri sabit noktanın yanında karakterize edildiği için öncelikli olarak sabit nokta elde edilir. Karakterize etmekten kasıt elde edilen sabit noktanın maksimum veya minimum veya eyer noktası olup olmadığını belirlemektir.

x_1, x_2, …, x_k değişkenleri için yanıtın nispi duyarlılığı ile çalışılmak istenir. Bunu yapmanın en koyla yolu, uyumu yapılan modelin eş yükselti plotunu incelemektir. İki veya üç süreç değişkeni mevcutken eşyükselti plotlarının oluşturulması ve yorumlanması oldukça kolaydır. Buna rağmen daha az değişkenin bulunduğu durumlar için bile daha formal analizlerin, Kanonik Analiz, kullanılması önerilmiştir.

İlk aşamada modelin x_s sabit noktasındaki orijin ile yeni koordinat sitemine transformasyonu yapılır ve daha sonra bu sistemin eksenlerini uyumu yapılan yanıt yüzeylerinin ana eksenlerine paralel olana kadar döndürülür. Bu transformasyonlar Şekil 3.9 de gösterilmiştir. Uyumu yapılan modeldeki bu sonuçlar aşağıdaki eşitlik ile gösterilebilir;

$$\hat{y} = \hat{y}_s + \lambda_1 r_1^2 + \lambda_2 r_2^2 + \ldots + \lambda_k r_k^2 \qquad (3.30)$$

Bu eşitlikte r_i ler dönüştürülmüş bağımsız değişkenler olup Bölüm 2.8.3 de anlatılan "Bileşen Oranlarının Birbirlerine Oranlanması" ile elde edilmektedir, λ_i ler ise sabittir. Eşitlik (3.30) modelin kanonik formu olarak adlandırılır. Ayrıca $\{\lambda_i\}$ ler **B** matrisinin öz değerleri veya karakteristik kökleridir.



(Kaynak: Montgomery,1996;588)

Şekil 3.9 *İkinci Dereceden Modelin Kanonik Formu*

Yanıt yüzeylerinin yapısı, sabit noktanı λ_i lerin işaret ve büyüklüğünden belirlenir. Sabit noktanın uyumu yapılmış ikinci dereceden model için incelenen alan içinde olduğunu varsayılarak;

(i) λ_i lerin tümü pozitif ise x_s minimum yanıt noktası

(ii) λ_i lerin tümü negatif ise x_s maksimum yanıt noktası

(iii) λ_i ler farklı işaretlere sahip ise (bazıları negatif, bazıları pozitif) x_s uyumu yapılan yüzeyin bir eğer noktasıdır.

Bireysel λ_i değerlerinin büyüklükleri, x_s'den w_i ekseni yönünde uzaklaşıldığında yüzeyde oluşacak değişikliğin ağırlığını belirtmektedir. Örneğin $|\lambda_2| > |\lambda_1|$ ise w_2 yönünde hareket edildiğinde yanıt yüzeyindeki değişiklik w_1'e göre daha fazla olacaktır.

Yanıt yüzeyini kanonik formda ifade etme işleminin son aşaması w_i değerlerinin x_i değerlerinin fonksiyonu şeklinde ifade etmektir.

Genel anlamda x değişkeni ile kanonik değişken w arasındaki ilişki;

$$\mathbf{w} = \mathbf{M}'(x - x_s)$$

şeklinde ifade edilir. **M** (kxk) boyutlu ortogonal matristir.

$\mathbf{M} = \left[\mathbf{m}_1 : \ldots : \mathbf{m}_k\right]$ şeklinde parçalandığı kabul edilsin. Burada $\mathbf{m}_i$ 'ler λ_i özdeğerlerine karşılık gelen özvektörler olup. Daha sonra $\mathbf{m}_i$ 'deki elemanların kareler toplamları bir olacak şekilde,

$$\mathbf{m}_i'\mathbf{m}_i = 1$$

normalize edilirler. Başka bir deyişle $\mathbf{m}_i$ elemanları

$$(\mathbf{B} - \lambda_i \mathbf{I}_k)\mathbf{m}_i = 0 \qquad (3.31)$$

eşitliği çözülerek elde edilir.

Bölüm 4

5 DEĞİŞKEN İÇİN ORTOGONAL BLOK TASARIM YAPISININ OLUŞTURULMASI

4.1. 2 ORTOGONAL BLOKLU 5 DEĞİŞKEN İÇİN OPTİMUM KARIŞIM DENEYİNİN OLUŞTURULMASI

Bu bölümde, blok değişkeni içeren uyumu yapılmış kuadratik model için beş değişkenli iki ortogonal bloklu tasarım yapısı ele alınarak değişkenlerin optimum değerleri elde edilmesine yer verilecektir. Çalışma Draper (1994) tarafından verilen 4 değişkenli 2 bloklu tasarım sınıfından yola çıkılarak 5 değişken için genişletilmiştir. Gerçekleştirilen bu uygulamada iki ana amaç söz konusudur:

i. 5 değişkenli durum için en iyi tasarım sınıfını bulmak
ii. Ürünün gözlenen kalite karakteristiğinin optimizasyonunu veren karışım bileşenlerinin optimum performans oranlarının bulunmasıdır.

Çalışmada analitik ve nümerik metotların her ikisi de kullanılmış olup Maple, Matlab ve Statistica programlarından yararlanılmıştır.

Beş bileşenli karışım deneylerinin yapısının Ayrık Ortogonal Latin Karelerin (MOLS) setine dayandığı daha önce ifade edilmişti. P. Prescott (1993) tarafından önerilen olası tasarım yapıları baz alınarak iki bloğun her birinde 11 deneme olan 22 denemeli tasarım sınıfı Tablo 2.5 de verilen kareler kullanılarak elde edilmiştir. El de edilen blok yapısı Tablo 4.1 de gösterilmiştir. Blok 1, Kare 1 ve Kare 2 den, Blok 2 ise Kare 3 ve Kare 4 den oluşmaktadır.

Tablo 4.1: 10+*n Hacimli 2 Ortogonal Bloklu Tasarım Yapısının Oluşturulması*

KARIŞIM	BLOK 1					KARIŞIM	BLOK2				
1	a	b	d	e	c	**1**	a	e	c	b	d
2	b	c	e	a	d	**2**	b	a	d	c	e
3	c	d	a	b	e	**3**	c	b	e	d	a
4	d	e	b	c	a	**4**	d	c	a	e	b
5	e	a	c	d	b	**5**	e	d	b	a	c
6	a	d	e	c	b	**6**	a	c	b	d	e
7	b	e	a	d	c	**7**	b	d	c	e	a
8	c	a	b	e	d	**8**	c	e	d	a	b
9	d	b	c	a	e	**9**	d	a	e	b	c
10	e	c	d	b	a	**10**	e	b	a	c	d
11	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	**11**	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20

Her bir bloktaki a, b, c, d ve e parametreleri

$$a+b+c+d+e=1$$

$$0 \le a,b,c,d,e \le 1$$

kısıtlarını sağlamaktadır.

Blok 1 de yer alan Kare 1 ile Blok 2 de yer alan Kare 3 için x_1x_2, x_1x_3, x_1x_4, x_1x_5, x_2x_3, x_2x_4, x_2x_5, x_3x_4 ve x_4x_5, çapraz çarpım toplamları, **A, B, A, B, B, B, A, A, A, B** şeklinde olduğundan bu kareler eştir ve benzer çapraz çarpım yapılarına sahiptir. (A = (ab + ae + bc + cd + de) ve B = (ac + ad + bd + be + ce) olarak alınmıştır). Dolayısıyla John 1984 tarafından belirtilen (2.58) ortogonal bloklama koşulları sağlanmaktadır. Benzer şekilde Kare 2 ve Kare 4 de çapraz çarpım yapıları **B, A, B, A, A, A, B, B, B, A** şeklinde olduğundan eştir. Karelerin eşliği EK 4 de gösterilmiştir.

Farklı karışım sayılarında ve kısıt sayısında indirgemeye gitmek için c = e = 0 seçimi literatür taramaları (Cornell 1990, Draper 1993, Prescott 1993) baz alınarak yapılmış ve yapı Tablo 4.2 de gösterilmiştir. Amaç (3.8) de belirtilen D kriterini minimize edecek tasarım setinin bulunmasıdır. Daha öncede ifade edildiği

üzere $(\mathbf{X'X})^{-1}$ matrisinin determinantının minimizasyonu, $(X'X)$ in determinantının maksimizasyonu olarak ele alınabilineceğinden dolayı amaç fonksiyonu maksimizasyon olarak belirlenmiştir.

Tablo 4.2: *2 Ortogonal Bloklu 5 Değişkenli Karışım Deneyi Sınıfı*

	BLOK 1						BLOK2				
KARIŞIM						**KARIŞIM**					
1	a	b	d	0	0	**1**	a	0	0	b	d
2	b	0	0	a	d	**2**	b	a	d	0	0
3	0	d	a	b	0	**3**	0	b	0	d	a
4	d	0	b	0	a	**4**	d	0	a	0	b
5	0	a	0	d	b	**5**	0	d	b	a	0
6	a	d	0	0	b	**6**	a	0	b	d	0
7	b	0	a	d	0	**7**	b	d	0	0	a
8	0	a	b	0	d	**8**	0	0	d	a	b
9	d	b	0	a	0	**9**	d	a	0	b	0
10	0	0	d	b	a	**10**	0	b	a	0	d
11	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	**11**	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20

$x_{u1}, x_{u2}, x_{u3}, x_{u4}$ ve x_{u5} u-uncu denemedeki karışım bileşen oranları, u =1, …., 22 olsun. z_u da blok değişkeni olarak ifade edilmekte olup, u =1, …., 22

$$z_u = \begin{cases} 0 & \text{u - uncu deneme birinci blokta ise} \\ 1 & \text{u - uncu deneme ikinci blokta ise} \end{cases}$$

$y(x_{u1}, x_{u2}, x_{u3}, x_{u4}, x_{u5}) = y_u$ u-uncu deneme için gözlem olsun. Bu çalışmada y_u ların sabit varyanslı korelâsyonsuz rassal değişken oldukları ve ortalamalarının;

$$E(y_u) = \sum_{i=1}^{5} \beta_i x_{ui} + \sum \sum_{i<j}^{5} \beta_{ij} x_{ui} x_{uj} + \gamma(2z_u - 1) \qquad (4.1)$$

olduğu varsayılmaktadır. β, γ, σ^2 bilinmeyen sabitlerdir. Matris notasyonun da;

$$E(y) = (X \quad Z)\begin{pmatrix} \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$
$$var(y) = \sigma^2 I \qquad (4.2)$$

şeklinde yazılır. Bu ifade de **Z** ve **y** (18x1) boyutlu vektör, (X Z) rankı 16 olan tasarım matrisi ve $\beta = (\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4, \beta_{12}; \beta_{13}, \beta_{14}, \beta_{15}, \beta_{23}, \beta_{24}, \beta_{35}, \beta_{34}, \beta_{35}, \beta_{45})'$ dir. (4.1) deki $E(y_u)$ ifadesi ikinci dereceden kanonik form, γ blok parametresidir.

