

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ÜRÜN FORMÜLASYONU İÇİN OPTİMUM KARIŞIM
DENEY TASARIMLARI
– ALTI SİGMA İÇİN TASARIM YAKLAŞIMI–

Kim. Y. Müh. Gündüz GÜZEL

FBE Kimya Mühendisliği Anabilim Dalı Kimya Mühendisliği Programında

Hazırlanan

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tez Danışmanı: Y. Doç. Dr. Semra KOŞUCUOĞLU ÖZKAN

İSTANBUL, 2008

KALEKİM A.Ş.'nin 35. kuruluş yıldönümüne armağan.

TEŐEKKÜR

Çalıőma boyunca göstermiő olduđu olađanüstü sabrı ve desteđinden dolayı tez danıőmanım Sayın Semra ÖZKAN hanımefendiye teőekkür ederim.

Ayrıca, tez danıőmanlarım Sayın Berna ÖZBEK hanımefendiye ve Sayın Abdürrezzak E. BOZDOĐAN beyefendiye teőekkürlerimi sunarım.

Son olarak, uzun yıllardır çalıőtıđım KALEKİM A.Ő.'nin sayın yöneticileri ve mesai arkadaşlarıma göstermiő oldukları ilgi ve desteklerinden dolayı teőekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
SİMGE LİSTESİ.....	vii
KISALTMA LİSTESİ.....	viii
ŞEKİL LİSTESİ.....	x
ÇİZELGE LİSTESİ.....	xv
ÖNSÖZ.....	xvii
ÖZET.....	xviii
ABSTRACT.....	xix
1. GİRİŞ	1
1.1 Çalışmanın Amacı	3
1.2 Çalışmanın Kapsam Ve Yöntemi	3
2. ENDÜSTRİYEL ÜRÜN VE SÜREÇ İYİLEŞTİRMEYE YALIN ALTI SİGMA YAKLAŞIMI	5
2.1 Yalın Altı Sigma Yöntemleri	5
2.1.1 TÖAİK ve ASİT Adımlarının Farkları ve Uygulama Alanları	10
2.2 Endüstriyel Deney Tasarımı Yöntemleri – Genel Açıklamalar	13
2.2.1 Rastsallaştırma	18
2.2.2 Tekrarlama	19
2.2.3 Bloklama	20
2.3 Deney Tasarımında Aşamalar ve Deney Tasarımının Kalitesi	21
2.4 Tepki Yüzeyi Yöntemleri – Genel Açıklamalar	23
2.5 Sonuçlar.....	28

3. ÜRÜN FORMÜLASYONU İÇİN DENEY TASARIMI – KARIŞIM DENEY TASARIMLARI	30
3.1 KDT'lerin Tarihsel Gelişimi	5
3.2 KDT'ler için Deney Tasarımı Uzayı	37
3.3 KDT'ler için Matematik Modeller	42
3.3.1 KDT Matematik Modelleri için Varsayımlar	44
3.3.2 Doğrusal Çokterimli Modeller	48
3.3.3 Karesel (2.dereceden) Çokterimli Modeller.....	50
3.3.3.1 Sabit Terim İçeren Karesel (2.dereceden) Çokterimli Modeller	53
3.3.4 Kübik (3.dereceden) Çokterimli ve Kuartik (4.dereceden) Çokterimli Modeller	55
3.3.4.1 Kübik ve Kuartik Çokterimli Modellerin Özel Biçimleri	56
3.4 Simpleks Deney Tasarımı Uzayları için KDT'ler	58
3.4.1 Kısıtlar ve Alt-uzaylar	59
3.4.2 Simpleks-Kafes Deney Tasarımları	68
3.4.3 Simpleks-Merkezli Kafes Deney Tasarımları	72
3.4.4 Simpleks-Tarama (Screening) Deney Tasarımları	75
3.4.5 KDT'ler için Bileşenleri Kodlama	77
3.5 Simpleks Olmayan Deney Tasarımı Uzayları için KDT'ler	82
3.5.1 Düzgün Olmayan Geometrik DT Bölgeleri için Stratejiler	84
3.5.2 Deney Tasarımlarında Kullanılan Algoritmalar- Genel Açıklamalar.....	86
3.5.2.1 XVERT Algoritması	88
3.5.2.1.1 XVERT1 Algoritması.....	89
3.5.2.2 CONSIM Algoritması	91
3.5.3 Tasarım Optimizasyonları.....	92
3.5.3.1 D-optimum Tasarım Kriteri	93
3.5.3.2 A-optimum Tasarım Kriteri	96
3.6 Karışım-Süreç Deney Tasarımları (KSDT ve KMDT).....	98
3.6.1 KSDT ve KMDT için Matematik Modeller.....	98
3.6.2 KSDT ve KMDT için Deney Tasarımı Uzayları	101
3.7 KDT'lerde Kötü Koşulluluk Sorunu	104
3.7.1 Çoklu Eş-doğrusallık ya da Kötü Koşulluluk Nedir?	105
3.7.2 Çoklu Eş-doğrusallık ya da Kötü Koşulluluk Sorununun Belirlenmesi için Yöntemler ..	106
3.7.3 Çoklu Eş-doğrusallık Sorununun Azaltılmasında Kullanılan Yöntemler.....	109
4. KARIŞIM DENEY TASARIMLARI İÇİN BİR UYGULAMA	110
4.1 Ürünün Genel Özellikleri	111
4.1.1 Ürün ve Süreç Bileşenleri	113
4.1.2 Ürün Bileşenleri için Kısıtlar ve Süreç Bileşen Seviyeleri	114
4.2 Cevap Değişkenleri	116
4.3 Deney Tasarımı Aşaması	116

4.4	Deney Tasarımının Değerlendirilmesi	120
4.4.1	Standart Hatalar	122
4.4.2	VIF ve R_i^2 Değerleri	122
4.4.3	Güç Hesapları	124
4.4.4	Kaldıraç (Leverage) Değerleri.....	126
4.4.5	Grafiksel Değerlendirme Yöntemleri	128
4.4.5.1	Tasarım Uzayının Kesri - FDS (Fraction of Design Space) Grafikleri	129
4.4.5.2	İz (Trace) Grafikleri.....	132
4.4.5.3	Tasarımın Standart Hata Grafiği.....	136
4.5	Deney Tasarımının Analizi	138
4.5.1	Model Analizleri	140
4.5.1.1	dE için Model Oluşturma	143
4.5.1.2	dE için ANOVA.....	146
4.5.1.3	dE için Kestirim Denklemi	156
4.5.1.4	Viskozite için Model Oluşturma	163
4.5.1.5	Viskozite için ANOVA	164
4.5.1.6	Viskozite için Kestirim Denklemi.....	167
4.6	Deney Tasarımının Tanı/Yeterlilik Analizleri	175
4.6.1	Artıkların Ölçeklendirilmesi/Standartlaştırılması	175
4.6.2	Teşhis/Tanı Grafikleri	179
4.6.2.1	Artıkların Karşılaştırılması Grafikleri	180
4.6.2.2	Artıkların Normal Dağılımı.....	183
4.6.2.3	Güç Dönüşümleri için Box-Cox Grafikleri.....	185
4.6.3	Etki Grafikleri	189
4.6.3.1	Kaldıraç Grafikleri	191
4.6.3.2	DFFITS ve DFBETAS Grafikleri	193
4.6.3.3	Cook Mesafesi.....	197
4.7	Tasarım için Çoklu-Cevap Optimizasyonu	200
4.7.1	Nicel Optimizasyon	202
4.7.2	Grafik Optimizasyon.....	211
5.	SONUÇLAR VE ÖNERİLER	212
5.1	Sonuçlar.....	212
5.2	Öneriler.....	215
6.	KAYNAKLAR.....	217
7.	EKLER	224
7.1	Ek-1: Renk Haslığı için $\ln(dE)$ matematik modeli ve model analizi	224
7.2	Ek-2: $dE^{0.82}$ ve viskozite için İlave Grafikler	236
	ÖZGEÇMİŞ	243

SİMGE LİSTESİ

b	Terim katsayısı tahmini
e	Hata/artık
E(y)	y'nin beklenti fonksiyonu
H	Şapka Matrisi
R	Belirtme katsayısı
r_i	Studentleştirilmiş artıklar
var(x)	x'in değişkenliği
X	Tasarım/Fisher Matrisi
X'X	Bilgi Matrisi
x_i	Karışım Bileşeni
y	Cevap Değişkeni
z_i	Süreç Değişkeni
β	Terim katsayısı
ε	Kavramsal hata
σ	Standart sapma

KISALTMA LİSTESİ

2FI	İki Faktör Etkileşimi
ANOM	Analysis of Means
ANOVA	Analysis of Variances
ASİT	Altı Sigma İçin Tasarım
C.V.%	Coefficient Of Variation Percent – Değişkenlik Katsayısının Yüzdesi
CADEX	Computer-Aided Design of Experiments Algoritması
CONSIM	Constrained Simplex Algoritması
DETMAX	Determinant Maximization Algoritması
df	Degree of Freedom - Serbestlik Derecesi
DFBETAS	Tahmin değerlerinin farkı
DFFITS	Uydurulan y değerlerinin farkı
DT	Deney Tasarımları
EKK	Eksensel Kontrol Karışımları
FDS	Fraction of Design Space – Tasarım Uzayının Kesri
İSK	İstatistikî Süreç Kontrolü
KaK	Karışımların-Karışımı Türü Deney Tasarımı
KDM	Kısıt-düzlem merkez noktaları
KMDT	Karışım-Miktar Deney Tasarımları
KSDT	Karışım-Süreç Deney Tasarımları
KTD	Karışımlar için Deney Tasarımları

M-A	McLean-Anderson Algoritması
$MS_{\text{artıklar}}$	Artıkların Kareler Ortalaması
MS_{blok}	Blokların Kareler Ortalaması
MSE	Mean Square Error – Hatanın Kareler Ortalaması
$MS_{\text{saf hata}}$	Saf hatanın Kareler Ortalaması
MST	Toplamın Kareler Ortalaması
NID	Normally and Identically Distributed – Normal ve Tekil Dağılmış
OTM	Ortalama-Tepe nokta-Merkezi
PRESS	Prediction Error Sum of Squares – Tahmin Hatasının Kareler Toplamı
SSE	Sum of Squares Errors – Hataların Kareler Toplamı
SS_{LOF}	Model Uyumsuzluğunun Kareler Toplamı
SS_{PE}	Saf Hatanın Kareler Toplamı
SSR	Sum of Squares Regression – Regresyonun Kareler Toplamı
SST	Sum of Squares Total – Toplam Kareler Toplamı
TÖAİK	Tanımla, Ölç, Analiz et, İyileştir, Kontrol et
TÖATD	Tasarla, Ölç, Analiz et, Tasarla, Doğrula
TYY	Tepki (Cevap) Yüzeyi Yöntemleri
VIF	Değişkenlik Şişirme Faktörü (Variance Inflation Factor)
XVERT	Extreme Vertices Algoritması
YAS	Yalın Altı Sigma Yöntemleri
YK	Yeterli Kesinlik

ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa
Şekil 2. 1	Yalın altı sigma performans ilerleme modeli..... 7
Şekil 2. 2	Deney tasarımları için genel süreç diyagramı gösterimi..... 8
Şekil 2. 3	TÖAİK ve TÖATD yaklaşımları için maliyet, sigma performansı ilişkisi..11
Şekil 2. 4	Yalın altı sigma TÖAİK model seviyelerinin (adımlarının) gösterimi..... 12
Şekil 3.1	1981-2007 yılları arasında kdt üzerine yapılmış istatistikî çalışmaların sayıları.....34
Şekil 3.2	1955-2004 yılları arasında kdt üzerine en çok yayın yapmış yazarlar ve yayın sayıları (khuri (der.), 2006).....34
Şekil 3.3	$q = 2, x_1 + x_2 = 1.0$ için faktör uzayı bir boyutlu simplekstir.....38
Şekil 3.4	$q = 3, x_1 + x_2 + x_3 = 1.0$ için faktör uzayı iki boyutlu simplekstir.....39
Şekil 3.5	$q = 4, x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1.0$ için faktör uzayı üç boyutlu simplekstir. Tasarımın tüm deneme noktaları piramitin sınırları üzerinde ya da içinde olmalıdır.....40
Şekil 3.6	3-bileşenli bir karışım sisteminde simpleks koordinat sistemi.....42
Şekil 3.7	$\beta_{ijk} x_i x_j x_k$ ve $\beta_{ijk} x_i^2 x_j x_k$ terimleri ile modellenebilecek eğrisellikler.....58
Şekil 3.8	Üç alt-limitli bileşen için simpleks bölgesi (kesikli üçgenin sınırladığı bölge).....60
Şekil 3.9	Üç üst-limitli bileşen için simpleks bölgesi (Hiçbir bölge DT için uygun değildir.).....63
Şekil 3.10	Üç üst-limitli bileşen için simpleks bölgesi (kesikli üçgenin sınırladığı bölge tasarım bölgesidir.).....64
Şekil 3.11	Eşitsizlik (3.50) tarafından sınırlandırılmış deney tasarımı alt-uzayı (kesikli ters üçgenin sınırladığı bölge).....67
Şekil 3.12	$\bar{U}_i = 1/3$ ($i = 1, 2, 3, 4$) için sınırlandırılmış deney tasarımı alt-uzayı (kesikli ters piramidin sınırladığı bölge).....67
Şekil 3.13	$\{4, 2\}$ simpleks-kafes tasarım için deney noktalarının yerleşimi.....69
Şekil 3.14	$\{3, 3\}$ simpleks-kafes tasarım için deney noktalarının yerleşimi.....70
Şekil 3.15	$\{3, 2\}$ simpleks-kafes tasarımın $q + 1 = 4$ adet nokta eklenmiş görüntüsü (içi boş daireler ilave noktaları gösterir.).....71
Şekil 3.16	$\{3, 3\}$ simpleks-merkezli kafes tasarım için deney noktalarının yerleşimi..74

Şekil 3.17	{4, 2} 2-seviyeli kısmî simpleks-merkezli kafes tasarım için deney noktalarının yerleşimi.....	74
Şekil 3.18	3-bileşenli simpleks-tarama tasarımı için deney noktalarının yerleşimi.....	76
Şekil 3.19	4-bileşenli simpleks-tarama tasarımı için deney noktalarının kısmî yerleşimi.....	77
Şekil 3.20	Bölüm 3.4.1’de verilen IV. örnek için kısıtlı bölgeler.....	80
Şekil 3.21	Sözde-bileşen dönüşümlerinin oluşturduğu simpleks biçimli olmayan DT bölgesi.....	81
Şekil 3.22	Düzgün olmayan çokgen biçimli DT alt-bölgesi.....	83
Şekil 3.23	Oran kısıtları için düzgün olmayan çokgen biçimli DT alt-bölgesi.....	83
Şekil 3.24	2 bileşen için güven aralığı (solda) ve bu güven aralıklarının oluşturduğu güvenilirlik elipsi (sağda).....	93
Şekil 3.25	3-bileşenli bir simpleks KDT için Cox-etki doğrultuları.....	96
Şekil 3.26	Merkez noktası eklenmiş {3, 1} simpleks-kafes tasarım ile 22 faktöriyel tasarımının Kartezyen birleşiminden elde edilen karışım-süreç deney tasarımı (Dingstad vd., 2003).....	101
Şekil 3.27	{3, 2} simpleks-merkezli kafes tasarım ile 23 faktöriyel tasarımının Kartezyen birleşiminden elde edilen KSDT (Lazic, 2004).....	102
Şekil 3.28	Merkez noktası eklenmiş {3, 1} simpleks-kafes tasarımlarının birleştirilmesi ile oluşturulmuş KaK tasarımları (Dingstad vd., 2003).....	103
Şekil 4.1	KSDT Çalışması için İki Bileşenin Karışımı Grafiği.....	129
Şekil 4.2	KSDT Çalışması için Tasarım Uzayinin Kesri (FDS) – Fark Tipi Hata...	131
Şekil 4.3	KSDT Çalışması için Tasarım Uzayinin Kesri (FDS) – Ortalama Tipi Hata.....	132
Şekil 4.4	Kısıtlı Bölgeler için Piepel (sol) ve Cox (sağ) Doğrultuları (Statease Inc., 2008).....	133
Şekil 4.5	Piepel Doğrultusu için İz Grafikleri - KSDT Çalışması.....	135
Şekil 4.6	Cox Doğrultusu için İz Grafikleri - KSDT Çalışması.....	135
Şekil 4.7	KSDT Çalışması için Tasarımın Standart Hata Grafiği – 3-boyutlu gösterim.....	137
Şekil 4.8	KSDT Çalışması için Tasarımın Standart Hata Grafiği – Eş-yükselteli gösterim.....	137
Şekil 4.9	$(dE)^{0.82}$ için eş-yükselteli karışım grafiği.....	159
Şekil 4.10	$(dE)^{0.82}$ için 3-boyutlu karışım grafiği.....	159

Şekil 4.11	(dE) ^{0.82} için Piepel doğrultulu iz grafiği.....	160
Şekil 4.12	(dE) ^{0.82} için Cox doğrultulu iz grafiği.....	161
Şekil 4.13	(dE) ^{0.82} için süreç değişkenlerinin etkileşim grafiği.....	161
Şekil 4.14	(dE) ^{0.82} için süreç değişkenlerinin duyarlılık grafiği.....	162
Şekil 4.15	(dE) ^{0.82} için 3-boyutlu karışım-süreç grafiği.....	163
Şekil 4.16	Viskozite için eş-yükselteli karışım grafiği.....	169
Şekil 4.17	Viskozite için 3-boyutlu karışım grafiği.....	170
Şekil 4.18	Viskozite için Piepel doğrultulu iz grafiği.....	171
Şekil 4.19	Viskozite için Cox doğrultulu iz grafiği.....	172
Şekil 4.20	Viskozite için süreç değişkenleri ile değişim grafiği.....	173
Şekil 4.21	Viskozite için 3-boyutlu karışım-süreç grafiği.....	173
Şekil 4.22	Viskozite için eş-yükselteli standart hata grafiği.....	174
Şekil 4.23	Viskozite için 3-boyutlu standart hata grafiği.....	175
Şekil 4.24	Cevap değişkenleri için hataların cevap tahminleri ile değişimi. Alt: viskozite, Üst: dE.....	181
Şekil 4.25	dE (üstte) ve viskozite (altta) cevapları için artıkların deney sırasına göre değişimi.....	182
Şekil 4.26	dE (üstte) ve viskozite (altta) cevapları için ölçülen y değerlerinin kestirim değerleri ile karşılaştırılması.....	183
Şekil 4.27	dE (üstte) ve viskozite (altta) cevapları için artıkların normal dağılım grafikleri.....	185
Şekil 4.28	dE cevap değişkeni için Box-Cox dönüşüm grafiği.....	188
Şekil 4.29	Viskozite cevap değişkeni için Box-Cox dönüşüm grafiği.....	189
Şekil 4.30	dE (üstte) ve viskozite (altta) cevapları için harici Studentleştirilmiş artıkların deney sırasına bağlı değişim grafikleri.....	190
Şekil 4.31	dE (üstte) ve viskozite (altta) cevapları için kaldıraç değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafikleri.....	193
Şekil 4.32	dE (üstte) ve viskozite (altta) cevapları için DFFITS değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafikleri.....	195
Şekil 4.33	dE (üstte) ve viskozite (altta) cevaplarında pigment bileşeni için DFBETAS değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafikleri.....	196
Şekil 4.34	b ₁ ve b ₂ parametreleri için birleşik güvenilirlik elipsoitleri (Smith, 2005).....	197
Şekil 4.35	dE (üstte) ve viskozite (altta) cevaplarında Cook mesafesi değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafikleri.....	200

Şekil 4.36	Sayısal optimizasyon için hedefin maksimum olduğu istenirlik görüntüsü.....	203
Şekil 4.37	Sayısal optimizasyon için hedefin minimum olduğu istenirlik görüntüsü.....	204
Şekil 4.38	Sayısal optimizasyon için optimum değer hedef olduğu istenirlik görüntüsü.....	205
Şekil 4.39	Sayısal optimizasyon için optimum hedefin değişim aralığında olduğu istenirlik görüntüsü.....	206
Şekil 4.40	KSDT çalışması için istenirlik fonksiyonunun 1.çözüm için aldığı değerler.....	209
Şekil 4.41	KSDT çalışması için istenirliğin eş-yükselteli grafiği.....	210
Şekil 4.42	KSDT çalışması için istenirliğin 3-boyutlu grafiği.....	210
Şekil 4.43	KSDT çalışması için grafik optimizasyonu ile elde edilen 1.çözüm için grafik gösterim.....	211
Şekil E.1	$\ln(dE)$ için eş-yükselteli karışım grafiği.....	227
Şekil E.2	$\ln(dE)$ için 3-boyutlu karışım grafiği.....	227
Şekil E.3	$\ln(dE)$ için Piepel doğrultulu iz grafiği.....	228
Şekil E.4	$\ln(dE)$ için Cox doğrultulu iz grafiği.....	228
Şekil E.5	$\ln(dE)$ için karışım-süreç eş-yükselteli grafiği.....	229
Şekil E.6	$\ln(dE)$ cevap değişkeni için hataların cevap tahminleri ile değişimi.....	229
Şekil E.7	$\ln(dE)$ için artıkların deney sırasına göre değişimi.....	230
Şekil E.8	$\ln(dE)$ için ölçülen y değerlerinin kestirim değerleri ile karşılaştırılması.....	230
Şekil E.9	$\ln(dE)$ için artıkların normal dağılım grafiği.....	231
Şekil E.10	$\ln(dE)$ cevap değişkeni için Box-Cox dönüşüm grafiği.....	231
Şekil E.11	$\ln(dE)$ için harici Studentleştirilmiş artıkların deney sırasına bağlı değişim grafiği.....	232
Şekil E.12	$\ln(dE)$ için kaldıraç değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafiği.....	232
Şekil E.13	$\ln(dE)$ için DFFITS değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafiği.....	233
Şekil E.14	$\ln(dE)$ cevabında pigment bileşeni için DFBETAS değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafiği.....	233
Şekil E.15	$\ln(dE)$ için Cook mesafesi değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafiği.....	234

Şekil E.16	$dE^{0.82}$ için 3-boyutlu karışım grafiği. (B ve D bileşenleri için değişim aralığının darlığı dikkat çekicidir.).....	236
Şekil E.17	$dE^{0.82}$ cevabında AG terimi için DFBETAS değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafiği.....	236
Şekil E.18	Viskozite için 3-boyutlu karışım grafiği (viskozite değerlerinin büyüklüğü dikkat çekicidir).....	238
Şekil E.19	Viskozite için Piepel doğrultulu standart hatanın iz grafiği.....	238
Şekil E.20	Viskozite için Cox doğrultulu standart hatanın iz grafiği.....	238
Şekil E.21	Viskozite cevabında AD terimi için DFBETAS değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafiği.....	238
Şekil E.22	Viskozite cevabında BD terimi için DFBETAS değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafiği.....	239
Şekil E.23	KSDT çalışmasının sayısal optimizasyonunda 1. çözüm noktası için tüm değişkenlerin rampa grafikleri.....	242

ÇİZELGE LİSTESİ

	Sayfa
Çizelge 2.1	Yalın altı sigma karakuşak geliştirme eğitim içeriği 9
Çizelge 2.2	Temel deney tasarımları 20
Çizelge 3.1	1955-1980 yılları arası kdt'ler üzerine yapılan istatistikî çalışmaların yıllara göre dağılımı (Cornell ve Piepel, 2005).....31
Çizelge 3.2	1955-2007 yılları arası kdt'ler hakkında yazılmış eğitici makaleler,derlemeler, kitaplar ve gözden geçirme çalışmaları (Cornell ve Piepel, 2005).....36
Çizelge 3.3	Cevap değişkeni y'nin karışım bileşenlerine bağlı değişimi.....50
Çizelge 3.4	2-bileşenli karesel çokterimli model için tüm parametreler ve değerleri.....51
Çizelge 3.5	Scheffé tipi çokterimli modeller için terim sayıları.....57
Çizelge 3.6	4-bileşenli, 2.dereceden simpleks-kafes tasarım için deney noktaları.....68
Çizelge 3.7	3-bileşenli, 3.dereceden simpleks-kafes tasarım için deney noktaları.....69
Çizelge 3.8	{q, m} simpleks-kafes tasarımlar için deney noktaları (Smith, 2005).....71
Çizelge 3.9	Simpleks-tarama deney tasarımları için deney noktaları ve türleri.....75
Çizelge 3.10	Simpleks-kafes tasarım için kodlanmış ve kodlanmamış deney noktaları.....78
Çizelge 3.11	Bölüm 3.4.1'de verilen IV. örneğin tepe noktaları için gerçek ve sözde-değerler.....80
Çizelge 3.12	$q \leq 12$ için kısıtlı bölgelerde mümkün olan bütün uç nokta ve kenar orta nokta sayıları (Smith, 2005).....84
Çizelge 3.13	Deney Tasarımlarında deney noktası seçimi için kullanılan algoritmalar (Smith, 2005).....86
Çizelge 4.1	KSDT için kullanılan ürün bileşenleri ve kimyasal grupları.....114
Çizelge 4.2	KSDT Tasarımı için bileşenler ve kodlanmış alt- ve üst-sınır değerleri.....118
Çizelge 4.3	KSDT uygulaması için A-sözde dönüşümlü deney noktaları ve nokta tipleri.....119
Çizelge 4.4	Tasarım değerlendirmesi için istatistikî göstergeler ve değerleri.....121
Çizelge 4.5	KDT'lerde güç hesapları için etki aralıkları.....125
Çizelge 4.6	KSDT uygulaması için kaldıraç değerleri ve deney noktası tipleri.....127
Çizelge 4.7	KSDT çalışması için cevap değişkenleri.....139

Çizelge 4.8	$(dE)^{0.82}$ cevap deęişkeni için çokterimli modellerin model uyumu özet tablosu.....	143
Çizelge 4.9	$(dE)^{0.82}$ cevap deęişkeni için kısmî kareler toplamının ANOVA tablosu.....	146
Çizelge 4.10	$(dE)^{0.82}$ cevap deęişkeni için istatistikî özet deęerler.....	151
Çizelge 4.11	dE cevap deęişkeni için model terimleri ve bazı istatistikî göstergeleri.....	157
Çizelge 4.12	Viskozite deęişkeni için çokterimli modellerin model uyumu özet tablosu...	164
Çizelge 4.13	Viskozite cevap deęişkeni için kısmî kareler toplamının ANOVA tablosu...	165
Çizelge 4.14	Viskozite cevap deęişkeni için istatistikî özet deęerler.....	166
Çizelge 4.15	Viskozite cevap deęişkeni için model terimleri ve bazı istatistikî göstergeleri.....	167
Çizelge 4.16	Bazı güç dönüşümleri (Smith, 2005).....	187
Çizelge 4.17	KSDT çalışması için optimizasyon kriterleri.....	207
Çizelge 4.18	KSDT çalışması için optimizasyon kriterleri kullanılarak bulunan çözümler.....	208
Çizelge E.1	$\ln(dE)$ cevap deęişkeni için çokterimli modellerin model uyumu özet tablosu.....	224
Çizelge E.2	$\ln(dE)$ cevap deęişkeni için kısmî kareler toplamının ANOVA tablosu.....	225
Çizelge E.3	$\ln(dE)$ cevap deęişkeni için istatistikî özet deęerler.....	225
Çizelge E.4	$\ln(dE)$ cevap deęişkeni için model terimleri ve bazı istatistikî göstergeleri...	225
Çizelge E.5	$\ln(dE)$ için teşhis/tanı ölçütleri için veri dökümü.....	235
Çizelge E.6	$dE^{0.82}$ için teşhis/tanı ölçütleri için veri dökümü.....	240
Çizelge E.7	Viskozite için teşhis/tanı ölçütleri için veri dökümü.....	241

ÖNSÖZ

*Statistics for Experimenters** kitabının iç kapak sayfalarında bulunan ve söyleyeni belirtilmemiş olan bir söz şöyledir:

*“Perfection is not possible; it is always an approximation” ***

Deneye dayalı tüm modellemeler ve model optimizasyonları özünde bir yaklaşımdan ibarettir. Mühendislik yaklaşımı kullanılarak yapılacak matematik modelleme çalışmaları her halükarda mükemmelliğe giden yolda bir adım olacaktır.

Fakat bu adımın büyüklüğü ve mükemmelliğe ne kadar yaklaşıldığını, kullanılan parametreler, bu parametrelerin değişim aralıkları ve öngörülen modelin istatistikî sağlıklılığı belirleyecektir.

Bu çalışmada karışım deney tasarımı yöntemleri kullanılarak optimum ürün formülasyonu için deney tasarımlarının etkinliği irdelenmiştir. Elde edilen modeller ve bu modellerin kontrol testleri optimuma ne kadar yaklaşıldığını ve üretim sürecinde değişkenliğin ne kadar azaltılabileceğini göstermiştir.

*G.E.P. Box, J.S. Hunter ve W.G. Hunter, (2005), *Statistics for Experimenters – Design, Innovation, and Discovery*, (2.Edt.), J.Wiley & Sons – New York

** Mükemmellik mümkün değildir. Her zaman bir yaklaşımdır.

ÖZET

Günlük hayatta kullanılan birçok ürün birden fazla bileşenin belirli oranlarda karıştırılması yoluyla elde edilmektedir. Bu ürünleri üreten endüstriler rekabetçi piyasa koşulları ve daha kaliteli-daha ucuz maliyetli etkileşimini korumak için ürünlerini ve üretim süreçlerini ölçülebilir hale getirmelidirler. Bu amaçla geliştirilen birçok süreç iyileştirme ve ürün geliştirme araçlarına yönetim araçlarının da eklenmesiyle elde edilen Yalın Altı Sigma (YAS) süreç iyileştirme yöntemleri tüm dünyada yaygın olarak kullanılmaktadır. YAS süreç iyileştirme yöntemlerinin en etkin aracı olan deney tasarımları (DT), sürecin iyileştirme adımlarında kullanılabildiği gibi yeni bir ürün/süreç tasarımının söz konusu olduğu geliştirme/tasarım adımlarında da kullanılabilir. DT'ler yardımıyla sürecin ölçülebilir çıktılarını/performans göstergelerini belirli matematik fonksiyonlarına uydurarak modelleyebilmek mümkündür.

Deney tasarımlarının ürün formülasyonları için geliştirilmiş biçimi karışımlar için deney tasarımı yöntemleri değişken olarak ürün bileşenlerini kullanır. KDT'lere süreç değişkenlerinin eklenmesiyle karışım-süreç deney tasarımları (KSĐT) mümkündür. KDT'ler D-optimum kriteri gibi optimizasyon algoritmalarının da yardımıyla, ürün geliştirme ve ürün formülasyonları için etkin olarak kullanılabilir.

Boya endüstrisinde yaygın kullanılan universal renklendiriciler birçok bileşenin belirli oranlarda bulunduğu karışımlardır. Bu çalışmada KDT'lerin teorik altyapısı açıklandıktan sonra, etkin olduğu tarama deney tasarımlarıyla belirlenmiş 5 ürün bileşeni ve 2 süreç bileşeni için optimum KSĐT uygulaması gerçekleştirilmiştir. Üç cevap değişkeni için (de, viskozite ve maliyet) Scheffé tipi çokterimli matematik modeller oluşturulmuştur. Sıradan en küçük kareler yöntemi kullanılarak elde edilen bu istatistikî modeller, ANOVA ve ilgili analizlere tabi tutulmuş ve istatistikî sağlıklılığı irdelenmiştir.

Oluşturulan modellerle, belirlenen hedef değerler için, çoklu-cevap değişkeni optimizasyonu gerçekleştirilmiş, sonuçta optimum reçeteler elde edilmiştir.

Anahtar kelimeler: Endüstriyel deney tasarımları; Karışım deney tasarımları; Karışım-süreç deney tasarımları; Reçete tasarımı; D-optimum algoritması; Yalın Altı Sigma; Çoklu-cevap Optimizasyonu

JÜRİ:

1. Y. Doç. Dr. Semra KOŞUCUOĞLU ÖZKAN
2. Prof. Dr. Berna ÖZBEK
3. Prof. Dr. Abdürrezzak E. BOZDOĞAN

Kabul Tarihi: 30.10.2008
Sayfa Sayısı: 262

ABSTRACT

Industrial products consist of two or more components in defined proportions. Due to the competitive market conditions and quality improvement necessities, industries have to rationalize their products and production processes. There are lots of accumulated process and product improvement methodologies. Among them, Lean Six Sigma (LSS) methodologies have gained a grand interest because of joining qualitative and statistical tools together.

Industries can decrease their process variances and control all of their processes via LSS methodologies. The most important tool of LSS is the design of experiments (DOE). This tool can be used for the improvement part of LSS and can also be used for the product design/development cycles.

The quality of an industrial product depends on the raw material proportions and the process variable levels, both of which need to be taken into account in designing a product. A specialized form of DOE's which can be used for designing products are named as mixture designs. By adding process variables to these kinds of designs, a new version called as mixture-process designs has been developed.

Universal colorants are used in paint and related industries. In this study, after explaining the theoretical background of mixture designs, a mixture-process design has been established for 5 mixture components and 2 process variables. Scheffé type polynomial models have been developed for three measured responses (dE, viscosity and cost). These statistical models have been developed via the partial least squares regressions and analyzed through ANOVA and related diagnostic tools.

Finally, models have been used for multi-response optimization by assigning goals for each response.

Keywords: Mixture Designs; Mixture-Process designs; Experimental design for formulation; Industrial design of experiments; D-optimum criteria; Lean Six Sigma; DFSS; Multi-response optimization

JURY:

1. Asst. Prof. Dr. Semra KOŞUCUOĞLU ÖZKAN
 2. Prof. Dr. Berna ÖZBEK
 3. Prof. Dr. Abdürrezzak E. BOZDOĞAN
- Date of Acceptance: 30.10.2008
Number of Pages: 262

1. GİRİŞ

İstatistik ve uygulamaları endüstride giderek artan bir rol oynamaktadır. Bu durumu yönlendiren birçok etken vardır. Bunlardan başlıcaları: potansiyel olarak daha fazla kullanılabilir veri yığınları üreten yeni teknolojiler, (büyük çoğunluğu günümüzde, dünyada ve, özellikle, ülkemizde etkin olarak kullanılamamaktadır), bilgisayarların etkinleşerek artan yaygınlığı, *yeni* istatistikî yöntemlerin oluşturulması (grafik yöntemler dâhil) ve daha kullanıcı dostu, gelişmiş istatistik yazılımlarıdır. Bu yazılımlar sayesinde, yeterince eğitim almış herhangi bir bilgisayar kullanıcısı, veri analizi için bu “modern” istatistik yöntemlerini etkin bir şekilde kullanabilmektedir. S. Bisgaard’a göre (Steinberg, 2008) endüstride istatistiğin temel işlevi, dizgesel (systematic) veri-güdümlü (data-driven) bilgi üretmede, öğrenmede ve yeniliklerde/geliştirmelerde (innovation) katalizör etkisi yapmasıdır.

Yukarıdaki etkenlerden “yeni istatistikî yöntemleri” örneklemek gerekirse: Üretim endüstrileri ürünlerini sürekli, performans, güvenlik, garanti, fiyat/maliyet oranı, temin süresi vb. etmenleri içeren ürün güvenilirliği (product reliability) testlerine tabi tutmak ihtiyacıyla karşı karşıya kalmaktadır. Bu testleri klasik fiziksel test yöntemleriyle çözmek ise, her zaman mümkün değildir. Çünkü birçok kısıtlar bu testlerin sağlıklı uygulanmasına imkân vermemektedir. Dolayısıyla, yeni endüstriyel istatistik yöntemlerine ihtiyaç duyulmaktadır. Keller-McNulty’e göre (Steinberg, 2008) endüstriyel istatistikte evrimsel bir dönüşümün yapılması şarttır. Bu evrimsel dönüşümde ilk adım, uzmanlık, kurum hafızası (tecrübe) ve matematik modelleme/benzetim (simulation) gibi yardımcı veri kaynaklarını ve deneysel yöntemleri bir arada kullanarak, ölçüm metriklerinin anında sayısallaştırılabilmesini sağlayacak yöntemlerin geliştirilmesidir.

Diğer taraftan, D.C. Montgomery de (Steinberg, 2008) endüstride istatistiğin giderek daha fazla kullanılmasını, 21. yüzyılın biyoteknoloji yüzyılı olacağı ve bu endüstrinin istatistiğin en önemli etki alanı olacağını belirterek savunmaktadır. Diğer tüm ürünlerden daha fazla olarak biyoteknolojik ürünler düzenli testlerden geçmek zorundadır ve üretici şirket bu ürünü, güvenli olarak, kritik fonksiyonel niteliklerinde minimum değişkenlikle üretebilmeli ve makul bir fiyatla dağıtabilmelidir. Bu ve benzeri durumlar istatistikî anlamda yeterince meydan okuyucudur. Ayrıca, biyoteknolojik araştırma ve geliştirme çalışmalarının hemen hepsine sızan ve araştırmacıların çözmek için uğraştığı çok yüksek doğal değişkenlik gibi kritik

olabilen durumlar kaçınılmazdır. D. C. Montgomery'e göre (Montgomery, 1999; Coleman vd., 2007) bu tür meydan okumalara verilmiş cevaplardan hiçbirisi deney tasarımlarından daha önemli değildir. Bu deneyler, çoğunlukla, çeşitli seviyeleri (level) olan olmazsa-olmaz faktörleri, nitel ve nicel (sürekli) tasarım değişkenlerini, uygulama sırasında sınırlamaları, denemelerin homojen koşullarda yapılabilmesini sağlamak için deneme sayılarını kısıtlamayı, deney malzemelerindeki (bileşenler, faktörler) yüksek değişkenlikleri ve geleneksel normal dağılım, bağımsızlık ve sabit değişkenlik varsayımlarını karşılamayan "sıradışı" cevapları içermektedir. Bu alanda etkin olarak kullanılacak ya da yeni geliştirilecek Deney Tasarımı (DT) yöntemleri, başlangıçtaki bilimsel ilkelerden nihaî ürüne kadar olan geliştirme çevriminin (development cycle) çok önemli bir "kısaltıcı" parçası olacaktır. Ayrıca, deney tasarımı ve analizinden elde edilen bilgi bizi, gelişigüzel, herhangi bir planlama ve dikkat gösterilmeden yapılan ürün ve süreç performansı çalışmalarından, değişkenliği az, yüksek verimli, düşük maliyetli ve güvenilir performans çalışmalarına götürecektir.

Wu'nun iddiasına göre son 60 yıl içinde endüstriyel istatistik alanındaki birçok başarılı çalışmadan en önemli ikisi: 1950'li ve 1960'lı yıllarda ilk olarak kimya ve süreç endüstrilerinde ortaya çıkan cevap (Tepki) Yüzeyi Yöntemleri (TYY) (Response Surface Methodology - RSM) ve 1980'li yıllarda üretim kalite iyileştirme çalışmalarından gelen dayanıklı parametre tasarımı çalışmalarıdır (Robust Parameter Design) (Steinberg, 2008). Bisgaard'a göre de (Steinberg, 2008) üretim ya da servis süreçlerinde "daha kaliteli" hedefi büyük olasılıkla gelecekte de deney tasarımı, TYT ve istatistikî süreç kontrolü (İSK) çalışmalarındaki gelişmelerin ilham kaynağı olmaya devam edecektir.

Sonuç olarak, Abt ve Pukelsheim'in (1995) "Endüstride istatistiğin uygulama imkânı bulabileceği alanlar açısından ürün kalitesi -yönetim katmanı da dâhil- birincil önemdedir. Düşük maliyet, sağlıklı üretim planlaması ve çalışan verimliliği ise daha düşük önemdedir." iddiasının aksine -kanımızca- endüstride istatistiğin birincil uygulama alanları, şirketlerin daha çok nasıl tasarruf yapabileceği ve/veya karlılığını daha çok nasıl arttırabileceğini gösteren çalışma alanlarıdır (Hahn ve Doğanaksoy, 2008). Esasında, günümüz piyasa koşullarında ve ekonomi anlayışında temel amaç, çok yüksek kalitede ürünler/hizmetler üretmek değil; aksine piyasa şartlarının oluşturduğu kalite düzeyinde olan, rekabetçi ama düşük maliyetli ürün ve hizmetler üretilmesidir.

Dolayısıyla, endüstride istatistik bilimi ve uygulamaları gelecekte- bu çalışmanın amacı da göz önünde tutulduğunda- "daha düşük maliyetli ve daha sorunsuz nasıl?" sorusunu, "daha

kaliteli nasıl?" sorusundan önce soran piyasa koşullarına cevap verecek yönde biçimlenecektir.

1.1. Çalışmanın Amacı

Günümüzde endüstriyel kalite iyileştirme ve ürün geliştirme süreçlerinde etkin olarak kullanılan istatistikî yöntemlerin yaygınlığı artmaktadır. Günümüzde kişisel bilgisayarların da yaygınlaşmasından dolayı, artık, daha kolaylaşan bu işlem yoğun süreçler, geliştirilen uygun yazılımların da yardımıyla ürünler, fikirden ürün için optimum parametrelerin belirlenmesi ve piyasaya sürülmeden test edilmesi adımlarına kadar tasarlanabilmektedir.