4.1.1 Tablo 4.2 de verilen karışım deneyi sınıfının ortogonal tasarım olduğunun gösterimi;

Eşitlik (4.2) ye bağlı olarak Tablo 4.2 den elde edilen tasarım matrisi şu şekildedir;

$$X = \begin{pmatrix}
a & b & d & 0 & 0 & ab & ad & 0 & 0 & bd & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
b & 0 & 0 & a & d & 0 & 0 & ab & bd & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & ad \\
0 & d & a & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & ad & bd & 0 & ab & 0 & 0 \\
d & 0 & b & 0 & a & 0 & bd & 0 & ad & 0 & 0 & 0 & 0 & ab & 0 \\
0 & a & 0 & d & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & ad & ab & 0 & 0 & bd \\
a & d & 0 & 0 & b & ad & 0 & 0 & ab & 0 & 0 & bd & 0 & 0 & 0 \\
b & 0 & a & d & 0 & 0 & ab & bd & 0 & 0 & 0 & 0 & ad & 0 & 0 \\
0 & a & b & 0 & d & 0 & 0 & 0 & 0 & ab & 0 & ad & 0 & bd & 0 \\
d & b & 0 & a & 0 & bd & 0 & ad & 0 & 0 & ab & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & d & b & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & bd & ad & ab \\
\frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} \\
a & 0 & 0 & b & d & 0 & 0 & ab & ad & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & bd \\
b & a & d & 0 & 0 & ab & bd & 0 & 0 & ad & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & b & 0 & d & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & bd & ab & 0 & 0 & ad \\
d & 0 & a & 0 & b & 0 & ad & 0 & bd & 0 & 0 & 0 & 0 & ab & 0 \\
0 & d & b & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & bd & ad & 0 & ab & 0 & 0 \\
a & 0 & b & d & 0 & 0 & ab & ad & 0 & 0 & 0 & 0 & bd & 0 & 0 \\
b & d & 0 & 0 & a & bd & 0 & 0 & ab & 0 & 0 & ad & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & d & a & b & 0 & 0 & 0 & 0 & ab & 0 & 0 & ad & bd & ab \\
d & a & 0 & b & 0 & ad & 0 & bd & 0 & 0 & ab & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & b & a & 0 & d & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & bd & 0 & ad & 0 \\
\frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25} & \frac{1}{25}
\end{pmatrix}_{22x15} \qquad Z = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}_{22x1} \qquad (4.3)$$

$\hat{\beta}$ ve $\hat{\gamma}$ EKK tahmincileri olmak üzere normal denklemler;

$$\begin{pmatrix} X' \\ Z' \end{pmatrix}(X \quad Z)\begin{pmatrix} \hat{\beta} \\ \hat{\gamma} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} X'X & X'Z \\ Z'X & Z'Z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{\beta} \\ \hat{\gamma} \end{pmatrix} \qquad (4.4)$$

$$= \begin{pmatrix} X'y \\ Z'y \end{pmatrix}$$

(4.3) deki X matrisinin her bir sütunundan görülebileceği üzere ilk onbir satırdaki a, b, d, 0, ab, bd ve ad son onbir satırdakilerle aynı frekansa sahiptir; bu yüzden

$$X'Z = 0_{15x1}$$

ayrıca **Z'Z** = 22 dir. Sonuç olarak en küçük kareler tahminleyicileri;

$$\begin{pmatrix} \hat{\beta} \\ \hat{\gamma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (X'X)^{-1}X'y \\ \frac{1}{22}Z'y \end{pmatrix}$$

olup

$$\text{var}\begin{pmatrix} \hat{\beta} \\ \hat{\gamma} \end{pmatrix} = \sigma^2 \begin{pmatrix} (X'X)^{-1} & 0 \\ 0' & \frac{1}{22} \end{pmatrix} \text{ dir.}$$

Her i ve j için $\text{cov}(\hat{\beta}_i, \hat{\gamma}) = 0$ ve $\text{cov}(\hat{\beta}_{ij}, \hat{\gamma}) = 0$ olduğundan Tablo 4.2 de verilen tasarım ortogonal blok tasarımdır.

Tablo 4.2 de verilen tasarımın ortogonal olması ve $\text{var}(\hat{\gamma})$ nin $\frac{\sigma^2}{22}$ olup a, b ve d 'ye bağlı olmamasından dolayı D-optimum tasarımı elde etmek için sadece $\text{var}(\hat{\beta}) = \sigma^2 (X'X)^{-1}$ ile çalışmak yeterli olacaktır. (4.3) e bağlı olarak **(X'X)** matrisi;

$$\begin{pmatrix}
x & y & y & y & y & k & k & k & k & t & t & t & t & t & t \\
y & x & y & y & y & k & t & t & t & k & k & k & t & t & t \\
y & y & x & y & y & t & k & t & t & k & t & t & k & k & t \\
y & y & y & x & y & t & t & k & t & t & k & t & k & t & k \\
y & y & y & y & x & t & t & t & k & t & t & k & t & k & k \\
k & k & t & t & t & s & p & h & p & p & p & h & \frac{2}{625} & \frac{2}{625} & \frac{2}{625} \\
k & t & k & t & t & p & s & p & h & h & \frac{2}{625} & \frac{2}{625} & p & p & \frac{2}{625} \\
k & t & t & k & t & h & p & s & p & \frac{2}{625} & p & \frac{2}{625} & h & \frac{2}{625} & p \\
k & t & t & t & k & p & h & p & s & \frac{2}{625} & \frac{2}{625} & p & \frac{2}{625} & p & h \\
t & k & k & t & t & p & h & \frac{2}{625} & \frac{2}{625} & s & h & p & p & p & \frac{2}{625} \\
t & k & t & k & t & p & \frac{2}{625} & p & \frac{2}{625} & h & s & p & p & \frac{2}{625} & h \\
t & k & t & t & k & h & \frac{2}{625} & \frac{2}{625} & p & p & p & s & \frac{2}{625} & h & p \\
t & t & k & k & t & \frac{2}{625} & p & h & \frac{2}{625} & p & p & \frac{2}{625} & s & h & p \\
t & t & k & t & k & \frac{2}{625} & p & \frac{2}{625} & p & p & \frac{2}{625} & h & h & s & p \\
t & t & t & k & k & \frac{2}{625} & \frac{2}{625} & p & h & \frac{2}{625} & h & p & p & p & s
\end{pmatrix} \quad (4.5)$$

şeklinde olup (4.5) matrisinde yer alan kodlamalar şu şekildedir.

$$x = 4a^2 + 4b^2 + 4d^2 + \frac{2}{25}$$

$$y = 2ab + 2bd + 2ad + \frac{2}{25}$$

$$k = a^2b + a^2d + b^2d + d^2a + d^2b + \frac{2}{125}$$

$$t = 2abd + \frac{2}{125}$$

$$h = 2abd^2 + \frac{2}{625}$$

$$s = 2a^2b^2 + 2a^2d^2 + 2b^2d^2 + \frac{2}{625}$$

$$p = a^2bd + b^2ad + \frac{2}{625}$$

şeklinde olup $\begin{pmatrix} A & C \\ C' & B \end{pmatrix}$ yapısına uymaktadır. Buna göre $P = \begin{pmatrix} A & C \\ C' & B \end{pmatrix} = |A| * |B - C'*A^{-1} * C|$ yardımı ile determinant hesaplanabilir. (Liu, 1999)

4.1.2 (X'X) Matrisinin Determinantının elde edilişi:

(4.5) de ifade edilen matris yapısında;

$$A = \begin{pmatrix} x & y & y & y & y \\ y & x & y & y & y \\ y & y & x & y & y \\ y & y & y & x & y \\ y & y & y & y & x \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} k & k & k & k & t & t & t & t & t & t \\ k & t & t & t & k & k & k & t & t & t \\ t & k & t & t & k & t & t & k & k & t \\ t & t & k & t & t & k & t & k & t & k \\ t & t & t & k & t & t & k & t & k & k \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} s & p & h & p & p & p & h & \frac{2}{625} & \frac{2}{625} & \frac{2}{625} \\ p & s & p & h & h & \frac{2}{625} & \frac{2}{625} & p & p & \frac{2}{625} \\ h & p & s & p & \frac{2}{625} & p & \frac{2}{625} & h & \frac{2}{625} & p \\ p & h & p & s & \frac{2}{625} & \frac{2}{625} & p & \frac{2}{625} & p & h \\ p & h & \frac{2}{625} & \frac{2}{625} & s & h & p & p & p & \frac{2}{625} \\ p & \frac{2}{625} & p & \frac{2}{625} & h & s & p & p & \frac{2}{625} & h \\ h & \frac{2}{625} & \frac{2}{625} & p & p & p & s & \frac{2}{625} & h & p \\ \frac{2}{625} & p & h & \frac{2}{625} & p & p & \frac{2}{625} & s & h & p \\ \frac{2}{625} & p & \frac{2}{625} & p & p & \frac{2}{625} & h & h & s & p \\ \frac{2}{625} & \frac{2}{625} & p & h & \frac{2}{625} & h & p & p & p & s \end{pmatrix}$$

şeklindedir.

(**X'X**) matrisi ve $P = \begin{pmatrix} A & C \\ C' & B \end{pmatrix} = |A| * |B - C'*A^{-1} * C|$ özelliğinden yararlanılarak determinantın elde edilişi EK 5 de gösterilmiş olup Maple programı yardımıyla determinant değeri;

$$\begin{aligned} |(X'X)| &= 640(-2a - 2b + 5ab - 2d + 5ad + 5db)^2 \\ &\quad (-ad - db + ab)^2 (a-b)^8 (a^4d^4 + a^4b^4 \\ &\quad + 2a^4b^2d^2 - a^4bd^3 - a^4b^3d \\ &\quad + a^3b^3d^2 - 2a^3d^5 - a^3b^4d + 2a^3bd^4 - 2a^3b^2d^3 \\ &\quad + a^2b^2d^4 + d^6a^2 - 2a^2b^3d^3 - d^5a^2b \\ &\quad + 2a^2b^4d^2 - d^5ab^2 - b^4ad^3 + 2b^3ad^4 + b^4d^4 \\ &\quad + d^6b^2 - 2b^3d^5)^4 \end{aligned} \tag{4.6}$$

olarak elde edilmiştir.

4.1.3 (X'X) in Determinantını Maksimum Yapan Bileşen Değerlerin İncelenmesi;

Amaç fonksiyonu elde edilen determinant değeri olup

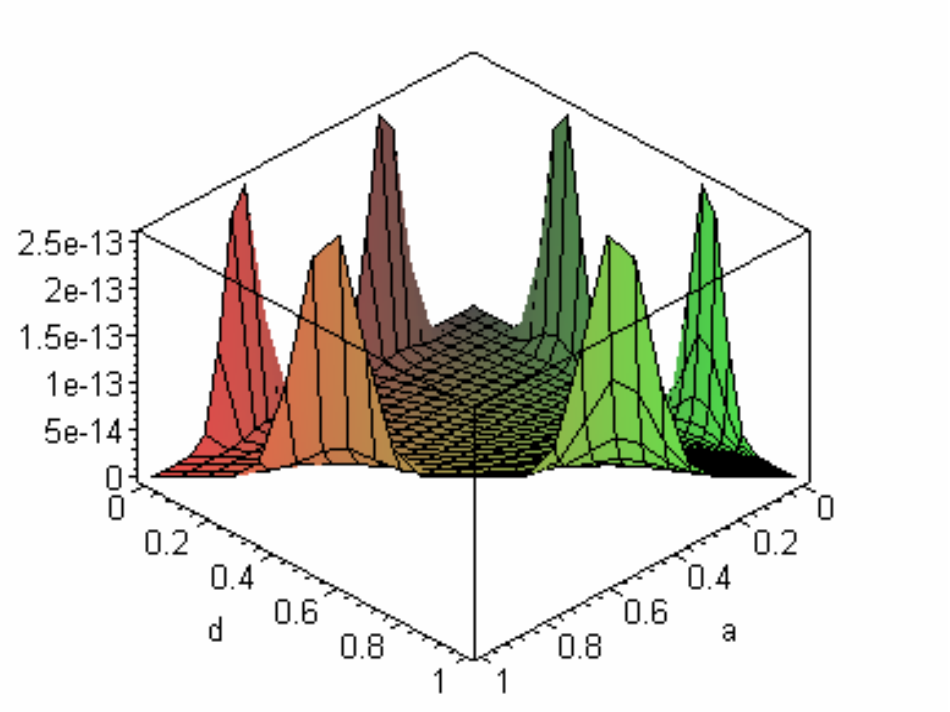
$$a + b + d = 1$$

$$0 \le a, b, d, e \le 1$$

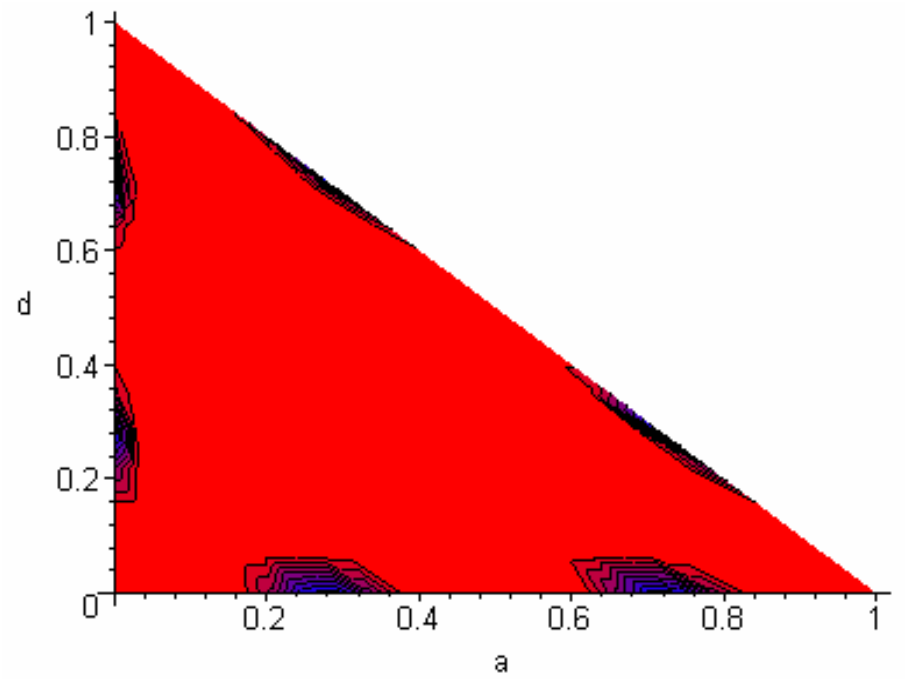
$$0 \le a * b * d \le \frac{1}{27}$$

kısıtları altında fonksiyonunun durağan noktaların tespiti için ilk aşamada Yanıt Yüzeyleri Metodolojisi (RSM) baz alınarak Maple yardımıyla 3D grafik çizimi istenmiştir.

Verilen kısıtlamalardan yararlanılarak b = 1- (a + d) determinant değerinde yerine yazılarak a = 0 …(1-d) 'ye d = 0…1 olmak üzere amaç fonksiyonu için maksimum noktaların elde edilişinin grafiksel gösterimi Şekil 4.1 deki gibidir. Şekil 4.1'in eş yükselti eğrisi plotu ise Şekil 4.2'de verilmiştir. Şekil 4.1 incelendiğinde 6 tane maksimum noktanın mevcut olduğu ve ikili değerlendirmelerde bu maksimum noktalara ulaşmak için bir değişkenin daha sıfır kabul edilmesi gerektiği görülmektedir. Bu bilgiden yola çıkarak tüm olası değişkenlerin sıfır olduğu durumlar incelenerek determinant için maksimum noktalar araştırılmıştır.



Şekil 4.1: *(X'X) determinantını maksimum yapan değerlerin 3D Grafik ile Tespiti*



Şekil 4.2: Eş *yükselti Eğrisi*

Çalışmada, Maple sisteminin tüm komut ve yordam kütüphanesini ya da sözdizim (syntax) kuralları kullanılarak nümerik analiz yapılması yerine sisteminin matematiksel analizde karşılaştığımız bir optimizasyon probleminin çözümünde nasıl kullanılabileceği sergilenmiş ve genel olarak optimum tasarım noktalarının elde edilişinde matematiksel teknikler izlenmiştir.

Bölüm 3 de ifade edildiği üzere maksimum noktanın elde edilmesinde ilk sıra koşulu birinci türevleri sıfır yapan noktaların araştırılması idi. Şekil 4.1 baz alınarak bir değişkenin daha sıfır kabul edilmesi gerektiği ifade edilmişti. Buna göre

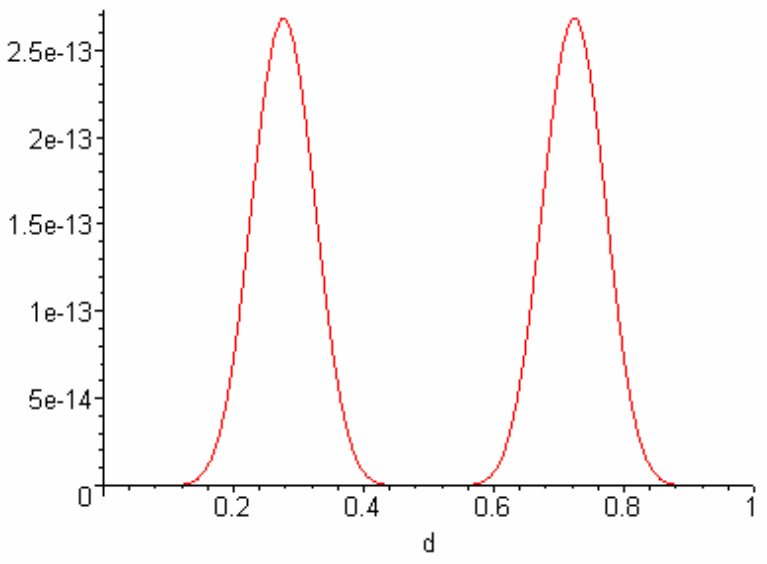
i. a=0 olarak alındığında elde edilen yeni determinant değerinde (f_a) b = 1-d yazılarak birinci türevini sıfır yapan d kökleri (Şekil 4.3 (a))
ii. b=0 olarak alındığında elde edilen yeni determinant değerinde(f_b) a = 1-d yazılarak birinci türevini sıfır yapan d kökleri (Şekil 4.3 (b))
iii. d=0 olarak alındığında elde edilen yeni determinant değerinde (f_d) b = 1-a yazılarak birinci türevini sıfır yapan a kökleri (Şekil 4.3 (c))

araştırılmıştır. Elde edilen kök değerleri beklenildiği üzere her üç durum içinde aynı olup

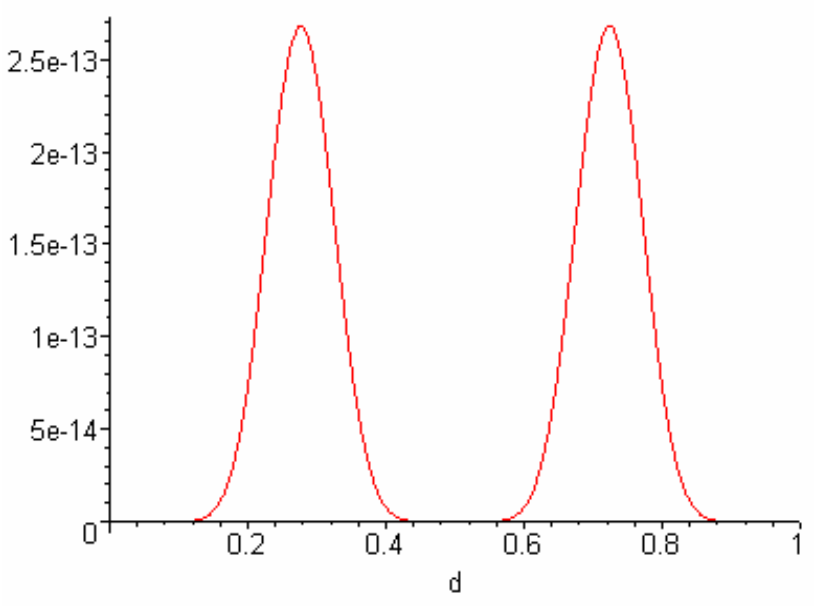
Kök 1: 0. 276

Kök 2: 0. 724

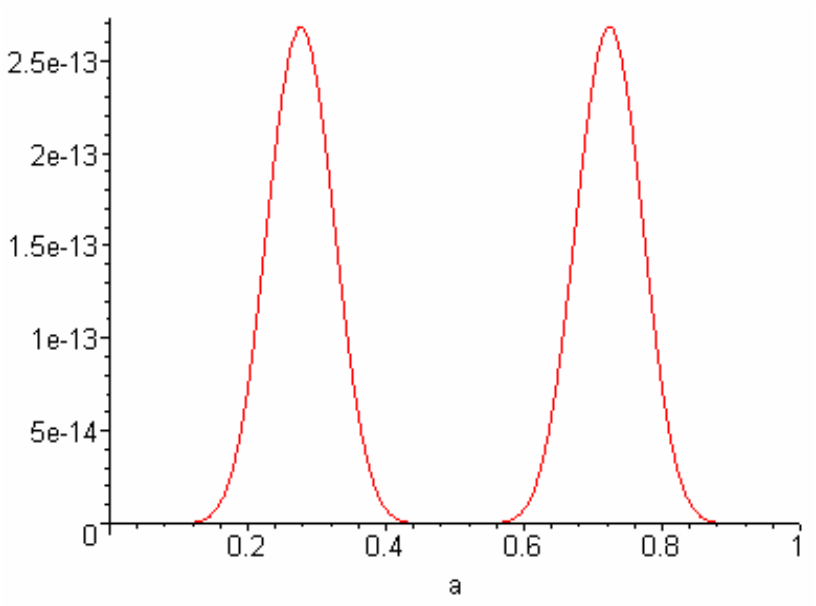
olarak elde edilmiştir.