İstatistikî ürün/süreç tasarımları olarak adlandırılan bu adımlarını bir bütün içinde ele alıp, üretim süreçlerine yönetim adımlarını da katarak bir yöntem bilim olarak gittikçe yaygınlaşan Yalın Altı Sigma süreç iyileştirme yöntemleri günümüzde çok dikkat çekici başarılar kaydetmektedir. Bu yöntem biliminin tasarım adımının etkinliğinin daha yüksek olduğu yol haritası Altı Sigma İçin Tasarım olarak adlandırılmaktadır.

Yukarıda da bahsedilen deney tasarımları, Altı Sigma İçin Tasarım yol haritasının ve kanımızca Yalın Altı Sigma yöntemlerinin en önemli adımıdır. Bu deney tasarımlarından ürün formülasyonu ve optimum reçeteler elde etmekte etkin bir şekilde kullanılabilir olanı, karışımlar için deney tasarımı (KDT) olarak adlandırılmaktadır. KDT'ler tepki yüzeyi yöntemlerinin çok özelleşmiş biçimleridir.

Bu çalışmada DT optimizasyonu algoritmaları kullanılarak elde edilen optimum KDT'lerin ürün formülasyonu için kullanılması, teorik ve pratik açıdan, irdelenecektir.

1.2. Çalışmanın Kapsam ve Yöntemi

Çalışma beş kısımdan oluşmaktadır. Bu kısımlar endüstriyel istatistikî uygulamalarının ve bu uygulamalarda DT'lerin kullanıma biçimlerinin irdelendiği giriş bölümüyle başlamaktadır. Yalın Altı Sigma yöntemleri ve bu yöntemlerin ürün ve süreç iyileştirme adımlarında nasıl kullanılacağı 2.bölümde genel hatlarıyla incelenecektir.

Üçüncü bölümde ise, KDT'lerin teorik ve matematik ayrıntıları pratik faydaları göz önüne bulundurularak ve matematiksel ispatlardan mümkün olduğunca kaçınılarak irdelenecektir.

KDT'lerin optimum ürün formülasyonu için kullanımı, dördüncü bölümde, 5 ürün bileşeni ve 3 süreç değişkeni kullanılarak yapılacak uygulama ile analiz edilecektir. Bu uygulamada üç performans göstergesi için, yani üç cevap değişkeninin matematik modelleri elde edilecektir. Ayrıca çalışmanın bu kısmında KDT'lerin istatistikî analizi pratik kullanımı dikkate alınarak uygulama üzerinden anlatılmaya çalışılacaktır. Bu modeller ve istatistikî analizleri, deney tasarımları için geliştirilmiş yazılım(lar) (Design-Expert v.7.1.x) kullanılarak yapılacaktır. Son olarak elde edilen sonuçlar ve KDT'lerin uygulamasında ortaya çıkan sorunlar ve bu sorunların giderilmesinde kullanılabilecek ya da geliştirilecek yöntemler sunulmaya çalışılacaktır.

2. ENDÜSTRİYEL ÜRÜN VE SÜREÇ İYİLEŞTİRMEYE YALIN ALTI SİGMA YAKLAŞIMI

İşletmeler için kârlılık, en önemli amaçlardan birisidir ve yüksek kârlılık, verimli satış stratejileri ve işletmenin tamamında düşük maliyetli süreçlerle ifade edilebilir. Verimli satışlar ise, çoğunlukla yüksek kalite ve makul fiyat dengesini sağlamalıdır. Sonuç olarak, kalite iyileştirmeleri ve maliyet azaltma çalışmaları, işletmelerin en önemli yükümlülükleri arasındadır. Bu amaçlar göz önüne alındığında, *Yalın Altı Sigma* (YAS) yöntemleri (Lean Six Sigma Methodologies), kalite iyileştirmeleri ve maliyet azaltma çalışmalarının etkin ve verimli olarak yürütülmesinde, iş dünyasında en çok kabul gören işletme mükemmelliği girişimidir.

2.1 Yalın Altı Sigma Yöntemleri

Genel anlamıyla YAS yöntemleri, hataları, israfları ve yeniden işlemleri ortadan kaldırmaya çalışan bir yönetim felsefesidir. Bugüne kadar birçok süreç iyileştirme yöntemi, daha fazla ürün üretmek, yeni pazarlama stratejileri geliştirmek gibi “saldırgan” (offensive) davranışlara odaklanırken; YAS “korumacı” (defensive) davranır. Hâlihazırda yürümekte olan süreçlerin daha iyi işlemlerini sağlamayı amaçlar, daha az hata üreten süreçler ve daha yüksek kalite/maliyet oranlı ürünler elde edilmesini sağlamaya odaklanır.

“Altı Sigma” ismi istatistik terminolojisinden gelmektedir. Sigma (σ) standart sapma demektir. Endüstrideki birçok sürecin veri dağılımının normal ya da normalleştirilebilir olduğu kabul edilmektedir. Normal dağılımda ortalamanın ± 3 sigma aralığına düşme olasılığı: 0,9999966 dır. Bir üretim sürecinde *Altı Sigma standardı*, sürecin hata oranının bir milyon adet parçada 3,4 adet hata ya da hatalı parça olacağını gösterir. Daha açıkça ifade etmek gerekirse, YAS standardı, olabildiğince yüksek bir kararlılık ve yeterince düşük bir değişkenlik seviyesini gösterir. İstatistikî terimlerle ifade edilirse YAS’ın amacı, değişkenliğin (variance (σ^2)) azaltılması ve dolayısıyla küçük standart sapma değerlerinin elde edilmesini sağlamaktır.

Yalın Altı Sigma yöntemleri, işletmelerin iş yapma kabiliyetlerini arttıracak *istatistikî ve süreç yönetimi araçları* bütünü olarak ta görülebilir. YAS’ın iyileştirme çalışmaları için temel iş yapma birimi “*süreç*” tir. Bu süreç bir ürün olabildiği gibi, şirketin dış müşterilerine

sağladığı bir servis süreci ya da faturalama, üretim süreci gibi şirket içinde bir “iç süreç”te olabilir. YAS için süreç iyileştirmenin amacı, performans iyileştirmelerini sağlarken; performans değişkenliklerini (variance) azaltmaktır. Bu amaç gerçekleştirildiğinde ise, ürün kalitesinde artış, çalışan motivasyonu, karlılık artışı ve hatalı ürün sayısında azalma, dolayısıyla, sağlanmış olacaktır. Sonuçta ise bu iyileştirmeler, işletme mükemmelliğine giden yolu açacaktır. Montgomery’e (1999) göre 30 yılı aşkın süredir dünya genelinde endüstriler kalite, üretim verimliliği ve kalite yönetimi çalışmalarına giderek artan bir önem vermektedir. Altı Sigma ve onun değişik (gelişmiş) bir biçimi olan YAS bu çabaların en önemli yürütücüsü durumundadır.

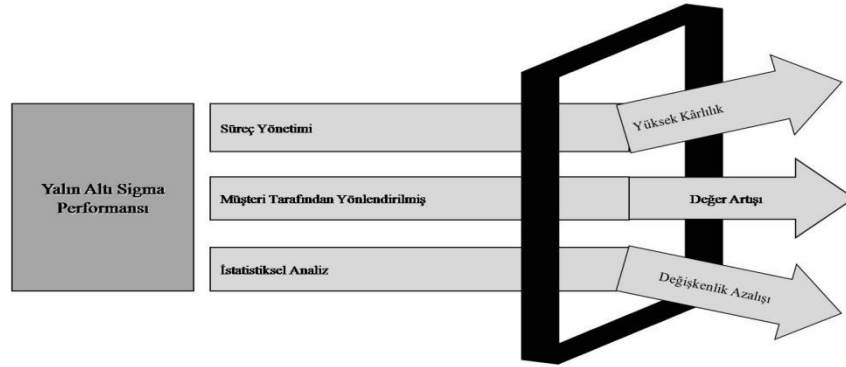
Günümüzde YAS endüstride çok hızlı yayılan süreç iyileştirme ve iş yönetimi sistemidir. Amerika ve Uzakdoğu ülkelerinde 1990’lı yıllardan beri sağladığı yüksek kazançlardan dolayı dünya çapındaki büyük işletmelerin çoğu tarafından uygulanmaktadır (www.sixsigmaforum.com). Altı Sigma, 20. Yüzyılın ilk yarısında başlayan yürüyen montaj hattı, istatistikî kalite kontrolü ve II. Dünya Savaşı zamanlarında bunları takip eden yöneylem araştırmaları, sıfır hatalar, toplam kalite yönetimi, montaj için tasarım (design for assembly), eşzamanlı mühendislik (concurrent engineering) ve iş yapma süreçlerinin yeniden yapılandırılması (business process re-engineering) gibi çalışmaların gelişen doğal sonucu olarak ortaya çıkmıştır. Bu bağlamda bakıldığında 50 yılı aşan tecrübesiyle Altı Sigma Yöntemleri, modern İSK, kalite iyileştirmeleri ve güvenilirlik çalışmaları için endüstriyel ve oldukça işlevsel bir çerçeve sunmaktadır.

Altı Sigma, 1980’li yılların ortalarında **Motorola** şirketinin, uzak doğuda 50’li yıllardan başlayarak gelişmekte olan iyileştirme yöntemlerini (felsefelerini) (Kaizen, 5S, Toyota Üretim Sistemleri vb.) uygulamasıyla ABD’de; daha sonraki yıllarda da Avrupa’da sistemsel süreç iyileştirme yöntemleri bütünlüğü olarak yayılmıştır. Özel olarak bakıldığında, Amerika’daki ilk uygulama 1987 yılında **Motorola** şirketinin yarı iletken ürünler üreten bir fabrikasında başlamıştır. En büyük başarısını ise, **General Electric**’in CEO’su Jack Welch tarafından 1995 yılında ana iş yapma stratejisi olarak kabul edilmesinden sonra, burada, yaşamıştır. Türkiye’de de önde gelen birçok kurum tarafından uygulanmaktadır. Bunların başında **Kale Grubu** şirketleri, **Arçelik**, **TEI (Turkish Engine Industry)**, **Borusan** vb. gelmektedir.

YAS yöntemlerinde odaklanma alanı açısından üç farklı kuşaktan söz edilebilir. (Steinberg, 2008) Bunların ilki (1. kuşak) hataları yok etme ve temel değişkenlik azaltma çalışmalarına odaklanır. 2. kuşakta birincideki odak alanlarını, şirketin karlılığını arttıracak ve tasarruf sağlayacak projelerle birleştirme üzerine odaklanılmıştır. Bu alandaki çalışmalarda **General**

Electric'in başarı öyküsü en dikkat çekici olanıdır. 3. kuşakta ise işletmenin tamamında artı değer üretimi gibi ilave bir odak alanı oluşmuştur. Ayrıca bu kuşakta, YAS'ın üretim ve servis süreçlerinde uygulanan değişkenlik azaltma ve süreç iyileştirme felsefelerinin, tasarım sürecine uygulanması sonucu yeni ürünler (ya da hizmetler/hizmet süreçleri) oluşturulmasını sağlayan Altı Sigma için Tasarım (ASİT) (Design for Six Sigma - DFSS) yaklaşımı teşekkül etmiştir.

Diğer süreç ve kalite iyileştirme yöntemleriyle kıyaslandığında YAS'ın en önemli farkı, sadece ürün kalitesini arttıracak kilit süreç adımlarıyla değil; iş yapma süreçlerinin bütün adımlarındaki darboğazların ortadan kaldırılması veya kilit adımların iyileştirilmesiyle ilgilenmesidir. Örneğin YAS, iyi tasarlanmış, yüksek güvenilirlikte ve müşterinin ödeme sistemiyle uyumlu maliyet kontrol sistematığının geliştirilmesi ve etkin proje yönetimini sağlamak amacıyla kullanılabilir. Bu örnekten anlaşıldığı üzere YAS, sürecin bütünü göz önüne alınarak ve kalıcı iyileştirme için gerekli olan tüm aşamalar göz önünde tutularak uygulanır. YAS projeleri takım çalışmalarıdır ve bu tür çalışmalar ancak şirketin/kurumun bütününde ortak ya da çapraz-fonksiyonel (cross-functional) gruplarla başarılabılır. Yalın altı sigma süreç performansı Şekil 1.1'deki gibi bir performans ilerleme modeli ile gösterilebilir:



Şekil 2. 1 Yalın altı sigma performans ilerleme modeli

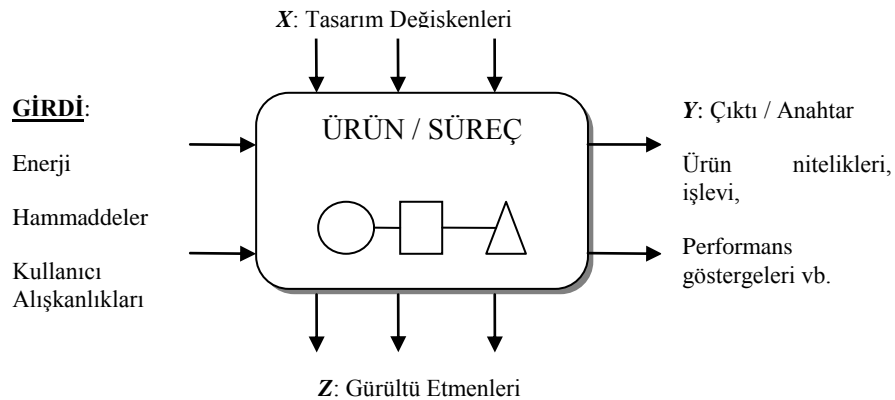
Bu gösterimden de anlaşıldığı üzere eğer süreçler YAS yöntemleri ile yönetilirse yüksek kârlılık elde edilir. Müşteri tarafından yönlendirilen ürün ya da hizmet kalite beklentisi, işletme kültürüne ve “know-how” una katkıda bulunur, yani değer artışı sağlar. Diğer taraftan,

istatistikî yöntemlerin uygulanması ise, tüm süreçlerde değişkenliğin azaltılmasını ve dolayısıyla çok daha az hata üreten ürün ve süreçlerle çalışılmasını sağlar.

YAS proje çalışmaları bir şampiyon ve uzman karakuşak (master blackbelt) koordinatörlüğünde yürütülür. Projelerin liderliğini ise, projenin finansal getirilerine göre karakuşak ya da yeşilkuşak adı verilen belirli istatistiksel araçları uygulamasını bilen, sertifikalı kişiler yapmaktadır. Karakuşak, yeşilkuşak ve şampiyon gibi adlandırmalar bu yöntemlerin ilk olarak Uzakdoğu ülkelerinde (Japonya, G. Kore) başlamasından dolayı verilmiştir. Sarı, Yeşil, Siyah (Kara) renk sıralamasına göre istatistikî bilgi düzeyi ve YAS araçlarını kullanma etkinliği artmaktadır. Tipik bir karakuşak yetiştirme ve sertifikasyon eğitim içeriği Çizelge 1. 1'deki gibidir.

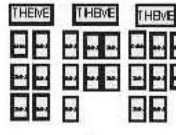
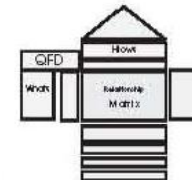

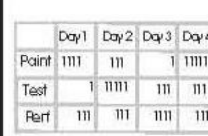
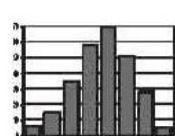
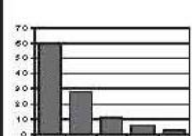
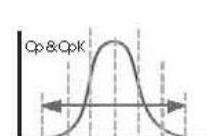
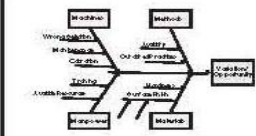
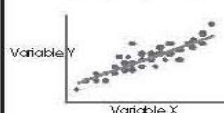
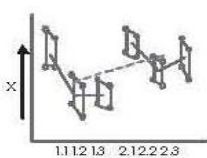
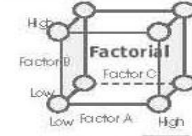
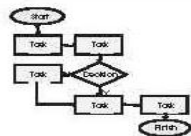
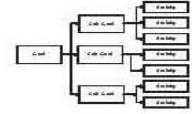
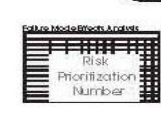

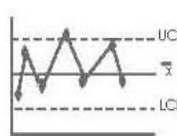

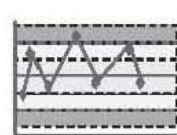
Matematiksel modelleme açısından bakıldığında bütün (en) iyileştirme yöntemleri, çıktılarda (süreç çıktıları) anlamlı (iyileştirilmiş) sonuçlar elde etmek için, anahtar süreç değişkenleri olarak bilinen girdilerin etkinliğinin anlaşılması ve kontrolünü esas alan fonksiyonel çalışmalardır. Yani, bağımsız değişkenlerin bağımlı değişkenler üzerindeki etkisini anlamamıza yarayan matematik modellerin kurulması ve bu modellerin irdelenmesi esas amaçtır.

Deney Tasarımı terimleri ile söylenecek olursa, girdiler ya da x 'ler genelde bağımsız değişkenler (faktörler) olarak; çıktılar ya da y 'ler ise, genelde, tepkiler/cevaplar (bağımlı değişkenler) olarak bilinirler. Hemen tüm YAS çalışmalarında, süreç y 'lerinin x 'lerle ilişkisi Şekil 1. 2'deki gibi bir fonksiyon ($y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$) ile tanımlanır.



Şekil 2. 2 Deney tasarımları için süreç diyagramı genel gösterimi.

Çizelge 2. 1 Yalın altı sigma karakuşak geliştirme eğitim içeriği (Taghizadegan, 2006 - yeniden üretildi)

	Amaç		Araç ve Teknikler
TANIMLAMA	İşin boyutlarını belirlemek Müşteri için kritik noktaları seçmek Süreçler Projeleri tanımlama Uygulama planını geliştirme	Yakınlık(lar) Çizeneği (Affinity Diagram) / İç İlişki Çizeneği Kalite Fonksiyonu Yayılımı (QFD) SIPOC Süreç Haritası Proje Beyanamesi	  
ÖLÇÜM	Kilit süreç ölçümlerini geliştirmek Veri toplama ve analizi yapmak Etkili parametreleri belirlemek Süreç yeterliliği tahmini yapmak Ölçüm sistemleri analizi	Veri Toplama Planı Veri Çizelgeleri Pareto Çizelgesi Gage R&R / Histogram Süreç Yeterliliği	   
ANALİZ	Sebep-Sonuç ilişkilerini anlamak Çoklu-Değişken analizleri gerçekleştirmek Değişkenliği olan bileşenleri belirlemek Korelasyonları kanıtlamak	Sebep-Sonuç Çizeneği Çoklu-Değişken Çizeneği Saçılım Çizeneği (Scatter Plot Diagram)	  
İYİLEŞTİRME	Çözümleri geliştirmek ve değerlendirmek Değişkenlik azaltılmama uygulamak Süreçleri standartlaştırmak Risk etmenlerini incelemek	Deney Tasarımları Yayımlı Akış Çizelgeleri Ağaç Diyagramı FMEA	   
KONTROL	Süreç kontrolünü etkinleştirmek (IPK) Anahtar Değişkenler için IPK uygulamak Değişkenlikler Hatasız süreçler oluşturmak Sonuçları irdelemek	Süreç Kontrol Planı Kontrol/Önkontrol Çizelgeleri Poka-Yoke Yeni Pareto Analizi Yeni Süreç Yeterliliği Analizi	   

Buradan da anlaşılacağı üzere YAS'ın yapmaya çalıştığı şey aslında bir tür deney tasarımıdır. Yukarıda da ifade edildiği üzere, DT'ler girdi-çıkı ilişkilerini zamandan ve paradan tasarruf ederek keşfetmeye yarayan en etkin yöntemlerdir. DT'ler Altı Sigma yaklaşımının bütünleşik bir parçasıdır. Özellikle YAS yaklaşımlarının iyileştirme adımlarında bu yöntemlerden çok fazla yararlanır. Bazı yazarlara göre ise, DT'ler YAS araç kutusundaki en önemli istatistikî araçtır (Steinberg, 2008; Montgomery, 1999). Çünkü bu yöntemler, bir sistemde hangi değişkenlerin kalite için kritik olan özelliklerden sorumlu olduğunun belirlenmesinde ve bu özelliklerin geliştirilmesi veya en iyileştirmesinde neler yapılması gerektiğini, sisteme aktif olarak müdahale etmek ve gerekli kontrolleri oluşturulan matematik modeller yardımıyla sağlayan tek yöntemler bütünüdür.

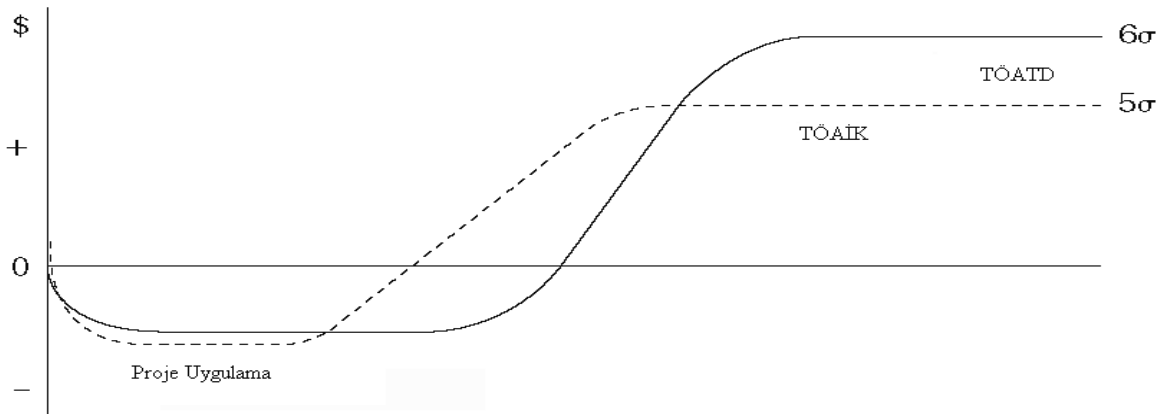
2.1.1 TÖAİK ve ASİT Adımlarının Farkları ve Uygulanma Alanları

YAS projelerinin yürütülmesinde genelde iki yaklaşım uygulanmaktadır. Bunlar kısa isimleriyle TÖAİK (DMAIC) ve ASİT (DFSS)'tir. Birinci yaklaşım en çok bilinen ve genellikle, üründe, üretim süreci ya da hizmet sürecinde çözümü bilinmeyen bir problem varsa uygulanır ve sırasıyla şu adımlardan oluşmaktadır: Tanımla, Ölç, Analiz et, İyileştir ve Kontrol et (Define, Measure, Analyze, Improve and Control). Öncekine göre daha güncel olan ASİT yöntemi ise, yeni ürün ve/veya sürecin “tasarımını” konu alır. ASİT, geliştirme sürecinin kapsamını müşteri ihtiyaçlarının belirlenmesinden nihai ürünün ya da hizmetin çıkarılması adımı kadar genişletmiştir ve temel amacı müşteri açısından hatasız, “yeni ürün, süreç ya da hizmet süreci” geliştirmektir.

Üretim süreçlerindeki imalat kısmı, sadece kalite kavramını tasarım sürecinden uzaklaştırır. Yani, tasarımın ana unsuru olan “kaliteli” kavramı, ürünün imalatı esnasında artık tasarımın ana unsuru olmaktan çıkıp imalatta gerçekleştirilmesi ve sürdürülmesi gereken bir nitelik olur. Dolayısıyla, ürün tasarımlarını mümkün olduğunca hatasız gerçekleştirmek bir zorunluluktur. ASİT yaklaşımı “bir şeyi tek seferde doğru yapma” kavramını öncelediğinden Chowdhury'e göre (2003) 21 yy.'ın yönetim girişimi olacaktır.

Bazı uluslar arası altı sigma danışmanlık şirketleri ASİT için Tanımla, Tasarla, En iyileştir, Doğrula - TTED (IDOV) veya Tasarla, Ölç, Analiz et, Tasarla, Doğrula – TÖATD (DMDV) adımlarından oluşan farklı yol haritaları (yöntemler) da önermektedirler. Bu yol haritalarının en temelde birbirinden farkları yoktur. Farklılık sadece adım içeriklerinin farklılığıyla ilgilidir.

Esas itibariyle hem TÖAİK, hem de ASİT yalın altı sigma süreç adımlarıdır. Diğer taraftan, ASİT yaklaşımı TÖAİK'in iyileştirme sürecine karşılık gelse de, bu adımı çok ayrıntılı olarak işler ve ürün ya da süreçteki hataları tasarım aşamasında (yani ürün üretilirken ya da üretildikten sonra değil) tespit edip bunların kalite kontrol hatta üretim sürecinde tespit edilmesinin önüne geçer. ASİT yaklaşımında TÖAİK'in analiz ve ölçüm adımları eksiktir. Çünkü nihai ürün ya da süreçte ortaya çıkacak değişkenlikler ve problemler baştan önlenmiştir ve böylelikle “başlangıçta doğrusunu yapmak” yaklaşımıyla ürün/süreç performansının başlangıçtaki ölçümü ve analizi için harcanan zamanı ortadan kaldırmıştır. TÖAİK'te ise var olan tasarımın iyileştirilmesi esastır. Şekil 1.3'te TÖAİK ile TÖATD yaklaşımlarının projenin ilk aşamalarında ve sonrasında maliyet, getiri ve ulaşılan sigma seviyeleri gösterilmiştir. Görüldüğü gibi ancak ASİT yaklaşımı ile 6σ 'lık süreç mükemmelliği seviyesine ulaşılmaktadır ve dolayısıyla iyileştirme getirisindeki artış – uygulama safhasının uzunluğuna rağmen– hem daha hızlı, hem de daha yüksektir.



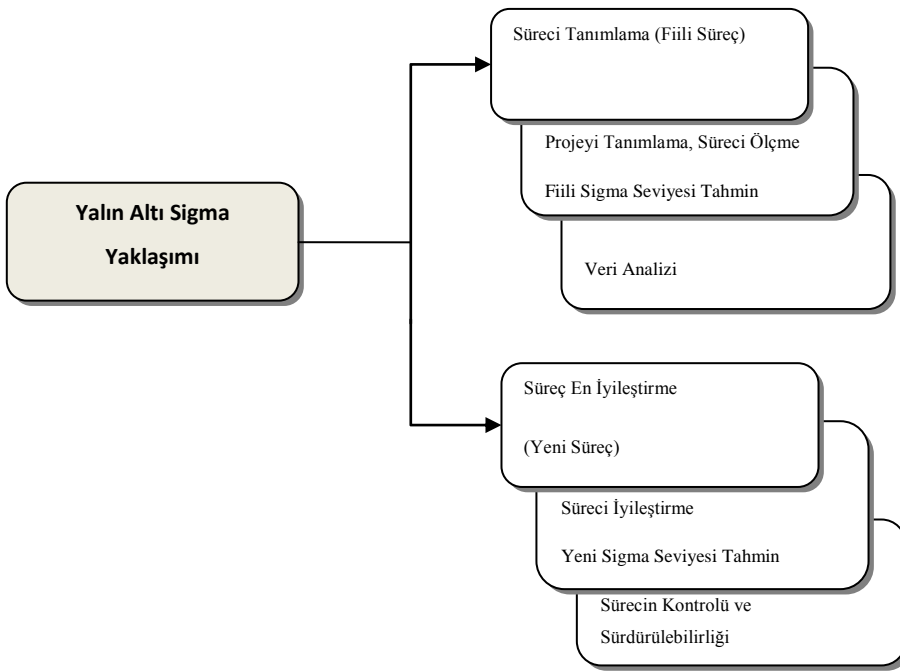
Şekil 2.3 TÖAİK ve TÖATD yaklaşımları için maliyet, sigma performansı ilişkisi (Chowdhury, 2003)

Birçok işletme bütçelerinin sadece %5'ini tasarım süreçlerine (Ar-Ge dâhil) ayırırlar. Fakat tasarımın kendisi, çoğunlukla, ürün maliyetinin %70'ine tekabül eder. Ayrıca, kalite problemlerinin %80'i farkında olmadan ürün tasarımı esnasında ürün içine sızar. Bu sızma işleminin tasarım esnasında farkında olunması ancak ASİT yaklaşımının uygulanması ile mümkündür (Chowdhury, 2003).

ASİT yaklaşımında “yenilik” (innovation) kavramı geleneksel algılamadakinden çok daha büyük bir yer işgal etmektedir. ASİT yenilikleri yeni ürünler, yeni süreçler ve yeni hizmet

araçlarını içerebilir ve böylelikle daha *yenilikçi*, yüksek kaliteli, bilinen diğer tüm yöntemlerden daha düşük maliyetli tasarımlar üretmemizi sağlar (Chowdhury, 2003; Yang ve El-Haik, 2003).

Şekil 1.4'te gösterilen TÖAİK süreci, altı sigma spesifikasyonlarının dışında kalan herhangi bir sorunlu süreçte sorunu tanımlama, analiz etmeye, ölçüm sistemi oturtma veya var olanı iyileştirme, sonrasında oluşan çıktıyı(ları) analiz etme, analiz sonucu gerekli iyileştirme adımlarını yürürlüğe sokma ve nihayetinde bu iyileştirmelerin etkinliğini kontrol edecek bir kontrol sistemi oluşturulması adımlarından oluşmaktadır. YAS projelerinde bu adımlar sırasıyla takip edilmekle birlikte her adımın aynı etkinlikle uygulanması şart değildir. ASİT süreci ise, tarafımızca, Tasarımı başlat, Ölçüm sistemi oluştur, gerekli Analizleri ve geribildirimleri irdele, tekrar Tasarla (en iyileştir) ve piyasa koşullarında tasarımı Doğrula (TÖATD) şeklinde uygulanmaktadır.



Şekil 2. 4 Yalın altı sigma TÖAİK model seviyelerinin (adımlarının) gösterimi (Taghizadegan, 2006 – yeniden üretildi)

Eşzamanlı mühendislik (concurrent engineering) aynı anda hem ürünü hem de o ürünü üretmeyi sağlayan sürecin tasarımıyla ilgilidir. ASİT yaklaşımı normalde tasarım optimizasyonu için DT yöntemlerini kullanır. Fakat standart DT yöntemleri iş yapma süreçlerinin optimizasyonunda en iyi yöntem olmasına rağmen, ürünlerin fonksiyonel

performanslarının tasarımında ve optimizasyonunda yeterince etkili değildir. Bu eksiklik standart DT'lere dayanıklı istatistik (robust statistics) yöntemlerinin uygulanması ile ortadan kaldırılabılır. Günümüzde –henüz dayanıklı tasarım yöntemlerini deney tasarımlarına uygulayan bir yazılım mevcut olmamasına rağmen– dayanıklı istatistik yöntemler, teorik ya da küçük boyutlu DT 'ler, TYY yöntemleri ve karışımlar (ürün formülasyonları) için deney tasarımlarına da (KTD) uygulanmaktadır (Yang ve El-Haik, 2003; Smith 2005).

2.2 Endüstriyel Deney Tasarımı Yöntemleri – Genel Açıklamalar

J. Bernal'in yaptığı tahminlere göre dünyada bilimsel (ve dâhi endüstriyel) araştırmalar oldukça kaotik bir şekilde yapılmakta ve bu çalışmaların kullanılabilirlik/yararlılık katsayısı (coefficient of usability) %2 civarında olmaktadır (Lazic', 2004). Bu tür araştırmaların etkinliğini arttırmak için, dolayısıyla, klasik deneysel çalışmalar yerine tamamen yeni yöntem(ler)in ortaya çıkarılması gerekmektedir.

Bu alandaki önemli yeniliklerden birisi istatistikî-matematik yöntemleri kullanmaktır. Başka bir ifadeyle, deney tasarımlarını kullanmaktır. Tanımı itibariyle DT'ler, sebep-sonuç ilişkilerini saptamamıza yarayan planlanmış yaklaşımlar bütünüdür. Saptamalar matematik ve istatistikî analizler sonucunda elde edildiği için de tekrarlanması ve/veya kanıtlanması mümkün olan yaklaşımlardır.

Birçok bilimsel deney çalışması üç aşamadan oluşur: deneyin planlanması/tasarlanması, denemelerin gerçekleştirilmesi ve toplanan verinin analiz edilip yorumlanması. Planlama aşaması istatistikî yöntemleri kullanarak deney tasarımını gerektirir. Deney tasarımının sağlıklı olabilmesi için gerçekleştirme aşaması rastsallaştırma planı ve mümkün olan bloklama adımlarını gerektirir. Yorumlama aşaması ise, istatistikî veri analizi yöntemlerine gereksinim duyar. Sonuç olarak bu üç adım birlikte “*deney tasarım/planlama süreci*” ni oluşturur. Her ne kadar burada vurgu “tasarım” kavramı (adımı) üzerine olsa da esas olarak bu tür süreçler, planlama, gerçekleştirme ve deneyin istatistikî prensipler kullanılarak analizinden oluşmaktadır.

Bir deneyin planlanması aşamasında hangi faktörlerin değiş(tiril)eceğine ve hangi cevap ya da cevapların ölçüleceğine karar vermek başlangıç koşulu olarak görülmelidir. Bundan dolayı tasarımcı hangi cevapların ölçüleceğini/gözleneceğini ve hangi faktörlerin bu cevaplar

üzerinde fonksiyonel etkisi olduğu hususunda varsayımlarda bulunur. Bu durumu analitik olarak şu şekilde ifade edebiliriz:

$$\text{Cevap(lar)} = f(\text{faktör seviyeleri}) \quad (2.1)$$

Burada faktör seviyeleri “*faktör ya da faktör seviyelerinin herhangi bir matematik fonksiyonu*” şeklinde okunmalıdır.

Deney tasarımları da, diğer herhangi bir bilim dalı gibi, kendine özgü yöntem, kavram, terminoloji ve araştırma konusuna sahiptir. Atkinson vd. (2007), yazdıkları kitabın önsözünde DT’ler için: “*İyi tasarlanmış bir deney, kâinat’ın bilgisini edinmek için etkili bir yoldur*” demektedirler. İsminden de anlaşılacağı üzere bu alan, deney/deneme yöntemlerinin tasarlanması ile ilgilenmektedir. Ürün/süreç araştırma ve geliştirilmesinde oldukça fazla deneysel çalışma yapılmaktadır. Bu çalışmaların deneysel kısımları, kavram bütünlüğü itibarıyla bakıldığında, fiziksel veya modelleme temelli olabilirler. Yani, deneysel çalışmalar doğrudan ilgili konu üzerinden yürütülebileceği gibi, model üzerinden de yürütülebilirler. Model bazen kendi matematiksel doğası ve genelde kapsamı (boyutları) gereği ilgili konusundan farklı olabilir. Eğer model ilgili olduğu konuyu yeterince sağlıklı betimleyebiliyorsa, deneysel çalışma doğrudan matematiksel model üzerinden de gerçekleştirilebilir. Günümüzde bilişim teknolojilerindeki gelişmeler, birçok fiziksel sürecin matematiksel modelleme çalışmalarını, artık, mümkün kılmaktadır.

DT çalışmaları için şu üç nitelik esastır. Bunlar olmadan DT’nin, klasik deneysel yaklaşımlardan hiçbir farkı olmayacaktır:

- Toplam deneme sayısını en iyileştirmek ya da azaltmak;
- Deneysel çalışmalarda bütün etmenleri/değişkenleri eş zamanlı olarak değiştirebilmek;
- Tasarımın her aşamasından sonra güvenli çözümler elde etmeyi sağlayacak belirgin (net) bir strateji sunabilmek.

Eğer bir deneysel çalışma sağlıklı bir şekilde planlanmış ya da tasarlanmışsa, söz konusu sorunla ilgili veriler de en etkili şekilde derlenebilecektir. Lazic’e (2004) göre deney tasarımı, verilerin analizi sonucu anında “doğru” istatistikî çıkarımlara (inferences) ulaştıracak şekilde elde edileceğini, baştan garanti eden adımlar dizisidir. Dolayısıyla, bir tasarım seçilmeden önce, aşağıdaki soruların cevaplandırılmış olması şarttır:

- Değişken ve cevap etkileri nasıl ölçülecektir?
- Kaç adet değişken cevap(lar) üzerinde etkili olacaktır?
- Kaç değişken eş zamanlı olarak hesaba katılacaktır?

- Kaç defa deney tekrarı gerekli olacaktır?
- Hangi tip veri analizi yöntemi (regresyon, ANOVA, ANOM vb.) gereklidir?
- Etkilerde hangi seviyedeki farklılık (level of difference in effects) anlamlı kabul edilecektir?

Diğer taraftan, DT'nin mümkün olduğunca basit olması, sorunun gereksinimlerine de yeterince uygun olması gerekmektedir. Bu nedenle DT, klasik görgül/deneysel (empirical) araştırma yöntemlerinden çok farklı, yeni bir araştırma yaklaşımı gerektirmektedir. Geleneksel araştırma yaklaşımları hatırı sayılır malzeme israfı gerektirebilen ve her bir faktörün etkisini gösterebilmek için genellikle çok fazla süre isteyen yaklaşımlardır. Bu tür yaklaşımlarda deney, her seferinde tek bir değişkenin etkisini analiz ederken, diğerlerinin hepsinin sabit tutulmasını gerektirir. Bu durum *ceteris paribus* ilkesi olarak adlandırılır.

Geleneksel araştırma yöntemlerinin başka bir zorluğu da eğer bir matematiksel model elde edilebilmiş ise, bu modelin eldeki deneysel veriye tam uymamasıdır (uyum eksikliği - lack-of-fit). Çünkü bu tür “her seferinde bir değişken” çalışmalarında, deneysel hata olasılığı hep göz ardı edilmektedir. Sonuç olarak, eş zamanlı analizlerin mümkün olmaması ve büyük boyutlu denemelerin oluşturacağı zorluklar, klasik deney tasarımlarının sonuçlarını irdelemeyi çok zorlaştırmaktadır.

Klasik deney tasarımı olarak adlandırılabilen bu yöntemlerde ise, deneme sayısı, özellikle, çok büyüktür ve değişkenler 2 veya 3'ten fazla farklı değer alamazlar. Değişkenlik miktarı (level of variation) çok düşüktür. Örnek olarak, eğer bir çalışmada etkili olduğu bilinen 4 değişken varsa ve etkisi incelenecek bu dört değişken de 4 farklı seviyede değer alacaksa, bu araştırmanın tamamlanabilmesi için $4^3 = 64$ adet farklı denemeye ihtiyaç vardır. Burada, deneysel hatayı önlemek adına herhangi bir denemenin tekrarı da yoktur. Bu yöntem günümüze kadar endüstride, reçete çalışmalarında ya da bilimsel araştırmalarda mühendisler ve bilim adamları tarafından en yaygın olarak kullanılan yöntemdir.

Yukarıdaki deneme sayısından da görülebileceği gibi bu çalışmanın eyleme geçirilmesi çok zor ve uzun sürer. Bu tür durumlarda, genellikle, ya değişken seviyesi azaltılır, ya değişken etkili de olsa elenir; ya da, daha sıklıkla, bütün denemeler gerçekleştirilmeyip tecrübeye dayalı kestirimler yapılır. Bu durum ise, deney uzayını (deneyin gerektirdiği boyutları) tam göremememize neden olur. Diğer taraftan, değişkenler arası olası etkileşimler ve bu etkileşimlerin deney uzayında çıktı üzerinde oluşturacağı etkinin bu tür yöntemlerle tespiti mümkün değildir. Dahası, her üç durumda da deney tasarımlarından elde edilecek sonuçların güvenilirliği oldukça düşük olacaktır. Oysa yukarıdaki örnek çalışma ikinci dereceden

döndürülebilir (rotatable) deney tasarımı yöntemi kullanılarak yapılıyor olsaydı – deneyin tam bir tekrarı dâhil- 16 denemeyle bitirilebilecekti (Lazic', 2004).

Yapılan deneysel çalışmalardan istatistikî olarak anlamlı sonuçlar elde edebilmek için DT yöntemlerinin güçlü istatistikî analiz yöntemleriyle desteklenmesi ya da bütünleştirilmesi kaçınılmazdır. Dahası, tecrübeyle anlaşılmıştır ki endüstriyel bir DT'nin başarısı, çok sağlam bir planlamaya, uygun DT yönteminin seçimine, verilerin istatistiksel analizine ve takım çalışması kabiliyetine bağlıdır.

D. C. Montgomery'e göre (2004) istatistiksel deney tasarımlarında dört devirden söz edilebilir. Bunlardan ilki olan ziraî devir, 1920'ler ve 30'ların başında Sir R. A. Fisher'in öncülük ettiği çalışmalarla başlamıştır. Fisher bu çalışmalarıyla DT yöntembilimine rastsallaştırma (randomization), tekrar (replication) ve bloklama (blocking) araçlarını katmış ve istatistiksel düşünme biçimlerini sistematik olarak DT çalışmalarına kazandırmıştır (Montgomery, 2004). Bunlardan rastsallaştırma istatistikî deney tasarımının köşe taşlarındandır. Fisher, ilk çalışmalarında ekinlere farklı gübre çeşitlerinin farklı tarlalardaki etkisini incelemiştir. Ekinlerin son durumları (verim, kalite) üzerinde gübrenin yanı sıra diğer bazı etmenlerin de (toprak tipi, toprağın nem miktarı vb.) etkili olduğunu tespit etmiştir (Antony, 2003). Bu çalışmalardan sonra DT biyolojik ve zirai alanlarda oldukça fazla uygulanma şansı bulmuştur.