(a)



(b)



(c)

Şekil 4.3: (a) *f_a da b = 1-d yazılması ile elde edilen ifadenin d ye göre grafiksel gösterimi* (d=0..1)

(b) *f_b de a = 1-d yazılması ile elde edilen ifadenin d ye göre grafiksel gösterimi* (d=0..1)

(c) *f_d de b = 1-a yazılması ile elde edilen ifadenin a ya göre grafiksel gösterimi* (a=0..1)

İkinci sıra koşul olarak elde edilen durağan noktaların ikinci türevi sıfırdan küçük yapması beklenmektedir. Buna göre;

i. d yerine sırasıyla Kök 1 ve Kök 2 değerlerinin yazılarak f_a nın ikinci türev değeri
ii. d yerine sırasıyla Kök 1 ve Kök 2 değerlerinin yazılarak f_b nın ikinci türev değeri
iii. a yerine sırasıyla Kök 1 ve Kök 2 değerlerinin yazılarak f_d nın ikinci türev değeri

araştırılmış olup her durum için elde edilen ikinci türev testi sonuçları -0.1127 dir.

Sonuç olarak elde edilen Kök 1 ve Kök 2 değerleri **(X'X)** matrisinin determinantını maksimum yapan değerlerdir.

b değişkeninin değerinin sıfır kabul edilerek a= 0.276 d= 0.724 (veya a=0.724 d= 0.276) alındığında elde edilecek olan tasarım Tablo 4.3 de gösterilmiştir.

Tablo 4.3. *a= 0.276 d= 0.724 iken Ortogonal Bloklu 5 Değişkenli Karışım Deneyi*

	BLOK 1						BLOK2				
KARIŞIM						**KARIŞIM**					
1	0.276	0	0.724	0	0	**1**	0.276	0	0	0	0.724
2	0	0	0	0.276	0.724	**2**	0	0.276	0.724	0	0
3	0	0.724	0.276	0	0	**3**	0	0	0	0.724	0.276
4	0.724	0	0	0	0.276	**4**	0.724	0	0.276	0	0
5	0	0.276	0	0.724	0	**5**	0	0.724	0	0.276	0
6	0.276	0.724	0	0	0	**6**	0.276	0	0	0.724	0
7	0	0	0.276	0.724	0	**7**	0	0.724	0	0	0.276
8	0	0.276	0	0	0.724	**8**	0	0	0.724	0.276	0
9	0.724	0	0	0.276	0	**9**	0.724	0.276	0	0	0
10	0	0	0.724	0	0.276	**10**	0	0	0.276	0	0.724
11	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	**11**	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20

Uygulamada ikinci adım olarak en yüksek yanıt değerini veren karışım oranlarının optimum kombinasyonunu bulmak amacıyla deneysel yapının nasıl oluşturulabilineceği gösterilecektir.

4.2 OPTİMUM KOŞULLARIN SIMULATED ANNEALING (BENZETİLMİŞ TAVLAMA) ALGORİTMASI BELİRLENMESİ

Ortogonal bloklu 5 değişken için Tablo 4.3 den baz alınan tasarım yapısı ve deneyden elde edilen gözlemler Tablo 4.4 de gösterilmiştir. Kimyasal ürünler üreten bir fabrikanın üretmiş olduğu ürünlerden bir tanesi 5 farklı hammaddenin belirli oranlarda karışımından oluşmaktadır ve bu oranlar, x_1, x_2, x_3, x_4 ve x_5 ile ifade edilmiştir. Deneyde yer alan gözlenen yanıt değerleri, kırılmaya karşı ürüne ait direnç göstergesinin spesifik değerleri olup belirli bir sabit kadar ötelenmiştirdir.

Tablo 4.4. *Ortogonal Bloklu 5 Değişkenli Karışım Deney İçin Tasarım Yapısı Ve Elde Edilen Gözlemler*

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	y	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	y
0.276	0	0.724	0	0	403	0.276	0	0	0	0.724	417
0	0	0	0.276	0.724	442	0	0.276	0.724	0	0	407
0	0.724	0.276	0	0	425	0	0	0	0.724	0.276	379
0.724	0	0	0	0.276	433	0.724	0	0.276	0	0	406
0	0.276	0	0.724	0	445	0	0.724	0	0.276	0	388
0.276	0.724	0	0	0	435	0.276	0	0	0.724	0	435
0	0	0.276	0.724	0	385	0	0.724	0	0	0.276	439
0	0.276	0	0	0.724	425	0	0	0.724	0.276	0	381
0.724	0	0	0.276	0	433	0.724	0.276	0	0	0	412
0	0	0.724	0	0.276	398	0	0	0.276	0	0.724	422
0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	423	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	413

Tablo 4.4 de ifade edilen deney bulguları kullanılarak Statistica programı yardımıyla uyumu yapılan model;

$$\begin{aligned}\hat{y} = \hat{y}(x_1,x_2,x_3,x_4,x_5) = {} & 410.33x_1 + 412.11x_2 + 391.12x_3 + 413x_4 \\ & + 438.45x_5 + 61.5x_1x_2 + 18.9x_1x_3 + 111.8x_1x_4 \\ & + 3.1x_1x_5 + 72x_2x_3 + 19.7x_2x_4 + 33.6x_2x_5 \\ & - 95.4x_3x_4 - 24x_3x_5 - 76.2x_4x_5\end{aligned} \tag{4.7}$$

olarak bulunmuştur.

$\sum_{i=1}^{5} x_i = 1$ doğal kısıtından faydalanılarak yazılan $x_5 = 1-(x_1 + x_2 + x_3 + x_4)$, Eşitlik (4.7) de verilen model de yerine konduktan sonra elde edilen kuadratik fonksiyon 4 boyutlu optimizasyon problemi haline gelecektir.

$x_5 = 1-(x_1 + x_2 + x_3 + x_4)$ kısıtının yerine yazılması ile elde edilen yeni fonksiyon ise şu şekildedir;

$$\begin{aligned}\hat{y} = \hat{y}(x_1,x_2,x_3,x_4) = 438.45 &- 25.02x_1 + 7.26x_2 - 71.33x_3 - 101.65x_4 \\ &+ 438.45x_5 + 24.8x_1x_2 + 39.8x_1x_3 + 184.9x_1x_4 \\ &+ 62.4x_2x_3 + 62.3x_2x_4 + 4.8x_3x_4 - 3.1x_1^2 \\ &- 33.6x_2^2 + 24x_3^2 + 76.2x_4^2\end{aligned} \qquad (4.8)$$

Bölüm 3 de ifade edilen Simulated Annealing Algoritması problemin çözümü için şu şekilde oluşturulur. Eşitlik (4.8) de ifade edilen model $-\hat{y}$ olarak alınmış ve algoritma minimizasyon için oluşturulmuştur.

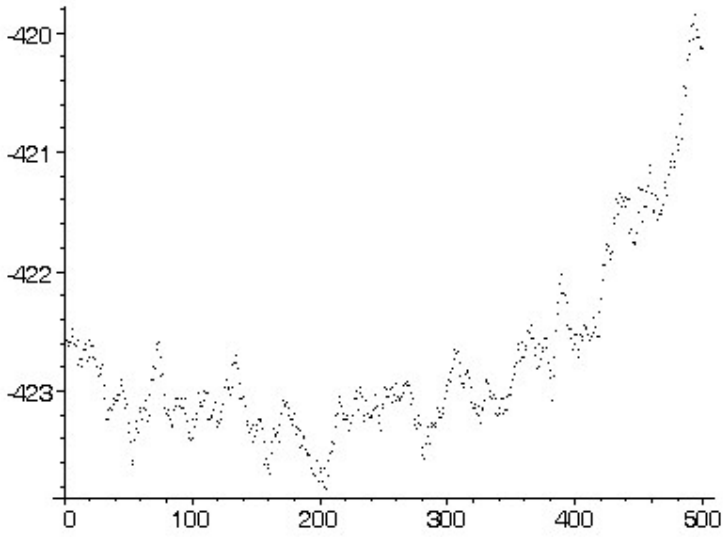
1. T için başlangıç değeri seçilir.
2. 4 boyutlu uzayda $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)}, x_4^{(0)}$ başlangıç noktası seçilir; (4.8) den $f\left(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)}, x_4^{(0)}\right)$ hesaplanır.
3. $$x_1^{(i+1)} = x_1^{(i)} + \Delta x_1^{(i)}$$ $$x_2^{(i+1)} = x_2^{(i)} + \Delta x_2^{(i)}$$ $$x_3^{(i+1)} = x_3^{(i)} + \Delta x_3^{(i)}$$ $$x_4^{(i+1)} = x_4^{(i)} + \Delta x_4^{(i)}$$ şeklinde rasgele bir hareket gerçekleştirilir, $f\left(x_1^{(i+1)}, x_2^{(i+1)}, x_3^{(i+1)}, x_4^{(i+1)}\right)$ hesaplanır.

4. $f\left(x_1^{(i+1)}, x_2^{(i+1)}, x_3^{(i+1)}, x_4^{(i+1)}\right) < f\left(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, x_3^{(i)}, x_4^{(i)}\right)$ ise hareket kabul edilir, değilse
   (a) $\omega = \exp\left[\left(f\left(x_1^{(i+1)}, x_2^{(i+1)}, x_3^{(i+1)}, x_4^{(i+1)}\right) - f\left(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, x_3^{(i)}, x_4^{(i)}\right)\right)/T\right]$ programın bu adımı için sabit olan T değeri ile hesaplanır.
   (b) $0 < r < 1$ olacak biçimde bir r rasgele sayısı üretilir
   (c) $\omega > r$ ise hareket kabul edilir, değilse reddedilir.
5. 3, 4 işlemleri yeni hareket noktası için yinelenir.
6. Fonksiyonun en küçük değerini veren x_1, x_2, x_3, x_4 bulunur (x_1', x_2', x_3', x_4').
7. T azaltılır.
8. Yeni T için 2-6 arası işlemler, hareketin başlangıç noktası 6 da bulunan (x_1', x_2', x_3', x_4'). olacak şekilde uygulanır.
9. T programın başında belirlenen değere indiğinde program durur.

Program boyunca hareketlerin verdiği minimum değerler aşağıdaki Tablo 4.5 den ve Şekil 4.4 den görülebilir:

Tablo 4.5 *Simulated Annealing algoritması ile çalışan program boyunca farklı T değerleri için bulunan minimum değerler ve bu değerleri veren noktalar*

T	x'_1	x'_2	x'_3	x'_4	$\hat{y}$
.9838000000	.2016070000	.4476860000	.2935030000	.04100400000	-422.4102550
.9999999999	.1282080638	.3955021544	2704624280	09739959605	-423.8160899
.3162277660	.06885134724	.3308567708	.2020469851	.02393992515	-425.6731273
.09999999999	.07493728919	.2957232188	.1052927611	.003238357889	-431.5609019
.03162277660	.01431050716	.2909017264	.0009859679508	.002086686821	-437.4906936
.009999999999	.001936859413	.2793907683	.001735841011	.000155581471	-437.8562257
.003162277660	.0008118299523	.2780927442	.000146127516	.0000177163500	-437.8562257
.0009999999999	.001198753677	.2747665261	000080825963	00007368270000	-437.8757017
.0003162277660	.0009194100200	.2715691671	.0000650065228	.0000495645630	-437.9190607
.00009999999999	.0001856811207	.2696290300	.0000992395080	.21050920 10^{-5}	-437.9558021
.00003162277660	.0000243927484	.2672350078	.0000564527954	0001903308028	-437.9708887
.9999999999 10^{-5}	.0000924930842	.2647221791	.0000134849077	.0000360043532	-438.0117565
.3162277660 10^{-5}	0000294671838	.2642612020	.0001030111586	.29914638 10^{-5}	-438.0156667
9999999999 10^{-6}	.0000603089666	.2621329660	.0000327541854	.0000261442613	-438.0391576
.3162277660 10^{-6}	.0000446612567	.2616757473	0000283905852	.67875939 10^{-5}	-438.0460646
.9999999999 10^{-7}	.989253050 10^{-5}	.2612765372	.0000647050444	.0000158798578	-438.0480498
.3162277660 10^{-7}	.0001813553667	.2609780892	.73928586 10^{-5}	.35820217 10^{-5}	-438.0521431
.9999999999 10^{-8}	.0000829968831	.2606650261	.26426271 10^{-5}	.0000182451635	-438.0561904
.3162277660 10^{-8}	.0000104334079	.2607016848	.0000140167388	.0000128322406	-438.0569964
.9999999999 10^{-9}	.41792156 10^{-5}	.2605052378	.0000167125782	.0000302384622	-438.0574911



Şekil 4.4: *Simulated Annealing algoritmasının ürettiği 500 adımlık rasgele yürüyüş boyunca fonksiyonun aldığı minimum değerler*

Tablo 4.5 ve Şekil 4.4 den görüldüğü gibi algoritma T parametresinin değeri azaldıkça fonksiyonun global minimumunu veren x değerlerine doğru yaklaşmaktadır.

Fonksiyonun gerçek global minimumu;

$$x_1 = 0.41792156.10^{-5} \cong 0$$
$$x_2 = 0.2605052378 \cong 0.26$$
$$x_3 = 0.0000167125782 \cong 0$$
$$x_4 = 0.000302384622 \cong 0$$
$$x_5 = 0.7394947622 \cong 0.74$$

iken gerçekleşmiş olup minimum yanıt $-\hat{y}$ için -438.0574911 olarak bulunmuştur. Bir başka ifadeyle (0, 0.26, 0, 0, 0.74) noktalarında maksimum yanıt 438.0574911 dir.

SONUÇ VE ÖNERİLER

Karışım deneyleri incelendiği bu çalışmada, karışım deneyi metodolojisi açıklanmış, yanıt yüzeylerinin modellenmesinde karışımda yer alan bileşenlerin oranlarının toplamının bir birim olması koşulu nedeniyle, sabit terimsiz olan Scheffé' nin kanonik polinomları temel alınmış ve ardından, Scheffé modellerine alternatif modeller tanıtılmıştır. Daha sonra, iki veya daha fazla ortogonal bloklu tasarımların oluşturulmasında genel yöntemler incelenmiştir.

Karışım deneylerinin bloklanması ile ilgili çalışmalar, Murty (1968) în, Simetrik simpleks tasarımlarda, kuadratik model parametrelerinin tahminlenmesinde **(X'X)** matrisinin tersinin alınmasında EKKY ile yaşanan zorlukları gidermek amacıyla sunmuş olduğu alternatif tahminleme metodunda tasarım matrisinin sağladığını varsaydığı simetri koşulları ile başlamıştır. Ampirik bir bulgu olmakla beraber Murty (1968) simetrik simpleks tasarımlarda gerçek bloklamanın sağlanabilmesi için tasarımın tekrarlanması gerektiğini ifade etmiştir.

Nigam (1970) yılında Murty in alternatif tahminleme metodundan yola çıkarak, Scheffé 'nin blok etkisi içeren kuadratik modeli baz alındığında, regresyon parametrelerinin blok etkisinden bağımsız tahminlenebilmesi için karışım değişkenlerine transformasyon uygulanması gerektiğini göstermiş ve simetrik simpleks tasarımların ortogonal olarak bloklamanması için gerekli koşulları oluşturmuştur.

Scheffé 'nin kuadratik modeli baz alındığında ortogonalitenin başarılı olması için Nigam (1970) tarafından oluşturulan koşullar John (1984) tarafından modifiye edilerek son halini almıştır.

q-bileşenli tasarım için her bir bloktaki deneme karışımlarının aynı seçimleri ile karışım ortogonalitesi sağlanabilmektedir. Diğer bir ifade ile ortogonaliteyi sağlamanın bir yolu tüm bloklara aynı tasarımın uygulanmasıdır. Bu amaç doğrultusunda en uygun tasarımlar simpleks kafes ve simpleks merkez tasarımlardır. Ancak bu tasarımların en büyük dezavantajı tasarım nokta sayısının fazla olması nedeniyle blok büyüklüğünün geniş olmasıdır. John (1984), her bir blok

için aynı tasarım yapısının kullanılmasını gerektirmeyen ortogonal bloklardan oluşan alternatif metot olarak qxq Latin Kare tasarımları sunmuştur.

Prescott, Draper, Lewis ve Dean (1991), John (1984) ün önerisini baz alarak $q \geq 3$ olduğu durumlar için iki ve ya daha fazla blok yapısı oluşturmak için Latin Karelerin kullanılması için genel bir metot geliştirmiştir. Kuadratik modelin kullanılması ile 4 bileşenli 2 bloklu yapı için metot Draper (1993) tarafından eş Latin Kare çiftlerinin kullanılması ile oluşturulmuş ve her iki blokta da yer alan ortak karışımların ortogonal bloklama yapısını bozmadan silinmesi ile toplam deneme sayısında indirgeme sağlandığı gösterilmiştir. Prescott, Draper, Lewis ve Dean (1993) tarafından 4 bileşenli 2 bloklu tasarım yapısı beş bileşenli karışım deneyleri için genişletilmiş olup bloklarda yer alması gereken ve "Ayrık Ortogonal Latin Kare" setine dayanan eş kare çiftleri tanıtılmıştır.

Karışım deneylerinde ortogonal bloklama ile ilgili çalışmalarda yer alan önemli bir noktada bloklamanın sadece kuadratik model için değil 3-üncü ve daha üstü derecelerden modeller içinde elde edilebilmesidir. Fakat bu konu, çalışmada ana hatları ile incelenmiş, konunun ayrıntılarına değinilmemiş sadece ilave bloklama koşullarının nasıl oluşturulacağı belirtilmiştir. Bu durum yapılacak olan daha sonraki çalışmalarda incelenebilecek karışım deneylerine yönelik önemli bir konudur. Ayrıca bloklarda yer alabilecek eş Latin Kare çiftlerinin baz alınarak 2den fazla bloklamanın mevcut olduğu durumlar için tasarım sınıflarının elde edilmesinde gerekli yapı oluşturulmuş olup yapılan literatür taramalarında herhangi bir uygulamaya rastlanılmamıştır. Blok sayısının 2den çok olduğu durumlarda optimum değerlerin elde edilmesi incelenebilecek alternatif bir konudur.

Karışım deneylerine yönelik bu çalışmada yer verilen uygulamada, Prescott, Draper, Lewis ve Dean (1993) tarafından beş bileşenli karışım deneyleri için bloklarda yer alabilecek eş kare çiftleri baz alınarak 2 bloklu D-optimalite tasarım kriterini sağlayan en iyi tasarım sınıfı elde edilmiştir. Tasarım yapısının oluşturulmasında iki bloğun her birinde 10 deneme olan tasarım yapısı elde edilmiş, ayrıca ($\mathbf{X'X}$) matrisinin tekil olmaması için ortak karışım olarak merkez noktalar her iki bloğa da ilave edilmiştir. Analitik çözümün sıkıntı yaratması nedeniyle nümerik analizden faydalanılarak elde edilen durumlar irdelenerek en etkin olanı saptanmaya çalışılmıştır. Uygulamada, ayrıca beş karışım bileşeninin (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5), yanıt

davranışını en iyi şekilde ifade edecek optimum kombinasyon oranları Scheffé 'nin kuadratik modeli baz alınarak elde edilmiştir. Bulunan bu oranların D-optimum tasarım yapısında elde edilen bileşen oranları ile yaklaşık aynı olduğu görülmüştür.

Karışım deneylerinin bloklanmasında ortaya çıkan önemli bir nokta da, karışım deneylerinde yer alan bileşenlerin bazılarının veya tümünün alt ve/veya üst sınıra sahip olduğu durumlarda elde edilecek deneysel bölgede bloklama koşullarının ne şekilde değişebileceği, tavsiye edilebilecek en iyi tasarım yapısının ne olacağı hususunun belirtilmemiş olmasıdır. Bu konu kapsamında simetrik simpleks tasarımların bloklanmasında dengeli tamamlanmamış blok tasarımlar ele alınarak tasarım yapısının oluşturulması daha sonraki çalışmalar için incelenebilir.

KAYNAKLAR

Aggarwal M.L (2002), "Mixture Experiments", *ISI, Koklata*, 77-89

Ateş S., 2002-2003 Matematiksel İktisat Ders Notları

Barnett R.A, Ziegler M.R., Byleen K.E (2002), *Calculus for Business, Economics, Life Sciences, and Social Sciences*, 9. Baskı, Prentice Hall

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.*

Box, G. E. P. ve Hunter, J. S. (2000), "2^{k-p} Fractional Factorial Designs," *Technometrics*, 42, 28-47.

Cornell, J.A. (1990), *Experiments with Mixtures: Designs, Models, and Analysis of Mixture Data*, 2. Baskı, New York: John Wiley.

Crosier R.B. (1984). "Mixture Experiments: Geometry and Pseudocomponents", *Technometrics*, Vol 26, 209-216.

Draper, N. R., & St. John, R. C. (1977): "A Mixture Model with Inverse Terms", *Technometrics*, Vol 19, 37-46.

Draper, N.R., Prescott, P., Lewis, S.M, Dean, A.M., John, P.W.M. & Tuck, M.G., 1993. "Mixture Designs for Four Components in Orthogonal Blocks", *Technometrics*. 35, 268-276.