İkinci devir olan endüstriyel alanda DT çalışmaları ise, 1930'lu yıllarda başlamıştır. Endüstriyel devir olarak adlandırılan bu devir, cevap (tepki) yüzeyi yönteminin (TYY) Box ve Wilson (1951) tarafından geliştirilmesi ile ivmelenmiştir. Birçok endüstriyel deney çalışmasının temelde zirai DT uygulamalarından farklı olduğunu tespit eden bu iki yazar, farklılığı şu iki başlık altında açıklamışlardır:

- Cevap değişkeni çok hızlı bir şekilde izlenebilir ve
- Deney tasarımcısı birkaç küçük denemeyle, daha sağlam kurulmuş ayrıntılı tasarımları için gerekli olan birçok önemli bilgileri elde edebilir.

Takip eden yıllarda, TYT ve diğer deney tasarımı yöntemleri (bloklamalı tasarımlar, faktöriyel tasarımlar, kesirli-faktöriyel tasarımlar ve tarama (screening) tasarımları) kimya ve süreç endüstrilerine yayılmaya başlamıştır. Bunun sonucunda, özellikle TYT, araştırma ve geliştirme süreçlerinde daha etkin kullanılmaya başlanmıştır. TYT konularında yapılan çalışmalarda en büyük pay sahibi ise, hiç şüphesiz George E. P. Box'tır (Box ve Draper, 1987, 2007). Box bu alanda ve birçok ilgili istatistik alanlarında yüzlerce yayın yapmış ve bu alanın teorik alt yapısının oluşturulmasında öncülük yapmıştır.

Deney tasarımı çalışmalarının üretim süreçlerinde ve işletmelerde kullanımı henüz yeterince yaygın değildir (Montgomery, 1999, 2004). Bunun sebepleri arasından en önemlileri, mühendislerin istatistik konularında yeterince eğitilmemiş olması ve bilişim teknolojilerinde bu alanda yeterince gelişmenin sağlanamamış olmasıdır (Montgomery, 1999).

1970’li yılların sonlarında özellikle batılı endüstrilerin kalite iyileştirmelerine artan ilgisi istatistikî deney tasarımlarının üçüncü devri olarak kabul edilebilir (Montgomery, 1999, 2004). Genichi Taguchi’nin çalışmalarının, deney tasarımlarının kullanımı, bu konulara olan endüstriyel ilgi ve yeni gelişmeler üzerinde çok önemli etkisi olmuştur (Nair, 1992). Taguchi, güvenli değişken tasarımı (robust parameter design) olarak adlandırdığı DT yöntemini kullanarak şunları savunmuştur:

- Süreci, kontrol edilmesi zor olan çevresel ve diğer faktörlere karşı duyarsızlaştırmak,
- Bileşenlerden (components) kaynaklanan değişkenliklere karşı ürünleri duyarsızlaştırmak ve
- Ortalamaları istenen bir değere yaklaştırmaya zorlarken, aynı zamanda bu değerlerin sağında ve solunda çok az bir değişkenliği sağlayacak, süreç değişkenleri oluşturmak.

G. Taguchi bu tür sorunları çözmek için yeni bir takım istatistik yöntemlerin yanı sıra, yüksek seviyeli kesirli-faktöriyel tasarımlar ve dikey matris dizileri kullanımını (orthogonal arrays) önermiştir. Önerilen bu yeni yöntemler zamanında çok fazla tartışma ve anlaşmazlıklara yol açmıştır. Bu durumun esas sebebi, yöntemlerin ilk olarak batılı endüstrilerce irdelenmesi ve alt yapısında yatan istatistikî yöntemlerin hakkıyla anlaşılabilmesi olmuştur. 80’li yılların sonuna doğru bu yöntemler daha sağlıklı irdelenmiş ve kullanımında ortaya çıkan sorunlar daha iyi anlaşılmasına başlanmıştır (Nair, 1992)

Taguchi’nin önerdiği yöntemler üzerindeki tartışmaların iki önemli çıktısı olmuştur: İlk olarak, tasarlanmış deneyler otomotiv, havacılık ve elektronik sanayileri gibi farklı birçok endüstri kolunda daha fazla uygulanma imkânı bulmuştur. Diğer taraftan bu çalışmalar, dördüncü DT devrini de başlatmıştır. Bu çağ, Taguchi DT yöntemlerinin iyileştirilmesini, yeni en iyileştirilmiş (optimum) deney tasarımı yöntemlerinin geliştirilmesini ve endüstrinin farklı alanlarındaki sorunları çözmek için değişik deney tasarımı yöntemlerinin keşfedilmesini sağlamıştır.

Fisher tarafından DT yöntembilimine kazandırılan, rastsallaştırma, bloklama ve tekrar prensipleri endüstriyel bir DT çalışmasının etkinliğini arttırmak için kullanılabilir (Antony, 2003). Bu prensipler deneysel sistematik-hataları (bias) azaltmak ve hatta ortadan kaldırmak için kullanılabilirler (Lewis, vd.,1999). Açıkçası, bu tür büyük deneysel sistematik-hatalar

hatalı optimum ayarlamalara (optimal settings) veya, bazı durumlarda, etkili deęişkenlerin etkisinin saklı kalmasına neden olabilirler. Dolayısıyla, hem süreci anlama fırsatı kaybolur hem de süreç iyileştirmenin başlıca öęesi gözden kaçmış olur.

2.2.1 Rastsallaştırma

Endüstride deneysel çalışmalar tasarlanırken, güç dalgalanmaları, çalışan (operator) hataları, sıcaklık dalgalanmaları, nem ve hammadde deęişkenlikleri gibi süreç çıktısının performansını doğrudan etkileyen deęişkenler ya da etmenler mevcuttur. Bu tür deęişkenlerin çoğunlukla kontrol altında tutulması zor veya pahalıdır. Bu tür etmenler deneysel sonuçları olumsuz yönde etkileyebilirler ve dolayısıyla ya etkilerini en aza indirmek ya da deneyden çıkarmak zorunludur. Bu tür deęişkenlikler gürültü olarak adlandırılır. Rastsallaştırma, deney tasarımcılarının deneysel sistematik-hataları azaltmak için güvendikleri yöntemlerden birisidir. Sağlıklı bir şekilde rastsallaştırılan bir deney tasarımı, süreçte var olabilecek gürültü etmenlerinin etkilerini ortalama deęerlere çekmeye yardımcı olabilir. Yani rastsallaştırmakla, bir deęişkenin her seviyesinin gürültü etmenleri tarafından eşit miktarda etkilenmesi sağlanabilir. D. Shainin “*deneme şartlarını rastsallaştırmamak, deney tasarımının istatistikî doğruluęunu azaltır.*” diye belirtmektedir (Antony, 2003).

Dięer taraftan, bazen DT’yi rastsallaştırmak zaman ve para kısıtlarından dolayı mümkün olmayabilir. Mesela, bir kimyasal süreçte sıcaklık deęiştirilmesi çok zor olan bir deęişken olabilir ya da bu deęişkeni bütünüyle rastsallaştırmak neredeyse imkânsız olabilir. Bu tür durumlarda, bu gibi deęişkenlerin seviyelerini deęiştirmek dięerlerine oranla daha az tercih edilir. Bazen de “kısıtlı rastsallaştırma” (restricted randomization) denilen yöntemle başvurulur.

Ayrıca, klasik DT’lerde (1. ve 2. devir) tam rastsallaştırma savunulurken; Taguchi DT yöntemlerinde gürültü etmenleri de deney planına dâhil edildiğinden rastsallaştırma ihtiyacı ortadan kalkmaktadır (Nair, 1992). Aşağıdaki ipuçları endüstriyel DT çalışmalarında rastsallaştırma stratejileri için oldukça kullanışlıdır:

- Faktör seviyelerini deęiştirmenin maddi etkisi nedir?
- DT planına herhangi bir gürültü etmeni dâhil edilmiş midir?
- Denemeler arası kurulum (set-up) süresi ne kadardır?
- Deęişkenlerin kaçını kontrol etmek pahalıdır / zordur?
- Seviyelendirilmesi (deęiştirilmesi) zor olan deęişkenleri nereye ayırmalıyız?

Sonuç olarak, eğer verilerin dağılımı gelişigüze, burada verilerin birbirinden bağımsız dağıldığını varsaymak yeterince güvenlidir. Rastsallaştırma deney verileri arasında korelasyon olasılığını oldukça azaltmaktadır (Montgomery, 2004). Dolayısıyla, istatistikî analizler için gerekli olan “veriler birbirinden bağımsız dağılmaktadır” varsayımı sağlanabilmelidir (Box ve Draper, 1987, 2007).

2.2.2 Tekrarlama

DT’lerde tekrarlama, denemeleri –rastsallaştırmadaki gibi– gelişigüzel bir sırayla yürütme süreci olarak adlandırılabilir (Montgomery, 2004). Tekrarlama, denemelerin tamamını veya bir kısmını birden fazla farklı koşul altında yinelemek (repetition) demektir. Tekrarlamanın iki önemli özelliği vardır. Bunlardan ilki, deneysel hata hakkında tahmin yürütebilmeyi sağlamasıdır. İkincisi ise, deney tasarımcısına değişken etkileri/değişkenler arası etkileşimler (interaction) hakkında net bir tahmin yapabilmeyi sağlamasıdır. Eğer denemeler sadece bir kez gerçekleştirilirse, buradan değişken ya da değişkenler arası etkiler hakkında tatmin edici sonuçlar elde etmek mümkün olmayacaktır. Değişken etkileri ya da değişkenler arası etkileşimler, deneysel hatalar sonucu etkili görünebilirler. Bundan dolayı, eğer yeterli sayıda deney noktası tekrarı yapılırsa, değişken etkileri ya da değişkenler arası etkileşimler hakkında sağlıklı çıkarımlar (inference) yapılabilir.

Bazen tekrarlamalar bir deneyin bitirilmesini çok uzatabilirler. Dahası, eğer deneyde kullanılan malzeme pahalı ise, bu da çalışma maliyetlerini çok arttırabilir. Kurulumda yapılan değişikliklerle birleşen herhangi bir sistematik-hata ya da deney hatası, tekrarlamayla beraber bütün denemelere aynı şekilde etki edecektir. Dolayısıyla, DT’lerde, tekrarlamalar zaman ve maliyet etkisi açısından irdelendikten sonra uygulanabilirler.

Genellikle, tekrarlama (replication) yineleme (repetition) kavramları birçok deney tasarımcısı tarafından eş anlamlı olarak kullanılır. Oysa teknik olarak, bu iki kavram aynı şeyleri ifade etmemektedir. Yinelemede, deneyi yapan kişi sonraki denemeye geçmeden önce bir denemeyi (aynı koşullar altında ve baştan planlandığı gibi) birden fazla defa gerçekleştirebilir. Bu yaklaşımın en önemli yararı deney kurulum maliyetinin az olmasıdır. Fakat bu yaklaşımla, kurulum kaynaklı bir hatanın tespiti mümkün değildir. Tekrarlamada ise, ya deneyin tamamı baştan sona aynı sırayla tekrar gerçekleştirilir; ya da tasarıma ait ya da eklenmiş deney noktası ya da noktaları yine rastsal olarak gerçekleştirilir.

2.2.3 Bloklama

Bloklama, çıktılar üzerinde oluşan gürültü etmenleri kaynaklı anlamsız değişkenlikleri engellemeyi ve böylelikle deney tasarımının etkinliğini arttırmayı sağlayan bir yöntemdir. En önemli amacı süreçte, günler arası, kümeler arası (batch-to-batch) ve vardiyalar arası vb. oluşabilecek istenmeyen değişkenlik kaynaklarını engellemektir. Yapılan şey, benzer denemeleri aynı grup (blok) altında toplamaktır. Herhangi bir blok, genelde, görelî olarak homojen deney koşulları barındırır. Bloklar, hammadde kümeleri, farklı çalışanlar (operator), farklı tedarikçiler ve farklı deneme günleri olabilir. Aynı deneysel koşullar altında (yani, aynı gün, aynı vardiya vb.) yapılan gözlemlerin aynı blokta toplanması gerekmektedir. Bloklar arası değişkenlik, deneysel hatadan mutlaka arındırılmalıdır (Antony, 2003). Bu arındırma işlemi deneyin doğruluğunu arttırmaktadır.

DT yöntemleri kullanılarak endüstriyel ürün ve süreç iyileştirme çalışmaları, dizgesel, iyi planlanmış, kısa sürede bitirilen ve mümkün olan en düşük maliyetlerle gerçekleştirilebilen çalışmalardır. Endüstride kullanılan temel deney tasarım tipleri ve istatistikî uygulamaları, tüm nicel ve kategorik/nitel değişkenler için Çizelge 1. 2’de verilmiştir.

Çizelge 2. 2 Temel Deney Tasarımları (Lazic’, 2004 - yeniden üretildi)

Deney Tasarımı	Değişkenler /Faktörler	İstatistikî Uygulamalar
Basit Karşılaştırma Tasarımları	Kategorik/Nitel ve Nicel	Yöntem denetlemesi, tek değişken etki testi
Rastgele Bloklar ve Latin Kareler	Kümeler arası farklar, Uygulamalar (treatments), Örnekler	Deney koşullarının eşitsizliğinin elenmesi sonrası, etkilerin hesaplanması
Kesirli Tekrarlı Tasarımlar	Kategorik/Nitel ve Nicel	Faktörlerin/değişkenlerin taranması
Rastgele Dengeli Tasarım	Kategorik/Nitel ve Nicel	Faktörlerin /değişkenlerin taranması
Tam Faktöriyel Tasarımlar	Kategorik/Nitel ve	Dğişkenlerin seçimi, ana etki ve

	Nicel	değişkenler arası etkileşimlerin hesaplanması
Döndürülebilir Merkezi Karma Tasarımlar (Central Composite Rotatable Designs)	Nicel	2.dereceden regresyon modelleri
Dikey (Orthogonal) Merkezi Karma Tasarımlar	Nicel	2.dereceden regresyon modelleri
Simpleks-kafes Tasarım	Nicel	Karışım problemleri, 2. ve daha yüksek dereceli regresyon modelleri
Uç Nokta Tasarımlar (KDT) (Extreme Vertices)	Kısıtlı nicel	Karışım problemleri, 2. ve daha yüksek dereceli regresyon modelleri
Hartley, Kono ve Kiefer D-optimal Tasarımlar	Nicel	Regresyon modelleri
Yüksek dereceli Tasarımlar	Nicel	Yüksek dereceli regresyon modelleri

Deney tasarımlarında bütün çalışmayı tek seferde gerçekleştirmek çoğu zaman en-uygun strateji değildir ve tek bir DT çalışmasının yeterli olduğu çok az endüstriyel çalışma mevcuttur.

2.2.4 Deney Tasarımında Aşamalar ve Deney Tasarımının Kalitesi

Araştırma geliştirme çalışmaları mantıksal evrelerden oluşmaktadır. Dolayısıyla, tasarım çalışmalarını da önce–sonra dizgesi üzerine kurmak önemlidir. Yani, bir önceki DT çalışmasının sonucu anlamlı fakat yetersizse, tasarım süreci devam ettirilir ve yeni adımlar ilave edilir. Deneysel çalışmalar şu sırayı izleyebilir (Lewis vd., 1999):

- Tarama (Screening),
- Nicel değişkenlerin irdelenmesi,
- Optimizasyon
- Doğrulama

DT bu adımların hepsinde uygulanabilir. Fakat her çalışmada bu adımların her birinin kullanılması gerekmez. Eğer önceki çalışmalar ışığında süreç yeterince iyi biliniyorsa, tarama çalışması atlanır ve doğrudan, önemli değişkenleri belirlenmiş bir sürecin deney tasarımı çalışmasına geçilir. Reçete hazırlama ve süreç iyileştirme/hat dengeleme çalışmalarında ayrıca tasarım sonrası optimum koşullarda çalışan bir reçete için optimizasyon

çalışması yapılabilir. Diğer taraftan, laboratuarda yapılan optimizasyon çalışmasından sonra, büyük boyut (scale-up) çalışması endüstriyel üretime geçiş için, genelde, gerekmektedir (Coleman ve Montgomery, 1993).

D. C. Montgomery'e göre (2004) bir DT çalışmasında ne herhangi bir tasarımı ilgili soruna uydurmaya kalkışmaya, ne de sorunu belirli bir tasarıma uyarlamaya gerek vardır. Yapılması gereken sorunu doğru betimleyip uygun DT çalışmasını kurmaktır. Günümüzde gelişmiş ve esnek DT yazılımların yaygınlaşması (Design-Expert, JMP, Minitab, MODDE, Statistica vb.) ve bu yazılımların kullanıcı dostu ara yüzü (user-interface) olmaları endüstriyel sorunların kolay bir şekilde tasarlanmalarını sağlamaktadır.

Buraya kadar anlatılanların ışığında, açıkçası, herhangi bir deneme çalışması *tek başına* çok anlam ifade etmeyecektir. Bu denemenin sağladığı bilgi, onun değişken uzayındaki (factor space) konumuna ve diğer denemelerle olan ilişkisine bağlıdır. Zaten tüm DT çalışmalarının esas katkıları, bu tür sistematik denemeler bütünü sunmalarıdır. Bundan dolayı, tasarımların dizgesel bütünlük sağlamaları için çalışmaların ince elenip sık dokunarak yapılması gerekmektedir. Bir tasarımın kalitesi kurulan matematiksel modele ve denemelerin deney uzayındaki dizilimine bağlıdır. Tabii ki bu durum, “bir tasarım çalışmasının kalitesi deneysel ölçümlerin sağlıklı kurulmasına ve doğru yürütülmesine bağlı değildir.” anlamına gelmez (Coleman ve Montgomery, 1993). Bu aşamalar tabii ki çok önemlidir. Fakat bir deney tasarımının kalitesi kavramı, ölçümlerin kaliteli yapılması koşulundan ayrı düşünülmelidir.

Ayrıca, hiçbir değişken tek başına bir DT'nin kalitesini belirleyemez ve bir deney tasarımı çalışmasının “en iyi” (best) tasarım olarak seçilmesi çoğu zaman bir uzlaşımı gerektirir. Deney tasarımlarının etkinliği/kalitesi irdelenirken şu soru sorulmalıdır: Kaç denemeye gereksinimimiz var ve etmenlere ilişkin tahminler ya da değişken etkilerinin hesaplanması birbirinden bağımsız mıdır? En basit anlatımla, maliyet deneme sayısıdır; yarar/fayda ise, tasarımın kalitesidir. Dolayısıyla, kalite kavramı için, deney tasarımı başına elde edilen anlamlı bilgi ve deney uzayında, hesaplanan cevabın/tepkinin görece olarak sabit mi, yoksa deney uzayı (design space) boyunca değişkenlik mi gösterdiği sorgulanmalıdır (Lewis vd., 1999).

Son olarak, *istatistikî olarak anlamlı* (statistical significance) kavramının önemi çok iyi irdelenmelidir. Örneğin, bir değişkenin etkisi “anlamlı” (significant) ise, bu etkinin “gerçek” olma olasılığı yüksek (%95, %99, %99,9 gibi) ve bu etki sıfırdan farklı demektir. Bundan dolayı, tasarımcının başlıca amaçlarından birisi bir faktörün/bileşenin ya da matematik modelin anlamlılığını belirlemektir.

Ayrıca, “istatistikî olarak anlamlı” olan ile “önemli” olan kavramları birbirine karıştırılmamalıdır. İstatistikî olarak anlamlı olan bir etki, küçük olmasından dolayı, önemsiz olabilir. Dolayısıyla, tasarımcının, istatistikî olarak anlamlı olan etkinin pratik anlamda önemli (yararlı) olup olmadığını çok iyi irdelemesi gerekir (Coleman ve Montgomery, 1993). Eğer bir deney tasarımı çalışması yeterince yeniden üretilebilir (reproducible) ise, pratikte önemsiz olan bazı faktörler istatistikî analizler sonucu “anlamlı” görünebilir. Diğer taraftan, deneysel kesinliğin (precision) yetersiz olmasından dolayı, hesaplamalar sonucu çok etkili olduğu görülen bazı etmenler, istatistikî olarak anlamsız kabul edilebilirler.

2.3 Tepki Yüzeyi Yöntemleri – Genel Açıklamalar

Birçok deneysel çalışma şu iki boyut gözetilerek tasarlanır: çıktı üzerinde etkili olduğu varsayılan faktör(ler) grubu ile ölçülebilir çıktı(lar) arasındaki ilişkiyi nicelleştirmek ve çıktı için optimum sonuçları üreten faktör değerlerini bulmak. En iyi çıktı değerleri deneysel çalışma uzayının dışında kalıyorsa, bu durumda yapılan tasarımdan çıkarılacak en anlamlı sonuç, sürecin ya da ürünün performansının “*bütüncül*” olarak anlaşılmasının gerekliliğidir. Yani, ürün ya da sürecin davranışları belli bir matematik model kapsamında ayrıntılı olarak analiz edilebilir.

TYT yöntemleri, yukarıda ifade edildiği gibi, ilk olarak 1950’li yıllarda kimya sanayinde ortaya çıkmıştır (Box ve Wilson, 1951). TYT tanım olarak, süreçleri geliştirmek, iyileştirmek ve dahası “en iyileştirmek” (optimization) için kullanışlı olan istatistikî ve matematik teknikler bütünüdür. Yeni ürünlerin tasarımı, geliştirilmesi ve formülasyonu için, hatta mevcut ürünlerin iyileştirilmesi çalışmalarında, etkin uygulama alanları mevcuttur. TYT, ürün tasarımının, süreç geliştirmenin, kalite, üretim/imalat mühendislerinin ve mavi yakaların bu yöntemleri uygulamak için genelde takım olarak beraber çalıştığı bir “eşzamanlı mühendislik aracı” (concurrent engineering tool) olarak ta görülebilir.

Bu yöntemler eğer tasarımcının öncelikli amacı:

1. Göreli olarak daha kesin sonuçlar vermesi için bir mühendislik sisteminde girdi-çıkı ilişkisini açıklamak için kestirimler yapmaksa,
2. Tasarlanmış süreçte optimizasyon için gereken “ince ayarları” (fine tunes) yapmak istiyorsa, bu koşullarda TYT’ler çok etkilidir.

Zira TYY türü deney tasarımları belli sayıdaki değişken için, kesirli faktöriyel deney tasarımları ile yapılan tarama (screening) çalışmalarından daha fazla sayıda deneme gerektirmektedir. Dolayısıyla, TYY türü tasarımlar bütün faktörlerin etkili oldukları daha önceden (taramalarla) tespit edilmiş çalışmalarda kullanılmaktadır.

Diğer taraftan, TYY ile yalnızca *optimum* şartları değil, ayrıca, sistemin optimum şartlarının deneyde kullanılan faktörlerin değişkenliğine karşı ne kadar duyarlı olduklarını göstermekte de kullanılabilir. TYY'lerin diğer bir faydası da değişken(ler) ve çıktı(lar) ilişkisini hem üç boyutlu, hem de eşyükselti eğrileri olarak (contour line plots) gösterebilmeyi mümkün kılmasıdır. Böylelikle fonksiyonel ilişki ve bu ilişkinin şiddeti/etkinliği kolaylıkla ayırt edilebilir.

Üretim (kimya) süreçlerinde ölçülebilen çıktı ile (yani cevap davranışı), değişken grubu arasındaki *belirlenebilir (deterministic) ilişki* ile ifade edilebilen kesin yasalarca (matematik eşitlikler, modeller) yürütülür. Böylelikle en iyi koşulları sağlayan değişken seviyelerinin ayarlanabilmesi ve istenen çıktının optimizasyonu mümkün olur. Genellikle bu ilişki ya çok karmaşık ya da keşfedilmemiş olduğu için deneysel yaklaşımlar gereklidir. Bu ve benzeri görgül yaklaşımlarda kullanılan stratejiler TYY'lerin temelini oluşturur.

Farklı değerler alabilen değişkenlere sahip herhangi bir sistemde ve çeşitli faktörlerin ölçülebilir değişken (cevap) üzerindeki etkisinin irdelendiği sistemlerde genel amaç, bu etkilerin sistematik irdelenmesinin sağlanması olduğu yukarıda belirtilmişti. Bu tür irdemeler regresyon analizi yapılarak gerçekleştirilebilir. Bu tür analizlerde deneysel çalışmadan elde edilen veriler toplanır ve sonra bu veriler bazı matematik modeller kullanılarak cevap/tepki ve onu etkileyen faktörler arasındaki ilişkiyi “*deneysel*” olarak nicelleştirmekte kullanılır. Bu tür analizlerde çıktıyı etkileyen faktörler, “regresör “ ya da “açıklayıcı” değişken olarak ifade edilir. Regresyon analizi, sosyal bilimler dâhil, birçok bilim dalında araştırma amaçlı olarak çok yaygın kullanılan bir araçtır.

TYY yöntemleri veriye regresyon analizi uygulanmadan önce, uygulanırken ve sonrasında kullanılan yöntemlerdir. Regresyon analizinden sonra bazı optimizasyon yöntemleri de kullanılmaktadır. Sonuç olarak, TYY'nin konusu, söz konusu çıktı sisteminin niteliklerinin daha iyi anlaşılmasını sağlamak için regresyon analizini ve diğer bazı istatistikî teknikleri kullanmaktır.

TYY yöntemleri günümüzde özellikle süreç iyileştirme çalışmalarında etkin bir şekilde kullanılmaktadır. Bu yöntemler daha çok 2.dereceden ya da daha yüksek dereceli çokterimli matematik modeller için söz konusudur ve eğer sürecin performansı doğrusal bir modelle

ifade edilemiyorsa, yani daha basit DT yöntemleri (faktöriyel, kesirli faktöriyel vb.) uygun değilse tercih edilmektedir. Ayrıca, sunduğu görsel malzemelerin ve parametre optimizasyonun (tepki yüzeyi üzerinde tepe ya da çukurlar) mümkün olması bu yöntemlerin en avantajlı yönüdür.

Diğer taraftan, çok bileşenli bir karışım/ürün için yapılan deney tasarımı çalışmalarında amaç, ölçülen çıktının şeklini/grafiğini çizmek ya da en yüksek/en düşük değer(ler)i aldığı noktay(lar)ı belirlemek gibi fiziksel nitelikleri incelemektir.

Bilindiği gibi herhangi bir reçete/formülasyon çalışması iki veya daha fazla bileşenden oluşan bir karışım yapmaktan başka bir şey değildir. Bu tür karışımlarda herhangi bir bileşenin oranı, bir diğerinden bağımsız değildir. Eğer bir bileşenin oranı arttırılıyor ya da azaltılıyorsa buna bağlı olarak en az bir ya da birden fazla bileşenin oranı değişmek zorundadır. Bu durum birçok reçete çalışmasında olmazsa olmaz koşuldur. Diğer bir ifadeyle bileşenlerin toplam miktarı sabit kalıyorsa her bir bileşenin oranı bir diğerine bağlı olarak değişir. Bunun yanı sıra, daha ilerde değinilecek olan bileşen toplamlarının sabit olmadığı karışım deney tasarımları da mevcuttur. KDT'lerde bileşenler, klasik deney tasarımlarındaki faktörlere benzerdir ama birbirinden bağımsız davranamazlar. Fakat faktörler, genelde, birbirinden bağımsızdırlar. Ayrıca, bazı niteliklerden fedakârlık yaparak KDT bileşenleri de bağımsız hale getirilebilir ama bu çok tercih edilen bir yöntem değildir. Çünkü bu durumda bir bileşenden fedakarlık yapıp, onu yok saymak gerekmektedir. Ayrıca, KDT'lerle birlikte kullanılan süreç değişkenleri de, bileşenlerin aksine, faktörlerden oluşur.

Bir karışımda, gözlenen ve ölçülen cevaplar fonksiyonel olarak bileşenlerin oranlarına bağlıdır. Bu bağıntı (2.1) eşitliğine benzer olarak şu şekilde bir bağıntı ile ifade edilebilir:

$$\text{Cevap(lar)} = f(\text{bileşen oranları}) \quad (2.2)$$

Burada cevap ile kastedilen şey, genelde ölçülebilen ve negatif ya da pozitif bir değer alabilen matematik olarak sürekli ve çoğunlukla bir birimi olan niceliktir. (2.2) eşitliği ile ifade edilen bir ilişkiye örnek olarak Chardon vd.'nin (1989) yaptığı çalışma gösterilebilir. Bu çalışmada TYY'nin özel bir uygulaması olan karışım deney tasarımı kullanılmıştır. Çalışmada tekstil örneklerinin hidrofiliğinin (cevap/tepki değişkeni) üzerine terbiye yöntemlerinin etkisi incelenmiştir. Burada terbiye için kullanılacak olan ürünün formülasyonunda üç adet yumuşatıcı (karışım bileşenleri), yumuşatıcıların toplam miktarının kendisi ve bir adet reçine kullanılmıştır. Reçine ve toplam yumuşatıcı miktarı karışım bileşenleri olmayıp, süreç

faktörleri (değişkenleri) olarak kullanılmaktadır. Bu çalışmada cevap (tekstil parçalarının hidrofilliği) (2.3)'teki gibi modellerle ifade edilebilir:

$$\text{Cevap} = f(\text{bileşen oranları}) + f(\text{faktör seviyeleri}) \quad (2.3)$$

$$\text{Cevap} = f(\text{bileşen oranları}) + f(\text{faktör seviyeleri}) + f(\text{bileşen oranları} * \text{faktör seviyeleri})$$

Bileşen oranları ve faktör seviyelerinin (süreç değişkenleri) birleşimi ve beraber değişiminden oluşan tasarımlara Karışım-Süreç Deney Tasarımları (Mixture-Process Designs) (KSDT) adı verilmektedir (Scheffé 1963; Lambrakis, 1968b; Cornell, 2002; Box ve Draper, 2007). Yukarıdaki örnekte süreç değişkeni olarak reçine seviyesi ile birlikte yumuşatıcıların toplam miktarı da kullanılmıştır. Toplam karışım miktarının değiştiği bu tür deney tasarımlarına, ayrıca, Karışım-Miktar Deney Tasarımları (KMDT) (Mixture-Amount Design) adı verilir. Yukarıdaki çalışma hem KMDT; hem de KSDT'ye örnek olabilecek ilginç bir çalışmadır. Çünkü yumuşatıcı oranlarına ilave olarak, yumuşatıcıların toplam miktarı ve reçine seviyesi eşzamanlı değiştirilmektedir.

KDT'lerde kullanılan simpleks bölgeler üzerinde tepki yüzeyi yöntemlerinin uygulaması durumunda göz önünde bulundurulması gereken ana hususlar şöyle sıralanabilir:

- İlgilenilen tasarım bölgesini (yüzeyi) "sağlıklı" temsil edebilecek bir modelin seçilmiş olması,
- Tepki yüzeyini temsil eden modelin istatistikî testlere ve niteliklere uygun olması ve
- Tasarımın modele uyumluluğundan kasıt, ölçülen/toplanan veriye ve model uyumsuzluğu testlerine dayanıklı bir deney tasarım olmasıdır.

Diğer taraftan, (2.2) eşitliği ile ifade edilebilen matematik modeller şu dört genel amacın sağlanmasında kullanılır:

1. Karışımın bileşenlerinin nasıl ve ne oranlarda etkili olduğunun anlaşılması ve bu etkilerin cevap üzerinde nasıl ölçülebildiğinin nicelleştirilmesi,
2. Karışım bileşenlerine bağlı olarak değişen cevabın nerede maksimum, nerede minimum ya da hedef değerde olduğunun anlaşılması,
3. Denemelerde oluşan tartım hatalarının nerede en aza indirildiğinin tespit edilmesi, yani en az tartım hatasının hangi karışım bileşiminde (terkibinde) elde edilebilmesi ve
4. Kontrol edilemeyen sıcaklık, nem gibi dış değişkenlerin (gürültü değişkenleri) hangi karışım bileşiminde en az etkili olduğunun anlaşılması.

Diğer taraftan, doğada genel olarak teorik bir model yazabilecek kadar sistemler hakkında bilgi mevcut değildir. Bundan dolayı yukarıdaki gibi sebep sonuç ilişkilerinin fonksiyonel ifadeleri şeklinde kurulabilen *deneysel* modellerin, üzerinde çalıştığımız -yani deneyler yaptığımız- sistemleri -en azından çalışılan sınırlar içerisinde- yeterince açıklayıcı olacağı umuduyla davranmak durumundayız. Burada en çok kullanılan deneysel modeller çokterimli (polinomik) deneysel modellerdir. Bu çokterimli fonksiyonlar doğrusal, ikinci dereceden, üçüncü dereceden veya daha yüksek dereceli fonksiyonlardır. 2. dereceden ve daha yüksek dereceden çokterimliler, tepki yüzeyi modelleri olarak ta bilinirler.

(2.2) ve (2.3) eşitlikleri ile gösterilmeye çalışılan cevap-karışım bileşenleri ilişkisi fonksiyonel olarak şu şekilde gösterilebilir:

$$E(y) = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_q) \quad (2.4)$$

Burada, (2.4)'teki eşitlikle ifade edilebilecek bir fonksiyonel ilişkinin mevcut olduğu ve bu eşitliğin ilgili tepki yüzeyini tam olarak betimleyebildiği varsayılmaktadır. Ayrıca, E(y) ile ifade edilen nicel cevabın, (cevap nicelleştirilmiş nitel -anket sonuçları gibi- bir cevap ta olabilir fakat bu çalışmada sadece nicel cevaplar üzerinde durulacaktır.) E(y)'nin beklenen (expected) cevap çıktısı olduğu ve $x_1, x_2, x_3, \dots, x_q$ 'nin ise E(y)'nin bağımlı olarak değiştiği karışım oranları olduğuna dikkat edilmelidir.

Genel olarak, $f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_q)$ gibi bir ilişkiyi ifade etmekte kullanılan çokterimli fonksiyonlar, Taylor serisi açılımları şeklinde düşünülebilir. Serinin nerede kesildiği veya kesileceği tepki yüzeyini temsil edeceği düşünülen fonksiyon ile doğrudan ilintilidir (Box ve Draper, 1987, 2007). Normalde, birçok karışım (ürün formülasyonu) için deney tasarımı çalışmasında doğrusal (1. dereceden) bir çokterimli

$$E(y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i \quad (2.5)$$

ya da 2. dereceden bir çokterimli

$$E(y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j \quad (2.6)$$

gibi düşük dereceli çokterimlilerin cevap yüzeyini temsil ettiği genel bir kabuldür (Cornell, 2002; Box ve Draper, 2007; Lewis vd., 1999). Zira bu tür düşük dereceli çokterimlilerin

hesaplanması, dahası istatistikî analiz çok kolaydır: daha az terim içerirler, dolayısıyla, parametrelerin tahmini için daha az ölçüme/gözleme ihtiyaç duyulur.

Sonuç olarak, ürün formülasyonu ya da karışımlar için yapılacak deney tasarımları için, TYY'lerin, üçüncü bölümde anlatılacak olan temel kısıtlardan dolayı, özelleşmiş bir şekli olan Karışım Deney Tasarımları (KDT) geliştirilmiştir.

2.4 Sonuçlar

Bir deney çalışmasını deney tasarımı uygulayıp, uydurulmuş (fitted) bir matematik model aracılığıyla açıklamanın ve/veya göstermenin çok çeşitli faydaları vardır. Bunlar şu şekilde özetlenebilir:

1. DT kapsamındaki alan içinde herhangi bir noktada, ilgilenilen cevaplara ait tahminler/kestirimler (prediction) verilebilir. Bu kestirimlerdeki belirsizlikleri açıklamak için, makul bir değerler aralığı sunan güven aralıkları (confidence intervals) kullanılabilir.
2. Değişkenlerin (bağımsız değişken) her bir cevap değişkeni (bağımlı değişken) için optimumu (en küçük, en büyük ya da belirlenmiş hedef değerler) veren değerleri kolaylıkla bulunabilir. Optimum değer, kullanılan modele bağlı olarak sayısal ya da analitik optimizasyon yöntemi kullanılarak bulunur. Her bir cevap değişkeni için optimum koşullar kümesi değişken uzayında bir nokta olup, deneyde ilgili cevabın ölçümü için kullanılan nokta olması da şart değildir. Uydurulmuş modelin optimizasyonu bazen DT alanının dışındaki bir alanda optimum koşul kestirimine sebep olabilir. Bu tür dışdeğer bulmalar (extrapolation) güvenilir değildirler ve modelin bu daha önceden denenmemiş alanda da geçerli olup olmadığının denemeyle kontrolünü gerektirirler.
3. Deneyde birden fazla cevap değişkeni varsa, her bir cevap için optimum ya da optimuma yakın değerleri sağlayan değişken seviyelerinin yer aldığı bir küme bulmak gerekebilir. Eğer optimumlar çakıştırmıyorsa -genelde böyle olmaktadır- bir şekilde “uzlaştırma” yolu aranmalıdır. Bu tür uzlaştırma yollarından birisi: cevapları görece önemlerini gösterir şekilde ağırlıklandırıp, sonrasında bu cevapların ağırlıklı kombinasyonlarını optimize etmektir. Bu kısım 4.bölümün sonunda, alt-bölüm 4.7’de açıklanacaktır.

4. Son olarak, uydurulmuş matematik modellerin diđer bir yararı, arařtırılan fonksiyonel iliřkinin grafik gsterimine imkân vermesidir. Fakat yapılan herhangi bir analizin sonuları, daha ok uydurulmuş modelin kalitesine ve verilere, dolayısıyla, deneyin nasıl tasarlandığına ve uygulandığına bađlıdır.

3. ÜRÜN FORMÜLASYONU İÇİN DENEY TASARIMI – KARIŞIM DENEY TASARIMLARI

Günlük hayatta kullandığımız birçok ürün, bileşenlerinin belirli oranlarda karıştırılması ile elde edilmektedir. Bu ürünler tüm yaşamımız boyunca ve neredeyse günün her saati ihtiyaç duyduğumuz ürünlerdir. Bunlardan bazılarını sıralamak gerekirse: İçecekler, besin katkıları, gıda ürünleri, temizlik ürünleri, yapıştırıcılar, boyalar, polimerler, polimer katkıları, yüzey kaplamaları, kişisel bakım ürünleri, ilaçlar, cam, koruyucu malzemeler, kremler, toz kaplamalar ve daha birçok endüstriyel ürün örnek olarak verilebilir.

KDT'lerin birçok farklı endüstrideki kullanımları giderek yaygınlaşmaktadır. Örneğin, demir-çelik endüstrisinde ve plastik endüstrisinde kullanılan birçok alaşım iki veya daha fazla maddenin belirli oranlarda bir araya getirilmesi ile elde edilmektedir. Bütün bu karışımlar belirli bir reçete kullanılarak yapılmaktadır ve bu reçetelerin belirli göstergeler açısından optimum niteliklere sahip olması çok önemlidir. Bu alaşımların en iyi performansı vereceği terkihi bulmak ve bunu ilgilendiren birçok parametrenin (kalite, yani performans göstergeleri, maliyet, fonksiyonellik, kolay üretilebilme, lojistik temin kalitesi ve hammadde kabul spesifikasyonundaki dalgalanmalar vb.) eş-zamanlı olarak optimizasyonu, günümüz rekabetçi piyasa koşullarında artık kaçınılmaz olmuştur.

Bileşenleri birbirine karıştırarak hazırlanan ürünlerde amaç, birden fazla bileşeni karıştırarak elde edilecek ürüne ait performansın (fonksiyonel özellik ya da yapıma/üretileme amacı), tek bir bileşenle elde edilen performanstan daha iyi olup olmadığını tespit etmek de olabilir.

KDT çalışmalarının kullanımlarına ilginç bir örnek olarak Chen vd.'nin yaptıkları çalışma gösterilebilir. Ayrıca Snee ve Rayner'in (1982) tavuk besi yemi için yaptıkları çalışma, barındırdığı birçok ilginç istatistikî analizden dolayı ilgi çekicidir. Chen vd. (1996) yaptıkları çalışmada diyet ürünlerinin tümör oluşumuna etkisini incelemiş ve ayrıca KDT'lerin birçok ilginç kullanım alanlarını örneklemiştir. Bu örneklerden bazıları şöyledir:

Benzin istasyonlarında çalışanlarının soludukları benzin, gazyağı, mazot buharı ve uçucu kimyasal karışımlarının sağlıkları üzerine etkisinin incelenmesi, farklı bölgelerdeki kirli hava bileşimlerini soluyan kişiler üzerinde oluşan etkilerin incelenmesi, bir ormandaki

ağaç çeşitliliğinin ve miktarının ekosistem ve odun üretimi üzerindeki etkisinin incelenmesi ve son olarak haliçlerde yaşayan canlılar üzerinde deniz suyu içeriğinin, (tuzluluk oranı, pH, oksijen, azot, fosfor, vb.) canlı çeşitliliği ve büyüklüğü üzerindeki etkisinin incelenmesidir. Bütün bu örnekler belirli performans göstergeleri (cevap değişkenleri) üzerinde karışım oranlarının etkisinin incelenmesini gerektirmektedir.