Fries, A. ve Hunter, W. G. (1980), "Minimum Aberration 2^{k-p} Designs," *Technometrics*, 22, 601-608.

Gill P.E., Murray W., Wright M.H (1981), *Practical Optimization*, Academic Press New York

Ghosh S. ve Liu T. (1999). "Optimal Mixture Designs for Four Components in Two Orthogonal Blocks", *Journal of Statistical Planning and Inference* 78, 219-228

Hutton J. (1995), "The Maple Computer Algebra System", *Journal of Applied Econometrics*, Vol 10, 329-337

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

Lewis, S.M. et l (1994), "Mixture Designs for q components in orthogonal Blocks", *JRSS*, Ser. B, Vol 56, 457-467.

Mendenhall W. (1968), *Introduction to Linear Models and The Design and analysis of Experiments*, California: Wadsworth Publishing Company

Montgomery, D. C. (1996), *Design and Analysis of Experiment*, 4. Baskı, New York: John Wiley.

Murty J.S ve Das M.N (1968). "Design and Analysis of Experiments with Mixtures", *Annals of Mathematical Statistics*. 39, 1517-1539.

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

Nigam, A. K., (1970), "Block Designs for Mixture Experiments", *Annals of Mathematical Statistics*. 41, 1861-1869.

Nigam, A. K., (1973). "Symmetric-Simplex Block Designs for Mixtures", *JRSS*, Ser. B, Vol 35, 466-472.

Nigam, A. K., (1976), "Corrections To Blocking Conditions for Mixture Experiments", *Annals of Mathematical Statistics*. 47, 1294-1295

Prescott, P., Draper, N.R., Dean, A.M., Lewis, S.M. (1993), "Mixture Designs for Five Components in Orthogonal Blocks", *J.Appl. Stat*. 20, 105-117.

Piepel G.F.(1983). "Defining Consistent Constraint Regions in Mixture Experiments", *Technometrics*, Vol 25, 97-102.

Press W.H, Teukolsky S.A, Vetterling W.T, Flannery B.F, (1994) *Numerical Recipes in Fortran 77*, 2. Baskı, Cambridge University Press

Rosenbluth N.A, Rosenbluth M.N, Teller A.H, Teller E, (1953). *Metropolis*, J., Chem. Phys. 21, 1087

Scheffé, H., (1958). "Experiments with Mixtures", *Journal of Royal Statistical Society.* Series B, 20, 344-360.

Scheffé, H., (1963). "Simplex-Centroid Designs for Experiments with Mixtures", *Journal of Royal Statistical Society*. Series B, 25, 235-263.

Snee R.D, (1975) "Experimental Designs for Quadratic Models in Constrained Mixture Space", *Technometrics*, Vol 17, 149-159.

Snee R.D, Marquardt D.W, (1976) "Screening Concepts and Designs for Experiments with Mixtures", *Technometrics*, Vol 18, 19-29.

Şehirlioğlu A.K, 2004–2005 İleri Deney Tasarımı Ders Notları

Vitali R., (2000). *Response Surface Methods for High Dimensional Structural Design Problems.* Yayınlanmamış Doktora Tezi, Florida Üniversitesi, ABD

EKLER

Ek 1

Düzeltilmiş Normal Denklemlerin Elde Edilişi

Scheffe' nin blok etkisi içeren kuadratik modelinden yola çıkarak; modelinin parametrelere göre (β_λ ve $\beta_{\lambda\mu}$ olarak adlandırılsın) türevlendirilip sıfıra eşitlenmesi ile Nigam (1970) tarafından normal denklemler şu şekilde elde edilmiştir

$$\sum_u \left(Y_u - \sum_t \beta_i x_{iu} - \sum_{i<j} \beta_{ij} x_{iu} x_{ju} - \sum_w \beta_w z_{wu} \right)^2 \qquad \text{(E1.1)}$$

Eşitlik (E1.1) u herhangi bir β_λ ve $\beta_{\lambda\mu}$ ye göre türevlenirse;

$$\sum_u x_{\lambda u} y_u = Ab_\lambda + B \sum_{1\le i\le n\ne\lambda} b_i + C \sum_{1\le i\le n\ne\lambda} b_{\lambda i} + D \sum_{1\le i\le n\ne\lambda} b_{ij} + \sum_w b_w \left(\sum_{u=1}^{m_w} x_{\lambda u} \right) \qquad \text{(E1.2)}$$

$$\begin{aligned} \sum_u x_{\lambda u} x_{\mu u} y_u = C(b_\lambda + b_\mu) + D \sum_{1\le i\le n\ne\lambda,\mu} b_i + Eb_{\lambda\mu} + F\left(\sum b_{\lambda i} + \sum b_{\mu i}\right) \\ + G \sum_{1\le i\le j\le n\ne\lambda,\mu} b_{ij} + \sum_w b_w \left(\sum_{u=1}^{m_w} x_{\lambda u} x_{\mu u} \right) \qquad i \ne \lambda, \mu \end{aligned} \qquad \text{(E1.3)}$$

b' lar β parametrelerinin tahminidir. Eşitlik (E1.1) β_w ye göre türevlenirse;

$$\sum_{u=1}^{m_w} y_{iu} = \left(\sum_{u=1}^{m_w} x_{iu} \right) \sum_{1\le i\le n} b_i + \left(\sum_{u=1}^{m_w} x_{iu} x_{ju} \right) \sum_{1\le i\le j\le n} b_{ij} + m_w b_w \qquad \text{(E1.4)}$$

m_w w-inci bloktaki nokta sayısıdır.

(E1.2), (E1.3) ve (E1.4) den gözlendiği üzere;

$$\sum_{u=1}^{m_w} x_{iu} = 0 \text{ ve } \sum_{u=1}^{m_w} x_{iu}x_{ju} = 0 \qquad (w = 1, 2,\ldots, t \text{ ve } i \neq j \text{ için}) \tag{E1.5}$$

koşulları sağlandığında ortogonal bloklamaya erişilmektedir.

Ancak karışım deneyleri $x_{iu} \geq 0$ olmasını gerektirir. Açıkça görüldüğü üzere (E1.5) koşulları tüm x_{iu} lar sıfır olduğunda sağlanmaktadır ki bu ise imkansızdır. Bu yüzden ortogonal bloklamanın elde edilmesi için karışım değişkenlerine transformasyon uygulanmalıdır. Nigam (1970) blok etkileri için parametreleri düzenleyerek ortogonal olmayan bloklama sorununu çözmeye çalışmıştır.

Normal denklemlerin çözümünü basitleştirmek için;

$$\begin{aligned} &\sum_{u=1}^{m_w} x_{iu} = \text{sabit} = k_1 \\ &\sum_{u=1}^{m_w} x_{iu}x_{ju} = \text{sabit} = k_2 \\ &\qquad w = 1,2\ldots, t \text{ ve } i \neq j; i, j = 1,2,\ldots, n \text{ için} \end{aligned} \tag{E1.6}$$

Eşitlik (E1.4) den b_w yi çekilirse;

$$b_w = \left(\sum_{u=1}^{m_w} y_{iu} - k_1 \sum_i b_i - k_2 \sum_{i<j} b_{ij} \right) \Big/ m_w \tag{E1.7}$$

Tüm w = 1, 2,…, t üzerinden (E1.7) yi toplanır ve $\sum_w 1/m_w = k_3$ olarak alınırsa;

$$\sum_{w=1}^{t} b_w = \sum_w \sum_{u=1}^{m_w} y_u/m_w - k_1k_3 \sum b_i - k_2k_3 \sum b_{ij} \tag{E1.8}$$

elde edilir.

Eşitlik (E1.8) de ifade edilen $\sum b_w$ yi (E1.2) ve (E1.3) de yerine konarak blok etkileri için düzeltilmiş denklemleri elde edilir;

$$\sum_u x_{\lambda u} y_u - k_1 \sum_w \sum_{u=1}^{m_w} y_u / m_w = (A - k_1^2 k_3) b_\lambda + (B - k_1^2 k_3) \sum_{i \neq \lambda} b_i + (C - k_1 k_2 k_3) \sum_{i \neq \lambda} b_{\lambda i} + (D - k_1 k_2 k_3) \sum_{i<j \neq \lambda} b_{ij} \quad \text{(E1.9)}$$

$$\sum_u x_{\lambda u} x_{\mu u} y_u - k_2 \sum_w \sum_{u=1}^{m_w} y_u / m_w = (C - k_1 k_2 k_3)(b_\lambda + b_\mu) + (D - k_1 k_2 k_3) \sum_{i \neq \lambda, \mu} b_i + (E - k_2^2 k_3) b_{\lambda\mu} + (F - k_2^2 k_3)\left(\sum b_{\lambda i} + \sum b_{\mu i}\right) + (G - k_2^2 k_3) \sum_{i<j \neq \lambda, \mu} b_{ij} \quad \text{(E1.10)}$$

$$A - k_1^2 k_3 = A^* \quad B - k_1^2 k_3 = B^* \quad C - k_1 k_2 k_3 = C^* \quad D - k_1 k_2 k_3 = D^*$$
$$E - k_2^2 k_3 = E^* \quad F - k_2^2 k_3 = F^* \quad G - k_2^2 k_3 = G^*$$

$$\sum_u x_{\lambda u} y_u - k_1 \sum_w \sum_{u=1}^{m_w} y_u / m_w = \left(\sum_u x_{\lambda u} y_u \right)^*$$
$$\sum_u x_{\lambda u} x_{\mu u} y_u - k_2 \sum_w \sum_{u=1}^{m_w} y_u / m_w = \left(\sum_u x_{\lambda u} x_{\mu u} y_u \right)^* \quad \text{(E1.11)}$$

olarak ifade edildikten sonra (E1.9) ve (E1.10) eşitlikleri şu şekilde yazılabilir;

$$\left(\sum_u x_{\lambda u} y_u \right)^* = A^* b_\lambda + B^* \sum_{1 \neq \lambda} b_i + C^* \sum_{i \neq \lambda} b_{\lambda i} + D^* \sum_{i<j \neq \lambda} b_{ij} \quad \text{(E1.12)}$$

$$\left(\sum_u x_{\lambda u}x_{\mu u}y_u\right)^* = C^*(b_\lambda + b_\mu) + D^*\sum_{i\neq\lambda,\mu} b_i + E^* b_{\lambda\mu} + F^*\left(\sum b_{\lambda i} + \sum b_{\mu i}\right) + G^*\sum_{i<j\neq\lambda,\mu} b_{ij} \qquad (E1.13)$$

$$i \neq \lambda, \mu$$

b_λ ve $b_{\lambda\mu}$ nün çözümleri;

$$PQb_\lambda = PQ_4\left(\sum_u x_{\lambda u}y_u\right)^* - PQ_2\sum_i\left(\sum_u x_{\lambda u}x_{iu}y_u\right)^* - \Delta_1\sum_i\left(\sum_u x_{iu}y_u\right)^* + \Delta_2\sum_{i<j}\left(\sum_u x_{iu}x_{ju}y_u\right)^* \qquad (E1.14)$$

ve

$$PQ(E^* - 2F^* + G^*)b_{\lambda\mu} = PQ\left(\sum_u x_{\lambda u}x_{\mu u}y_u\right)^* - P[Q_4(C^* - D^*) - Q_3(F^* - G^*)].\left[\left(\sum_u x_{\lambda u}y_u\right)^* + \left(\sum_u x_{\mu u}y_u\right)^*\right] + P[Q_2(C^* - D^*) - Q_1(F^* - G^*)]\left[\sum_i\left(\sum_u x_{\lambda u}x_{iu}y_u\right)^* + \sum_i\left(\sum_u x_{\mu u}x_{iu}y_u\right)^*\right] - [(D^*P_4 - G^*P_3)Q - 2(C^* - D^*)\Delta_1 - 2(F^* - G^*)\Delta_3]\left(\sum_u x_{iu}y_u\right)^* + [(D^*P_2 - G^*P_1)Q - 2(C^* - D^*)\Delta_2 - 2(F^* - G^*)\Delta_3]\sum_{i<j}\left(\sum_u x_{iu}x_{ju}y_u\right)^* \qquad (E1.15)$$