J. A. Cornell (2002), karışım deney tasarımları için *referans* olarak gösterilen kitabında KDT'ler için şöyle bir tanım yapmaktadır:

Genel olarak bir karışım için deney tasarımı, ölçülen çıktının sadece bileşen oranlarına bağlı olduğu ve karışım miktarına bağlı olmadığı varsayılan, gelişmiş ve kullandığı çok terimli modeller açısından özelleşmiş bir tepki yüzeyi yöntemidir.

Yazar, kitabının ilerleyen bölümlerinde ve özellikle yani basımları için yaptığı ilavelerde bu tanımını genişletip toplam karışım miktarlarının değiştiği tasarımları ve süreç değişkenlerini de kapsayan yeni tanımlar da yapmıştır.

Klasik bir deney tasarımı (faktöriyel DT, kesirli-faktöriyel DT, Plackett-Burman DT, vb.), her bir faktöre ait farklı seviyelerin kombinasyonlarının belirli yöntemlerle test edilmesinden oluşmaktadır. Amaç, her bir faktörün seviyesini değiştirirken diğer faktörlerin seviyelerinin sabit kalmasını sağlamak yoluyla veya iki ya da daha fazla faktörün seviyesini eşzamanlı olarak değiştirmek yoluyla çıktı üzerinde oluşacak değişimi ölçmektir. Bu tür DT'ler ürün ya da süreç performansını iyileştirmek için kullanılabilir. Fakat ürün formülasyonlarında bileşenler bağımsız davranamayacağı için klasik DT'ler ancak faktör/bileşen etkilerini -kısmen- görmek için kullanılabilir.

Herhangi bir ürün/karışım için ürün bileşenlerinin, ürünün yapılma amacı yani niteliği/performans göstergesi ile ne türden bir fonksiyonel ilişki içerdiğini anlamak için yapılacak DT çalışması ancak şu iki koşulu birlikte sağlarsa KDT tipi bir deney tasarımı uygulanır:

1. Bileşenlerin sabit bir üst toplam değeri vardır. Örneğin, 3-bileşenli bir ürünün x_1 bileşeni karışımın %10'u, x_2 bileşeni karışımın % 40'ı ve x_3 bileşeni ise karışımın geri kalan % 50'si olsun. Önceki bölümde de ifade edildiği üzere eğer bir bileşenin üründeki miktarı arttırılır/azaltılırken üründeki diğer bir bileşen ya da bileşenlerin oranı azalır/artar ise bu sistem, klasik faktöriyel ya da TYY tipi deney tasarımlarından farklı davranır. Eğer yukarıdaki gibi bir bileşenler arası bağımlılık yok ise TYY tipi deney tasarımlarının kullanılması uygun olacaktır. Bu konularda daha fazla bilgi DT teorisi ve uygulama alanları için giriş seviyesinde olan ve D. C.

Montgomery tarafından yazılan “*Design and Analysis of Experiments*” kitabına bakılabilir (Montgomery, 2004).

2. KDT’lerde cevap(lar) (performans göstergesi, ölçülen nitelik) bileşen oranlarının bir *fonksiyonu* olmalıdır. Örneğin dondurmanın tadı, dondurmanın miktarına değil, o dondurmaya oluşturan bileşenlerin oranlarına bağlıdır. Eğer cevap bileşen oranlarına bağlı değil ise burada da KDT yerine yine TYY tipi deney tasarımları kullanılmalıdır.

3.1 KDT’lerin Tarihsel Gelişimi

Karışımlar için DT çalışmaları, bu alanda yapılan istatistikî araştırmalar ve yayın sayıları göz önüne alındığında -klasik DT’lere kıyasla- henüz yeni bir çalışma alanıdır. Bu alanın istatistikî alt yapısı ve teori-pratik dönüşümleri geçtiğimiz son 40 yıl içerisinde hazırlanmıştır. Ayrıca, bu alandaki *teorik* çalışmalar, özellikle ürün formülasyonu ve optimizasyonunun ilgili endüstrilerde büyük önem kazanması ve istatistik hesaplarını kolaylaştıran kişisel bilgisayarların ve bunlara ilişkin yazılımların yaygınlığının artması dolayısıyla, devam etmektedir (Muteki vd., 2007).

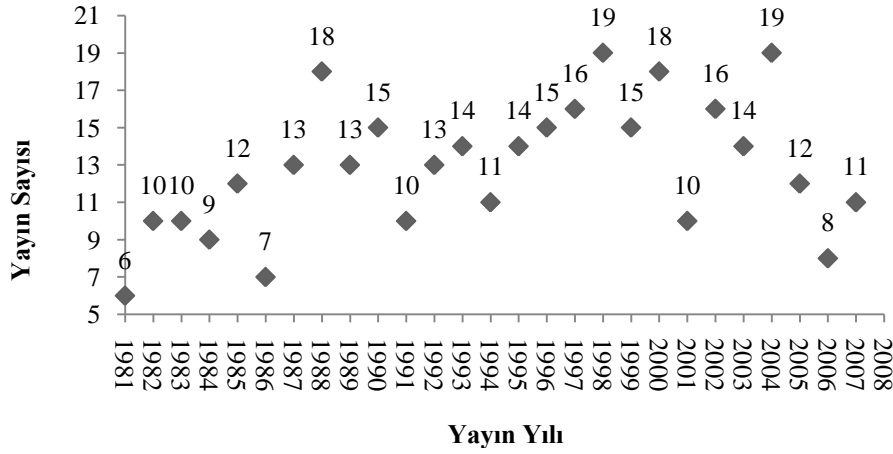
Bu konudaki ilk değiniler birçok İngilizce kaynakta (Cornell, 2002; Box ve Draper, 1987; Scheffé, 1958; Smith, 2005) Quenouille’in 1953 yılında yazdığı “*The Design and Analysis of Experiments*” kitabına dayandırılmaktadır. Fakat Z. L. Lazic’ (2004) karışımlara ilişkin ilk çalışmaların 1940’lı yıllarda SSCB’de yapıldığını belirtmektedir.

Yapılan ilk yayın ise, P. J. Claringbold’un 1955 yılında yayınladığı ve hormon dozajlarının fare üzerindeki etkisini incelediği yayındır. Bu yayını takip eden ilk yayın ise, H. Scheffé’nin 1958 yılında yayınladığı ve bu konunun matematik teorisine büyük katkı sunan “*Experiments with Mixtures*” (Scheffé, 1958) isimli yayındır. Scheffé bu çalışmada en temel KDT olan simpleks-kafes tasarımları tanıtmış, buna ilişkin kendi adıyla anılan çokterimli matematik modelleri göstermiştir. 1963 yılında yayınladığı ikinci çalışmasında (Scheffé, 1963) ise, $\{q, m\}$ (q bileşenli, m . dereceden) simpleks-kafes tasarımına alternatif olarak simpleks-merkezli kafes tasarımları geliştirmiş ve süreç değişkenlerini de içeren ilk KSDT çalışmasını yapmıştır. Karışım deney tasarımları teorisinin 1980 yılına kadar olan kronolojik gelişimi ve bu gelişime katkıda bulunan yazarlar Çizelge 3.1’de verilmiştir.

Çizelge 3.1 1955-1980 yılları arası KDT'ler üzerine yapılan istatistikî çalışmaların yıllara göre dağılımı (Cornell ve Piepel, 2005)

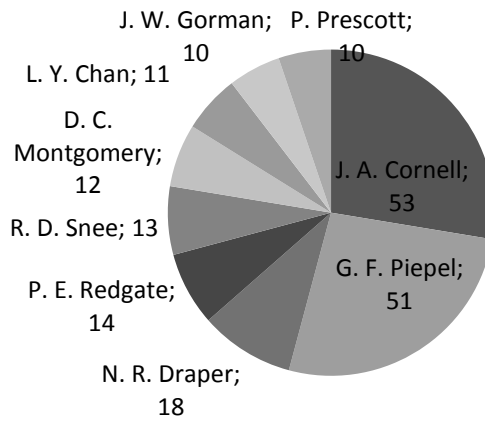
Yıl	Yazar(lar)	Yayın Sayısı
1955	Claringbold	1
1958	Scheffé	1
1959	Quenouille	1
1961	Scheffé; Kiefer	2
1962	Gorman & Hinman; Wagner & Gorman	2
1963	Kenworthy; Scheffé; Wagner & Gorman	3
1964	Uranisi	1
1966	Cruise; Box & Gardner; Gorman; Kurotori; McLean & Anderson; Murty; Nelder	7
1967	Diamond; Drew; Farrell, Kiefer & Walbran	3
1968	Becker; Lambrakis (1968a,b,c); Murty & Das; Thompson & Myers	6
1969	Atwood; Becker; Kennard & Stone; Lambrakis (1969a,b); Watson	6
1970	Becker; Cornell & Good; Gorman; Nigam	4
1971	Cornell; Cox; Li; Paku, Manson & Nelson; Snee; Van Schalkwyk	6
1972	Narcy & Renaud;	1
1973	Cornell; Nigam; Saxena & Nigam; Snee	4
1974	Anderson & McLean; Marquardt & Snee; Nigam; Snee & Marquardt	4
1975	Cornell; Cornell & Ott; Draper & St. John (1975a,b); Kiefer; Laake; Mendieta vd.; Rusin; Snee (1975a, 1975b)	10
1976	Nigam; Snee & Marquardt; Sobolev & Chemleva	3
1977	Cornell; Draper & St. John (1977a,b); Galil & Kiefer (1977a,b); Hare & Brown; Saxena & Nigam	7
1978	Becker; Cornell & Gorman; Kiefer; Park; Vuchkov vd.	5
1979	Cornell; Cornell & Khuri; Goel & Nigam; Hare; Morris & Snee; Snee (1979a,b)	7
1980	Daniel & Wood; Goel (1980a,b); Piepel	4

Bu çizelgeden de anlaşılacağı üzere bu alandaki çalışmaları belirli bir grup bilim insanı gerçekleştirmiştir. Yayın sayısı 1980 yılından sonra görece olarak artmıştır. Bu artışın en temel sebebi kişisel bilgisayarların yaygınlığının artması ve dolayısıyla çok yoğun hesap gerektiren çalışmaların yapılabilmesidir. Şekil 3.1'de 1981 ile 2007 yılları arasında ulaşabildiğimiz İngilizce ve Fransızca yapılmış yayınların yıllara göre dağılımı verilmiştir. Bu grafikten görüldüğü gibi 1990'lı yıllardan 2005'e kadar belirgin bir artış mevcuttur.



Şekil 3.1 1981-2007 yılları arasında KDT üzerine yapılmış istatistikî çalışmaların sayıları

1955-2004 yılları arasında bu alanda önemli çalışmalar yapmış kişiler ve bu kişilerin yaptıkları yayın sayıları ise, Şekil 3.2’de verilmiştir. Burada en çok yayını J.A Cornell, sonra ise G. F. Piepel yapmıştır. Her iki bilim adamı da meslekten istatistikçidirler ve hala bu alanda yayın yapmaktadırlar. KDT alanının teorik kısmı olarak adlandırılabilir olan 1955-1980 yılları arasında en aktif çalışma yapmış ve dört veya dörtten fazla yayını olan yazarlar (Yayın sayıları parantez içinde verilmiştir.): Snee (10), Cornell(9), Nigam (7), Gorman (6), Draper (6), Lambrakis (5), Kiefer (5), Becker (4), and St. John (4)’dur (Khuri (der.), 2006). KDT alanına çok önemli katkı sağlamış olan McLean ve Anderson (1966), Cox (1971) ve Croisier (1984, 1985)’de unutulmamalıdır.



Şekil 3.2 1955-2004 yılları arasında KDT üzerine yalnız veya başka yazarlarla birlikte en çok yayın yapmış yazarlar ve yayın sayıları (Khuri (der.), 2006)

KDT'nin teorik ve pratik gelişimine katkıda bulunmuş bazı yazarlar ve çalışmalarına kısaca değinecek olursak: N. R. Draper ve W. E. Lawrence'ın (Draper ve Lawrence, 1965a, 1965b) 1965 yılında ardı ardına yaptıkları üç ve dört bileşenli karışım deney tasarımlarında ilk kez yanlılığı (bias) ve model parametrelerinin tahmininde ortaya çıkan değişkenliği en aza indirecek yöntemler sunmuşlardır. R. D. Snee (Snee, 1973, 1979) çok bileşenli deney tasarımlarını ve karışım deney tasarımı verilerinin analizinde kullanılacak istatistikî teknikleri geliştirmiştir. Çok bileşenli simpleks-kafes tasarımlarına ilk katkı ise J. W. Gorman ve J. E. Hinman tarafından 1962 yılında sağlanmıştır (Gorman ve Hinman, 1962). D. W. Marquardt ve R. D. Snee karışım deney tasarımlarında kullanılacak istatistikî testleri ve Scheffé tipi modeller için parametre tahminlerini sağlayan doğru hipotez testlerini geliştirmişlerdir. (Marquardt ve Snee, 1974)

Çizelge 3.2'de 1955-2007 yılları arasında İngilizce ve Fransızca dillerinde KDT'leri ve bunların uygulanmasını anlatan öğretici makaleler, derlemeler (review) ve özet çalışmalar gösterilmiştir. Bu çalışmaların en dikkat çekici tarafı sadece üç kitabın özel olarak KDT'lere ayrılmış olmasıdır. Fransızcada ise sadece bu konuya ayrılmış kitap, Jacques Goupy'nin "*Plans d'Expériences: Les Mélanges*" kitabıdır. Diğer tüm kitaplarda bir veya daha fazla bölümde KDT'ler gözden geçirilmiştir. Ayrıca, deney tasarımına ilişkin bazı Fransızca kitaplarda bu konuya ayrılmış bölümler mevcuttur (Goupy, 2000).

Çizelge 3.2 1955-2007 yılları arası KDT'ler hakkında yazılmış eğitici makaleler, derlemeler, kitaplar ve gözden geçirme çalışmaları (Cornell ve Piepel, 2005)

Yıl	Derlemenin, öğretici yayın (kitap,makale) ya da Raporun içeriği	Yazar (lar), Dergi/Rapor/Kitap
1967	Karışım Tasarımı Yöntemleri (İstatistik alanı dışı dergi)	B. D. Drew, The Minnesota Chemist (Cornell, 2002)
1971	Karışım Deney Tasarımları ve modelleri	R. D. Snee, Journal of Quality Technology
1973	KDT literatürü – 1955'ten 1971'e	J. A. Cornell, Technometrics
1974	Simpleks ve Tepe-noktalar için tasarımlar hakkında derleme	V. L. Anderson ve R. A. McLean, <i>Design of Experiments: A Realistic Approach</i> (Kısım 13.1.4)
1975	KDT'ler, modeller ve yöntemleri	N. R. Draper ve R. C. St.John, <i>Models and Designs for Experiments with Mixtures I ve II</i> , U. Of Wisconsin, Madison
1979	1973-79 arası KDT literatürü Örneklerle KDT'ler	J. A. Cornell, Technometrics R. D. Snee, CHEMTECH
1981	<i>Experiments with Mixtures</i>	J. A. Cornell (3 basım: 1981, 1990 ve 2002)
1983	KDT'ler hakkında kitapçık (KDT'lerin nasıl tasarlanacağını ve uygulanacağını anlatır)	J. A. Cornell (2 basım: 1983, 1990)
1985	Karışım Deney Tasarımları (Ansiklopedi içinde makale)	J. A. Cornell, <i>Encyclopedia of Statistical Sciences</i>

1987	KDT'ler hakkında gözden geçirme (Bölüm 9)	A. Khuri ve J. A. Cornell, <i>Response Surfaces: Design and Analysis</i> (2 basım: 1987, 1996)
1990	Karışım Deney Tasarımları (Bölüm 7)	J. A. Cornell, <i>Statistical Design and Analysis of Industrial Experiments</i> , Ghosh, S. (der.)
1991	Simpleks tasarımlar ve KDT modelleri KDT yöntemlerinin özeti ve gözden geçirilmesi KDT örnekleri kataloğu	J. A. Cornell ve S. B. Linda, <i>Models and Designs for Experiments with Mixtures- Part I</i> , U. of Florida J. A. Cornell, <i>Communications in Statistics-Theory and Methods</i> J. A. Cornell ve G. F. Piepel, <i>A Catalog of Mixture Experiment Examples</i> , Rev. 0 - Rev 15.1 (1991, 2005) BN-SA-3298
1992	KDT'lere beş farklı yaklaşım ve öneriler	J. A. Cornell ve G. F. Piepel, <i>Mixture Experiment Approaches-Options, Examples, and Recommendations</i> , (1992, 1994)
1995	KDT'ler ve KMDT'lerde kullanılan modeller ve bu tip tasarımlar için optimizasyon yöntemleri	L. Y. Chan, <i>Communications in Statistics-Theory and Methods</i> (1995, 2000)
1997	KDT'ler için geliştirilmiş yazılımların analizi KDT, KSDT ve KMDT'ler ve bunlara uygun modeller KDT örneği: Margarita hazırlama	G. F. Piepel, <i>Journal of Quality Technology</i> J. A. Cornell ve J. M. Harrison, <i>Models and Designs for Experiments with Mixtures- Part II</i> , U. of Florida D. C. Montgomery ve M. L. Bowles, <i>Quality Engineering</i>
1998	Kemometrik yaklaşım: 10 adımda KDT hazırlama hakkında eğitici çalışma KDT'ler ve modellerinin gözden geçirilmesi ve gelecek ön görüşleri	L. E. Eriksson vd., <i>Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems</i> J. A. Cornell, <i>Journal of Statistical Computing and Simulation</i>
1999	Optimum Tasarım Algoritmalarının gözden geçirilmesi ve yazılımlar; kısıtlı bölgeler için tasarım önerileri <i>Pharmaceutical Experimental Design</i> (Bölüm 9 ve 10)	R. J. Martin vd., <i>Statistics and Computing</i> G. A. Lewis vd.
2000	Formülasyon için Deney Tasarımı ve Optimizasyonu hakkında öğretici makaleler <i>Plans d'Expériences: Les Mélanges</i> (Sadece KDT'lere ayrılmış bir kitap)	D. Mathieu ve R. Phan-Tan-Luu, <i>Planification d'Expériences en Formulation: Criblage, Optimisation, Techniques de l'Ingénieur</i> J. Goupy
2002	<i>Response Surface Methodology</i> (Bölüm 12 ve 13)	R. H. Myers ve D. C. Montgomery (2 basım: 1993, 2002)
2004	<i>Design of Experiments in Chemical Engineering</i> (Kısım 3)	Z. L. Lazic'
2005	<i>Experimental Design for Formulation</i> KDT'lerin 40 yılının gözden geçirilmesi	W. F. Smith F. Louvet, <i>40 ans de Plans de Mélange: Bilans et Perspectives</i> , 30 ans de Méthodologie de la Recherche Expérimentale, U. P. Cezanne – Aix-Marseille III
2006	<i>Pharmaceutical Experimental Design and Interpretation</i> (Bölüm 10)	N. A. Armstrong (2 basım: 1997, 2006)
2007	<i>Optimum Experimental Designs, with SAS</i> (Bölüm 16, 2.basım) <i>Response Surfaces, Mixtures, and Ridge Analyses (Empirical Model Building and Response Surfaces)</i> (Bölüm 16-20, 2.basım için)	A. C. Atkinson vd., (2 basım: 1992, 2007) G. E. P. Box ve N. R. Draper (2 basım: 1987, 2007)

Bu alandaki teorik çalışmaların büyük çoğunluğunun yayımlandığı dergi American Society for Quality (ASQ) tarafından yayımlanan *Technometrics* dergisidir. Bu dergiyi 1990'lı

yıllardan itibaren, yine ASQ tarafından yayımlanan *Journal of Quality Technology*, dergisi takip etmiştir. Diğer taraftan, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* ve *Journal of Statistical Planning and Inference* gibi bazı dergilerde bu alanın teorisi ve bazı pratik uygulamalarına ilişkin yayınlar görülmektedir.

Çalışmanın bu kısmında açıklanacak teorik bilgiler ve bu bilgilerin sunumunda izlenecek yöntemler, bu alana kattığı pratik faydalar ve konunun istatistik ve matematik ayrıntılarını pratik kullanımlarını göz önüne alarak açıkladığı için, Wendell F. Smith'in *Experimental Design for Formulation* kitabındakine benzer şekilde sunulacaktır.

3.2 KDT'ler için Deney Tasarımı Uzayı

Karışım deney tasarımları için deney tasarımı uzayı şu iki kısıt ışığında tanımlanır:

1. Toplam ya da eşitlik kısıtı:

$$\sum_{i=1}^q x_i = x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1.0 \quad (3.1)$$

2. Pozitif değer alma kısıtı:

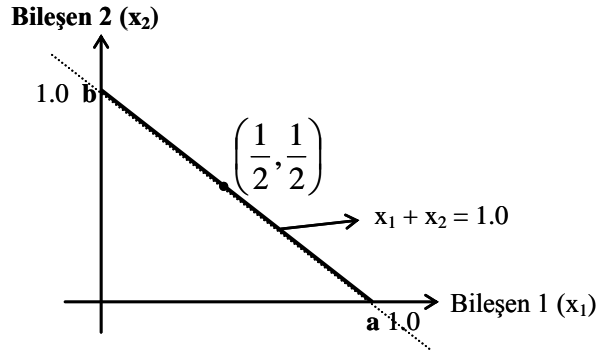
$$0 \leq x_i \leq 1, \quad i = 1, 2, \dots, q \quad (3.2)$$

Burada q karışım bileşenlerin toplam sayısını; x_i ise, i . karışım/ürün bileşenini ve aynı zamanda bu bileşenin karışımdaki oranını temsil etmektedir. x_i , ağırlıkça oran, hacimce oran ya da mol kesri olarak ta ifade edilebilir, ama bilimsel literatürde daha çok ağırlıkça oran olarak ifade edilmektedir. KDT'ler için temel kısıt bir numaralı kısıttır (3.1). Bu iki kısıtı birlikte sağlamak demek: bir karışımın ancak negatif değer almayan bileşenlerin (niceliklerin) bir araya getirilmesi ile elde edilebileceği demektir.

$i = 1, 2, \dots, q$ olmak üzere x_i , değerleri için kullanılan koordinat sistemine, simpleks koordinat sistemi denir. $i = 1, 2, \dots, q$ olmak üzere, x_i karışım bileşenleri üzerindeki (3.1) ve (3.2)'deki kısıtlamalar nedeniyle q bileşenli ve simpleksin sınırları üzerindeki veya içindeki noktalardan oluşan faktör uzayının geometrik tanımı $(q-1)$ boyutlu simplekstir.

Eğer iki bileşenli bir karışım yerine, iki faktörlü (karışım bileşeni olmayan) bir deney tasarımı çalışması yapılırsa, deney tasarımı uzayı x_1, x_2 gibi iki boyutlu bir koordinat sistemi ile tanımlanır. Şekil 3.3'te bu koordinat sistemi verilmiştir. Burada yatay eksen x_1 eksen, dikey eksen ise x_2 eksen ile gösterilmektedir. a ile gösterilen $x_1 = 1.0$ noktası x_1 ve x_2 oranlarının sırasıyla 1.0'e ve 0.0'a eşit olduğu bir karışım olarak düşünülebilir. Benzer şekilde b ile gösterilen $x_2 = 1.0$ noktası, x_1 ve x_2 oranlarının sırasıyla 0.0'a ve 1.0'e eşit olduğu bir karışım olarak düşünülebilir.

Şekil 3.3'teki gibi bu iki noktadan sonsuz uzunlukta bir doğru geçirirsek bu doğru üzerinde herhangi bir noktada $x_1 + x_2 = 1.0$ olacaktır ve böylelikle eşitlik kısıtı sağlanmış olacaktır. Fakat bu durumda x_1 ve x_2 negatif değerler de alacaktır (kesikli noktalar). Bu ise 2. kısıta aykırıdır. Dolayısıyla pozitif değer alma kısıtını uygulamak bu doğrunun kalın olan kısmı üzerinde çalışılması gerektiği sonucunu doğurur. Yani, tüm deney noktaları bu kalın doğru üzerinde olmalıdır. Kalın doğru parçası üzerindeki tüm noktalar $(x_1, 1-x_1)$ veya $(1-x_2, x_2)$ biçimindedir.



Şekil 3.3 $q = 2$, $x_1 + x_2 = 1.0$ için faktör uzayı bir boyutlu simplekstir.

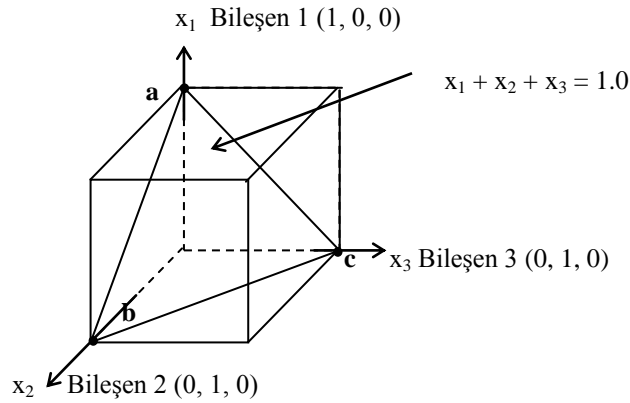
1-boyutlu simpleksi tanımlamak için kullandığımız adımlar şu şekilde özetlenebilir:

- Toplam kısıt 2-boyutlu faktör uzayını tek-boyutlu bir doğruya indirger.
- Pozitif değer alma kısıtındaki eşitlik koşulu (\leq), 2 sınırlayıcı eksen tanımlar (x_1 ve x_2).
- Bu iki kısıt faktör uzayını tek-boyutlu bir simplekse indirger.

Buradan da görüleceği üzere kullanılan kısıtlar, 2-boyutlu bir faktör uzayını, 1-boyutlu karışım uzayına indirgedi ve sonuç olarak bir adet serbestlik derecesi (degree of freedom)

kaybedildi. Genellikle, q-bileşenli bir karışım için karışım uzayı, q-1 boyutlu bir simplekse dönüşür ve deney noktası toplamının bir eksiği kadar serbestlik derecesi (df) oluşur.

Diğer taraftan, 3-bileşenli bir simpleks ile çalışılıyorsa bu durumda, bir birine dik üçlü bir koordinat sistemi tanımlanmalıdır. x, y, z ile gösterilen bu eksenler sırasıyla x_1 , x_2 , x_3 'e karşılık gelmektedir. Şekil 3.4 'te gösterilen bu koordinat sistemi üzerinde $x_1 = x_2 = x_3 = 1.0$ noktaları, sırasıyla, a, b ve c ile işaretlenirse, bu üç noktadan ancak bir düzlemin geçebileceği görülür. Bu düzlem sonsuzdur. Bu simplekse pozitif değer alma kısıtı uygulanırsa, sınırsız düzlem üç adet yeni düzlemlle sınırlanır. Bu yeni düzlemler: $x_1 x_2$, $x_1 x_3$ ve $x_2 x_3$ düzlemleridir. Böylelikle ab, ac ve bc kenarları ile tanımlanan bir eşkenar üçgen oluşur. Dolayısıyla, tasarımın deneme/deney noktalarının tamamı eşkenar üçgenin sınırları üzerinde veya içinde kalmalıdır.

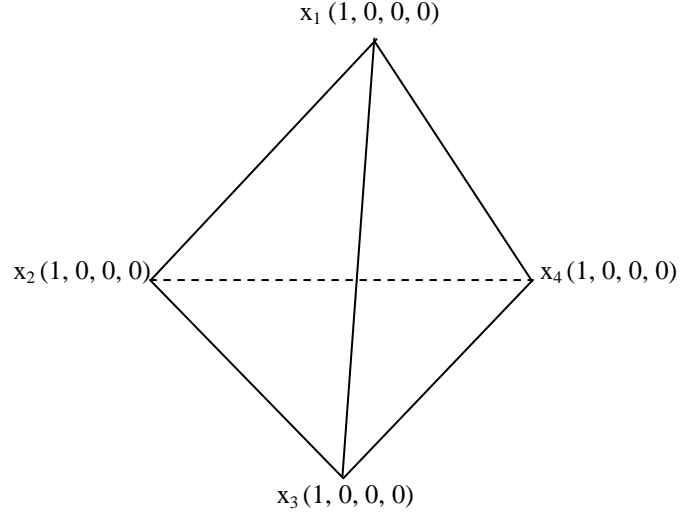


Şekil 3.4 $q = 3$, $x_1 + x_2 + x_3 = 1.0$ için faktör uzayı iki boyutlu simplekstir.

$q \geq 3$ için simpleks tanımlanırken şu genel adımlar izlenir:

- A. Toplam kısıtı faktör uzayını $q-1$ boyutlu bir düzleme ($q = 3$ için) ya da hiperdüzleme (çok boyutlu düzleme) ($q > 3$ için) dönüştürür.
- B. Pozitif değer alma kısıtındaki eşitlik koşulu (\leq), q adet $q-1$ boyutlu sınırlayıcı düzlem ($q = 3$ için) ya da sınırlayıcı hiperdüzlem ($q > 3$ için) oluşturur.
- C. Bu iki kısıt faktör uzayını düzgün ($q-1$)-boyutlu bir simplekse indirir.

Eğer $q = 4$ için yukarıdaki işlemler yapılacak olursa, Şekil 3-5'teki gibi 4-bileşen için düzgün bir dörtyüzlü (tetrahedron) ya da piramit elde edilir. Sonuç olarak, yüksek dereceli simpleksler için Şekil 3-3 - 3-5'ten şu genel özellikler elde edilir.



Şekil 3.5 $q = 4$, $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ için faktör uzayı üç boyutlu simplekstir. Tasarımın tüm deneme noktaları piramitin sınırları üzerinde ya da içinde olmalıdır.

Özellik 3.1:

KDT'lerde tüm sınırlar simplekstir. Örneğin üç boyutlu bir düzgün dört yüzlü 14 adet simpleks tarafından sınırlandırılır:

- Dört adet 2-boyutlu simpleks (üçgen) tarafından,
- Altı adet tek-boyutlu simpleks (kenar) tarafından ve
- Dört adet boyutsuz simpleks (tepe nokta ya da uç nokta – vertex ya da extreme vertex) tarafından sınırlanır.

Özellik 3.2:

Her tepe nokta diğer tepe noktalara bağlı olduğundan, q -bileşenli bir simpleksin d -boyutlu simplekslerinin sayısı:

$$N_d = \binom{q}{d+1} = \frac{q!}{(d+1)!(q-d-1)!} \quad (3.3)$$

Özellik 3.3:

Herhangi bir simpleks tasarımı sınırlayan simplekslerin (kenarların, düzlemlerin ve tepe noktalarının) toplam sayısı:

$$N_{\text{toplam}} = \binom{q}{1} + \binom{q}{2} + \binom{q}{3} + \dots + \binom{q}{q-1} = 2^q - 2 \quad (3.4)$$

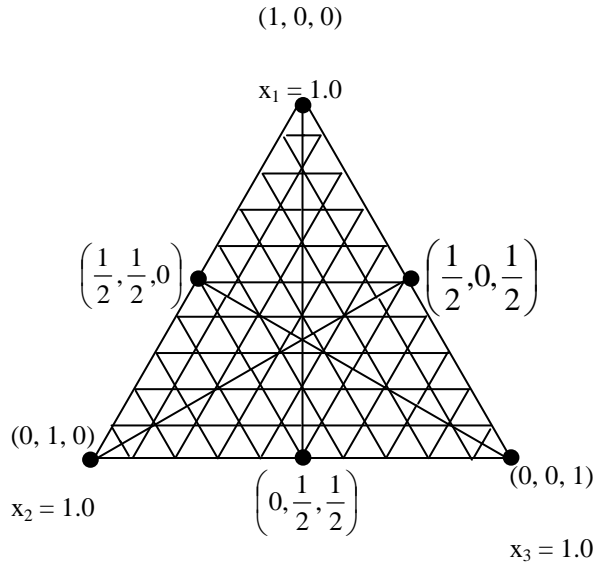
Örnek olarak, 8 bileşenli bir simpleks 7-boyutludur ve $2^8 - 2 = 254$ adet daha düşük boyutlu simpleks tarafından sınırlanır.

Şekil 3-5'ten de anlaşıldığı üzere simplekslerin tepe noktaları “saf” bileşenlere karşılık gelir. 2-bileşenli karışım birimleri tek-boyutlu kenarlarda; 3-bileşenli karışım birimleri ise, 2-boyutlu yüzeylerde (düzlemlerde) oluşur. 4-bileşenli karışımlar ise piramidin içinde oluşur.

Bir simpleks tasarımında oluşacak kenar sayısını bilmenin çeşitli faydaları vardır. Bunlardan en önemlisi: eğer karışımların 2-bileşenli birimlerinin (karışım birimleri) davranışı incelenmek isteniyorsa, kenarlar bu tür birimlerin yerleştirileceği en uygun yerlerdir. Örneğin, 2 bileşenli karışımın etkisini, 2.dereceden bir terimle açıklamak istiyorsak, tepe noktalar ve kenarların orta noktaları deney noktası olarak en uygun noktalarlardır. Diğer taraftan, eğer 2 bileşenli karışımın etkisini 3.dereceden bir terimle açıklamak istiyorsak, tepe noktalar ve kenarların 1/3'ü ve 2/3'üne denk gelen karışım noktaları en uygun noktalar olacaktır. Sonuç olarak, ikili karışımları tespit etmek için gereken toplam deney noktaları sayısı, tepe noktaların sayısı ile kenar üzerindeki noktaların belirli çarpımlarının toplamına eşit olacaktır.

3-bileşenli bir karışımda x_1 bileşeninin %100'ü tepe noktasına (üçgenin tepesine) karşılık gelir. Aynı bileşenin %0'ı ise tepenin tam karşısındaki $q - 2 = 1$ boyutlu alt-simpleksin üzerine denk gelir. Bu kenar eşkenar üçgenin tabanıdır. Şekil 3.6'da üçgenin tabanına paralel olarak çizilmiş yatay çizgiler 0.1 birimlik artışları göstermektedir. Yani, x_1 bileşeni tabanda 0.0 değerini bir üstteki yatay çizgide 0.1 değerini alarak tepede 1.0 değerine ulaşır. Aynı şekilde x_2 ve x_3 'e ait tepe noktası ve kenarlar 10 eşit parçaya bölünmüştür. Düzlem üzerinde alınacak herhangi bir noktada bu üç bileşenin toplamı 1.0'a eşit olacaktır. Kenarların orta noktalarında ilgili bileşenin değeri 0.0, diğer iki bileşenin değerleri ise $\frac{1}{2}$ 'ye eşit olacaktır.

Şekil 3.5'teki 4-bileşenli karışım sisteminde x_1 %100 değerini piramidin tepe noktasında, %0 değerini ise $q - 2 = 2$ boyutlu alt-simpleks (düzlem) üzerinde, yani düzgün piramidin tabanındaki eşkenar üçgen üzerinde alır. Beş ya da daha fazla sayıdaki bileşenden oluşan karışım sistemlerinde düzlemler, hiperdüzlemlere dönüşür.



Şekil 3.6 3-bileşenli bir karışım sisteminde simpleks koordinat sistemi.

3.3 KDT'ler için Matematik Modeller

Değiştirilebilir niceliklerin olduğu herhangi bir sistemde amaç, bu tür değişkenlerin herhangi ölçülebilir bir cevap üzerindeki etkisini analiz etmek ise, bu tür değerlendirme ve analizlerin birçoğunun *regresyon analizi* yöntemiyle kolaylıkla yapılabileceği önceki bölümde açıklanmıştı. Regresyon analizinde kullanılacak veri kümeleri yapılan deneylerle toplanmaktadır ve bu veriler bazı matematik modeller yardımıyla (empirical) sayısallaştırılmaktadır. Yani, var olan fonksiyonel ilişki matematik modeller yardımıyla açıklanmaktadır.

KDT'lerde birçok regresyon modeli kullanılabilir. Fakat bu çalışmada Scheffé tipi kanonik (canonical) çokterimlilerle ilgilenilecektir. Webster Sözlüğüne göre kanonik kelimesi:

“mümkün olan en basit ya da açık biçime indirgenmiş” demektir (Smith, 2005). Kanonik biçime getirilmiş Scheffé tipi çokterimliler, matematik modelleme açısından bakıldığında, KDT’leri modellemekte kullanılabilecek mümkün olan en basit matematik fonksiyonlardır ve dolayısıyla, bu tip çokterimliler günümüzde KDT alanında yapılmış birçok bilimsel yayında ve kitapta ve özellikle deney tasarımları için geliştirilmiş yazılımlarda kullanılmaktadır.

Scheffé tipi çokterimlileri isminden de anlaşılacağı üzere ilk olarak Henry Scheffé ortaya koymuştur (Scheffé, 1958, 1963). Takip eden gelişmeler ise, J. W. Gorman, J. E. Hinman ve ayrıca D. P. Lambrakis tarafından ortaya konulmuştur (Gorman ve Hinman, 1962; Lambrakis, 1968a, 1968b, 1969a, 1969b). D. P. Lambrakis, bu tip çokterimliler için genelleştirilmiş modeller sunmuş ve bu alanda ortaya çıkan istatistikî sorunları ilk defa ortaya koymuştur.

Regresyon analizinde kullanılan en basit model, doğrusal modeldir. Fakat burada “doğrusal” kelimesi ile ne kast edildiğinin açıklanması gerekmektedir. Zira bu kelimenin regresyon analizi açısından iki anlamı vardır.

Doğrusal bir model şu şekilde yazılabilir:

$$E(y)=\delta_0 x_0+\delta_1 x_1+\delta_2 x_2+\dots+\delta_p x_p \quad (3.5)$$

Burada $E(y)$, y 'nin beklenen değerini; δ 'lar ise *parametre* ya da katsayı olarak ifade edilmektedir. x_i 'ler ise ($i = 0, 1, \dots, p$) kestirim değişkenleri, regresör değişkenleri ya da en çok kullanılan biçimiyle regresörler olarak adlandırılır. Burada doğrusal model ile kastedilen şey esasında parametreler açısından doğrusal olan modellerdir. Bu durumu örneklemek gerekirse:

$$E(y)=\delta \sin \theta \quad (3.6)$$

$$E(y)=\delta +\gamma \ln x \quad (3.7)$$

$$E(y)=\delta +\gamma x+\phi x^2 \quad (3.8)$$

Yukarıdaki her üç model de doğrusal regresyon modelidir. Fakat eşitlik (3.9)'daki regresyon modelleri doğrusal olmayan regresyon modelleridir. Çünkü bu eşitlikler (3.5) biçiminde yazılamazlar.

$$E(y)=x^\delta$$

$$E(y)=e^{\delta +\gamma x} \quad (3.9)$$

$$E(y)=\frac{1}{1+e^{-\delta +\gamma x+\varphi x^2}}$$

Yukarıdaki tüm denklemlerde δ , γ ve φ 'lar parametreleri ya da başka bir deyişle katsayıları göstermektedir. Eşitlik (3.6) - (3.8)'deki doğrusal modeller ile (3.5)'teki doğrusal model karşılaştırılacak olursa: (3.6)'daki $\delta \equiv \delta_0$ ve $\sin \theta \equiv x_0$ 'dır. (3.7)'deki $\delta \equiv \delta_0$; $1 \equiv x_0$; $\gamma \equiv \delta_1$ ve $\ln x \equiv x_1$ dir. Benzer eşleştirmeler (3.8) eşitliği için de yapılabilir. Dolayısıyla doğrusal modellerde x 'ler cebirsel ifadeler olabildiği gibi aşkın (transcendental) ifadeler de olabilir.

Çalışmanın amacı açısından yukarıdaki eşitliklerden en önemlisi (3.8) eşitliğidir. Bu eşitlik çokterimli bir modeldir. Zira çokterimli bir model şu biçimde gösterilir:

$$E(y)=\delta_0 +\delta_1 x+\delta_2 x^2+\dots+\delta_p x^p \quad (3.10)$$

Burada üsler tamsayı olmak zorundadır. (3.8) eşitliği 2.dereceden bir çokterimlidir. 1.dereceden çokterimlilere *doğrusal*; 2.dereceden olanlara karesel; 3.dereceden olanlara ise kübik çokterimliler denir. Sonuç olarak, burada *doğrusal* sıfatı yukarıdaki doğrusal - doğrusal olmayan model karşılaştırmasından çok farklıdır. Dolayısıyla bu çalışma boyunca kullanılacak “doğrusal model” den kasıt parametrelerin ilişkisi açısından doğrusal olan model olacaktır. Fakat nerede “*doğrusal çokterimli*” (karesel çokterimli, kübik çokterimli, gibi) ifadesi kullanılırsa bundan kasıt, bu çokterimlinin derecesidir. Yani bu çokterimlinin derecesinin “1” olduğu anlaşılmalıdır.