şeklinde elde edilir. Bu eşitliklerde;

$$P_1 = A^* + (n-1)B^*$$
$$P_2 = 2C^* + (n-2)D^*$$
$$P_3 = (n-1)C^* + \binom{n-2}{2}D^*$$
$$P_4 = E^* + 2(n-2)F^* + \binom{n-2}{2}G^*$$
$$P = P_1P_4 - P_2P_3$$

$$Q_1 = A^* - B^*$$
$$Q_2 = C^* - D^*$$
$$Q_3 = (n-2)(C^* - D^*)$$
$$Q_4 = E^* + (n-4)F^* - (n-3)G^*$$
$$Q = Q_1Q_4 - Q_2Q_3$$

$$\Delta_1 = P_4[B^*Q_4 - Q_2(C^* + (n-2)D^*)] - P_3[D^*Q_4 - Q_2(2F^* + (n-3)G^*)]$$
$$\Delta_1 = P_2[B^*Q_4 - Q_2(C^* + (n-2)D^*)] - P_1[D^*Q_4 - Q_2(2F^* + (n-3)G^*)]$$
$$\Delta_1 = P_4[B^*Q_3 - Q_1(C^* + (n-2)D^*)] - P_3[D^*Q_3 - Q_1(2F^* + (n-3)G^*)]$$
$$\Delta_1 = P_2[B^*Q_3 - Q_1(C^* + (n-2)D^*)] - P_1[D^*Q_3 - Q_1(2F^* + (n-3)G^*)]$$

olarak ifade edilmiştir.

Tasarımların simetri özelliğinden dolayı her hangi bir b_λ ve $b_{\lambda\mu}$ çözümleri yukarıda anlatıldığı şekilde elde edilir. Blok tahmini b_w $\sum b_i$ ve $\sum b_{ij}$ nin (E1.7) dE yerine yazılması ile kolaylıkla elde edilir.

EK 2

Latin Kare ve Graeco Latin Kare Tasarımlar

Latin Kare Tasarımlar

Latin kare tasarımlar genelde iki blok etkisini ortadan kaldırmak için kullanılan tasarımlardır. Faktör seviyeleri ve blok etkileri arasında etkileşim etkilerinin mevcut olmadığı varsayımı yapılmaktadır. Her iki blok içinde her bir faktör seviyesi sadece bir kez tekrarlanmaktadır. Yalnızca sütunların değil satırlarında blok olduğu bir kare tasarımdır. Bu tip tasarımlarda faktör seviye sayısı ile blokların sayıları eşittir. Aşağıda 3×3 ve 4×4 Latin kare tasarımlar için örnekler verilmiştir.

Blok I

		1	2	3
Blok II	I	A	B	C
	II	B	C	A
	III	C	A	B

Blok II

		1	2	3	4
Blok II	I	A	B	C	D
	II	B	A	D	C
	III	C	D	A	B
	IV	D	C	B	A

Yukarıda tanımlanan tasarımlarda, bir lastiğin dört farklı tipinin aşınması (ömrü) araştırılmak istendiğinde tasarım içindeki harfler lastik tiplerini (faktör seviyeleri) kullanılan dört farklı araba blok I ve dört faklı sürücü de blok II'yi temsil edebilir. Bu tasarım için bu model,

$$y_{ij} = \mu + \tau_{t(ij)} + \beta_i + \gamma_j + \varepsilon_{ij}$$

olup, β_i sıra (blok II), γ_j sütun (blok I) ve τ_t faktör seviye etkilerini temsil etmekte olup $i,j,t = 1,...,k$'dır. Varyans analiz tablosu Tablo E2.1 de verilmiştir.

Tablo E2.1 :*Latin Kare Tasarımı İçin Varyans Analizi*

D.K	*s.d*	*S.S*
Ortalama	1	$(\Sigma y_{ijt})^2 / N$
Faktör Etkisi	k - 1	$k\Sigma\ (\bar{y}_t - \bar{y})^2$
Blok I Etkisi	k - 1	$k\Sigma\ (\bar{y}_j - \bar{y})^2$
Blok II Etkisi	k - 1	$k\Sigma\ (\bar{y}_i - \bar{y})^2$
Hata	$v = N - 3k + 2$	
Toplam	N	$\Sigma\ (y_{ijt})^2$

Graeco - Latin Kare Tasarımlar

Gerçekleştirilen araştırmada eğer ikiden fazla blok etkisi mevcut ise Latin - kare tasarımlar yetersiz kalmaktadır. Eğer blok etkisi üç ise Graeco-Latin kare tasarımı, üçgen fazla ise Hyper-Graeco-Latin kare tasarımlar kullanılabilir. Bu tip tasarımlarda yine her üç bloğun seviye sayıları ile faktör seviye sayıları eşit olup $k \times k$ boyutlu bir matris şeklinde tanımlanabilirler. 4×4 boyutlu Graeco-Latin kare tasarımı aşağıda tanımlanmıştır. Tasarım içindeki Yunan harfleri blok III'ü temsil etmektedir. Lastik örneği için üçüncü blok etkisi hava koşulları olabilir.

Blok I

		1	2	3	4
Blok II	I	Aα	Bβ	Cϒ	Dδ
	II	Bδ	Aϒ	Dβ	Cα
	III	Cβ	Dα	Aδ	Bϒ
	IV	Dϒ	Cδ	Bα	Aβ

Bu tasarım için model,

$$y_{ij} = \mu + \tau_{t(ij)} + \beta_i + \gamma_j + \phi_{u(ij)} + \varepsilon_{ij}$$

şeklinde olup blok III 'ün serbestlik derecesi (k -1) ve kareler toplamı $k\ \Sigma\ (\bar{y}_u - \bar{y})^2$ ile elde edilir. Bu veriler Latin-kare için oluşturulan Tablo 1'de varyans analiz

tablosuna eklenerek ve hata serbestlik derecesi $v = N\text{-}4k\text{+}3$ şeklinde tekrar düzenlenerek Graeco-Latin-kareler için varyans analiz tablosu elde edilebilir.

EK 3

Döndürülebilir Dizaynlar İçin Moment Matrisinin Genel Formu

Döndürülebilir tasarımlarda moment matrisinin genel formunu açıklamak için ilk önce eşitlik (3.15) deki gibi kodlanan k değişkenli d-inci dereceden model için δ-uncu dereceden tasarım momenti anımsanırsa;

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

$\delta_1, \delta_2, \ldots, \delta_k$ negatif olmayan tam sayıları olup $\delta_1 + \delta_2 + \ldots + \delta_k = 1$ dir. Örneğin k=3 alındığında, karma dördüncü dereceden moment $\delta_1 = 2 \quad \delta_2 = 1 \quad \delta_3 = 1$ değerlerine sahip olup $[1123] = \frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N} x_{u1}^2 x_{u2} x_{u3}$ dir. d-inci dereceden model için δ en fazla **2d** olabilir.

Tasarımın dönüştürülmesi için gerek ve yeter koşul δ-uncu dereceden moment formlarının;

$$\begin{cases} \left[1^{\delta_1} 2^{\delta_2} \ldots k^{\delta_k}\right] = 0 & \text{herhangi bir } \delta_i \text{ tek ise} \\ \dfrac{\lambda_\delta \prod_{i=1}^{k} (\delta_i)!}{2^{\delta/2} \prod_{i=1}^{k} \left(\frac{\delta_i}{2}\right)!} & \text{tüm } \delta_i \text{ ler cift ise} \end{cases} \qquad \text{(E3.1)}$$

Eşitlik (E3.1) deki formülü tanımlamak için $Y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_{ui} + \varepsilon_u$, u = 1,2,…,N, birinci dereceden modeli ele alındığında moment matrisinin [i] ve ya [ij] şeklinde ifade edilen köşegen dışı elemanları ve δ_i ler sıfır ve ya bir değerini alır. Köşegen üzerindeki momentler [ii] ve ya $\delta_i = 2, \delta_j = 0$ (tüm j≠i için) dir. Eşitlik

(E3.1) den bu momentler $[ii] = \lambda_2 \frac{2!}{2} = \lambda_2$ olarak ifade edilebilir. Bu yüzden birinci dereceden döndürülebilir tasarımlar için moment matrisi;

$$\frac{1}{N} X' X = \begin{bmatrix} 1 & 0' \\ 0 & \lambda_2 I_k \end{bmatrix} \qquad \text{(E3.2)}$$

Şeklindedir. Eşitlik (E3.2) de yer alan I_k (kxk) boyutlu birim matristir. Dolayısıyla birinci dereceden döndürülebilir tasarım ortogonaldir.

EK 4

Tablo 4.1 de Verilen Karelerin Eş Olduğunun Gösterimi

John (1984) taraından belirtilen ortogonal bloklama koşulları;

$$\sum_{u=1}^{n_w} x_{ui} = k_i \qquad i = 1,2,...,q$$

$$\sum_{u=1}^{n_w} x_{ui}x_{uj} = k_{ij} \qquad i,j = 1,2,...,q \quad i \neq j$$

şeklindeydi. Buna göre; ilk ortogonalite koşulunun sağlanabilmesi için her bir kare için bileşen oranlarının toplamı 1 'e eşit olmalıdır. Bir başka ifade ile a+b+c+d+e = 1 olmalıdır. Ortogonal bloklamanın ikinci koşulunun sağlanabilmesi için; bloklarda yer almak üzere seçilen Latin kare çiftlerinin eş olması (çapraz çarpım toplamlarının benzer olması) gerekmektedir.