3.3.1 KDT Matematik Modelleri için Varsayımlar

Herhangi bir matematik model iki parçadan oluşur: model eşitliği ve bu modelin terimleri için gerekli olan varsayımlar (Smith, 2005). Bu çalışma boyunca regresyon modellerinin cevap verilerine uydurulması için Sıradan En Küçük Kareler (SEK) (Ordinary Least Squares) ya da Kısmi En Küçük Kareler (KEK) (Partial Least Squares) yöntemleri kullanılacaktır. Bunun için bazı varsayımlar yapılacak ve bu varsayımlar SEK regresyon modellerinin bir parçası olacaktır.

Eğer eşitlik (3.11)'deki gibi basit bir doğrusal regresyon modeli göz önüne alınırsa:

$$E(y) = \delta_0 + \delta_1 x \quad (3.11)$$

Bu modelde $E(y)$, y 'nin x 'in belirli bir değerine bağlı olarak değişeceği beklenen fonksiyon değeridir. Bu durum şu şekilde de ifade edilebilir: $E(y|x)$ ya da daha basit olarak η . $E(y)$, x 'in belirli bir değeri için toplanan sonlu sayıdaki örneklemeler sonucu, beklenen ortalama (aritmetik ortalama) değerdir. Buraya kadar “matematik model” olarak adlandırılan ifadeler aslında, daha doğru şekliyle, “*beklenti fonksiyonu*”dur. Ölçüm için $E(y_i)$ 'nin beklenen değeri, elbette ki, tek bir ölçüm değerinden farklı olacaktır. Bu iki durum arasındaki fark şu şekilde ifade edilebilir:

$$\varepsilon = y_i - E(y_i) = y_i - \delta_0 - \delta_1 x$$

Bu eşitlik yeniden düzenlenirse:

$$y_i = \delta_0 + \delta_1 x + \varepsilon_i$$

Bu model tüm ölçümlere uygulanacağından alt indisin kullanılmasına gerek yoktur. Dolayısıyla eşitlik şu şekilde yazılabilir:

$$y = \delta_0 + \delta_1 x + \varepsilon$$

Bu ifadeyi genelleştirecek olursak eşitlik (3.12)'yi elde ederiz:

$$y = f(\delta, x) + \varepsilon \quad (3.12)$$

Bu eşitlik artık bir matematik model olarak adlandırılabilir (Smith, 2005; Draper ve Smith, 1998). Bu ifadedeki son terim (ε) gürültü terimi olarak adlandırılıp, cevap ölçümlerinin modele tam olarak uydurulamayacağına göstergesi olarak algılanmaktadır. Her x değerinin hatasız ölçüldüğü kabul edildiği halde ε , kendine özgü bir olasılık dağılımı olduğu varsayılan rastsal bir değişkendir. ε 'a ait olasılık dağılımı özelliklerinin aynısının y 'ler için de geçerli olduğu varsayılmaktadır. Dolayısıyla, ölçülen cevaplar da (y 'ler), x 'in aldığı her belirli değer için, kendine özgü bir olasılık dağılımı olan rastsal değişkenlerdir.

(3.11) eşitliği ölçüm verilerine uydurulursa, bu uydurulmuş model şu şekilde ifade edilebilir:

$$\hat{y} = d_0 + d_1 x \quad (3.13)$$

Burada \hat{y} , “ y şapka” diye okunmalıdır. \hat{y} , y 'nin uydurulmuş değerini ifade eder ve d_0 ve d_1 ise, sırasıyla, sabit terimi (intercept) ve eğim değerleri için kısmî-kareler tahmin edicileridir. SEK tahmin edicileri y_i ölçümlerinin doğrusal kombinasyonlarıdır.

Dolayısıyla, bu tahmin ediciler de rastsal değişkenlerdir ve bunların da kendilerine özgü olasılık dağılımları vardır (Cornell, 2002; Smith, 2005).

Ölçülen y_i değerleri ile bunlara ilişkin uydurulmuş değerler (\hat{y}_i) arasındaki farklar *artıklar* olarak adlandırılır. Artıkları, ε ile gösterilen ve gürültü olarak adlandırılan ama aslında “kavramsal-sistemik hata” olarak da tanımlanabilecek olan hatadan ayırmak için, “e” harfi kullanılır. Sonuçta artıklar için şu ifadeyi yazmak mümkündür:

$$e = y_i - \hat{y}_i = y_i - d_0 + d_1 x \quad (3.14)$$

Diğer taraftan, ε_i için yapılan varsayımlar Gauss – Markov (G-M) koşulları olarak adlandırılan varsayımlar içinde tanımlamak mümkündür (Smith, 2005; Draper ve Smith, 1998). Bu varsayımlar şu şekildedir:

$$E(\varepsilon_i)=0, \quad \text{her } i \text{ için} \quad (3.15)$$

$$\text{var}(\varepsilon_i)=\sigma^2, \text{ her } i \text{ için} \quad (3.16)$$

$$\text{cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_j)=0, \text{ her } i \neq j \text{ için} \quad (3.17)$$

Eşitlik (3.15), “Olmaması durumunda ilgili olasılık dağılımlarında sistematik yanlılığa (bias) sebep olacak olan ve model için gerekli, anlamlı ve açıklayıcı değişkenlerden hiçbiri, model dışında kalmamıştır” ı ifade etmektedir. Eşitlik (3.16) ise, “ölçülen bütün cevaplar (y_i) aynı oranda güvenilirmezdir” anlamına gelmektedir ve değişkenliğin homojen olması varsayımı olarak bilinmektedir. Bu varsayım genellikle verilere model uydurulduktan sonra kontrol edilebilmektedir. Bu varsayımın sağlanmadığı durumlarda sorun, değişkenliği kararlaştırmak için cevap değişkenlerinin dönüştürülmesi ya da bazı durumlarda ağırlıklandırılmış en küçük kareler yöntemleri kullanılarak giderilir (Cornell, 2002; Lazic, 2004; Smith 2005). Son olarak, eşitlik (3.17) ikili olarak her bir dağılımın birbirinden bağımsız olduğunu ifade etmektedir. (3.17) varsayımının sağlanmadığı durumlarda sorun, genelleştirilmiş en küçük kareler (generalized least squares) yöntemi kullanılarak çözümlenir (Smith, 2005; Draper ve Smith, 1998). Fakat bu yöntem, çalışmanın konusu dışında kaldığı için ileride de üzerinde durulmayacaktır.

Bir bütün olarak bakıldığında G-M koşulları, olasılık dağılımlarının birbirinden bağımsız fakat birbirine benzer olduğunu ifade etmektedir. Bu durum kısaca şu şekilde ifade edilir: $\varepsilon_i \sim b. b. d.$ (İngilizce olarak: $\varepsilon_i \sim i. i. d. - \text{independently and identically distributed}$). En küçük kareler tahmin edicilerinin kalitesi hakkında önemli bir sonuç, Gauss-Markov teoremidir. Bu teorem şöyledir: G-M koşullarında en küçük kareler tahmin edicileri, diğer

tüm doğrusal tahmin ediciler içinde, yansızdırlar ve minimum değişkenliğe sahiptirler. Bu tahmin ediciler İngilizcede BLUE (Best Linear Unbiased Estimators) şeklinde kısaltılırlar. Çünkü bu tahmin ediciler için “*best*”, minimum değişkenlik (kesinlik) anlamına; “*linear*”, tahmin edilen katsayıların y_i 'nin doğrusal kombinasyonları olduğu anlamına; “*unbiased*” ise, $E(d_j)$ 'nin δ_j 'ye eşit olduğu anlamına gelmektedir (Smith, 2005)

Model varsayımları için kullandığımız G-M koşulları buraya kadar ε_i 'nin normal dağılması gerektiği hakkında hiçbir şey söylememektedir. Zira normal dağılım koşulu, eğer hipotez testleri ve güven aralığı tahmini için içinde yoksa en küçük kareler tahmini için gerekli değildir (Cornell, 2002). Fakat bu testler ve tahminler çoğu zaman gereklidir. Değişkenlik için homojen dağılım varsayımına benzer biçimde normal dağılım varsayımı da ölçüm verilerine model uydurulduktan sonra kontrol edilebilmektedir.

Sonuç olarak model varsayımları şöyle özetlenebilir: ε_i , 0 ortalama değerine, σ^2 değişkenliğe, normal ve bağımsız dağılıma sahiptir. Kısaca, $\varepsilon_i \sim \text{NID}(0, \sigma^2)$ şeklinde gösterilir.

Deney tasarımlarında kullanılan bütün modeller, tüm çeşitliliklerine rağmen “genel doğrusal model” (general linear model) biçiminde gösterilebilir (Draper ve Smith, 1998). Bu gösterim matris gösterimidir ve şu şekildedir:

$$\mathbf{Y}=\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}+ \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.18)$$

Yapılan deneme (deney) sayısı n ile gösterilir ve p ile de modeldeki parametre sayısı gösterilirse: \mathbf{Y} , ölçülen cevapların $n \times 1$ tipi bir sütun vektörünü; \mathbf{X} , regresör değişkenlerinin $n \times p$ tipi bir matrisini; $\boldsymbol{\beta}$, katsayıların $p \times 1$ tipi bir sütun vektörünü; $\boldsymbol{\varepsilon}$ ise, gürültülerin (rastsal hataların) $n \times 1$ tipi bir sütun vektörünü ifade eder.

Burada $p \geq q$ olmak üzere \mathbf{X} , $n \times p$ tipinde ve i -inci satırı, i -inci gözleme karşılık gelen p tane x_i değişkeninin değerlerini içeren matristir. 3-bileşenli bir karışım için $u = 5$ ölçüm (deneme) yapılan doğrusal model ele alınırsa, (3.18)'deki doğrusal çokterimli modelde, x_{ui} , u . denemedeki ($u = 1, 2, 3, 4$ ve 5) i . bileşen oranlarını ($i = 1, 2, 3$) göstermek üzere bu modelin matris biçimi (3.19) biçimindedir:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \\ x_{41} & x_{42} & x_{43} \\ x_{51} & x_{52} & x_{53} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

Eşitlik (3.18)'de verilen modelin en küçük kareler tahmin edicisi,

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y} \quad (3.20)$$

ve varyans-kovaryans matrisi ise,

$$\text{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \quad (3.21)$$

şeklindedir.

3.3.2 Doğrusal Çokterimli Modeller

Herhangi bir deney tasarımı için aşağıdaki gibi bir doğrusal bir model öngörülürse, bu tip bir modelin birden fazla biçiminin olacağı açıktır. Yani, yapılan ölçüm sonuçları için (3.22) biçiminde sonsuz tane model yazılabileceği mutlaklır.

$$E(y) = \delta_0 + \delta_1 x_1 + \delta_2 x_2 \quad (3.22)$$

Bu tip bir modelin karışım verisine uydurulması mümkün değildir. Zira bu model için \mathbf{X} matrisi üç sütunlu bir vektör olur ($\mathbf{X} = [\mathbf{1}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2]$) ve geometrik olarak bu modele ölçüm verisini uydurabilmek için 3-boyutlu karışım uzayına ihtiyaç duyulmaktadır. Oysa bu model için karışım uzayı 2-boyutludur. Ayrıca, eşitlikte KDT'lerin temel kısıtı olan toplam ya da eşitlik kısıtı, $x_1 + x_2 = 1.0$, göz önüne alınırsa, bu durumun regresör değişkenleri arasında tam bir doğrusal bağımlılığa, dolayısıyla aşırı-parametrelili (overparameterized) model sorununa yol açtığı görülür.

p modeldeki terim sayısı olmak üzere x_1, x_2, \dots, x_p , (3.18) eşitliğinde \mathbf{X} matrisinin p sütunu olsun. \mathbf{X} matrisinin sütunları arasında tam bir lineer bağımlılık varsa, yani (3.23)'teki gibi tümü sıfır olmayan c_j 'ler varsa \mathbf{X} matrisinin rankı p 'den küçük olacaktır.

$$\sum_{j=1}^p c_j x_j = 0 \quad (3.23)$$

Bu durumda $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ matrisi tekildir (singular) ve tersi yoktur. Diğer taraftan,

$$\sum_{j=1}^p c_j x_j \cong 0 \quad (3.24)$$

ise çoğu kez kötü koşulluluk (ill-conditioning) olarak tanımlanan durum oluşur. Kötü koşulluluk ya da iç-ilişkinin (collinearity) istenmeyen etkileri vardır (Coşkuntuncel, 2002):

1. $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ hatalı hesaplanabilir. Bu durumda SEK yöntemi ile elde edilen β tahminleri yanlış olur.
2. $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ doğru hesaplanırsa dahi, $\hat{\beta}_j$ 'lerin değişkenliği kötü koşulluluk tarafından şişirilecektir. $\hat{\beta}_j$ 'lerin örneklem dağılımı, $\hat{\beta} \sim \text{NID}(\beta, \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1})$, büyük değişkenliğe sahip ise $\hat{\beta}_j$ 'ler yanlış hesaplanabilir veya işaretleri yanlış olabilir. Bu durumda $\hat{\beta}_j$ 'ler kararlı değildir.
3. x_j 'ler arasındaki iç-ilişki, adımsal regresyon (stepwise regression) işleminin sonuçlarının karşılaştırılmasında tutarsızlığa ya da karışıklığa neden olur. Bu tutarsızlık değişken seçimini yanlış sonuca götürür (St. John, 1984).

Bu sorunlara ve çözüm yöntemlerine alt-bölüm (3.7)'de ayrıntılı olarak değinilecektir.

Eşitlik (3.22)'den kaynaklanan sorun iki yolla giderilebilir: Bunlardan birincisi q bileşenli koordinat sistemini $q - 1$ bileşenli koordinat sistemine dönüştürmektir. Yani, bir karışım değişkeninden vazgeçmektir (Draper ve Smith, 1998). Bu durum ise, ürün formülasyonları açısından kesinlikle mantıklı değildir. İkinci olarak, bazı cebirsel müdahalelerle bu sorun kolaylıkla giderilebilir:

$$\begin{aligned}
 E(y) &= \delta_0(1) + \delta_1 x_1 + \delta_2 x_2 \\
 &= \delta_0(x_1 + x_2) + \delta_1 x_1 + \delta_2 x_2 \\
 &= (\delta_0 + \delta_1)x_1 + (\delta_0 + \delta_2)x_2 \\
 &= \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

Bu tip cebirsel müdahalelere kanonik biçime dönüştürme denilmektedir ve ilk defa H. Scheffé tarafından önerilmiştir (Scheffé, 1958, 1963). Burada $\beta_1 = \delta_0 + \delta_1$ ve $\beta_2 = \delta_0 + \delta_2$ 'dir. Bu dönüştürmeyi genelleştirmek gerekirse, q adet bileşenden oluşan doğrusal bir çokteriminin $q + 1$ adet terimi vardır ve tam-rankı olan matematik modelin (KDT modeli) elde edilmesi için bir terimin yok edilmesi gerekir. Burada yok edilmesi gereken terim her zaman sabit terim (δ_0) değildir ve böyle bir zorunluluk ta yoktur. Tam-rankı olan bir

modelde regresörler arasında doğrusal bağımlılık yoktur ve bunun sonucu olarak parametre tahminleri, parametrelere özgü ve biricik olur.

Eşitlik (3.25) doğrusal Scheffé çokterimlisi olarak adlandırılır ve şu şekilde yazılabilir:

$$E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i \quad (3.26)$$

Doğrusal Scheffé çokterimlisinin terim sayısı karışımdaki bileşen sayısı (q) kadardır. Ayrıca, bu modeldeki doğrusal katsayılar (parametreler), cevap değişkeninin simpleksin tepe noktalarındaki tahmin değerleri olup, bileşenlerin etkileri hakkındaki tahminler değildir.

3.3.3 Karesel (2.dereceden) Çokterimli Modeller

Alt bölüm 3.3.2'de olduğu gibi burada da durumu daha basitleştirmek için 2-bileşenli karışımlar ele alınacak ve bu tip modeller bir örnek üzerinden açıklanacaktır (Smith, 2005). Çizelge 3.3'teki ölçüm verilerinin gürültüsüz yani sistematik hatasız olduğu varsayılacaktır.

Çizelge 3.3 Cevap değişkeni y'nin karışım bileşenlerine bağlı değişimi

x_1	x_2	y
1.0	0.0	10.00
0.8	0.2	12.64
0.6	0.4	14.96
0.4	0.6	16.96
0.2	0.8	18.64
0.0	1.0	20.00

Bu ölçüm verisine şöyle bir karesel model uydurulabilir:

$$E(y) = \delta_0 + \delta_1 x_1 + \delta_2 x_2 + \delta_{12} x_1 x_2 + \delta_{11} x_1^2 + \delta_{22} x_2^2 \quad (3.27)$$

Bu modele yukarıdaki ölçüm verisi uydurulursa, doğrusal modelde olduğu gibi, yine sonsuz sayıda model elde edilebilir. Bu modellerden ikisi aşağıdaki gibi gösterilebilir:

$$E(y) = 17 - 5x_1 + 4x_2 + x_1x_2 - 2x_1^2 - x_2^2 \quad (3.28)$$

$$E(y) = 16 - 5x_1 + 5x_2 + 2x_1x_2 - x_1^2 - x_2^2 \quad (3.29)$$

Bu durumun sebepleri doğrusal çokterimli modellerde ki ile aynıdır. Parametre değerleri Çizelge 3.4'teki gibi gösterilebilir. Bu çizelgedeki sütunlar incelendiğinde parametreler arasında şu doğrusal bağımlılıkların olduğu kolaylıkla görülür:

$$1 = x_1 + x_2$$

$$x_1^2 = x_1 - x_1x_2$$

$$x_2^2 = x_2 - x_1x_2$$

Eğer bu ifadeler (3.28)'de yerine konulursa (3.30) eşitliği elde edilir. Aynı işlemler (3.29)'da da yapılabilir:

$$\hat{y} = 10x_1 + 4x_1x_2 + 20x_2 \quad (3.30)$$

Çizelge 3.4 2-bileşenli karesel çokterimli model için tüm parametreler ve değerleri

(1)	x_1	x_2	x_1x_2	x_1^2	x_2^2
1.0	1.0	0.0	0.00	1.00	0.00
1.0	0.8	0.2	0.16	0.64	0.04
1.0	0.6	0.4	0.24	0.36	0.16
1.0	0.4	0.6	0.24	0.16	0.36
1.0	0.2	0.8	0.16	0.04	0.64
1.0	0.0	1.0	0.00	0.00	1.00

Eşitlik (3.30)'daki durumu genelleştirmek gerekirse q-faktörlü karesel regresyon modeli için genel çokterimli biçim şu şekildedir:

$$E(y) = \delta_0 + \sum_{i=1}^q \delta_i x_i + \sum_{i=1}^{q-1} \sum_{j=i+1}^q \delta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^q \delta_{ii} x_i^2$$

Bu ifadeyi tam-ranklı bir karışım modeli yani kanonik biçimde ifade etmek için gerekli olan dönüşümler şunlardır:

Sabit terim için:

$$\delta_0 = \delta_0(1) = \delta_0 \sum_{i=1}^q x_i = \sum_{i=1}^q \delta_0 x_i \quad (3.31)$$

Bu dönüşüm (3.31), sabit terim değerini 1.dereceden terimler toplamına dönüştürür.

2.dereceden terimler için dönüşümler (x_i^2) :

$$\delta_{ii} x_i^2 = \delta_{ii} x_i (1 - \sum_{j \neq i}^q x_j) = \delta_{ii} x_i - \delta_{ii} x_i \sum_{j \neq i}^q x_j \quad (3.32)$$

(3.32)'deki dönüşüm ise, 2.dereceden terimleri tek bir doğrusal terim ve $x_i x_j$ tipi bir çapraz çarpım teriminin toplamı şeklinde ki bir diziye dönüştürür.

Karesel Scheffé çokterimlisinin genel biçimi eşitlik (3.33)'teki gibidir:

$$E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{q-1} \sum_{j=i+1}^q \beta_{ij} x_i x_j \quad (3.33)$$

$\beta_{ij} x_i x_j$ terimi klasik DT çalışmalarında bir etkileşim terimi olarak algılansa bile, KDT açısından bu terim karesel karışım terimi olarak adlandırılmaktadır. β_{ij} katsayısı ise, karesel ya da doğrusal olmayan (nonlinear) karışım katsayısı olarak nitelendirilir. Bu katsayı değeri sıfırdan büyükse ve cevap değişkeninin büyük bir değer olması isteniliyorsa, i ve j bileşenlerinin karıştırılması birbirini destekler (synergistic) ve istenilirdir, denilir. Diğer türlü ise, birbirini desteklemez yani zıt çalışır (antagonistic) olarak nitelendirilir. β_{ij} katsayısının değeri sıfırdan küçük ve düşük çıktı değeri isteniliyorsa, i ve j bileşenlerinin karışımı birbirini destekler (synergistic) ve istenilirdir denilir. Diğer türlü ise, birbirini desteklemez yani zıt çalışır (antagonistic) olarak nitelendirilir.

Karesel Scheffé çokterimlisinin terim sayısı şu şekilde hesaplanabilir:

Terim sayısı $p = q$ adet doğrusal terim + $\binom{q}{2}$ adet çapraz çarpım terimi

$$\begin{aligned} &= q + \frac{q!}{2!(q-2)!} \\ &= q + \frac{q(q-1)}{2} = \frac{q(q+1)}{2} \end{aligned} \quad (3.34)$$

Dolayısıyla, karesel Scheffé çokterimlisini kullanabilmek için gerekli olan minimum deneme noktası sayısı: $\frac{q(q+1)}{2}$ adettir.

Sonuç olarak, 2.dereceden bir çokterimlinin q adet faktör için, $\frac{(q+1)(q+2)}{2}$ adet terimi vardır. Bu çokterimlinin KDT'lere uygulanabilmesi için, yani tam-ranklı bir karışım modeli elde edebilmek için, $q+1$ adet teriminin yok edilmesi gereklidir. q adet karesel (x_1^2) terimin yok edilmesi yeterli, fakat her zaman gerekli değildir. Örneğin eşitlik (3.27)'nin $\frac{(2+1)(2+2)}{2} = 6$ adet terimi vardır ve tam-ranklı bir karışım modeli elde etmek için $2+1 = 3$ adet teriminin yok edilmesi gerekir.

3.3.3.1 Sabit Terim İçeren Karesel (2.dereceden) Çokterimli Modeller

Eşitlik (3.22)'de sabit terim tutulursa, karesel model için, kalan 5 terimin iki tanesi daha tutulmalıdır. Burada x_1 ve x_2 beraber seçilemez. Çünkü her ikisinin beraber seçilmesi tam doğrusal bağımlılığa sebep olur ve dolayısıyla var olduğu düşünülen eğriselliği tespit edecek model elde edilemez. Sonuç olarak, tam-ranklı uygun karışım modeli sayısı $\binom{5}{2} - 1 = 9$ tanedir. q değeri arttıkça sabit terimli KDT modeli sayısı çok hızlı olarak artar. Bu tip modellerin sadece birkaç tanesi kullanışlıdır. Serbest-değişkenli (slack-variable) model bunlardan en bilinenidir. Bu tip modeller, genellikle, bir ürünün ya da karışımın herhangi bir bileşenin oranının, diğer bileşenlerin oranından çok yüksek olduğu durumlarda kullanılır. Yöntem, yüksek oranlı bileşen dışında kalan oranı düşük bileşenlerin oranlarında yapılacak değişikliklerden, oranı yüksek olan bileşenin etkilenmemesi ya da çok az etkilenmesi üzerine kuruludur. Çoğu zaman, oranı yüksek olan bileşen serbest-değişken olarak atanır.

$q = 2$ için, karesel serbest-değişkenli model şu şekildedir:

$$E(y) = \beta_0 + \beta_i x_i + \beta_{ii} x_i^2$$

Eğer $i = 1$ ise, x_2 değişkeni; $i = 2$ ise x_1 değişkeni serbest değişken olarak atanır. (3.30) eşitliğinin serbest-değişkenli biçimleri ise şöyledir:

$$\hat{y} = 20 - 6x_1 - 4x_1^2 \quad x_2 \text{ serbest-değişken}$$

$$\hat{y} = 10 + 14x_2 - 4x_2^2 \quad x_1 \text{ serbest-değişken}$$

x_1 'in serbest-değişken olduğu eşitlik, (3.30) kullanılarak şu şekilde elde edilebilir:

$$\begin{aligned}\hat{y} &= 10x_1 + 4x_1x_2 + 20x_2 \\ &= 10(1 - x_2) + 4(1 - x_2)x_2 + 20x_2 \\ &= 10 + (20 - 10 + 4)x_2 - 4x_2^2 \\ &= 10 + 14x_2 - 4x_2^2\end{aligned}$$

$q > 2$ için bu tip model fonksiyonlarda q .bileşenin (serbest-değişken) terimi eksik olan ve $\sum_{i=1}^{q-2} \sum_{j=i+1}^{q-1} x_i x_j$ gibi ilave terimler içeren modeller olacaktır.

Dolayısıyla, karesel serbest-değişkenli model fonksiyonlarının genel biçimi eşitlik (3.35)'teki gibidir:

$$E(y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{q-1} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{q-2} \sum_{j=i+1}^{q-1} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{q-1} \beta_{ii} x_i^2 \quad (3.35)$$

Bu modeldeki sabit, doğrusal, çarpaz çarpım ve 2.dereceden terimlere ait terim sayıları, sırasıyla, şu şekildedir: 1, $q - 1$, $\left(\frac{(q-1)(q-2)}{2}\right)$ ve $q - 1$. Toplam terim sayısı ise, karesel Scheffé çokterimlisi ile aynı olup, $\frac{q(q+1)}{2}$ adettir.

Diğer bir sabit terimli karesel model ise şu şeklidir:

$$E(y) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{q-1} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{q-1} \sum_{j=i+1}^q \beta_{ij} x_i x_j \quad (3.36)$$

Bu modele dikkat edilirse, karesel Scheffé çokterimlisinden farkın, bir doğrusal terimin sabit değişkenle değiştirilmiş olduğu görülür. Bu yöntem her dereceden Scheffé çokterimlisine uygulanabilir. Eşitlik (3.33)'e bu yöntem uygulanırsa şu iki model elde edilir:

$$\hat{y} = 20 - 10x_1 + 4x_1x_2$$

$$\hat{y} = 10 + 10x_2 + 4x_1x_2$$

İkinci eşitlik elde edilmek istenirse:

$$\begin{aligned}\hat{y} &= 10x_1 + 4x_1x_2 + 20x_2 \\ &= 10(1 - x_2) + 20x_2 + 4x_1x_2 \\ &= 10 + 10x_2 + 4x_1x_2\end{aligned}$$

Bu tip sabit-değişkenli modellerde doğrusal katsayıların anlamı, Scheffé çokterimlilerinden farklıdır. Fakat daha yüksek dereceli terimlerin anlamı aynıdır. Bu tip modeller, DT yazılımlarının Scheffé tipi modeller için doğru regresyon istatistiği vermediği durumlarda kullanışlıdır (Smith, 2005).

3.3.4 Kübik (3.dereceden) Çokterimli ve Kuartik (4.dereceden) Çokterimli Modeller

Doğrusal ve karesel modellerde kullanılan mantığa benzer şekilde yüksek dereceli Scheffé çokterimlileri üretilebilir. Karesel model, doğrusal modele ilgili terimlerin eklenmiş hali, kübik model de karesel modele ilgili terimlerin eklenmiş hali olarak görülebilir. Kübik Scheffé çokterimlisi, $q = 3$ bileşen için, şu şekilde gösterilebilir:

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

Yukarıdaki ifadede iki tip terim vardır:

1. İkili bileşenlerin karışımını gösteren 3.dereceden terimler: $\varphi_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)$
2. Üçlü bileşenlerin karışımını gösteren 3.dereceden terim: $\beta_{ijk} x_i x_j x_k$

Kübik ve kuartik Scheffé çokterimlileri için, bu çalışma boyunca, aşağıdaki terim gösterimleri kullanılacaktır (Smith, 2005):

$$\sum_{i < j} \sum^q \equiv \sum_{i=1}^{q-1} \sum_{j=i+1}^q$$

$$\sum \sum_{i < j < k} \sum^q \equiv \sum_{i=1}^{q-2} \sum_{j=i+1}^{q-1} \sum_{k=j+1}^q$$

$$\sum \sum \sum_{i < j < k < l} \sum^q \equiv \sum_{i=1}^{q-3} \sum_{j=i+1}^{q-2} \sum_{k=j+1}^{q-1} \sum_{l=k+1}^q$$

Sonuç olarak, kübik Scheffé çokterimlisinin genel biçimi eşitlik (3.37)'deki gibidir:

$$E(y) = \sum_i^q \beta_i x_i + \sum_{i < j} \sum^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i < j} \sum^q \varphi_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{i < j < k} \sum^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k \quad (3.37)$$

Diğer taraftan kuartik Scheffé çokterimlisinin genel biçimi eşitlik (3.38)'deki gibi gösterilebilir:

$$\begin{aligned}
E(y) = & \sum_i^q \beta_i x_i + \sum_{i<j} \sum^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j} \sum^q \varphi_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{i<j} \sum^q \theta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)^2 \\
& + \sum \sum_{i<j<k} \sum^q \beta_{ijk} x_i^2 x_j x_k + \sum \sum_{i<j<k} \sum^q \beta_{ijk} x_i x_j^2 x_k + \\
& + \sum \sum_{i<j<k} \sum^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k^2 + \sum \sum_{i<j<k<l} \sum^q \beta_{ijkl} x_i x_j x_k x_l
\end{aligned} \tag{3.38}$$

$\beta_{ijk} x_i^2 x_j x_k$, $\beta_{ijk} x_i x_j^2 x_k$ ve $\beta_{ijk} x_i x_j x_k^2$ terimleri sadece bileşen sayısı $q \geq 3$ olduğu durumlarda, $\beta_{ijkl} x_i x_j x_k x_l$ terimi ise, sadece $q \geq 4$ olduğu durumlarda modele eklenir.

Kübik Scheffé çokterimlisinin terim sayısı, p terim sayısını göstermek üzere, şu şekilde hesaplanabilir:

$$p_{q,3} = \frac{q(q+1)(q+2)}{3!}$$

Kuartik Scheffé çokterimlisinin terim sayısı, p terim sayısını göstermek üzere, şu şekilde hesaplanabilir:

$$p_{q,4} = \frac{q(q+1)(q+2)(q+3)}{4!}$$

Terim sayısı ile ilgili eşitlikler incelendiğinde, Scheffé tipi çokterimli KDT modelleri için, p terim sayısını; m ise çokterimlinin derecesini göstermek üzere, (3.39)'daki gibi bir eşitlik elde edilebilir:

$$p_{q,m} = \binom{q+m+1}{m} = \frac{(q+m-1)!}{m!(q-1)!} \tag{3.39}$$

Bu eşitlik yardımıyla tüm Scheffé tipi KDT modellerinin terim sayıları hesaplanabilir.

3.3.4.1 Kübik ve Kuartik Çokterimli Modellerin Özel Biçimleri

Yukarıdaki Scheffé tipi KDT modelleri incelendiğinde, karışım bileşenlerinin sayıları ve modelin derecesi arttıkça modeldeki terim sayılarının çok hızla arttığı Çizelge 3.5'ten tespit edilebilir. Bu durum Çizelge 3.5'te gösterilmektedir. Bu durumu önlemek için kübik ve kuartik tip modellerin terim sayısı azaltılmış özel biçimleri kullanılabilir.

Çizelge 3.5 Scheffé tipi çokterimli modeller için terim sayıları

q	Doğrusal	Karesel	Kübik	Kuartik
2	2	3	4	5
3	3	6	10	15
4	4	10	20	35
5	5	15	35	70
6	6	21	56	126
7	7	28	84	210

Terim sayısı azaltılmış bu modeller, özel kübik ve özel kuartik modeller olarak adlandırılır. Bu modeller, elbette ki, herhangi bir cevap yüzeyini ve bu yüzeyin eğriselliğini tam modeller gibi modelleyemezler (Cornell, 2002; Smith, 2005).

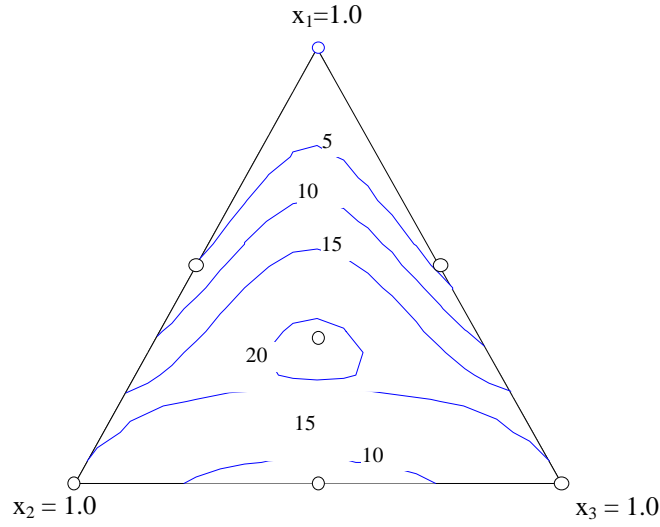
Özel kübik çokterimlinin genel biçimi şu şekildedir:

$$E(y) = \sum_i^q \beta_i x_i + \sum_{i<j} \sum^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum \sum_{i<j<k} \sum^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k \quad (3.40)$$

Özel kuartik çokterimlinin genel biçimi ise, eşitlik (3.41)'deki gibidir:

$$E(y) = \sum_i^q \beta_i x_i + \sum_{i<j} \sum^q \beta_{ij} x_i x_j + \sum \sum_{i<j<k} \sum^q \beta_{ijk} x_i^2 x_j x_k + \sum \sum_{i<j<k} \sum^q \beta_{ijk} x_i x_j^2 x_k + \sum \sum_{i<j<k} \sum^q \beta_{ijk} x_i x_j x_k^2 \quad (3.41)$$

Özel kübik ve özel kuartik tipi modellerdeki, sırasıyla, 3. ve 4.dereceden terimler Şekil 3.7'deki simplekstekteki gibi eğik cevap yüzeylerini modellemekte kullanışlıdır. Aslında $\beta_{ijk} x_i x_j x_k$ terimi, simpleks içinde merkez nokta etrafında simetrik tepe ya da çukurları; $\beta_{ijk} x_i^2 x_j x_k$ gibi terimler ise, simetrik olmayan tepe ve ya çukurları modellemek için daha uygundur.



Şekil 3.7 $\beta_{ijk} x_i x_j x_k$ ve $\beta_{ijk} x_i^2 x_j x_k$ terimleri ile modellenebilecek eğrisellikler.

Özel kübik ve kuartik modeller için terim sayıları şu şekilde hesaplanabilir:

$$P_{q, \text{ özel kübik}} = \frac{q(q^2 + 5)}{6} \quad (3.42)$$

$$P_{q, \text{ özel kuartik}} = \frac{q(q^2 - 2q + 3)}{2} \quad (3.43)$$

3.4 Simpleks Deney Tasarımı Uzayları için KDT'ler

Bu kısımda simpleks biçimli DT uzayı için, KDT'lerin nasıl tasarlanabileceği ve tasarım bölgelerinde deneme noktalarının yerleşimleri incelenecektir. Fakat öncelikle KDT kısıtları ve bu kısıtların simplekslerin şekli üzerindeki etkileri incelenecektir. Yukarıda da ifade edildiği üzere kısıtlar KDT'lerin en önemli ve zorunlu kısmıdır. Bu kısıtlar olmaksızın KDT tipi deney tasarımları söz konusu olamaz. Kısıtların niteliğini örneklemek gerekirse: Bir fincan kahve ve buna katılacak krema miktarı belirlidir. Yani, bir fincan kahvenin yarısı kahve yarısı krema olamaz. Kabul edilebilir, makul, oran %10 civarındadır. Dolayısıyla krema bileşenini x_1 ile gösterecek olursak, şöyle bir kısıt koşulu yazabiliriz: $0 \leq x_1 \leq 0.10$.

Burada 0 alt-limit; 0.10 ise, üst-limit değeridir. Diğer örnekler ise şöyle verilebilir: Bir meyve suyunda meyve oranı %10'dan küçük olamaz, ekmekte tuz oranı %1'den büyük olamaz, boyada TiO₂ oranı %10'dan büyük olamaz, vb.

Kısıtlar sadece alt limit ya da sadece üst-limit için olabildiği gibi hem alt-, hem de üst-limit için de olabilir. Bu durum şöyle örneklendirilebilir: Bir universal renklendiricide pigment miktarı %15'ten küçük, %60'tan büyük olamaz. Her iki limitin de söz konusu olduğu tasarımlar bir sonraki alt bölümde incelenecektir. Diğer taraftan, yukarıda verilen kısıtlar, deneyi tasarlayanın ya da reçete hazırlayanın kişisel tercihlerinden, piyasa koşulları tarafından oluşturulan zorunluluklardan ya da teknik sebeplerden kaynaklanabilir ve çoğu durumda bir zorunluluk değildirler. Bu kısıtlar ileriki bölümlerde optimizasyon için kullanılacaktır.

3.4.1 Kısıtlar ve Alt-uzaylar

Bir karışım deney tasarımında tasarım bölgesi, yani deney tasarımı uzayı ve model uyumu için ileride anlatılacak birçok koşul, bileşen oranlarına konulan kısıtlarla (alt-, üst-limitler) belirlenir. Bu kısıtlar KDT'lerde tasarımcı açısından, kanımızca, en önemli ve üzerinde en çok durulması gereken kısımdır.

KDT'lerde iki tip kısıttan söz edilebilir. Bunlar,

- Tek-bileşen kısıtları ve
- Çok-bileşen kısıtları

Tek-bileşen kısıtları şu biçimdedir:

$$A_i \leq x_i \leq \bar{U}_i \quad i = 1, 2, 3, \dots, q \quad (3.44)$$

Burada A_i alt-sınır (limit) değerini; \bar{U}_i ise, üst-sınır değerini göstermektedir.

Çok-bileşen kısıtları ise şöyle gösterilebilir:

$$A_r \leq a_{r1}x_1 + a_{r2}x_2 + \dots + a_{rq}x_q \leq \bar{U}_r \quad (3.45)$$

Burada ise A_r ve \bar{U}_r , sırasıyla, r.alt- ve r.üst-sınırları göstermektedir. a_{ri} , kısıtlardaki katsayıları göstermektedir ve sıfır ya da sıfırdan farklı değerler alabilir.

Diğer taraftan aşağıdaki gibi oran kısıtları da ürün formülasyonu çalışmalarında sık görülmektedir.

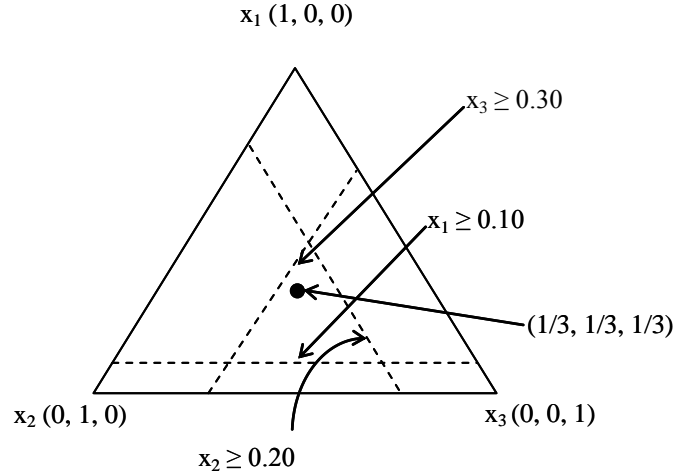
$$\frac{x_1+x_2+x_4}{x_3+x_5} \leq 1.0$$

Fakat bu tip kısıtlar, genellikle, aşağıdaki gibi bazı cebirsel işlemlerle çok-bileşenli kısıtlara dönüştürülebilmektedir:

$$0 \leq x_3 + x_5 - x_1 - x_2 - x_4$$

Bu kısıtlar ve eşitlik (3.1)'deki toplam ya da eşitlik kısıtı birlikte q-simpleks tipi deney bölgelerini oluşturur. Burada kısıtlar ve bu kısıtların alt-uzaylarının oluşumuna etkisi pratik faydaları göz önünde tutularak irdelenecektir. Kısıtlar ve bu kısıtların geometrisi hakkında ayrıntılı bilgi KDT'lerin referans kitabı olarak adlandırılan J.A Cornell'in (Cornell, 2002) kitabından elde edilebilir. Ayrıca, G. F. Piepel (Piepel, 1983) çok-bileşenli kısıtlar için oluşacak durumları ve bu kısıtların tasarım uzayına etkisini ayrıntılı olarak irdemiştir.

Sadece alt-limit değerleri olan 3-bileşenli örnek ($x_1 \geq 0.10$, $x_2 \geq 0.20$, $x_3 \geq 0.30$) için simpleks tasarım uzayı Şekil 3.8'deki gibidir. Görüldüğü gibi tasarım bölgesi bu haliyle de simpleks biçimindedir ve bu bölgeye A-simpleks de denir.



Şekil 3.8 Üç alt-limitli bileşen için simpleks bölgesi (kesikli üçgenin sınırlandığı bölge)

Dolayısıyla şöyle bir özellik elde edilir:

Özellik 3.5:

Bir KDT’de sadece alt-limitler mevcutken - bir veya q-adet alt-limit - var ise, deney tasarımı uzayı simpleks biçimlidir.

Burada herhangi bir bileşenin alt-limit değeri diğer bileşenlerin toplamını belirler. Örneğin x_1 bileşenin alt-limit değeri olan 0.1 değerinden dolayı, diğer bileşenlerin herhangi birinin veya toplamının alabileceği maksimum değer 0.9’dur. Yani, $x_i = 1, 2, 3, \dots, q$ bileşenlerinden hiç birisi 0.9 değerinden daha yüksek bir değer alamaz. Eğer $q=3$ bileşen için x_2 ve x_3 bileşenleri üst-sınır değeri olarak 1.0 değerini alırsa bu sistemin tutarsız olduğu söylenir (Piepel, 1983). Sadece $0.1 \leq x_1$ alt-limit değeri için diğer iki bileşenin alabileceği değerler şu şekilde gösterilebilir:

$$0.1 \leq x_1 \leq 1.0$$

$$0.0 \leq x_2 \leq 0.9$$

$$0.0 \leq x_3 \leq 0.9$$

Burada yeniden belirlenmiş olan x_2 ve x_3 ’e ait üst-sınır değerlerine *önerilen kısıtlar* adı verilmektedir.

$0.1 \leq x_1$ ve $0.2 \leq x_2$ alt-limit değerleri için oluşacak kısıt durumları şöyle gösterilebilir:

- $A_2 = 0.2$ değerinden dolayı $\bar{U}_1 = 0.8$ değerine ayarlanmak zorundadır.
- $\bar{U}_2, A_1 = 0.1$ değerinden dolayı 0.9 değerini almak zorundadır.
- $\bar{U}_i = 3, \dots, q$ ise, $A_1 + A_2 = 0.3$ değerinden dolayı 0.7 değerini almak zorundadır.

$0.1 \leq x_1, 0.2 \leq x_2$ ve $0.3 \leq x_3$ alt-limit değerleri için oluşacak kısıt durumları ise şöyle gösterilebilir:

$$0.1 \leq x_1 \leq 0.5$$

$$0.2 \leq x_2 \leq 0.6$$

$$0.3 \leq x_3 \leq 0.7$$

- $A_2 + A_3 = 0.5$ değerinden dolayı $\ddot{U}_1 = 0.5$ değerine ayarlanmak zorundadır.
- $\ddot{U}_2, A_1 + A_3 = 0.4$ değerinden dolayı 0.6 değerini almak zorundadır.
- \ddot{U}_3 ise, $A_1 + A_2 = 0.3$ değerinden dolayı 0.7 değerini almak zorundadır.
- Ayrıca, $\ddot{U}_i = 4, \dots, q$ ise, $A_1 + A_2 + A_3 = 0.6$ değerinden dolayı 0.4 değerini almak zorundadır.

Sonuç olarak, aşağıdaki gibi bir genel özellik elde edilir:

Özellik 3.6:

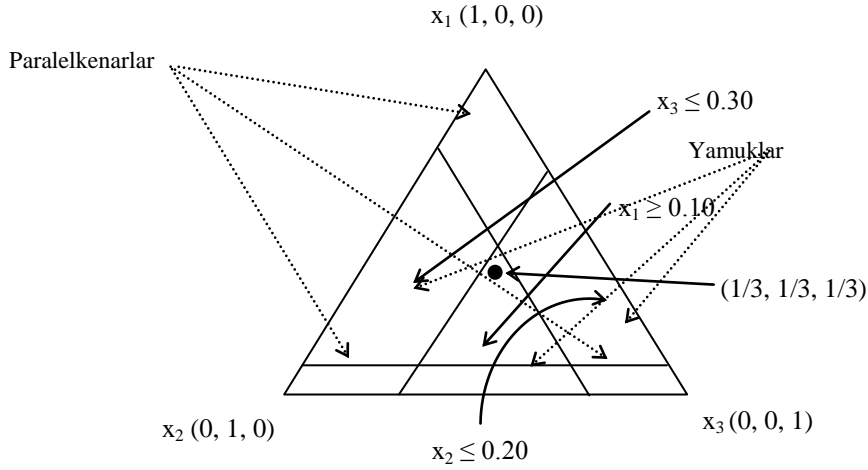
Aşağıda (3.46) ya da (3.47) eşitsizlikleri ile verilen durumlarda *tutarsız kısıtlar* oluşur.

$$\ddot{U}_i + \sum_{j \neq i}^q A_j > 1.0 \text{ (veya Toplam Karışım Miktarı)} \quad (3.46)$$

$$A_i + \sum_{j \neq i}^q \ddot{U}_j < 1.0 \text{ (veya Toplam Karışım Miktarı)} \quad (3.47)$$

(3.46) eşitsizliğindeki tutarsızlık A_i veya \ddot{U}_i değerini düşürmekle; (3.47) eşitsizliğindeki tutarsızlık ise, A_i veya \ddot{U}_i değerini artırmakla giderilebilir. Eğer herhangi bir KDT yazılımı kullanılıyorsa, (Design-Expert, Minitab ve Modde gibi...) bu durum otomatik olarak ilgili uyarı kutuları ile düzeltilir.

Diğer taraftan, sadece üst-limit değerleri olan, 3-bileşenli örnek ($x_1 \leq 0.10$, $x_2 \leq 0.20$, $x_3 \leq 0.30$) için simpleks tasarım uzayı Şekil 3.9'daki gibi olur fakat bu durumda üç kısıt ta zorlanılmış olur. Yani, şekildeki her üç yamuk biçimli bölgede iki kısıt; her üç paralelkenar biçimli bölgede üç kısıttan birisi ve merkezdeki üçgende ise her üç bileşen için konulmuş kısıtlar tutarsız olur. Burada deney tasarımının gerçekleştirilebileceği bir alan yoktur. Çünkü simpleks içindeki hiçbir bölgede her üç kısıt koşulunu da sağlayan bölge yoktur.



Şekil 3.9 Üç üst-limitli bileşen için simpleks bölgesi. (Hiçbir bölge DT için uygun değildir.)

Ayrıca sadece üst-sınırların olması durumunda, sadece alt-sınırların varlığındakinin aksine, oluşacak bölgenin şekli hakkında herhangi bir yargıda bulunmak imkânsızdır.

Sonuç olarak, yukarıdaki örnekte olduğu gibi, sadece üst-sınırların varlığı durumunda DT için elverişli bölgenin oluşmaması, şöyle bir özelliği doğurmaktadır:

Özellik 3.7:

Eşitsizlik (3.48)'in geçerli olduğu durumlarda, üst-sınırlar tutarsızdır. Eşitsizlik (3.49)'un geçerli olduğu durumlarda ise alt-sınırlar tutarsızdır.

$$\sum_i^q \bar{U}_i \leq 1.0 \text{ (veya Toplam Karışım Miktarı)} \quad (3.48)$$

$$\sum_i^q \bar{A}_i \geq 1.0 \text{ (veya Toplam Karışım Miktarı)} \quad (3.49)$$

Bu kısıtların varlığında, kısıtların sorunlu olduğu, eğer Design-Expert veya Minitab gibi bir yazılım kullanılıyorsa, ilgili uyarı kutuları ile bu durum kullanıcıya bildirilir.

Örneğin, 4-bileşenli bir karışımın $x_1 \leq 0.10$, $x_2 \leq 0.20$, $x_3 \leq 0.30$ ve $x_4 \leq 0.40$ gibi üst-sınır değerleri için, (3.48) eşitsizliğinin eşitlik kısmı (\leq) geçerlidir ve bu koşullarda bir bölgeden değil sadece bir noktadan $((x_1, x_2, x_3, x_4) = (0.1, 0.2, 0.3, 0.4))$ bahsedilebilir.

4-bileşenli bir karışımda x_1 ve x_2 bileşenleri için üst-sınır değerleri (sırasıyla 0.1 ve 0.2) var ise, ilginç bir şekilde hem (3.46), hem de (3.47) eşitsizlikleri sağlanır ve şu şekilde bir sınır değer durumu mümkün olur:

$$0.0 \leq x_1 \leq 0.1$$

$$0.0 \leq x_2 \leq 0.2$$

$$0.0 \leq x_3 \leq 1.0$$

$$0.0 \leq x_4 \leq 1.0$$

Bu durum bir genel kuraldır ve x_1 , x_2 bileşenlerinin aldığı üst-limit değerlerine bağlı değildir. Ayrıca x_4 'den sonraki i. bileşen için de geçerlidir.

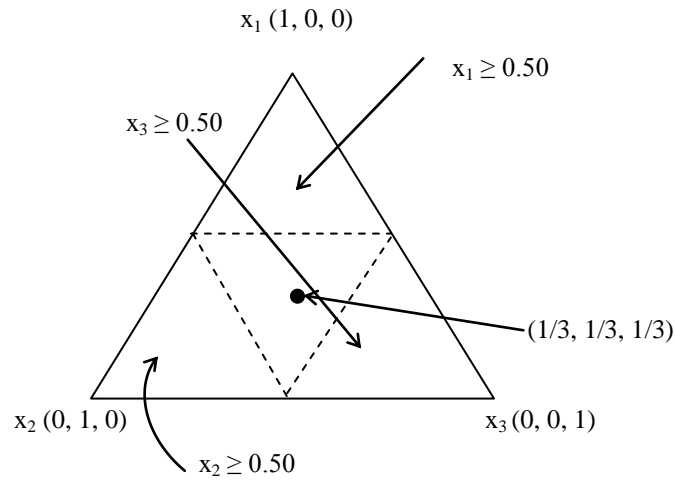
Bununla birlikte bazı durumlarda üst-limitlerin varlığı da simpleks biçimli “tutarlı” deney tasarımı uzayları oluşturur. $q = 3$ bileşen için aşağıdaki gibi kısıtlar var ise,

$$0.0 \leq x_1 \leq 0.5$$

$$0.0 \leq x_2 \leq 0.5$$

$$0.0 \leq x_3 \leq 0.5$$

Şekil 3.10'daki gibi bir tasarım bölgesi oluşur. Bu ters çevrilmiş üçgen bölgeye Ü-simpleks de denir



Şekil 3.10 Üç üst-limitli bileşen için simpleks bölgesi (kesikli üçgenin sınırladığı bölge tasarım bölgesidir)

Yukarıdaki şekli (3.10) oluşturan üst-limit değerlerinden herhangi birisi 0.5 değerinden daha yüksek olursa, kısıtlı bölge artık simpleks biçimli olmayacaktır. Bu durum aşağıdaki gibi bir özelliği doğurur (Crosier, 1984).

Özellik 3.8:

Eğer sadece üst-sınır değerleri varsa ve (3.50) eşitsizliği sağlanıyorsa, esas simpleks tasarım uzayı içerisinde Ü-simpleks biçimli bir tasarım bölgesi oluşur.

$$\sum_{i=1}^q \bar{U}_i - \bar{U}_{\text{minimum}} \leq 1.0 \quad (3.50)$$

Bir karışımı/ürünü oluşturan bileşenlerin alt- ve/veya üst-sınır değerlerinin önemini ve DT yazılımları tarafından nasıl tutarlı biçime sokulduklarının anlaşılması adına, aşağıda, birkaç örnek durum verilmiştir.

$$\begin{aligned} \text{I. } x_1 &\leq 0.25 \\ x_2 &\leq 0.45 \\ x_3 &\leq 0.70 \end{aligned}$$

Bu deney setinde sadece üst-limit değerleri vardır. Fakat (3.50) eşitsizliği sağlanamamaktadır. Design-Expert v.7.1.6 (DE) deney tasarımı yazılımı kullanıldığında bu set aşağıdaki gibi tutarlı hale getirilir:

$$\begin{aligned} 0.00 &\leq x_1 \leq 0.25 \\ 0.05 &\leq x_2 \leq 0.45 \\ 0.30 &\leq x_3 \leq 0.70 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{II. } x_1 &\leq 0.20 \\ x_2 &\leq 0.25 \\ x_3 &\leq 0.30 \\ x_4 &\leq 0.35 \\ x_5 &\leq 0.10 \end{aligned}$$

Bu örnekte ise, sadece üst-limit kısıtları vardır ve (3.50) eşitsizliği sağlanmaktadır. Dolayısıyla, DE yazılımı şu biçimde bir *tutarlı* deney seti sunacaktır:

$$\begin{aligned} 0.00 &\leq x_1 \leq 0.20 \\ 0.05 &\leq x_2 \leq 0.25 \end{aligned}$$

$$0.10 \leq x_3 \leq 0.30$$

$$0.15 \leq x_4 \leq 0.35$$

$$0.00 \leq x_5 \leq 0.10$$

$$\text{III. } 0.2 \leq x_1 \leq 0.5$$

$$0.1 \leq x_2 \leq 0.4$$

$$0.4 \leq x_3 \leq 0.7$$

Bu örneğe dikkat edilirse hem alt, hem de üst-sınır değerlerinin bulunduğu görülür. Bu tip deney setleri simpleks biçimli deney tasarım alt-uzayları oluşturmazlar. Kısıtları bu biçimde verilen karışımlar daha ileride, uygulamalı olarak, incelenecektir ve gerçekte birçok üründeki bileşenler bunun gibi hem alt- hem de üst-limit değerlerine sahiptir.

IV. $q = 3$ bileşenli bir ürün için eğer aşağıdaki gibi bir üst-limit kısıtları varsa ve (3.50) eşitsizliği sağlanıyorsa:

$$x_1 \leq 0.30$$

$$x_2 \leq 0.40$$

$$x_3 \leq 0.50$$

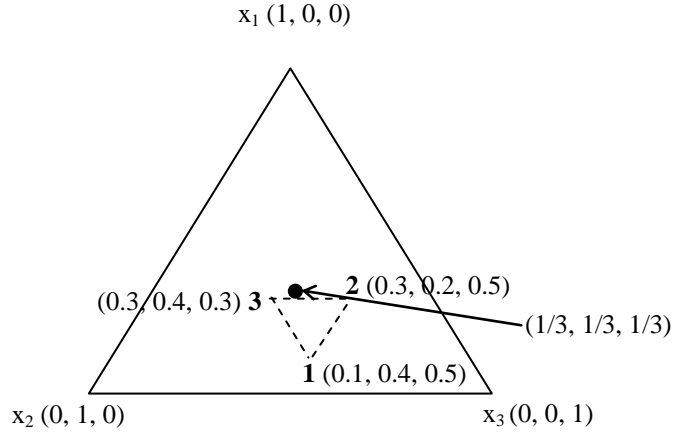
DE yazılımı bunu şu biçimde ayarlar ve Şekil 3.11'deki gibi bir deney tasarımı alt-uzayı oluşturur:

$$0.10 \leq x_1 \leq 0.30$$

$$0.20 \leq x_2 \leq 0.40$$

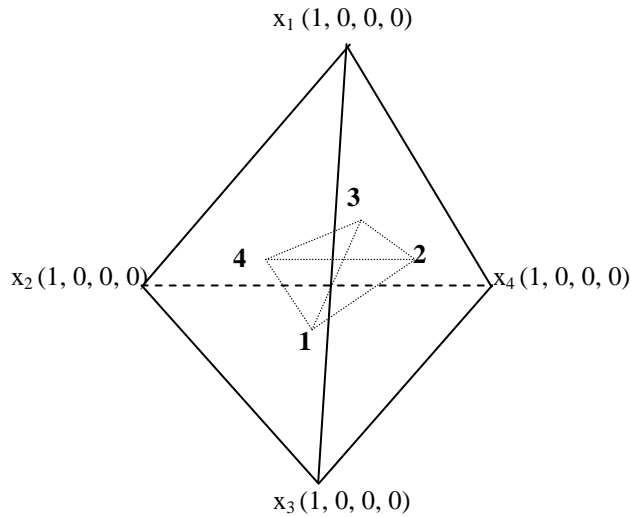
$$0.30 \leq x_3 \leq 0.50$$

Şekildeki ters üçgenin kenarları üst-sınır değerleri tarafından; üçgenin tepeleri (ya da tasarım uzayının uç noktaları) ise, alt-sınır değerleri tarafından belirlenir. Tepe noktalarının değerleri her bir bileşenin yanında verilmiştir.



Şekil 3.11 Eşitsizlik (3.50) tarafından sınırlanmış deney tasarımı alt-uzayı (kesikli ters üçgenin sınırladığı bölge).

Eğer üst-limit değerleri $\bar{U}_i = 1/3$ ($i = 1, 2, 3, 4$) değerine ayarlanırsa, Şekil 3.12'deki gibi bir deney tasarımı alt-uzayı oluşur. Burada 1'den 4'e kadar numaralandırılan uç noktalar dörtyüzlünün, sırasıyla, her bir yüzündeki merkez noktalara karşılık gelirler. Dolayısıyla, DT uzayı ters çevrilmiş bir piramit biçimindedir.



Şekil 3.12 $\bar{U}_i = 1/3$ ($i = 1, 2, 3, 4$) için sınırlanmış deney tasarımı alt-uzayı (kesikli ters piramidin sınırladığı bölge).

3.4.2 Simpleks-Kafes Deney Tasarımları

İlk defa 1950'li yıllarda H. Scheffé tarafından geliştirilmiştir (Scheffé, 1958). Genellikle $\{q, m\}$ gibi bir gösterim kullanılır. q karışımdaki bileşen sayısını; m ise, tasarımda kullanılan çokterimli modelin derecesini göstermektedir. Öreğin, $\{4,2\}$ gibi bir simpleks-kafes tasarımı verilmişse, burada 4 adet karışım bileşeni için, karesel Scheffé çokterimli modeli uydurulmuştur denilir.

Simpleks-kafes tasarımların denemelerinde kullanılacak deney noktaları seti (3.51)'deki gibidir.

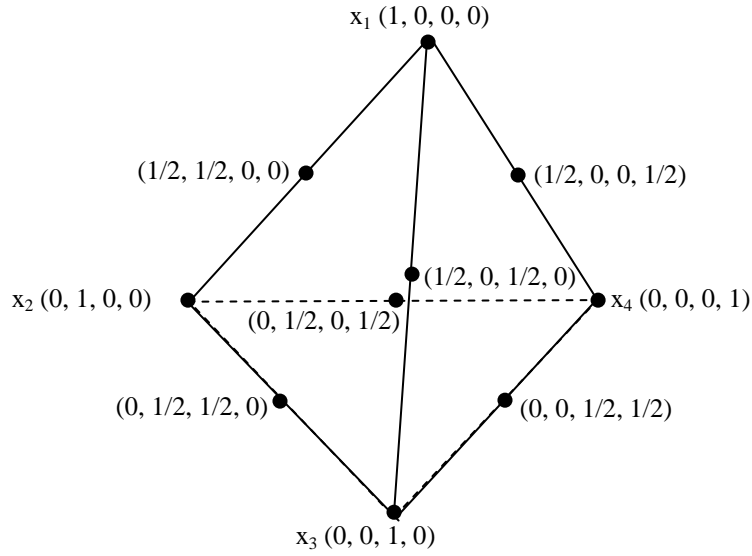
$$\left(\frac{0}{m}, \frac{1}{m}, \dots, \frac{m}{m}\right) \quad (3.51)$$

Bu deney noktaları Çizelge 3.6'daki gibi verilebilir.

Çizelge 3.6 4-bileşenli, 2.dereceden simpleks-kafes tasarım için deney noktaları.

x_1	x_2	x_3	x_4
2/2	0/2	0/2	0/2
0/2	2/2	0/2	0/2
0/2	0/2	2/2	0/2
0/2	0/2	0/2	2/2
1/2	1/2	0/2	0/2
1/2	0/2	1/2	0/2
1/2	0/2	0/2	1/2
0/2	1/2	1/2	0/2
0/2	1/2	0/2	1/2
0/2	0/2	1/2	1/2

Simpleks-kafes KDT'lerde iki tip deney noktası vardır: tepe noktaları ve kenarların orta noktaları (kenar ortaları). Bu tip tasarımların deney noktalarının yerleşimi Şekil 3.13'te verilmiştir. Bu tasarım için deney noktaları, yani denemelerin sayısı, 10 adettir.



Şekil 3.13 {4, 2} simpleks-kafes tasarımı için deney noktalarının yerleşimi.

2-boyutlu simpleks-kafes tasarımına örnek olarak {3,3} tasarımını ele alırsak, deney noktaları Çizelge 3.7'deki gibi olur ve bu noktaların simpleks üzerindeki yerleşimi Şekil 3.14'teki gibidir.

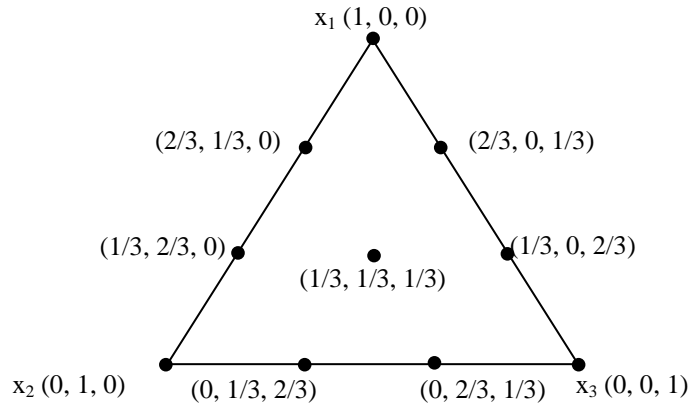
Çizelge 3.7 3-bileşenli, 3.dereceden simpleks-kafes tasarımı için deney noktaları

x_1	x_2	x_3
3/3	0/3	0/3
0/3	3/3	0/3
0/3	0/3	3/3
1/3	2/3	0/3
2/3	1/3	0/3
1/3	0/3	2/3
2/3	0/3	1/3
0/3	1/3	2/3
0/3	2/3	1/3
1/3	1/3	1/3

Bu tasarım için deney noktaları, yani denemelerin sayısı, 10 adettir. Dolayısıyla $\{q, m\}$ simpleks-kafes deney tasarımı için deney noktaları sayısı, m . dereceden Scheffé tipi çokteriminin terim sayısına eşittir. Dolayısıyla q -bileşenli, m . dereceden simpleks-kafes tasarımının deney noktaları sayısı eşitlik (3.39) ile bulunur:

$$p_{q,m} = \binom{q+m+1}{m} = \frac{(q+m-1)!}{m!(q-1)!} \quad (3.39)$$

Şekil 3.13'teki deney noktalarıyla $\{4,2\}$ simpleks-kafes tasarımı ya da Şekil 3.14'teki deney noktalarıyla $\{3,3\}$ simpleks-kafes tasarımı gerçekleştirilmek istenildiğinde, modeldeki terim sayısı ile deney noktalarının sayısının eşit olmasından dolayı, fazladan hiçbir serbestlik derecesi kalmaz. Dolayısıyla, istatistikî analizde karşımıza çıkan model uyumsuzluğu (lack of fit) ve benzeri testler için kestirimlerde bulunmak üzere hiçbir serbestlik derecesi kalmamıştır. Bu tür deney tasarımlarına doygun (saturated) deney tasarımları denir. Bu ve benzeri istatistikî test yöntemleri ilerde uygulamaları ile gösterilecektir.



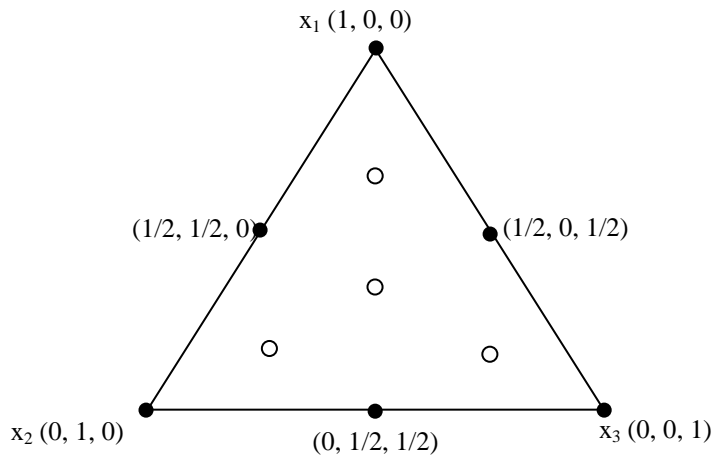
Şekil 3.14 $\{3, 3\}$ simpleks-kafes tasarımı için deney noktalarının yerleşimi.

$\{3, 3\}$ simpleks-kafes tasarımının her üç bileşenin de $x_i > 0$ oranında katıldığı sadece bir adet karışımı vardır. Tüm bileşenlerin $x_i > 0$ oranında var olduğu bu tür formülasyonlara *tam karışımlar* adı verilir (Cornell, 2002). Kullanılan modelin derecesinin bileşen sayısından küçük olduğu durumlarda ($m < q$ olduğu durumlarda), simpleks-kafes tipi KDT'lerde, en fazla modelin derecesi kadar bileşenin bulunduğu (toplam m adet bileşene kadar) karışımlar oluşur ve tam karışımlar oluşmaz. Dolayısıyla, $\{4, 2\}$ tasarımında tam karışım yoktur. $q = m$ olduğu durumlarda ($\{3, 3\}$ 'teki gibi) ise, sadece bir adet tam karışım oluşur. Ayrıca, $m > q$ değeri için, birden fazla tam karışım oluşur. Örneğin $\{3, 4\}$ tasarımı için oluşan tam karışım sayısı 3'tür. Çizelge 3.8'de $3 \leq q \leq 6$ ve $2 \leq m \leq 4$ için deney noktaları ve oluşan tam karışım sayıları (altı çizili değerler), farklı $\{q, m\}$ simpleks-kafes tasarımlar için verilmiştir.

Çizelge 3.8 {q, m} simpleks-kafes tasarımlar için deney noktaları (Smith, 2005)

q	m	Karışımlar				Toplam Deney Noktası Sayısı
		Tek Bileşenli	2'li	3'lü	4'lü	
3	2	3	3	-	-	6
	3	3	6	1	-	10
	4	3	9	3	-	15
4	2	4	6	-	-	10
	3	4	12	4	-	20
	4	4	18	12	1	35
5	2	5	10	-	-	15
	3	5	20	10	-	35
	4	5	30	30	5	70
6	2	6	15	-	-	21
	3	6	30	20	-	56
	4	6	45	60	15	126

Çizelge 3.8'de görüldüğü gibi toplamda sadece beş adet tam karışım vardır ve deney noktalarının büyük çoğunluğu düşük boyutlu alt-simplekslerde (uç noktalar, kenarlar, düzlemler vb.) birikmiştir. Deney noktalarının daha çok sınırlarda toplanması durumu simpleks-kafes tipi tasarımların karakteristik özelliğidir (Cornell, 2002). Yukarıdaki sebepten ve sözkonusu tasarımların doygun tasarımlar olmasından dolayı bu tür tasarımlara, genelde, $q + 1$ adet tam karışım deney noktası ilave edilir. Bu ilave noktalardan birisi her zaman merkez nokta ($1/3, 1/3, 1/3, \dots$) olur; geri kalan noktalar ise eksenel kontrol karışımları (ekk) (axial check blends) tipi noktalar olur. Bu tip noktalar, uç noktalar (tepeler) ile merkez noktanın arasındaki orta noktalardır. Şekil 3.15'te {3, 2} simpleks-kafes tasarım için merkez nokta ve 3 adet ekk noktası eklenmiş ($q + 1 = 3 + 1 = 4$ nokta) (içi boş daireler) bir tasarım görülmektedir.

**Şekil 3.15** {3, 2} simpleks-kafes tasarımının $q + 1 = 4$ adet nokta eklenmiş görüntüsü (içi boş daireler ilave noktaları gösterir.)

Dolayısıyla, $\{q, 2\}$ tipi simpleks-kafes tasarımlara ilave nokta eklenmesi yoluyla elde edilen tasarımlara simpleks cevap yüzeyi (simplex response-surface) tasarımları da denir. Bu tip tasarımlar karesel Scheffé çokterimli modellerini destekler ve ilave edilen $q + 1$ adet deney noktası, model uyumsuzluğu tahmini için gereken serbestlik derecelerini sağlar (Snee, 1981; Goupy, 2000).

3.4.3 Simpleks-Merkezli Kafes Deney Tasarımları

Bu tür tasarımlar da ilk defa 1960'lı yılların başında H. Scheffé tarafından geliştirilmiştir (Scheffé, 1963). q -bileşenli bir simpleks tasarım için sadece bir tane simpleks-merkezli kafes tasarımı vardır (Smith, 2005). Bu tasarım q -bileşenli simpleksin her bir alt-simpleksinin merkezinde olan karışım noktalarının toplamından oluşur. Yani tüm tek bileşenli "karışımlar" $(1, 0, 0, \dots, 0)$, tüm ikili karışımlar $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \dots, 0)$, tüm üçlü karışımlar $(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0, \dots, 0)$, ...ve merkez noktası $(\frac{1}{q}, \frac{1}{q}, \frac{1}{q}, \dots, \frac{1}{q})$ noktalarından oluşur. Kombinasyon hesabı mantığında olduğu gibi bu tür tasarımlarda her seferinde sıra gözetmeksizin, q bileşenden birisi, q bileşenden ikisi, q bileşenden üçü vb. seçilmektedir. Dolayısıyla, simpleks-merkezli kafes tasarımında deney noktaları sayısı şöyle hesaplanır:

$$\binom{q}{1} + \binom{q}{2} + \binom{q}{3} + \dots + \binom{q}{q} = 2^q - 1 \quad (3.52)$$

Açıktır ki deney noktası sayısı q değeri arttıkça, çok hızlı artar. Örneğin 8-bileşenli karesel Scheffé çokterimli modeli için tasarımın deney noktası sayısı 255 tir. Bu tasarımın terim sayısı ise 36 dır. Yani model uyumsuzluğu tahmini için $255 - 36 = 219$ tane serbestlik derecesi vardır. Eğer kübik Scheffé çokterimlisi kullanılırsa, bu durumda terim sayısı 120 olacaktır ve hâlâ model uyumsuzluğu tahmini için $255 - 120 = 135$ tane serbestlik derecesi kalacaktır. Kübik modellerin $x_i x_j (x_i - x_j)$ gibi terimleri vardır. Fakat bu tip KDT'lerde, ne yazık ki, bu terimlerin bir anlamı yoktur. $x_i x_j$ ve $(x_i - x_j)$ değerlerinin her ikisi de sıfıra eşittir. Ayrıca, $x_i x_j (x_i - x_j)^2$ ve $x_i^2 x_j x_k$ gibi terimler için de aynı durum geçerlidir. Bu sebeplerden dolayı, simpleks-merkezli kafes tasarımları ile aynı sayıda terim içeren özel çokterimli modeller geliştirilmiştir (Piepel, 1983). Bu tip modeller eşitlik (3.53)'teki gibi gösterilebilir

$$E(y) = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} \beta_{ijk} x_i x_j x_k + \dots + \beta_{12 \dots q} x_1 x_2 \dots x_q \quad (3.53)$$

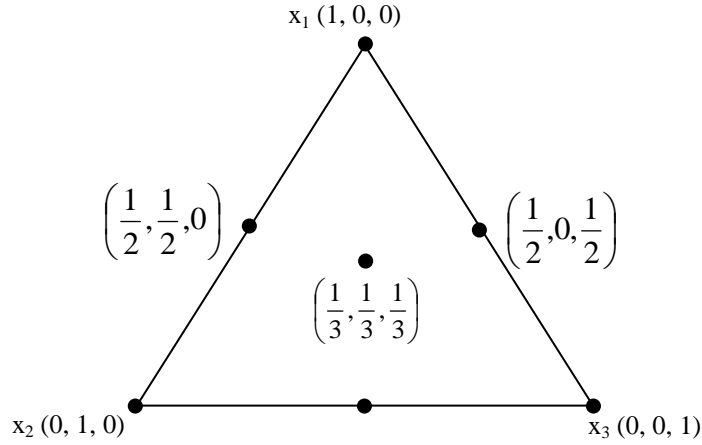
Bazı durumlarda bu tip modellerin bazı terimleri eksiltilmiş biçimlerini de kullanmak mümkündür. Bu tip modellere yukarıdaki özel tam modellerin p .seviyedeki kısmi modeli

adı verilir. G. F. Piepel, (3.52)'deki eşitliği $\binom{q}{p}$. terimde kesilmiş, fakat her zaman merkez teriminin bulunduğu modeller önermiştir (Piepel, 1982). Örnek olarak yukarıdaki 8-bileşenli karışım ele alınır ve amaç (3.53)'teki modeli ancak $x_i x_j$ terimine kadar barındıran ve merkez noktası da bulunan kısmî bir model oluşturmak ise, toplam $\binom{8}{1} + \binom{8}{2} + \binom{8}{8} = 37$ ya da belki $\binom{8}{1} + \binom{8}{2} + \binom{8}{3} + \binom{8}{8} = 93$ adet deney noktası bulunan tasarımlar elde edilebilir. Yukarıdaki modellerden hiçbirisi aslında “ideal” değildir. Zira 37 deney noktası karesel Scheffé modelinin gerektirdiği 36 terim için yeterli olmasına rağmen model uyumsuzluğunun tahmini için sadece 1 serbestlik derecesi kalmaktadır. 93 deney noktası durumunda ise, $93 - 36 = 57$ adet serbestlik derecesi kalır ki bu da model uyumsuzluğunun tahmini için gerekenden çok fazladır. Diğer taraftan, 37 adet deney noktası barındıra modele eklenecek tekrar noktaları ve ekk noktaları ile bu özel çokterimli model, model uyumsuzluğu testi ve hatta gerekiyorsa $x_i x_j x_k$ terimine kadar arttırılabilir. Bu durumda tasarıma $\binom{8}{3} = 56$ yeni üçlü karışım deney noktası eklenmesi gerekir. Bu noktalar 2-boyutlu simplekslerin (düzlemlerin) merkez noktalarıdır.

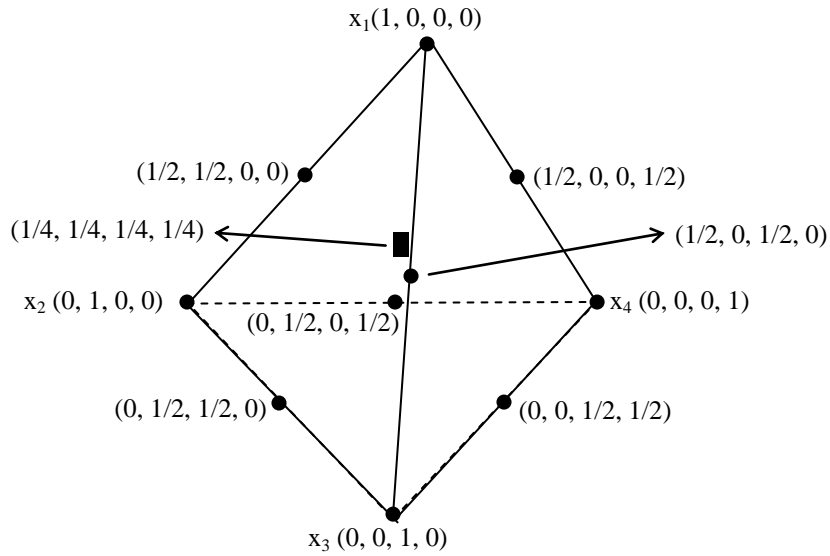
$\{q, m\}$ gösteriminde çokterimlinin derecesinin (m sayısının) anlamı, simpleks-kafes tasarımlarda ve simpleks-merkezli kafes tasarımlarda birbirinden farklıdır. Simpleks-kafes tasarımlarda deney noktaları kenarların $1/3$, $2/3$ ve $2/3$, $1/3$ konumlarına yerleşirken; simpleks-merkezli kafes tasarımlarda deney noktaları kenarların orta noktalarına konumlanır. Fakat her iki tasarım tipi de tepe noktaları ve 2-boyutluların, düzlemlerin, merkez noktalarına sahiptir.

Şekil 3.16'da $\{3, 3\}$ simpleks-merkezli kafes tasarımının deney noktalarının simpleks üzerindeki yerleşimleri görülmektedir. Buradaki deney noktası sayısı sadece 7'dir ($\{3, 3\}$ simpleks-kafes tasarımında 10'dur.) ve konumlanışları simpleks-kafes tasarımından çok farklıdır.

Şekil 3.17'de ise, 4 bileşen için 2-seviyeli kısmî simpleks-merkezli kafes tasarım ($\{4, 2\}$) gösterilmiştir. Bu tasarımın 11 adet deney noktası vardır ve bu değer $\binom{4}{1} + \binom{4}{2} + \binom{4}{4}$ işleminin sonucuna eşittir. 4-bileşenli tam simpleks-merkezli kafes tasarımın deney noktası sayısı ise, $2^4 - 1 = 15$ 'tir. Merkez noktası içi dolu dikdörtgen ile gösterilmiştir. İki nokta arasındaki 4 nokta farkı, 2-boyutlu düzlemlerin (üçgenlerin) merkez noktalarıdır.



Şekil 3.16 {3, 3} simpleks-merkezli kafes tasarımı için deney noktalarının yerleşimi.



Şekil 3.17 {4, 2} 2-seviyeli kısmî simpleks-merkezli kafes tasarımı için deney noktalarının yerleşimi.

Design-Expert ya da Minitab gibi yazılımların $\{q, p\}$ tipi kısmî simpleks-merkezli kafes tasarımı seçenekleri yoktur. Fakat tam simpleks-merkezli kafes tasarımı gerçekleştirildikten sonra gerekli noktaları eleyerek bu tür tasarımları gerçekleştirebilmek mümkündür. Diğer taraftan JMP yazılımının böyle bir özelliği mevcuttur.

3.4.4 Simpleks-Tarama (Screening) Deney Tasarımları

Ürün ve ürüne ait performans göstergeleri hakkında yeterli bilgi yoksa simpleks-tarama DT'leri kullanmak oldukça faydalıdır. Cevap(lar)a ait basit cevap-bileşen etkileşimlerinin grafik gösterimleri (tarama grafiği) ile daha model uydurulmadan, bileşenlerin cevap üzerindeki etkileri hakkında, çok fazla bilgi elde edilebilir. Böylelikle benzer etkileri olan bileşenler tek bir bileşen haline getirilebilir, etkisiz bileşenler tasarımdan çıkartılır ve hem tasarımın hem de, dolayısıyla, model yalın hale getirilebilir. Simpleks-tarama tasarımları özelde doğrusal modeller için geliştirilmiştir.

Simpleks-merkezli kafes tasarımlarda olduğu gibi, q-bileşenli bir simpleks tasarım için sadece bir tane simpleks-tarama deney tasarımı vardır. Bu tasarımın deney noktalarının tipi ve sayısı Çizelge 3.9'da verilmiştir.

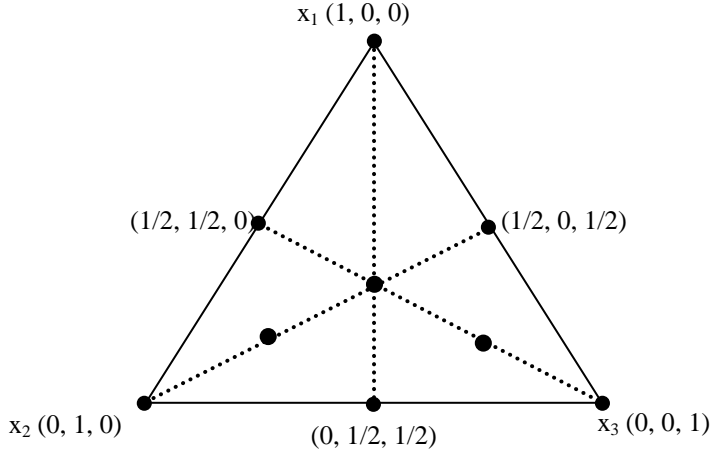
Çizelge 3.9 Simpleks-tarama deney tasarımları için deney noktaları ve türleri

Deney Noktası Tipi	Deney Noktası Sayısı
Tepe Noktaları	q
Merkez Noktası	1
Eksenel Kontrol Karışım (ekk) Noktaları	q
Son-noktalar	q
Toplam	3q + 1

Burada son-noktalar (end-points) olarak adlandırılan noktalar vardır ve bu noktalar, $q - 1$ adet bileşenin $\% \frac{100}{q-1}$ oranında bulunduğu q adet karışımdır. Dolayısıyla, $q = 3$ için 2-bileşenli 3 adet nokta vardır ve bu noktalarda bileşenlerin oranı %50'dir. $q = 4$ için, 3-bileşenli 4 adet nokta vardır ve bu noktalarda bileşenlerin oranı $\% \frac{100}{3}$ tür. Noktalar dörtyüzlünün her bir yüzündeki üçgenlerin merkez noktalarıdır.