A = (ab + ae + bc + cd + de) ve **B** = (ac + ad + bd + be + ce) olarak alındığında Blok 1 de yer alan Kare 1 ile Blok 2 de yer alan Kare 3 çapraz çarpım toplamları **A, B, A, B, B, B, A, A, A, B** şeklinde oldup bu kareler eştir. Benzer şekilde Blok 1 de yer alan Kare 2 ile Blok 2 de yer alan Kare 4 ün çapraz çarpım toplamları **B, A, B, A, A, A, B, B, B, A** şeklinde olup bu iki kare de eştir. Bu durum aşağıdaki Tablodan da görülebilir.

Blok 1

1	**2**	**3**	**4**	**5**	**12**	**13**	**14**	**15**	**23**	**24**	**25**	**34**	**35**	**45**
a	b	d	e	c	ab	ad	ae	ac	bd	be	bc	de	dc	ec
b	c	e	a	d	bc	be	ba	bd	ce	ca	cd	ea	ed	ad
c	d	a	b	e	cd	ca	cb	ce	da	db	de	ab	ae	be
d	e	b	c	a	de	db	dc	da	eb	ec	ea	bc	ba	ca
e	a	c	d	b	ea	ec	ed	eb	ac	ad	ab	cd	cb	db
					A	**B**	**A**	**B**	**B**	**B**	**A**	**A**	**A**	**B**
a	d	e	c	b	ad	ae	ac	ab	de	dc	db	ec	eb	cb
b	e	a	d	c	be	ba	bd	bc	ea	ed	ec	ad	ac	dc
c	a	b	e	d	ca	cb	ce	cd	ab	ae	ad	be	bd	ed
d	b	c	a	e	db	dc	da	de	bc	ba	be	ca	ce	ae
e	c	d	b	a	ec	ed	eb	ea	cd	cb	ca	db	da	ba
					B	**A**	**B**	**A**	**A**	**A**	**B**	**B**	**B**	**A**

Blok 2

1	**2**	**3**	**4**	**5**	**12**	**13**	**14**	**15**	**23**	**24**	**25**	**34**	**35**	**45**
a	e	c	b	d	ae	ac	ab	ad	ec	eb	de	bc	dc	bd
b	a	d	c	e	ba	bd	bc	be	ad	ac	ea	cd	ed	ce
c	b	e	d	a	cb	ce	cd	ca	be	bd	ab	de	ae	da
d	c	a	e	b	dc	da	de	db	ca	ce	bc	ea	ba	eb
e	d	b	a	c	ed	eb	ea	ec	db	da	cd	ab	cb	ac
					A	**B**	**A**	**B**	**B**	**B**	**A**	**A**	**A**	**B**
a	c	b	d	e	ac	ab	ad	ae	cb	cd	ec	db	eb	de
b	d	c	e	a	bd	bc	be	ba	dc	de	ad	ec	ac	ea
c	e	d	a	b	ce	cd	ca	cb	ed	ea	be	ad	bd	ab
d	a	e	b	c	da	de	db	dc	ae	ab	ca	be	ce	bc
e	b	a	c	d	eb	ea	ec	ed	ba	bc	db	ca	da	cd
					B	**A**	**B**	**A**	**A**	**A**	**B**	**B**	**B**	**A**

EK 5

(X'X) Matrisi ve Determinantının Elde Edilişi

Eşitlik (4.3) de verilen X matrisinden faydalanılarak elde edilen (X'X) matrisi Maple programı yardımıyla şu şekildedir;

[4*(a)*a+4*(b)*b+2/25+4*(d)*d,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
2/125+2*(d)*a*b,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
2/125+2*(d)*a*b,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d]

[(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
4*(a)*a+4*(b)*b+2/25+4*(d)*d,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
2/125+2*(d)*a*b,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,

(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
2/125+2*(d)*a*b,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d]

[(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
4*(a)*a+4*(b)*b+2/25+4*(d)*d,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
2/125+2*(d)*a*b, (a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
2/125+2*(d)*a*b]

[(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
4*(a)*a+4*(b)*b+2/25+4*(d)*d,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
2/125+2*(d)*a*b,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
2/125+2*(d)*a*b,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d]

[(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
(a)*b+2/25+(a)*d+(d)*b+(b)*a+(b)*d+(d)*a,
4*(a)*a+4*(b)*b+2/25+4*(d)*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
2/125+2*(d)*a*b,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
2/125+2*(d)*a*b,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
(a)*b*d+2/125+(b)*a*d,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d,
(a)*a*b+2/125+(a)*a*d+(d)*b*d+(b)*a*b+(b)*b*d+(d)*a*d]

[(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2*(a*b)*d+2/125,
2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
2*(a*b)*a*b+2/625+2*(a*d)*a*d+2*(b*d)*b*d,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2/625,
2/625,
2/625]

[(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,

(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2*(a*b)*d+2/125,
2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
2*(a*b)*a*b+2/625+2*(a*d)*a*d+2*(b*d)*b*d,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2/625,
2/625,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
2/625]

[(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2*(a*b)*d+2/125,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
2*(a*b)*a*b+2/625+2*(a*d)*a*d+2*(b*d)*b*d,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2/625,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
2/625,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2/625,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d]

[(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2*(a*b)*d+2/125,
2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,

(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
2*(a*b)*a*b+2/625+2*(a*d)*a*d+2*(b*d)*b*d,
2/625,
2/625,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2/625,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d]

[2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
2*(a*b)*d+2/125,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2/625,
2/625,
2*(a*b)*a*b+2/625+2*(a*d)*a*d+2*(b*d)*b*d,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2/625]

[2*(a*b)*d+2/125,
(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2/625,

(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2/625,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2*(a*b)*a*b+2/625+2*(a*d)*a*d+2*(b*d)*b*d,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b, 2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
2/625, 2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d]

[2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
2*(a*b)*d+2/125,
(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2/625,
2/625,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2*(a*b)*a*b+2/625+2*(a*d)*a*d+2*(b*d)*b*d,
2/625,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d]

[2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
2*(a*b)*d+2/125,
(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
2/625,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2/625,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2/625,

2*(a*b)*a*b+2/625+2*(a*d)*a*d+2*(b*d)*b*d,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b]

[2*(a*b)*d+2/125, 2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2/625,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2/625,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
2/625,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2*(a*b)*a*b+2/625+2*(a*d)*a*d+2*(b*d)*b*d,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b]

[2/125+(b*d)*a+(a*d)*b, 2/125+(b*d)*a+(a*d)*b,
2*(a*b)*d+2/125,
(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
(a*b)*a+2/125+(a*d)*a+(b*d)*d+(a*b)*b+(b*d)*b+(a*d)*d,
2/625,
2/625,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2/625,
2/625+(b*d)*a*d+(a*d)*b*d,
2/625+(a*d)*a*b+(b*d)*a*b,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
(a*b)*a*d+2/625+(a*b)*b*d,
2*(a*b)*a*b+2/625+2*(a*d)*a*d+2*(b*d)*b*d]

$P = \begin{pmatrix} A & C \\ C' & B \end{pmatrix} = |A| * |B - C'*A^{-1} * C|$ **Yapısından yola çıkarak X'*X matrisinin determinantının hesaplanması**

Bölüm 4 de A, B ve C matrislerinin elemanları verilmişti. Buna göre A matrisinin determinantı;

$$x^5 - 10x^3y^2 + 20x^2y^3 - 15xy^4 + 4y^5$$

olarak elde edilir.

$B - C'*A^{-1} * C$ matrisi ise şu şekilde elde edilmiştir:

[s-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-3*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-

2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t]

[p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
s-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*k-3*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-
2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-

4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, 2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, 2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, 2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t]

[h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-

2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
s-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*k-3*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-
2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-
2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-
2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-
2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t]

[p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-

4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-
2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
s-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*k-3*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-
2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-
2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,

h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t]

[p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
s-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-3*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-

(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-
2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t]

[p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-
2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-
2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,

s-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-3*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, 2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t]

[h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, 2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, 2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-

(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
s-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-3*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t]

[2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-

4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-
2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-
2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
s-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*k-3*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-
2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-
2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-
4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-

2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t]

[2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, 2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, 2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-

2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
s-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-3*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t]

[2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,

p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t, p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t,
s-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-3*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t]

Matriste yer alan değerlerin işlem kolaylığı açısından kodlanması;

c1= s-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-3*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t

c2 = p-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t

c3 = h-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t

c4 = 2/625-2*((k)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)-3*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t-2*(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*k-(-2*(k)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2)+(t)*(x+3*y)/(x^2+3*x*y-4*y^2)-2*(t)*y/(x^2+3*x*y-4*y^2))*t

Kodlamalar sonucu oluşan $B - C'*A^{-1} * C$ matrisi;

$$\begin{pmatrix} c1 & c2 & c3 & c2 & c2 & c2 & c3 & c4 & c4 & c4 \\ c2 & c1 & c2 & c3 & c3 & c4 & c4 & c2 & c2 & c4 \\ c3 & c2 & c1 & c2 & c4 & c2 & c4 & c3 & c4 & c2 \\ c2 & c3 & c2 & c1 & c4 & c4 & c2 & c4 & c2 & c3 \\ c2 & c3 & c4 & c4 & c1 & c3 & c2 & c2 & c2 & c4 \\ c2 & c4 & c2 & c4 & c3 & c1 & c2 & c2 & c4 & c3 \\ c3 & c4 & c4 & c2 & c2 & c2 & c1 & c4 & c3 & c2 \\ c4 & c3 & c3 & c4 & c2 & c2 & c4 & c1 & c3 & c2 \\ c4 & c3 & c4 & c2 & c2 & c4 & c3 & c3 & c1 & c2 \\ c4 & c4 & c2 & c3 & c4 & c3 & c2 & c2 & c2 & c1 \end{pmatrix}$$

şeklinde olup $B - C'*A^{-1} * C$ matrisinin determinantı;

-(c1+4*c2+3*c4+2*c3)*(-c1+4*c2-c4-2*c3)*(c2^2-2*c2*c4+c1*c3+2*c4^2-c1^2+c1*c4+c3^2-3*c4*c3)^4

$|A| * |B - C'*A^{-1} * C|$ nın değeri yapılan tüm kodlamalar açıldıktan sonra

$$|A| * \left|B - C'^{*} A^{-1} * C\right| = 640(-2a - 2b + 5ab - 2d + 5ad + 5db)^2$$

$$(\text{-ad - db} + ab)^2 (a-b)^8 (a^4 d^4 + a^4 b^4$$

$$+ 2a^4 b^2 d^2 - a^4 bd^3 - a^4 b^3 d$$

$$+ a^3 b^3 d^2 - 2a^3 d^5 - a^3 b^4 d + 2a^3 bd^4 - 2a^3 b^2 d^3$$

$$+ a^2 b^2 d^4 + d^6 a^2 - 2a^2 b^3 d^3 - d^5 a^2 b$$

$$+ 2a^2 b^4 d^2 - d^5 ab^2 - b^4 ad^3 + 2b^3 ad^4 + b^4 d^4$$

$$+ d^6 b^2 - 2b^3 d^5)^4$$

olarak elde edilir.