Şekil 3.18 3-bileşen için simpleks-tarama tasarımını göstermektedir. Bu tasarıma dikkat edilirse deney noktası sayısının, ilave noktalı {3,2} simpleks-kafes tasarımı (Şekil 3.15) ile aynı olduğu görülür. Dolayısıyla $q = 3$ için, simpleks-tarama tasarımları aslında doğrusal modeller için geliştirilmiş olmasına rağmen, karesel Scheffé çokterimli modellerini

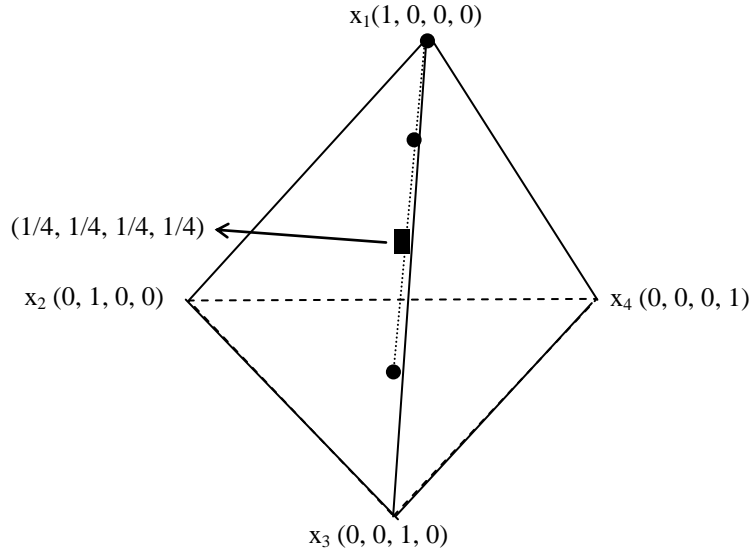
destekler. $q \geq 4$ için, geliştirilmiş simpleks-tarama tasarımları ise, karesel Scheffé çokterimli modellerini desteklemez.



Şekil 3.18 3-bileşenli simpleks-tarama tasarımı için deney noktalarının yerleşimi.

Şekil 3.19’da 4-bileşenli tasarım için, x_1 eksenine ait 4 noktanın yerleşimi gösterilmiştir. Bu modelin tam halinin 13 noktası ($4 \times 3 + 1 = 13$) vardır. Tasarımda 4 adet son-nokta vardır. Bu noktalardan birisi olan ve piramidin alt yüzünün orta noktası, yani (x_2, x_3, x_4) üçgeninin orta noktası olan nokta, x_1 ekseninin sıfır değerini aldığı son-noktadır. Bu tür son-noktalar *kısıt-düzlemi merkez noktaları* (constraint-plane centroids) olarak ta adlandırılır (Snee, 1975). Ayrıca, $q > 4$ için bu düzlemler hiper-düzlemlere dönüşür.

Şekil 3.18 ve 3.19’daki kesikli çizgilerden görüleceği üzere, bu tür tasarımlarda deney noktaları bileşen eksenleri üzerinde konumlanır. Bu sebepten bu tür tasarımlara *eksenel tasarımlar* (axial designs) da denir (Cornell, 2002). x_i bileşeninin *bileşen eksenini* içeriği, her $i \neq j$ için, $x_i = 1.0$ ’den $x_j = 0.0$ değerine ve yine her $i \neq j$ için $x_i = 0.0$ ’dan $x_j = \frac{1}{q-1}$ değerine kadardır. x_i eksenini boyunca diğer $q - 1$ adet bileşenin ($x_j, i \neq j$) miktarı değişir, fakat hep birbirlerine eşit kalır. $q = 3$ için x_1 eksenini boyunca x_2 ve x_3 bileşenlerinin oranı sürekli 1:1 kalır. $q = 4$ için ise, x_1 eksenini boyunca x_2, x_3 ve x_4 bileşenlerinin oranı sürekli 1:1:1 olarak kalır. Sonuç olarak bileşen eksenleri 2-boyutlu simpleksler gibi düşünülebilir: Bir uç noktada (tepe noktada) x_i için tek bileşenli (saf) “karışım”; diğer uç noktada ise, $x_j, i \neq j$ için eşit miktarda bir karışım vardır ve bu noktada $x_i = 0.0$ ’dır.



Şekil 3.19 4-bileşenli simpleks-tarama tasarımı için deney noktalarının kısmî yerleşimi.

3.4.5 KDT'ler için Bileşenleri Kodlama

3-bileşenli bir ürün için aşağıdaki gibi alt-sınırları olan bir bileşen seti düşünülürse, bu kısıtların Şekil 3.10'daki gibi simpleks biçimli bir tasarım doğuracağı görülür.

$$0.12 \leq x_1$$

$$0.22 \leq x_2$$

$$0.32 \leq x_3$$

Daha açık olarak, böyle bir kısıt setini DE gibi bir DT yazılımı kullanarak tasarıma tabi tutarsak, aşağıdaki gibi “önerilen üst-sınırlı” bir bileşen seti oluşturulduğu görülür (Smith, 2005).

$$0.12 \leq x_1 \leq 0.46$$

$$0.22 \leq x_2 \leq 0.56$$

$$0.32 \leq x_3 \leq 0.66$$

Bu deney seti simpleks-tarama deney tasarımına tabi tutulursa, Çizelge 3.10'daki gibi bir deney noktaları bütünü oluşturulabilir.

Çizelge 3.10 Simpleks-kafes tasarım için kodlanmış ve kodlanmamış deney noktaları.

x_1	x_2	x_3	x_1^*	x_2^*	x_3^*
0.177	0.277	0.547	0.166	0.166	0.667
0.177	0.477	0.377	0.166	0.667	0.166
0.347	0.277	0.377	0.667	0.166	0.166
0.233	0.333	0.433	0.333	0.333	0.333
0.460	0.220	0.320	1.000	0.000	0.000
0.120	0.560	0.320	0.000	1.000	0.000
0.120	0.220	0.660	0.000	0.000	1.000
0.290	0.220	0.490	0.500	0.000	0.500
0.120	0.390	0.320	0.500	0.500	0.000
0.120	0.390	0.490	0.000	0.500	0.500

Burada ilk üç sütün bileşen değerlerini; son üç sütun ise kodlanmış verileri göstermektedir. Bu tasarımda oluşan DT bölgesi de simpleks (alt-simpleks) olduğu için deney noktalarını tam simpleks yerine alt-simpleks için yazmamanın hiçbir gerekçesi yoktur. Bileşen oranlarını kodlanmış olarak sunmanın birçok pratik faydası vardır. Örneğin, kodlanmış biçimde ifade edilen bileşen oranları, kodlanmamış biçimde ifade edilenden her zaman daha kolay algılanır (Cornell, 2002; Draper ve Smith, 2007; Lewis vd., 1999; Smith, 2005). 3-bileşenli bir ürün için alt-sınırlar $0.12 \leq x_1$, $0.22 \leq x_2$ ve $0.32 \leq x_3$ yerine, $0.107 \leq x_1$, $0.195 \leq x_2$ ve $0.314 \leq x_3$ şeklinde verilseydi, bu biçimdeki bileşen seti öncekinden zor olarak algılanabilirdi. Oysa her iki biçim için de kodlanmış bileşen seti aynı olacaktır.

x_i^* şeklinde gösterilen kodlanmış bileşenler, *sözde-bileşenler* (pseudocomponents) olarak adlandırılır. Sözde-bileşenler ilk defa I.S. Kurotori tarafından 1966 yılında önerilmiş (Cornell, 2002) ve daha sonra R. B. Crosier tarafından ayrıntılı olarak irdelenmiştir (Crosier, 1984, 1986). Bu konuda geniş bilgi J. A. Cornell'in *referans* kitabından (Cornell, 2002) elde edilebilir.

x_i için alt-sınır kısıtlarını A_i $i = 1, 2, \dots, q$ ile gösterirsek, yukarıdaki 3-bileşenli örnek için bu değerler $A_1 = 0.12$, $A_2 = 0.22$ ve $A_3 = 0.32$ olur. Bu alt-limit değerlerinin toplamı A ile gösterilirse, bu toplam eşitlik (3.54)'teki gibi verilebilir:

$$A = \sum_{i=1}^q A_i \quad i = 1, 2, \dots, q \quad (3.54)$$

Yukarıdaki örnek için bu toplam $A = 0.12 + 0.22 + 0.32 = 0.66$ olur.

Sözde-bileşen oranları ise, eşitlik (3.55) kullanılarak hesaplanır:

$$x_i^* = \frac{x_i - A_i}{1-A} \quad (3.55)$$

Çizelge 3.10'daki x_i^* değerleri ardışık olarak aşağıdaki ifadelerden hesaplanmıştır:

$$x_1^* = \frac{x_1 - 0.12}{1 - 0.66}, \quad x_2^* = \frac{x_2 - 0.22}{1 - 0.66}, \quad x_3^* = \frac{x_3 - 0.12}{1 - 0.66}$$

Yukarıda verilen kodsuz \rightarrow kodlu dönüşümleri, bilimsel literatürde *A-sözde-bileşen dönüşümleri* (L-pseudocomponent transformations) olarak bilinir. Burada “A” ile alt kısıtlar türünden bir dönüşüm yapıldığı îma edilir.

Şekil 3.11 ve 3.12’de verilen ters-simpleksler için ise, *Ü-sözde-bileşen dönüşümleri* (U-pseudocomponent transformations) olarak adlandırılan dönüşümler uygulanabilir (Crosier, 1984). Burada da “Ü” ile üst kısıtlar türünden bir dönüşüm yapıldığı ima edilir. Dolayısıyla eşitlik (3.55) yerine üst-sınırlar için değiştirilmiş biçimi olan eşitlik (3.56) kullanılabilir:

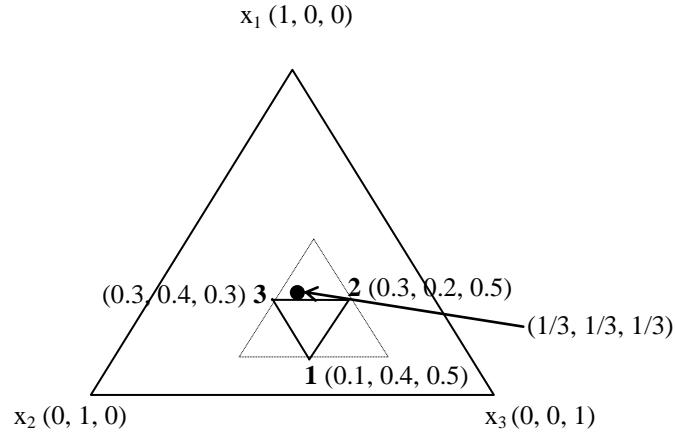
$$x_i^{**} = \frac{\bar{U}_i - x_i}{\bar{U} - 1} \quad (3.56)$$

Burada x_i^{**} üst-sözde-bileşen dönüşümünü gösterir ve \bar{U}_i , i.bileşenin üst-sınır değeridir. Ayrıca, üst-sınır değerlerinin toplamını \bar{U} ile gösterirsek, bu ifade eşitlik (3.57)’deki gibi verilebilir:

$$\bar{U} = \sum_i^q \bar{U}_i \quad i = 1, 2, \dots, q \quad (3.57)$$

Şekil 3.20’deki ters küçük üçgen Bölüm 3.4.1’deki IV. örnekte verilen kısıtlar sonucu oluşan DT bölgesidir. Bu bölge, ayrıca, Ü-sözde-bileşen simpleksidir. Diğer taraftan, Şekil 3.20, Şekil 3.11’e A-sözde-bileşen kısıtlarının eklenmesi ile elde edilmiştir (kesikli çizgi ile gösterilen üçgen).

A-sözde-bileşen simpleksinin *boyutu* $1 - A$; Ü-sözde-bileşen simpleksinin *boyutu* ise, $\bar{U} - 1$ ’dir (sırasıyla eşitlik 3.55 ve 3.56’nın payda değerleri) (Smith, 2005). Burada boyut ile kastedilen şey, x_i^* ve x_i^{**} sözde-bileşenlerinin “gerçek” bileşen oranları cinsinden değer aralığıdır.



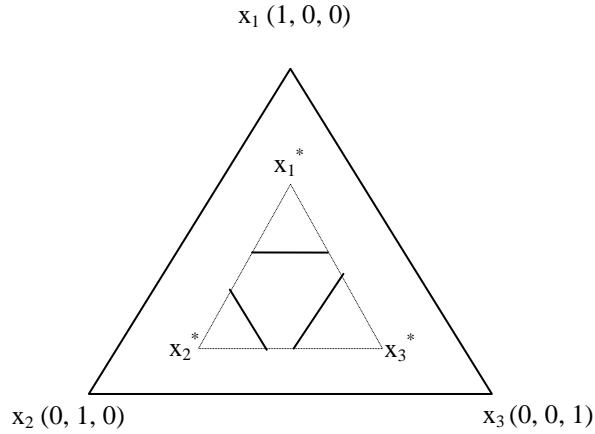
Şekil 3.20 Bölüm 3.4.1’de verilen IV. örnek için kısıtlı bölgeler.

Bölüm 3.4.1’deki IV.örnek için $1 - A = 0.4$ ve $\bar{U} - 1 = 0.2$ ’dir. $0.2 = 0.4/2$ olduğu için, A-sözde-bileşen simpleksinin boyutu, \bar{U} -sözde-bileşen simpleksinin boyutunun iki katıdır. Bileşenlerin tepe noktadaki bileşen değerleri “gerçek”, alt- ve üst-sözde-bileşen değerleri cinsinden Çizelge 3.11’de gösterilmiştir.

Çizelge 3.11 Bölüm 3.4.1’de verilen IV. örneğin tepe noktaları için gerçek ve sözde-değerler.

Tepe Noktaları	Gerçekler			Alt-sözdeleler			Üst-sözdeleler		
	x_1	x_2	x_3	x_1^*	x_2^*	x_3^*	x_1^{**}	x_2^{**}	x_3^{**}
1	0.1	0.4	0.5	0.0	0.5	0.5	1.0	0.0	0.0
2	0.3	0.2	0.5	0.5	0.0	0.5	0.0	1.0	0.0
3	0.3	0.4	0.3	0.5	0.5	0.0	0.0	0.0	1.0

Çizelge 3.11’den de görüleceği üzere \bar{U} -sözde-bileşen dönüşümlerinin bileşenler üzerindeki etkisi, “gerçek” bileşenlere dönüştürmedekinin tersidir. Sözde-bileşen dönüşümleri sadece alt-sınır değerlerinin olduğu durumlar için geçerli değildir. Bu dönüşümler her iki tip sınır durumu mevcutken de kullanılabilir. Bu durumda oluşacak DT bölgesi, büyük ihtimalle, simpleks biçimli olmayacaktır. Şekil 3.21 dönüşümler sonrası simpleks biçimde olmayan bir DT bölgesini göstermektedir. Şekilde kesikli çizgilerle gösterilen üçgen bir A-sözde-bileşen simpleksidir. Dolayısıyla, genel bir kural olarak, her durumda bütün deney noktalarını barındıran A- ya da \bar{U} -sözde-bileşen simpleksi mevcut olacaktır (Smith, 2005).



Şekil 3.21 Sözde-bileşen dönüşümlerinin oluşturduğu simpleks biçimli olmayan DT bölgesi.

Yukarıdaki şekle dikkat edilirse, sözde-bileşen simpleksinin tepe noktalarındaki bileşen değerlerinin kısıtlanmış DT bölgesinin dışında kaldığı görülür. Dolayısıyla, $E(y) = \beta_1^*x_1^* + \beta_2^*x_2^* + \beta_3^*x_3^*$ gibi bir Scheffé tipi çokterimli modelin uydurulması durumunda, kısıtlı bölgenin içindeki ya da sınırları üzerindeki deney noktaları kullanılarak toplanan verilerle yapılacak b_i^* parametre/katsayı tahminleri *sadece* kısıtlı bölge için uygun olacaktır. Bu verilerle tepe noktalarında cevabın nasıl davrandığına dair tahminler yürütülemez. Eğer böyle bir tahmin yapılırsa, bu işlem regresyon analizindeki gibi istenmeyen *dış değer bulmadan* (extrapolation) başka bir şey olmayacaktır.

Sonuç olarak, KDT tipi deney tasarımlarında kullanabilecek üç tür metrik vardır. Bu metriklerin hepsi DT yazılımlarında kullanılabilir.

- i. Güncel (Actual) (gram, kg, ml vb.)
- ii. Gerçek (Real) (bileşen oranları)
- iii. Sözde-bileşen (Pseudocomponent) (sözde-bileşen oranları)

Bileşenler herhangi bir DT yazılımında bileşen oranları cinsinden girilmişse gerçek ya da güncel metrikleri aynı anlama gelecektir. Ayrıca, eğer bileşenler üzerinde eşitlik (3.1) ve (3.2) kısıtları (eşitlik veya toplam kısıtı ve pozitif değer alma kısıtı) dışında bir kısıt yoksa gerçek ve sözde-bileşen metriği birbirine eşit olacaktır.

Birçok deney tasarımı yazılımı (Design-Expert ve Minitab gibi) varsayılan (default) olarak A-sözde-bileşen dönüşümlerini kullanmaktadır. Bu çalışmada da eğer bileşenleri

kodlamaktan söz ediliyorsa, bunun A-sözde-bileşen dönüşümü işlemi olduğu anlaşılmalıdır. Diğer durumlarda yapılan dönüşümün niteliği belirtilecektir.

3.5 Simpleks Olmayan Deney Tasarımı Uzayları için KDT'ler

Şekil 3.9 ve 3.21'den de görülebileceği üzere eğer üst-sınır kısıtları var ise DT uzayı (bölgesi) simpleks biçimli olmayacaktır. Alt- ve üst-sınırların varlığında $q = 3$ için, düzgün olmayan çokgen biçimli DT uzayları oluşur. $q = 4$ için, düzgün olmayan çokgen biçimli DT uzayları, düzgün olmayan polihedronlara (çokyüzeylilere) dönüşür. $q > 4$ için ise, bu düzgün olmayan polihedronlar, yine düzgün olmayan hiperpolihedronlara dönüşür. Bu şekilde oluşan DT uzayları için yapılan tasarımlar daha çok bilgisayar-destekli deney tasarımları (computer-aided experimental design) olarak bilinirler. Önceki bölümlerde anlatılan simpleks biçimli deney tasarımlarının hiç birisi, bu tür düzensiz bölgeler için uygun değildir. Fakat bazı yöntemlerle bu tür düzensiz yüzeylere uydurulabilmeleri mümkündür (Saxena ve Nigam, 1977; Cornell, 2002).

Bir simpleks içindeki kısıtlı DT bölgesinin geometrisi aslında “dışbükey politope” (convex polytopes) dur. Bir politope aslında bir çokgen ya da çokyüzeylinin n boyutlu genelleştirilmiş halidir. Bir politope, eğer kendisini oluşturan tüm doğru parçalarını birbirine bağlayan deney noktası çiftleri kendi -politope'un- içindeyse dışbükeydir.

Şekil 3.22 aslında 3.21'in alt- ve üst-sınır kısıtları konulmuş halidir. Şekildeki tek-boyutlu alt-uzaylar (kenarlar) simpleksin kenarlarına paraleldir. Genel olarak eğer tek bileşen kısıtları söz konusu ise, kısıtlı DT bölgesinin $(q - 2)$ -boyutlu sınırları, simpleksin $(q - 2)$ -boyutlu sınırlarına paralel olacaktır.

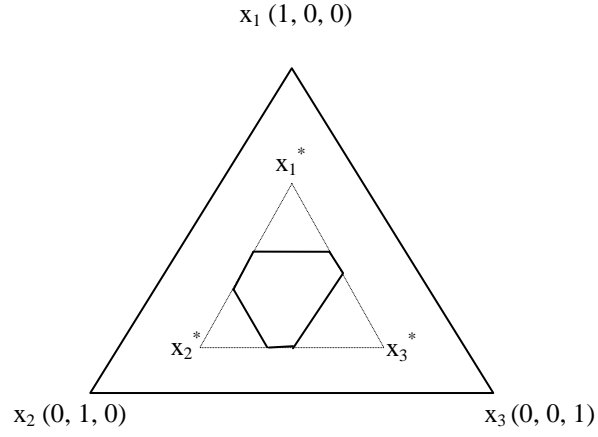
Bu durum çok-bileşenli kısıtlar söz konusu ise, her zaman doğru değildir. Örneğin $\frac{x_1}{x_2} \leq 2$ ve $\frac{3x_1 + x_2}{x_3} \geq 1$ gibi bir oran kısıtı var ise, bu kısıtlar basit cebirsel işlemler sonucu aşağıdaki biçimde yazılabilirler:

$$0 \leq -x_1 + 2x_3$$

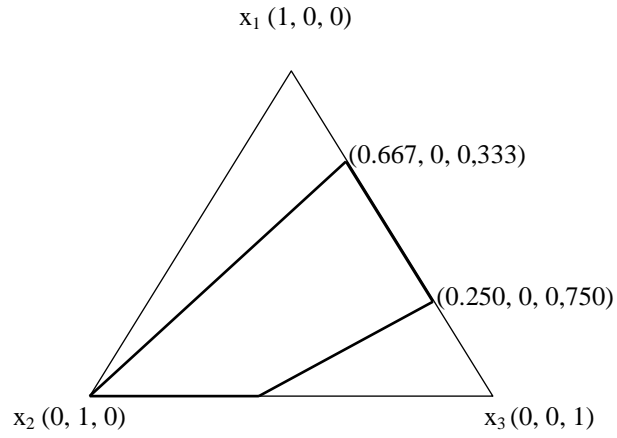
$$0 \leq 3x_1 + x_2 - x_3$$

Yukarıdaki ilk oran kısıtı tasarımı, x_1 'in tepe noktasına yakın bir noktaya kadar sınırlandırır. İkinci oran kısıtı ise, x_3 'ün tepe noktasına yakın bir noktaya kadar sınırlandırır. Bu iki kısıt altında tasarım bölgesi Şekil 3.23'teki gibi olur. Kalın çizgiler

arasındaki düzgün olmayan çokgen bölge DT bölgesidir. Görüldüğü gibi bu durumda iki sınır bölgesi arasında paralellik mevcut değildir.



Şekil 3.22 Düzgün olmayan çokgen biçimli DT alt-bölgesi.



Şekil 3.23 Oran kısıtları için düzgün olmayan çokgen biçimli DT alt-bölgesi.

Bu gibi düzensiz DT bölgeleri için yapılan tasarımlar daha çok özel algoritmalar kullanmak yoluyla mümkündür. Bu algoritmalar ise, genelde, uygun bir strateji ışığında oluşturulur ve uygulanır.

3.5.1 Düzgün Olmayan Geometrilik DT Bölgeleri için Stratejiler

Uç noktalar (simpleksler için tepe noktaları) bütün düzgün olmayan geometrilik DT bölgeleri için ortak olan deney noktası tipidir. Strateji için kullanılacak ilk adım olarak bu uç noktaların içeriği belirlenebilir ve böylelikle tasarım için gerekli olacak ilk *aday noktalar* (candidate points) kümesi elde edilebilir (Cornell, 2002). Sonrasında atılacak adım ise şöyle olabilir: uç nokta çiftlerinden birçoğu bir kenarın uç noktaları olacaktır ve dolayısıyla bu kenarın orta noktasının içeriği hesaplanabilir. Bu süreç orta noktaların değerini hesaplamak için tüm uç noktaların ortalamaları alınana kadar devam ettirilir. Sonuçta, $(q - 1)$ -boyuta kadar tüm boyutlar için orta noktaların da bulunduğu bir aday noktalar kümesi elde edilmiş olur. Bu noktalar kümesinde uç noktalar, 1-boyutluların orta noktaları, 2-boyutluların orta noktaları, ..., $(q - 1)$ -boyutluların orta noktalarının tamamı ya da bir kısmı yer alır. Burada uç noktaların ortalamaları alınarak hesaplanan orta noktaya ortalama-uç nokta-merkezi ya da ortalama-tepe nokta-merkezi (otm) (averaged-extreme-vertices) adı verilir.

R. B. Crosier, sadece tek-bileşen kısıtlarının bulunduğu kısıtlı bölgeler için mümkün olan bütün sınır sayılarını hesaplamak için formüller önermiştir (Crosier, 1986). $q \leq 12$ için mümkün olan bütün uç noktalar ve kenarların sayıları Çizelge 3.12’de verilmiştir. Şekil 3.22’de $q = 3$ için uç nokta ve kenar sayıları 6’şar tanedir.

Çizelge 3.12 $q \leq 12$ için kısıtlı bölgelerde mümkün olan bütün uç nokta ve kenar orta nokta sayıları (Smith, 2005).

q	Uç noktalar	Kenar ortaları
3	6	6
4	12	18
5	30	60
6	60	150
7	140	420
8	280	980
9	630	2520
10	1260	5670
11	2772	13860
12	5544	30492

Çizelgeden görüldüğü üzere, q değeri arttıkça aday nokta sayıları çok hızlı artmaktadır. 4.bölümde anlatılacak olan çalışma için hazırlanan deney tasarımında Design-Expert v.7.x programının oluşturduğu aday noktası sayısı 50000'ler civarındadır. Bu kadar nokta için deney tasarımı mümkün olmayacağı için nokta sayılarının makul değerlere indirilmesi şarttır. 1960'lı ve 70'li yıllarda bu alanlarda çok fazla araştırma yapılmış ve sonuçta uygun algoritmalar geliştirilmiştir. Bu algoritmaların en önemlileri, birçok DT yazılımında mevcuttur.

Düzensiz geometrilili bölgeler için DT oluşturma adımları şöyle özetlenebilir:

1. Deney noktaları için aday nokta kümesinin oluşturulması.
 - a. Aday nokta kümesindeki uç nokta içeriklerinin hesaplanması,
 - b. $(q - 1)$ -boyuta kadar bölgelerin orta noktalarının hesaplanıp, istenilenlerin aday nokta kümesine eklenmesi,
 - c. Diğer istenilen herhangi bir nokta veya noktaların içeriğinin hesaplanıp kümeye eklenmesi.
2. Aday nokta sayılarının uygun bir algoritma kullanarak makul deney noktası sayısına indirgenmesi.

Kişisel bilgisayarların henüz çok yaygın olmadığı zamanlarda bu adımlardan ilki kullanılmaktaydı ve birçok durumda doğrusal denklemler vb. kullanıldığı için deney noktası sayısı çok fazla olmamaktaydı. Oysa ürün veya karışımın bileşen sayısı artınca deney noktaları sayısı çok hızlı arttığından ve bilgisayar kullanımının yaygınlığından dolayı deney noktaları seçimi artık DT yazılımlarına bırakılmıştır. Aşağıda hem çok kullanıcı dostu olması hem de KDT'lere çok önemli bir yer ayırdığı için tercih ettiğimiz Design-Expert yazılımının kullandığı aday deney noktaları tipi vb. kısaca anlatılacaktır.

DE yazılımları çok çeşitli aday noktaları önermektedir. Bu noktaların tamamı ya da bir kısmı aday noktalar kümesine eklenebilir. Uç noktalar, kenar ortaları, ekk'lar ve merkez noktanın yanı sıra aşağıdaki nokta tipleri potansiyel aday noktalar olarak sunulmaktadır:

- **Kenar Üçteleri** (thirds of edges)
- **Üçlü karışımlar**: Birbirine yakın uç noktaların ortalamaları
- **Kısıt-düzlem merkez noktaları (kdm)**: $(q-2)$ -boyutlu çokgenlerin merkez noktaları. DT uzayının (bölgesinin) simpleks biçimli olduğu tasarımlarda, bu tür noktalar ile

eksenel son-nokta (axial end-points) tipi noktalar ve nokta sayıları aynı olur. Diğer tür tasarımlarda ise bu durum, tasarımın şekline bağlıdır.

- **İç-nokta karışımları (interior blends):** Bu tür noktalar merkez nokta ile kenarların orta noktaları arasında veya merkez nokta ile kdm noktaları arasında konumlanır. Bu noktaların sayısı, kenar orta noktalarının sayısı ile kdm noktaları sayısının toplamına eşittir.

3.5.2 Deney Tasarımlarında Kullanılan Algoritmalar- Genel Açıklamalar

Düzgün geometrisi olmayan yüzeylere uygun DT'ler geliştirebilmek için birçok çalışma yapılmaktadır (Muteki, 2007). Bu çalışmalardan elde edilen yöntemler belli bir sıra takip eder hale geldiğinde, bunları algoritma olarak nitelemek doğru olacaktır. Bu algoritmaların birçoğu ürün ya da karışım formülasyonları için oluşturulmamasına rağmen, bu tür DT'lere kolaylıkla uyarlanabilmektedir. Ayrıca sadece KDT'ler göz önüne alınarak geliştirilmiş algoritmalar da mevcuttur (Snee,1985). Örneğin, McLean-Anderson, XVERT ve CONSIM algoritmaları özellikle KDT'ler için geliştirilmiştir. Bu kısımda bu algoritmalar kısaca açıklanacak ve KDT'ler açısından önem arzeden XVERT ve CONSIM ayrıntılı olarak incelenecektir. Bu konuda daha fazla ayrıntı A. C. Atkinson vd. tarafından yazılmış olan “*Optimum Experimental Designs, with SAS*” kitabından edinilebilir.

Çizelge 3.13'te deney tasarım noktalarını seçmekte kullanılan algoritmalar verilmiştir. Bu verilen algoritmalarından yukarıda sayılanların dışında kalanlar, öncelikle diğer tip DT'ler için geliştirilmiştir.

Çizelge 3.13 Deney Tasarımlarında deney noktası seçimi için kullanılan algoritmalar (Smith, 2005).

Yıl	Algoritma Adı	
1966	McLean-Anderson (M-A)	R. A. McLean ve V. L. Anderson
1969	CADEX	R. W. Kennard ve L. Stone
1971	Dykstra	O. Dykstra
1972	Wynn-Mitchell	T. J. Mitchell vd.; H. P. Wynn
1972	Federov	V. V. Federov
1974	DETMAX	T. J. Mitchell
1974	XVERT	R. D. Snee ve D. W. Marquardt
1979	CONSIM	R. D. Snee

Bu çizelgede CADEX (computer-aided design of experiments), DETMAX (determinant maximization), XVERT (extrême vertices) ve CONSIM (constrained simplex) gibi isimlendirmelerin kısaltmalarından oluşmaktadır.

M-A ve XVERT algoritmaları sadece tek-bileşen kısıtları olan ürün formülasyonları için kullanılabilir. M-A algoritması toplam $q \times 2^q - 1$ adet uç nokta üretir. Fakat bu noktaların büyük bir kısmı deney kısıtları dışında kaldığı için, kullanılamazlar. Bu algoritmanın en önemli eksiği sadece uç noktaları hesaplamak için kullanılabilmesidir. $q \geq 5$ için potansiyel deney noktaları sayısının çok hızlı artacağı daha önceden gösterilmişti. Bu durum da M-A algoritması için olumsuz bir özelliktir. Bu algoritma kişisel bilgisayarların pek yaygın olmadığı zamanlarda geliştirildiği için uygulanması çok fazla zaman ve emek istemektedir.

XVERT algoritması ise, M-A algoritmasının daha geliştirilmiş bir halidir. Bu algoritma daha etkili ve daha kullanışlı bir algoritmadır. XVERT bütün uç noktalar ya da uç noktaların bir kısmının oluşturulması için kullanılabilir. Hemen tüm DT yazılımlarında, sadece tek-bileşen kısıtları varken bu algoritma kullanılmaktadır.

CONSIM algoritması ise, çok-bileşen kısıtları varken kullanılır. Birçok DT yazılımında bu algoritma bulunmaktadır. Bu algoritma XVERT'in aksine oldukça karmaşıktır ve yürütülmesi için bilgisayarlara ihtiyaç duyulur.

CADEX'te, M-A ve XVERT'teki gibi deney noktası seçimi yapılmaz. Bu algoritmada amaç, aday noktalar kümesinden mesafe-temelli (distance-based) olarak deney noktalarını seçmektir. Bu nokta seçimleri sonucu deney noktalarının bölge üzerinde mümkün olduğu kadar birörnek (uniform) dağılması sağlanmaya çalışılır. Her bir n adet aday noktası ($q - 1$)-boyutlu uzayda tek bir nokta olarak görülürse, bir KDT'de seçilen ilk aday nokta "saf" bileşenden en kısa Öklid-mesafeli (Euclidian-distance) nokta olur. Sonrasında eklenecek her aday nokta, kalan noktalardan tasarımda mevcut olan noktalara minimum Öklid-mesafesi en büyük olanı seçilir. Bu yöntemde herhangi bir model varsayımı yapılmaz. Bundan dolayı, aralık-temelli algoritmalarla DT optimizasyonu gibi bir kriter kullanılamaz.

Dykstra ve Wynn yöntemleri önceden oluşturulmuş deney tasarımlarının geliştirilmesi/arttırılması üzerine kurulmuştur. Bu yöntemde her seferinde bir nokta yöntemiyle seçilen ilave noktalarla, regresyon katsayılarının (genelleştirilmiş değişkenlik) güvenilirlik bölgesinin (confidence region) hacminin minimize edilmesi esastır.

Wynn-Mitchell yöntemleri daha çok ardışık arama prosedürleri denilen yöntemleri kullanarak önceden belirlenmiş bir boyuttaki deney tasarımını temel alır. Her bir yineleme

(iteration) işlemiyle bir nokta eklenip, bir nokta tasarımdan çıkarılır. Burada eklenen nokta istenilen koşulları tam olarak sağlayan nokta; çıkarılan nokta ise, $n + 1$ adet noktadan bu koşulları en az sağlayanıdır. Bu algoritma daha fazla iyileşme kaydedilemediği noktada durur.

Gezinti (excursion) algoritması olarak ta bilinen DETMAX, en çok kullanılan ve birçok DT yazılımlarında kullanılan algoritmadır. Öncelikle ardışık veya başka bir yöntemle bir DT oluşturulur. Wynn-Mitchell yöntemi gibi tek nokta değiş-tokuş algoritması ile seçilen kriterler açısından gelişme sağlanamazsa, gezinti algoritması devreye girer. Bu algoritma her seferinde tek nokta değil birden fazla nokta ekler ve çıkarır. Dolayısıyla bu algoritma çalışırken, tasarımdaki nokta sayısı $n + k$ ile $n - k$ arasında değişir. Burada n deney noktası sayısı; k ise, gezinti esnasında kullanılacak maksimum nokta sayısıdır.

Son olarak Federov algoritması ise, hem çok işlem yoğun olan, hem de en yavaş yürüyen algoritmadır. Bu yöntem eş-zamanlı değiş-tokuş üzerine kuruludur. Her bir yinelemede algoritma tüm mümkün değiş-tokuş çiftlerini göz önüne alır. Dolayısıyla, her bir yinelemede $n_{\text{deney noktası}} \times n_{\text{aday nokta}}$ adet nokta karşılaştırması yapılır. Bu da bu algoritmayı çok fazla yavaşlatır. Bu algoritmanın biraz daha hızlandırılmış olanı *değiştirilmiş Federov* (modified Federov) algoritması olarak adlandırılır ve Minitab programı tarafından kullanılmaktadır (Cook ve Nachtsheim, 1980).

3.5.2.1 XVERT Algoritması

R. D. Snee ve D. W. Marquardt (1974) tarafından geliştirilen bu algoritma M-A algoritmasına alternatif olarak önerilmiştir. Geliştirilen bu algoritma ile kısıtlanmış bölgenin tüm uç noktalarının koordinatları belirlendiği gibi, doğrusal Scheffé çokterimli modelini oluşturmak için gerekli deney noktalarını, bu uç noktalar arasından seçmeyi sağlar.

XVERT algoritması uygun tasarımlar arasından $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ matrisinin minimum izli olanını (min. $\text{tr}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$) seçmeyi sağlar. $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ matrisinin izi, matrisin köşegen elemanlarının toplamıdır. $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ matrisinin izi σ^2 ile çarpıldığında, eşitlik (3.58)'da olduğu gibi β_i bilinmeyen parametrelerinin b_i tahmin değerlerinin değişkenliklerinin toplamı elde edilir.

$$\sum_{i=1}^q \text{var}(\hat{\beta}_i) = \sigma^2 \text{tr}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \quad (3.58)$$

Yani amaç $\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y}$ ve $\text{var}(\mathbf{b}) = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\sigma^2$ olmak üzere

$$\sigma^2 \text{tr}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = \sum_{i=1}^q \text{var}(b_i) = \sum_{i=1}^q \text{var}(\hat{\beta}_i) \quad (3.59)$$

olup $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ bilgi matrisinin izini ve b_i tahminlerinin deęişkenliklerinin toplamını minimum yapmaktır.

DT bölgesinin uç noktalarını (çokgen bölgenin köşe noktaları) bulmak için uygulanacak XVERT algoritmasının adımları şöyledir:

1. Adım: $R_i = \bar{U}_i - A_i$ deęişim aralıkları belirlenir ve küçükten büyüye doğru sıralanır. En küçüğü D_1 ve en büyüğü D_q olarak alınır: $R_1 = \bar{U}_1 - A_1 = 0.80 - 0.40 = 0.40$ ise $x_1 = D_1$ gibi

2. Adım: D_i 'lerden en küçük deęişim aralığına sahip ilk $q - 1$ bileşenin alt ve üst sınırları kullanılarak tüm mümkün kombinasyonları (2^{q-1} kombinasyon) yazılır. Örneğin, $q = 4$ bileşen için $2^{4-1} = 2^3 = 8$ kombinasyon vardır.

3. Adım: $D_q = 1 - \sum_{i=1}^q D_i$ eşitliği kullanılarak 2^{q-1} kombinasyondaki kullanılmayan D_q 'uncu bileşenin deęeri hesaplanır.

4. Adım: Eđer D_q 'nun deęeri kabul edilebilir aralığa düşüyorsa, ilgili kombinasyon DT uzayının (bölgesinin) uç noktasıdır. Eđer D_q için elde edilen deęer kabul edilebilir aralığın dışında kalıyorsa, D_q için alt veya üst sınırlar kullanılarak ayarlama yapılır.

5. Adım: Kabul edilebilir aralığın dışında kalan D_q deęerleri için yeni noktalar, elde edilen diđer bileşen deęerlerinde ayarlama yapılarak üretilir. Bunun için, üçüncü adımda D_q 'ya ait hesaplanan deęer ile D_q 'nun alt- ve üst- sınırları arasındaki farkın miktarı, ilgili noktadaki diđer D_i deęerlerinden çıkarılır ve uygun noktalar üretilir. Bu durumda dördüncü adımdaki deęişim aralığında bulunmayan her nokta için $q - 1$ ek deney noktası elde edilir.

3.5.2.1.1 XVERT1 Algoritması

Uç-noktalar için deney tasarımı yapılırken, XVERT algoritması minimum deęişim aralığına sahip ilk $q-1$ bileşenin alt ve üst sınırlarının mümkün olan tüm kombinasyonlarının kümesini oluşturmakla işe başlar. Minimum deęişim aralığına sahip D_i , $i = 1, 2, \dots, q-1$ yeniden sıralanmış bileşenin alt ve üst sınırları sırasıyla \mathcal{A}_i ve $\bar{\mathcal{U}}_i$ olarak

gösterilirse 2^{q-1} kombinasyon oluşur. Bir sonraki adımda D_q bileşeni için boş bırakılan yerler $D_q = 1 - \sum_{i=1}^{q-1} D_i$ eşitliği kullanılarak doldurulur. Bu yapıldıktan sonra iki grup nokta elde edilir. Birinci grup esas noktalardan oluşan D_q değerinin kabul edilebilir aralıkta bulunduğu grup ve ikinci grup D_q değerlerinin kabul edilebilir aralıkta bulunmadığı gruptur. Daha sonra D_1, D_2, \dots, D_{q-1} değerlerinin D_q 'nin alt- ve üst-sınırlarına göre yeniden düzenlenmesiyle uygun olmayan kombinasyonlarda düzeltilir. Sonuçta esas noktalar ile ikinci gruptan seçilen aday noktaların alt kümelerinden oluşan ek noktalar elde edilir.

Nigam vd. (1983) tarafından önerilen XVERT1 algoritması, XVERT algoritmasının kısıtlanmış halidir. XVERT1 algoritması da XVERT algoritması gibi bileşenlerin değişim aralıklarının $R_i = \bar{U}_i - A_i$ şeklinde sıralanmasıyla başlar ve minimum değişim aralığına sahip bileşen D_1 , en büyük değişim aralığına sahip bileşen D_q olarak adlandırılır. XVERT1 algoritmasının diğer adımları şöyledir:

1. Adım: Minimum değişim aralığına sahip ilk $q-2$ bileşenin alt ve üst sınırlarının tüm olanaklı kombinasyonları listelenir. Bunların sayısı, 2^{q-1} 'dir. Bu sınırlar D_1, D_2, \dots, D_{q-2} 'ye bağlıdır ve $i = 1, 2, \dots, q-2$ olmak üzere \mathcal{A}_i ve $\bar{\mathcal{U}}_i$ olarak belirtilecektir.

2. Adım: $C = 1 - \sum_{i=1}^{q-2} D_i$ olsun. Burada D_i, \mathcal{A}_i ya da $\bar{\mathcal{U}}_i$ olabilir. Birinci adımdaki

her kombinasyon için,

a) $\tilde{D}_q = C - \mathcal{A}_{q-1}$ 'den D_q değeri, D_{q-1} 'in alt-sınırı kullanılarak hesaplanır.

b) $\tilde{D}_q = C - \bar{\mathcal{U}}_{q-1}$ 'den D_q değeri, D_{q-1} 'in üst-sınırı kullanılarak hesaplanır.

c) $\tilde{D}_{q-1} = C - \mathcal{A}_q$ 'den D_{q-1} değeri, D_q 'nin alt-sınırı kullanılarak hesaplanır.

d) $\tilde{D}_{q-1} = C - \bar{\mathcal{U}}_q$ 'den D_{q-1} değeri, D_q 'nin üst-sınırı kullanılarak hesaplanır.

2.adımın (a) – (d) durumları birinci adımdaki 2^{q-1} kombinasyonun her birinden dört kombinasyon üretir. Bu da toplam 2^q aday nokta demektir.

3. Adım: Bir aday nokta, için hesaplanan her iki \tilde{D}_{q-1} ve \tilde{D}_q değeri D_q ve D_{q-1} orijinal değişkenlerinin değişim aralığındaysa, yani, $\mathcal{A}_{q-1} \leq \tilde{D}_{q-1} \leq \bar{\mathcal{U}}_{q-1}$ ve $\mathcal{A}_q \leq \tilde{D}_q$ ise bu aday nokta kısıtlanmış bölgenin bir uç noktasıdır.

İlk bakışta XVERT1 algoritmasının 1 – 3. adımları açık olarak XVERT algoritmasından çok farklı görünmemektedir. Ancak 2. adımdaki (a) – (d) adımları tekrar ele alınacak olursa 3. adım şöyle ifade edilebilir:

$$\begin{aligned}
 \text{a) } \mathcal{A}_q &\leq C - \mathcal{A}_{q-1} \leq \mathcal{U}_q \\
 \text{b) } \mathcal{A}_q &\leq C - \mathcal{U}_{q-1} \leq \mathcal{U}_q \\
 \text{c) } \mathcal{A}_{q-1} &\leq C - \mathcal{A}_q \leq \mathcal{U}_{q-1} \\
 \text{d) } \mathcal{A}_{q-1} &\leq C - \mathcal{U}_q \leq \mathcal{U}_{q-1}
 \end{aligned} \tag{3.60}$$

Burada (3.60) eşitliğinin (a) ve (d) durumları sadece $C - \mathcal{A}_{q-1} = \mathcal{U}_q$ eşitliği geçerli ise sağlanır. (3.60) (b) ve (c) durumları ise, sadece $C - \mathcal{A}_q = \mathcal{U}_{q-1}$ eşitliği sağlandığında geçerlidir. Bu iki eşitliğin sağlandığı durumlarda sadece iki farklı nokta elde edilecektir. Çünkü (3.60) (a) ve (d) durumları birbirinin; (3.60) (b) ve (c) de birbirinin aynısıdır. Böylece XVERT1 algoritması toplam 2^{q-1} adet farklı uygun nokta üretmiş olur. Sonuç olarak, istenilen DT nokta sayısı 2^{q-1} ise, XVERT1 algoritması bu noktaları XVERT algoritmasından daha hızlı üretir.

3.5.2.2 CONSIM Algoritması

Yukarıda da belirtildiği gibi bu algoritma çok-bileşenli kısıtların var olduğu durumlarda kullanılmak için geliştirilmiştir. Bu algoritmanın matematik alt yapısı oldukça karmaşık olduğu için adımlar ayrıntılara girilmeden aşağıdaki gibi verilebilir:

1. **Adım:** Bir kısıt oluştur.
2. **Adım:** Hangi uç noktaların kısıt içinde, hangilerinin bu kısıt dışında kaldığını belirle
3. **Adım:** Aynı kenar üzerinde konumlanmış olan her kısıt içindeki ve kısıt dışındaki uç nokta için doğrusal kombinasyonlar elde edilecek biçimde yeni uç noktalar oluştur.
4. **Adım:** Yeni noktalar uç noktalar elde edildikten sonra kısıt dışındaki noktaları yok et.
5. **Adım:** 1.adıma geri dön ve yeni kısıtı oluştur.

Çok-bileşen kısıtları ürün formülasyonlarında sıkça karşımıza çıkmaktadır. KDT için geliştirilmiş ya da bu tür tasarımları da yapabilme kapasitesi olan bir çok yazılımda bu algoritma kullanılmaktadır. Bu algoritma G. F. Piepel'in 1988'de yayınladığı CONVRT olarak isimlendirilen FORTRAN kodlarının değiştirilmiş biçimidir (Piepel, 1988). Bu çalışmada kullanılan DE yazılımları da uç noktaları bulmak için CONVRT algoritmasını kullanmaktadır (Statease Inc., 2008).

Yukarıdaki algoritmalar kullanılarak oluşturulan aday noktalar kümesi içinden tasarımda kullanılacak noktaların seçilmesi de oldukça zorlu bir iştir (Cornell, 2002). Burada genellikle iki yöntemden söz edilebilir: XVERT algoritmasının kullanarak DT noktalarını seçmek ve tasarım optimizasyonu yöntemlerini kullanarak DT noktalarını seçmek. XVERT algoritması genellikle doğrusal modeller kullanan tarama tasarımları için uygundur. Tasarım optimizasyonları ise, hem tarama tasarımları hem de TYY'ler için uygundur. XVERT algoritması ile tasarım noktaları seçiminin ayrıntılarına girilmeyecektir. Fakat endüstriyel deney tasarımının olmazsa olmazı olarak görülebilecek tasarım optimizasyonları bir sonraki alt bölümde incelenecektir.

3.5.3 Tasarım Optimizasyonları

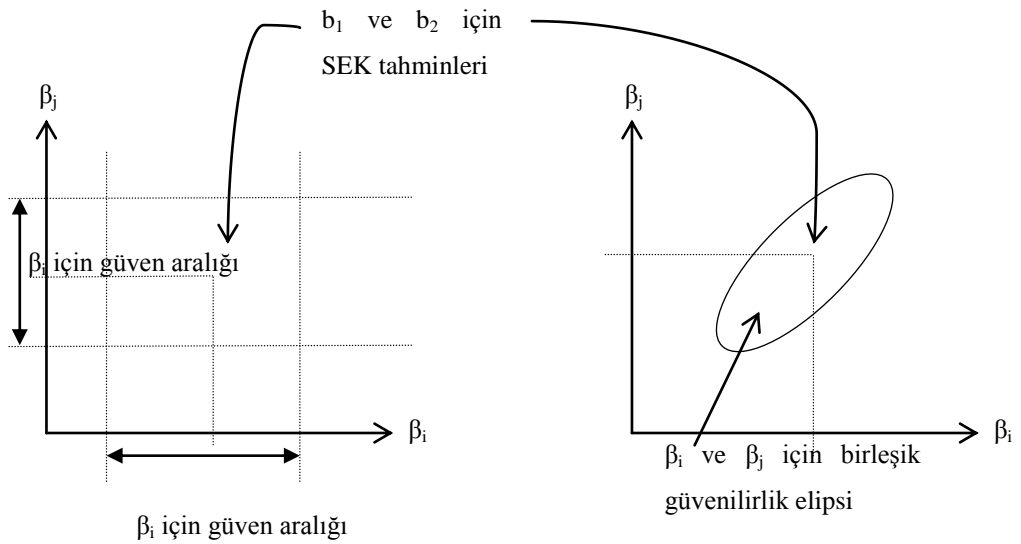
Bu bölümde, daha çok, bir deney tasarımı ile tasarım verisine uydurulmuş bir modelin katsayı tahminlerinin güvenilirlik bölgesi arasındaki ilişki üzerinde durulacaktır. Burada önemle belirtmek gerekir ki tahmin değişkenlikleri de en az katsayı tahminlerinin güvenilirlik bölgesi kadar önemlidir. Fakat katsayı tahminlerinin doğruluğu üzerinde daha fazla durulmasının sebebi, DT için kullanılan birçok yazılımın aday noktalar kümesinden tasarım noktalarını tahmin-temelli (prediction-based) değil, parametre-temelli (parameter-based) seçmesidir. Piyasada bazı tahmin-temelli nokta seçimi yapan yazılımlar da vardır. Bunlardan ACED ve Gosset en çok bilinenlerdir (Welch, 1984).

Parametre-temelli optimizasyon kriterlerinden en çok bilineni ve en yaygın olarak kullanılanı D-optimum kriteridir. Fakat bunun gibi bir çok optimizasyon kriteri mevcuttur. Bunlar genellikle alfabetik optimizasyon kriterleri olarak bilinirler. Bu çalışmada endüstriyel deney tasarımları için önem arz eden D-optimum ve A-optimum kriterleri üzerinde durulacaktır.

3.5.3.1 D-optimum Tasarım Kriteri

Endüstriyel ürün formülasyonları için deney tasarımları yapılırken en çok kullanılan D-optimum kriteri, güvenilirlik elipsinin alanının (confidence ellipse) ya da terim sayısı $p > 2$ için, güvenilirlik elipsoidinin hacminin minimize edilmesi üzerine kuruludur. Şekil 3.24'te gösterilen bu alanı ya da hacmi minimum yapan DT noktaları seti için tasarımın D-optimum olduğu söylenir.

D-optimum kriterinin ve diğer alfabetik optimizasyon kriterlerinin anlaşılabilmesi için, *bilgi matrisi* (information matrix) olarak adlandırılan ve sıradan en küçük kareler yönteminin uygulanmasında esas rolü oynayan $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ matrisi ve bu matrise ait özelliklerin anlaşılması gerekir.



Şekil 3.24 2 bileşen için güven aralığı (solda) ve bu güven aralıklarının oluşturduğu güvenilirlik elipsi (sağda)

Regresyon katsayılarının güvenilirlik bölgesinin (*genelleştirilmiş değişkenlik*) hacmi, $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ matrisinin determinantının karekökü ile ters orantılıdır (Cornell, 2002; Atkinson vd., 2007; Box ve Draper, 2007). Bu determinant değerinin ($|\mathbf{X}'\mathbf{X}|$) hesaplanması için önce $n \times p$ türü tasarım matrisi (\mathbf{X}) hazırlanır (deney noktaları seti), bu matrisin devriği (transposu) olan $p \times n$ türü \mathbf{X}' matrisi oluşturulur ve sonrasında ise matris çarpımı işlemi gerçekleştirilerek $p \times p$ türü $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ kare bilgi matrisi elde edilir. Burada p modeldeki terim sayısını; n ise, yapılan ölçüm ya da deneme sayısını gösterir. Genelleştirilmiş değişkenlik, bilgi matrisinin

determinantının karekökü ($\sqrt{|\mathbf{X}'\mathbf{X}|}$) ile ters orantılı olduğu için, determinant değerinin artması durumunda, genelleştirilmiş değişkenlik azalır.

Bir deney tasarımının D-optimum olup olmadığı eşitlik (3.61)'deki gibi bir etkinlik katsayısına bakılarak kararlaştırılabilir (Mitchell, 1974). Burada akıldan çıkarılmaması gereken şey, bir KDT'nin optimum olup olmadığı ancak aynı kısıtlar için gerçekleştirilen fakat farklı sayıda deney noktası içeren başka bir KDT ile kıyaslanarak kararlaştırılacağıdır.

$$D_{\text{etkinlik}} = 100 \cdot \frac{|\mathbf{X}'\mathbf{X}|^{1/p}}{n} \quad (3.61)$$

Bu eşitlikte n deneme sayısını ve p ise, modeldeki katsayıların toplamını göstermektedir. DE yazılımının eski versiyonları (v6.x ve v7.0.x) bu katsayının tersinin (çarpma işlemine göre) 100 ile çarpılmış biçimini göstermekte ve bunu *ölçeklendirilmiş D-optimum kriteri* (scaled D-optimality criterion) olarak adlandırmaktadır (Statease Inc., 2007, 2008). Bu katsayı ne kadar küçük ise tasarım o kadar D-optimumdur.

DT için kullanılan yazılımlar birbirinden farklı tasarım optimizasyonu yöntemleri kullanırlar. Fakat bu yazılımların ürettiği tasarımlar incelendiğinde, hepsinin benzer sonuçlar ürettiği görülür (Smith, 2005). Genel olarak bir DT yazılımı kullanarak optimum tasarım oluşturmak için adımlar şöyledir:

1. Aday nokta kümesi oluşturulur. Bu işlemi birçok DT yazılımı kendi içinde gerçekleştirir. (Kullanıcının bu veriye ulaşım yorumlaması çok zordur.)
2. Bir matematik model belirlenir.
3. Deney tasarımı için kaç noktanın (denemenin) yeterli olacağı belirlenir.
4. Optimizasyon kriteri belirlenir.

D-optimum deney tasarımları için aday nokta kümeleri oluşturmakta kullanılan DETMAX gibi algoritmalar deney noktalarını daha çok tasarım bölgesinin sınırları üzerinde konumlandırır. Zira bu tür noktalar $|\mathbf{X}'\mathbf{X}|$ değerini maksimum yapan noktalardır (Cornell, 2002).

D-optimum kriteri deney noktalarını sınırlar üzerinde konumlandığı için bu tür tasarımlarda merkez noktalar genellikle yer almaz. Bir DT'de merkez noktaların yer almaması bazı potansiyel sorunlara neden olur. Bunlar aşağıdaki gibi sıralanabilir:

1. Tasarım bölgesinin içinde tahmin değişkenliği değerleri çok aşırı artabilir. Bu durum yanlış tahminlere yol açar.
2. Eğer tasarımın cevap yüzeyi, bu yüzeyi tahmin etmekte kullanılan modelden daha yüksek bir modele uygun ise, yanlış tahminler, yani yanlı (biased) tahmin değerleri ve s^2 değerleri oluşur. Potansiyel yanlılıkları olan bir DT, tasarım bölgesinin uç noktaları için deney noktası içermez (Box ve Draper, 2007; Myers ve Montgomery, 2002).

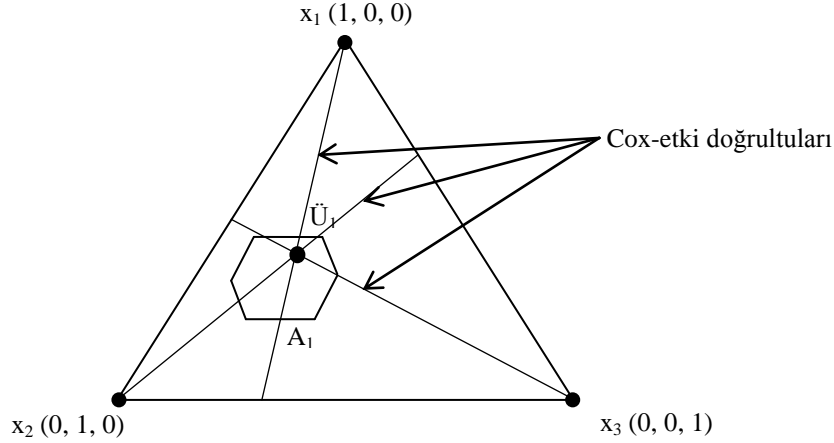
Bu çalışmada kullanılan DT yazılımı Design-Expert v7.x ve ayrıca JMP v.7 yazılımı aday nokta kümesinden bağımsız bir yönteme de sahiptir. Bu yöntem *koordinat-değişimi algoritması* (coordinate-exchange algorithm) olarak adlandırılır. Bu yöntemle elde edilen tasarım optimizasyonu da D-optimumdur. Aday nokta kümeleri kullanan algoritmanın ismi ise, yukarıda da açıklandığı üzere, *nokta-değişimi algoritmasıdır* (point-exchange algorithm).

Bir aday noktalar kümesi olmamasına rağmen bu algoritma, kullandığı arama prosedürü dolayısıyla uç noktaları ve muhtemel düzlem orta noktalarını bulabilmektedir (Smith, 2005; Statease Inc., 2008). Koordinat-değişimi algoritması iki aşamadan oluşmaktadır: Birinci adım istenilen deney noktalarını içeren optimum olmayan başlangıç tasarımıdır. İkinci adım ise, başlangıç tasarımının optimizasyonunu içeren koordinat-değişimi adımındır.

Birinci adımda KDT simpleksinde rastgele noktalar üretilir. Eğer oluşturulan nokta kısıtlanmış bölgede kalıyorsa bu nokta başlangıç tasarımı için elverişli bir noktadır. Aksi takdirde bu nokta konumuna en yakın sınır noktasına konumlandırılır. Eğer tüm kısıtlar sağlanıyorsa, o zaman bu nokta başlangıç tasarımına eklenir; aksi takdirde tekrar kendi konumuna en yakın sınıra yerleştirilir. Bu işlem, tüm kısıtlar sağlanıncaya kadar bu şekilde devam ettirilir.

İkinci adımda ise, ilk deney noktasının ilk bileşeni, Şekil 3.25'teki gibi bir *Cox doğrultusu* (Cox's direction) boyunca değiştirilir (Cornell, 2002). Bu konuya ileriki konularda tekrar değinilecektir. Örneğin, x_1 için $A_1 - \bar{U}_1$ aralığı n adet alt-aralığa bölünür ve böylece $n + 1$ adet ilave nokta oluşur. Her bir nokta için D-optimum kriteri hesaplanır. Eğer bir veya daha fazla nokta için kriterde iyileşme sağlanmışsa, o zaman ilk deney noktası *en iyi deney noktası* olarak alınır. Sonrasında bu en iyi deney noktasının ikinci bileşeni kendi Cox-etki doğrultusu boyunca aynı amaç için değiştirilir. Süreç tüm bileşenlerin, tüm başlangıç

deney noktalarının değiştirilmesi suretiyle sürdürülür. Sürecin tamamı tüm deney noktalarında artık değişim gözlenmeyene kadar bir defa daha tekrarlanır.



Şekil 3.25 3-bileşenli bir simpleks KDT için Cox-etki doğrultuları

Ayrıca DE yazılımında D-optimum kriteri kullanılarak önce model için gerekli olan noktaları seçilir. Model uyumsuzluğunun testi için ise, mesafe-temelli (distance-based) nokta seçimi yöntemi kullanılarak gerekli deney noktaları seçilir. Son olarak *saf deneysel hatanın* (pure experimental error) tahmininde kullanılan tekrar noktaları, yine D-optimum kriterine uygun olarak seçilir.

3.5.3.2 A-optimum Tasarım Kriteri

Diğer bir parametre-tabanlı popüler optimizasyon kriteri A-optimumdur. D-optimumdan farklı olarak A-optimum kriteri, regresyon katsayılarının tahminindeki değişkenliklerle (variance) ilgilenir ve tahminler arasındaki eşdeğişkenlikleri (covariance) ise yok sayar. D-optimum kriteri için gerekli olan bilgi matrisine benzer olarak burada bilgi matrisinin tersi $((\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1})$ önemlidir.

Bilgi matrisinin tersinin $((\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1})$, σ^2 ile çarpımı olan değişkenlik-eşdeğişkenlik matrisi ya da daha çok kullanılan adıyla kovaryans matrisi (variance-covariance matrix) de bilgi matrisi gibi SEK hesaplarında çok önemli bir yer tutar. kovaryans matrisinin ismi, katsayı tahminlerine ait değişkenliklerinin $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ matrisinin köşegen elemanlarıyla orantılı olmasından gelmektedir. Köşegen dışındaki elemanlar ise, eşdeğişkenliklerle orantılıdır.

Bu ifadeler matris biçiminde eşitlik (3.62)'deki gibi yazılabilir:

$$(\text{var}(\mathbf{b}))_{\text{pxp}} = s^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})_{\text{pxp}}^{-1} \quad (3.62)$$

Burada \mathbf{b} , $\text{px}1$ boyutlu bir katsayı tahminleri vektörü; $\text{var}(\mathbf{b})$, pxp türü değişkenlik matrisi ve s^2 ise, deneydeki *hataların kareler ortalamasını* (mean square error) göstermektedir. Eşitlik (3.62)'deki katsayı tahminlerinin değişkenliği iki bileşenden oluşur: belirlenimsel bileşen (deterministic) ve olasılıksal bileşen (stochastic). Belirlenimsel bileşen $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ matrisinin köşegen elemanlarından herhangi birisi; olasılıksal bileşen ise, s^2 'dir. Dolayısıyla, s^2 hariç olmak üzere, katsayı tahminleri, $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ matrisinin köşegen elemanlarına eşittir. $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ matrisinin köşegen elemanları c_{ii} ile köşegen dışında kalan elemanlar ise, c_{ij} ile gösterilir.

Katsayı tahminlerinin (b) standart hataları, $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ matrisinin köşegen elemanlarının kareköklerinin ($\sqrt{c_{ii}}$) standart hata (s) ile çarpımına eşittir ($\text{sh}(\mathbf{b}) = \sqrt{s c_{ii}}$). Başka türlü söylenirse, temel standart sapmanın 1.0'e eşit olduğu durumda, $\sqrt{c_{ii}}$ 'ler katsayı tahminlerinin standart hatalarına eşittir. Gerçekte σ 'nın bir tahmini olan s değerinin 1.0'e eşit olması, pek mümkün değildir. Eşit olduğu durum mümkün olursa, $\sqrt{c_{ii}}$ değerleri katsayı tahminlerinin standart hatalarına eşit olacaktır (Cornell, 2002). Fakat s'nin değeri her ne olursa olsun katsayı tahminlerinin standart hataları $\sqrt{c_{ii}}$ değerleri ve s değerinin çarpımına eşit olacaktır.

Böylelikle, katsayı tahminleri önceden, yani henüz denemelere başlamadan, görelî de olsa, bilinecektir. Denemeler gerçekleştirilip toplanan veriler SEK yöntemleri kullanılarak matematik modele uydurulduktan sonra, σ^2 değerine ait olan s^2 değeri elde edilecektir.

Bir deney tasarımı $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ matrisinin iz değerini ($\text{tr}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$) minimize ediyorsa A-optimum tasarım olarak adlandırılır (Bkz. XVERT algoritması, eşitlik (3.58) ve (3.59)). İz değerini modeldeki katsayı sayısı (parametre sayısı) p'ye bölünürse, katsayıların *ortalama değişkenliği* (average variance) elde edilir. Zaten, A-optimumdaki "A" harfi de "average"dan gelmektedir.

D-optimum kriteri için gerekli olan $|\mathbf{X}'\mathbf{X}|$ değerini maksimum yapmak ile $|(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}|$ değerini minimum yapmak aynı anlama gelmektedir (Cornell, 2002; Smith, 2005). Çünkü $|(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}| = \frac{1}{|\mathbf{X}'\mathbf{X}|}$ dur.

Tasarım optimizasyonları açısından bakıldığında A- ve D-optimum kriterleri arasındaki temel fark şöyle açıklanabilir: A-optimum kriteri p adet güven aralığının ortalama değerlerini minimize eder. Yani her bir parametre tahminin ortalama değerini minimize

eder. D-optimum kriteri ise, güvenilirlik elipsoidinin hacmini minimize eder. Burada güven aralıkları ya da bölgeleri, bunları hesaplamakta kullanılan yöntemlere bağlı özellikler olarak davranırlar (Cornell, 2002).

A- ve D-optimum kriterleri ve diğer tasarım optimizasyonları hakkında daha fazla bilgi A. C. Atkinson vd. (2007) tarafından yazılan kitaptan elde edilebilir.

3.6 Karışım-Süreç Deney Tasarımları (KSDT ve KMDT)

Bir endüstriyel formülasyon çalışmasında reçete performansı sadece karışım bileşenlerine bağlı olarak değişmez. Birçok durumda bu performans, kontrol edilebilir ya da kontrol edilemeyen (gürültü) süreç değişkenlerine de bağımlıdır. 2. Bölümde kısaca değinilen süreç değişkenlerine örnek olarak şunlar verilebilir: karışım hızı ve süresi, sıcaklık, pişirme süresi, kaplama kalınlığı, ilaç dozu, toplam karışım miktarları vb.

3.6.1 KSDT ve KMDT için Matematik Modeller

Bu alanda ilk matematik modeller de H. Scheffé tarafından geliştirilmiştir (Scheffé, 1963). Fakat bu tür deney tasarımları için yöntemler G. F. Piepel ve J. A. Cornell tarafından KMDT'ler için geliştirilmiştir ve KSDT'ler için de uygulanabilirler (Piepel ve Cornell, 1985). KSDT türü deney tasarımlarına *çaprazlanmış tasarımlar* (crossed designs) da denilmektedir ve modelleri genel olarak şu biçimde gösterilirler (Dingstad vd., 2003):

$$E(y) = f(x) \times g(z) + \varepsilon$$

Bu ifadede $f(x)$ karışıma ait çokterimli modeli; $g(z)$ ise, süreç değişkenlerine ait çok terimli modeli göstermektedir. Burada da ε ortalama değeri sıfır olan ve x ve z 'den bağımsız rastgele değişkeni (kavramsal hata) göstermektedir. Bu gösterimin nasıl oluşturulduğu ise aşağıda açıklanacaktır.

3-bileşenli bir karışımının cevap değişkeni doğrusal Scheffé çokterimlisi ile modellenirse, eşitlik (3.63)'teki gibi bir model elde edilir. Burada K alt-indisi KSDT nin karışım kısmını ifade etmektedir.

$$E(y)_K = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 \quad (3.63)$$

Diğer taraftan bu karışım üzerinde etkili olduğu düşünülen iki adet süreç değişkeni, z_1 ve z_2 , için doğrusal Scheffé çokterimli modeli düşünülürse, KSDT'nin en temel koşulu olarak varsayılan şöyle bir nitelendirmede bulunulabilir: z_j $j = 1, 2, \dots, r$ gibi süreç değişkenlerinin her biri ya da ikinci, üçüncü ya da n.dereceden terimlerinin karışım bileşenleri üzerinde etkisi vardır. Yani, karışım ve süreç değişkenleri etkileşim halindedir. Bu durum $\beta_i(z_j)$ şeklinde gösterilebilir ve “ β_i süreç değişkenlerinin bir fonksiyonudur.” şeklinde okunur. Bu tür bir fonksiyonel bağımlılık birçok farklı biçimde gösterilebilir ama en basit hali çokterimli biçimdir ve iki süreç değişkeni için eşitlik (3.64)'te verilmiştir.

$$\beta_i(z_j) = \beta_i^0 + \beta_i^1 z_1 + \beta_i^2 z_2 + \beta_i^{12} z_1 z_2 \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.64)$$

Burada i alt-indisi karışım bileşeni x_i 'leri; üst-indis ise süreç değişkenlerine ait terimleri göstermektedir. 0 üst-indis değerini almış olan, β_i^0 teriminde bu sıfır, süreç değişkeninin bulunmadığını gösterir.

3-bileşenli ve 2 süreç değişkenli ve sadece iki süreç değişkeninin etkileşimine (two-factor interactions – 2FI) izin veren bir süreç modeli için KSDT modeli eşitlik (3.65)'teki gibi olur:

$$E(y) = (\beta_1^0 + \beta_1^1 z_1 + \beta_1^2 z_2 + \beta_1^{12} z_1 z_2) x_1 + (\beta_2^0 + \beta_2^1 z_1 + \beta_2^2 z_2 + \beta_2^{12} z_1 z_2) x_2 \\ + (\beta_3^0 + \beta_3^1 z_1 + \beta_3^2 z_2 + \beta_3^{12} z_1 z_2) x_3 \quad (3.65)$$

Bu eşitlik genelleştirilirse, süreç değişkenleri için 2FI tipi bir model (3.66)'daki gibi gösterilebilir:

$$E(y)_S = \alpha_0 + \alpha_1 z_1 + \alpha_2 z_2 + \alpha_{12} z_1 z_2 \quad (3.66)$$

Burada eşitliğin sol tarafındaki alt-indis S modelin süreç değişkenleri için yazıldığını gösterir.

Eşitlik (3.65)'teki model (3.63) ve (3.66)'nın çarpımı ile elde edilebilir. Bu işlemi birinci terimler için yaparsak,

$$(\alpha_0 + \alpha_1 z_1 + \alpha_2 z_2 + \alpha_{12} z_1 z_2) \beta_1 x_1 = (\alpha_0 \beta_1 + \alpha_1 \beta_1 z_1 + \alpha_2 \beta_1 z_2 + \alpha_{12} \beta_1 z_1 z_2) x_1 \\ \equiv (\beta_1^0 + \beta_1^1 z_1 + \beta_1^2 z_2 + \beta_1^{12} z_1 z_2) x_1$$

elde edilir. Burada α katsayılarına ait alt-indisler, denkliğin sol tarafındaki, yani KSDT modeline ait terimin üst-indisine dönüşmüştür.

Sonuç olarak KSDT'ler için matematik model $E(y)_K$ her bir terimi ile $E(y)_S$ 'nin çarpılmasıyla elde edilebildiği görülür.

Eşitlik (3.65)'in diğer bir biçimi, süreç ve karışım değişkenlerinin yer değiştirdiği (3.67)'deki "devrik" biçimde de yazılabilir:

$$E(y) = (\beta_1^0 x_1 + \beta_2^0 x_2 + \beta_3^0 x_3) + (\beta_1^1 x_1 + \beta_2^1 x_2 + \beta_3^1 x_3) z_1 + (\beta_1^2 x_1 + \beta_2^2 x_2 + \beta_3^2 x_3) z_2 \\ + (\beta_1^{12} x_1 + \beta_2^{12} x_2 + \beta_3^{12} x_3) z_1 z_2 \quad (3.67)$$

Eşitlik (3.65) karışımın her bir bileşeninin süreç değişkenlerinin seviyelerine olan parametrik bağımlılığı; eşitlik (3.67) ise, süreç değişkenlerinin, kesim noktası dâhil, karışım bileşenlerine olan parametrik bağımlılığını göstermektedir.

Eğer KSDT tipi deney tasarımlarında Scheffé tipi kanonik, yani kesim noktası (sabit terimi) olmayan çokterimliler kullanılırsa, birleştirilmiş modeller de kanonik çokterimli olacaktır. Bu tür birleştirilmiş modellerin en basit biçimi *doğrusal x doğrusal* olanlardır. Bu modellerin genel gösterimi eşitlik (3.68)'de verilmiştir:

$$E(y) = \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^r \beta_i^j x_i z_j + \varepsilon \quad i = 1, 2, 3, \dots, q; j = 1, 2, 3, \dots, r \quad (3.68)$$

Eşitlik (3.68)'deki β_i^j katsayısı karışımın bileşenlerinin ve süreç değişkenlerin regresyon katsayılarını göstermektedir.

Karesel x karesel çok terimli modeller daha karmaşık olmasına rağmen bazı durumlarda – özellikle karışımların-karışımı türü deney tasarımlarında- bu tür modellere de ihtiyaç duyulmaktadır (Cornell ve Ramsey, 1998). *Karesel x karesel* çok terimli modellerin genel gösterimi eşitlik (3.69)'da verilmiştir:

$$E(y) = \sum_i \sum_j \beta_i^j x_i z_j + \sum_i \sum_{j<l} \beta_i^{jl} x_i z_j z_l + \sum_{i<k} \sum_j \beta_{ik}^j x_i x_k z_j + \sum_{i<k} \sum_{j<l} \beta_{ik}^{jl} x_i x_k z_j z_l + \varepsilon \quad (3.69)$$

Burada $i, k = 1, \dots, q$, $i < k$ ve $j, l = 1, \dots, r$, $j < l$ 'dir. Ayrıca, *doğrusal x karesel* ve "indirgenmiş" x "indirgenmiş" biçimli modellerin de yazılabileceği açıktır.

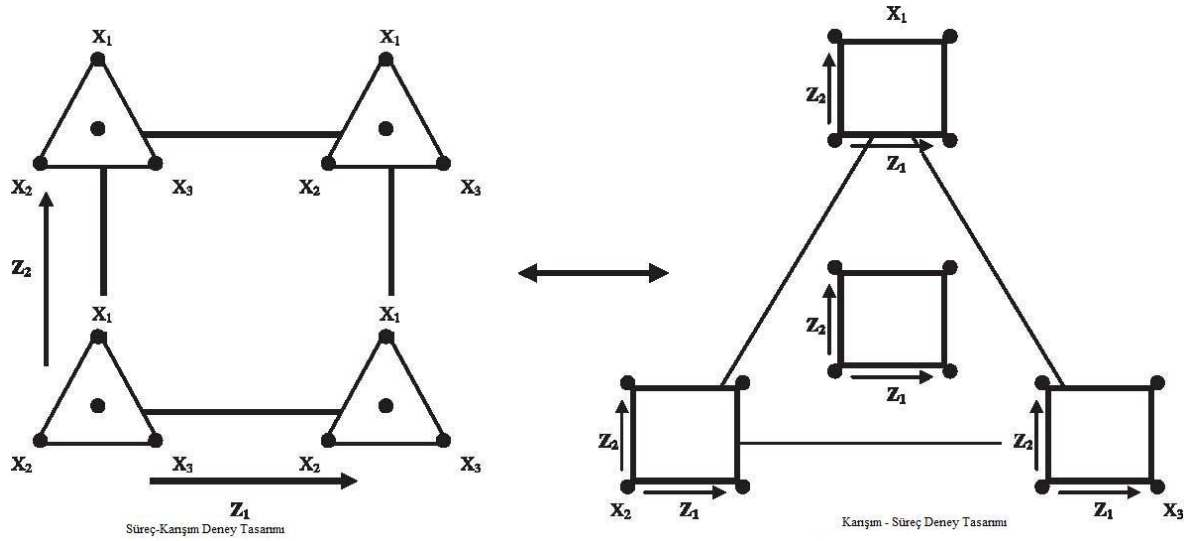
KSDT modellerinde regresyon katsayılarının yorumu KDT modellerinden daha zordur. Zira burada hem karışım bileşenleri için geçerli olan (3.1) ve (3.2) koşullarının yanı sıra, süreç değişkenlerinden de kaynaklanan bir zorluk oluşmaktadır. Ayrıca bileşen kısıtlarından ve bu kısıtların etkisinde oluşan deney tasarımı uzayları da bu yorumları oldukça zorlaştırmaktadır. Bu konularda aydınlatıcı bilgiler için Cornell ve Ramsey (1998)'e ve Cornell (2002)'ye bakılabilir.

3.6.2 KSDT ve KMDT için Deney Tasarımı Uzayları

KSDT türü deney tasarımlarına uygun tasarım bölgelerinin (uzaylarının) elde edilmesi için süreç değişkenleri için oluşturulmuş tasarımlar (Box-Behnken tasarımlar, Merkezi Karma tasarımlar, faktöriyel tasarımlar vb.) ve ilgili KDT birleştirilir. Bu birleştirme işlemine *Kartezyen birleştirme* (Cartesian join) denir ve \otimes ile gösterilir:

KSDT tasarımı = Karışım Deney Tasarımı \otimes Süreç Değişkeni Tasarımı

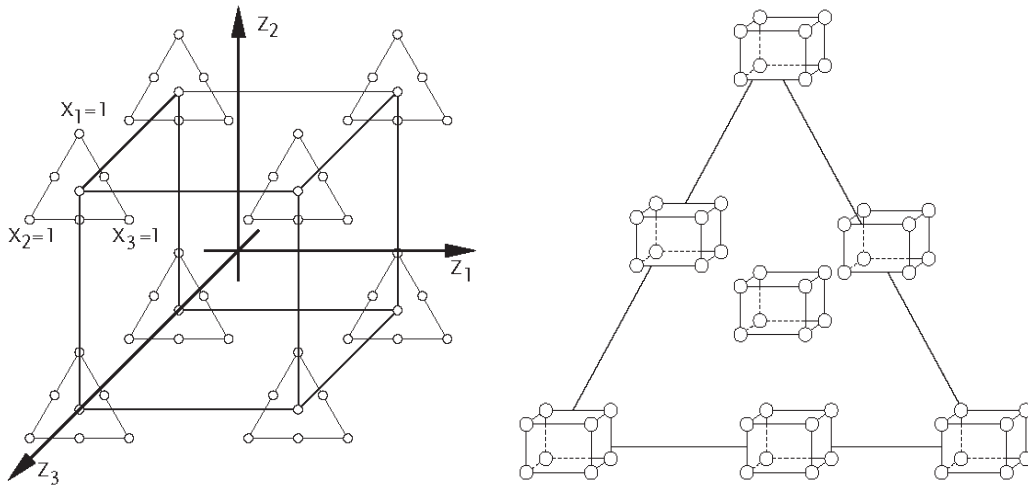
Kartezyen birleştirmede KDT süreç tasarımının her noktasına atanır. Yani süreç değişkenlerinin her bir kombinasyonu için KDT tekrarlanır ya da KDT'nin her kombinasyonu için süreç değişkeni tasarımı tekrarlanır. Şekil 3.26'da merkez noktası eklenmiş $\{3, 1\}$ simpleks-kafes tasarım ile 2^2 faktöriyel tasarımı birleştirilmiştir. Şekilden de anlaşılacağı üzere bu iki tasarım (Süreç-Karışım Tasarımı ve Karışım-Süreç Tasarımı) da eşdeğerdir.



Şekil 3.26 Merkez noktası eklenmiş $\{3, 1\}$ simpleks-kafes tasarım ile 2^2 faktöriyel tasarımının Kartezyen birleşiminden elde edilen karışım-süreç deney tasarımı (Dingstad vd., 2003).

Karışım oranları için alt- ve üst-limitlerin olduğu tasarımlarda D-optimum kriteri KSDT'ler için büyük önem arz etmektedir (Cornell,2002). Ayrıca, tasarımda 3 veya daha fazla süreç değişkeni var ise, bu tür tasarımlarda süreç tasarımı kısmı için uygun yöntemlerden birisi kısmî faktöriyel tasarımları kullanmaktır. Zira hem KDT'den gelen nokta sayılarının; hem de süreç tasarımından gelen nokta sayılarının çarpımı KSDT'nin

nokta sayısını çok arttıracak ve çoğu zaman gerçekleştirilmesi oldukça maliyetli ve vakit alan tasarım çalışmaları ortaya çıkacaktır. Şekil 3.27 bu duruma örnek gösterilebilir. Burada süreç tasarımı kısmı 2^3 tam faktöriyel deney tasarımı; KDT ise simpleks-merkezli kafes tasarımıdır. Toplam deney noktası sayısı $2^3 \times 2^3 - 1 = 63$ 'tür ve eğer D-optimum gibi bir tasarım optimizasyon kriteri kullanılmazsa, bu tasarım bile maliyetli ve uzun zaman alan bir çalışma olur.



Şekil 3.27 $\{3, 2\}$ simpleks-merkezli kafes tasarım ile 2^3 faktöriyel tasarımının Kartezyen birleşiminden elde edilen KSĐT (Lazic, 2004).

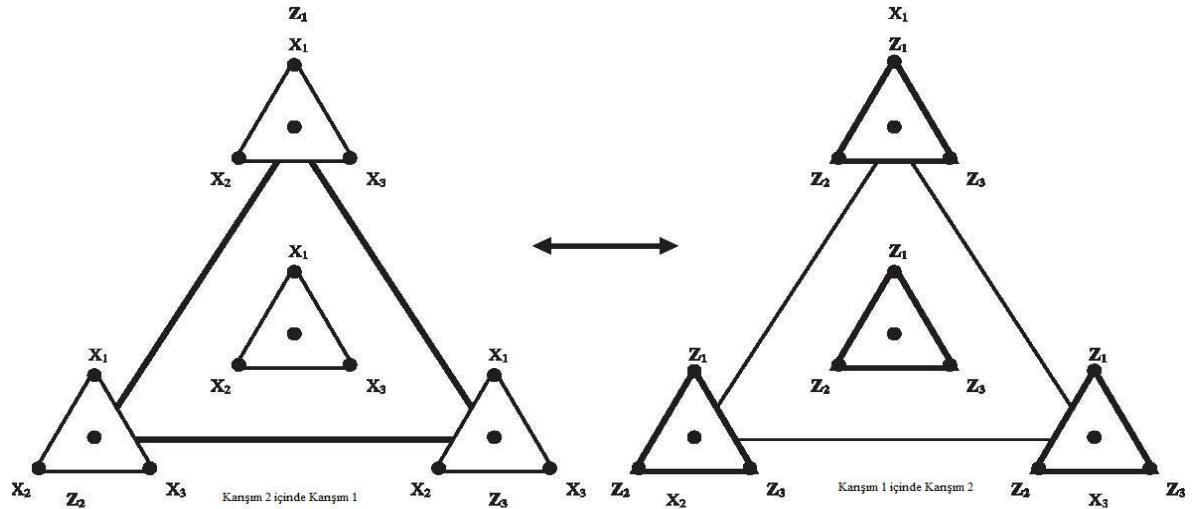
Şekil 3.27’de verilen iki biçimli KSĐT için, tasarımcı –eğer herhangi bir yazılım kullanmıyorsa– denemeleri gerçekleştirirken birkaç farklı yol izleyebilir. Bunlardan en çok kabul edilene *split-plot* tasarımlardır. Split-plot tasarımlarda süreç tasarımı değişkenlerinin seviyeleri için oluşan farklı kombinasyonlarda karışım denemeleri tekrarlanır ya da her bir karışım denemesi kombinasyonu için süreç değişkenlerinin farklı seviyeleri denenir.

Diğer taraftan, başlangıcı D.P. Lambrakis’e (1968a, 1968b, 1969a, 1969b) kadar uzanan Karışımların-Karışımı (KaK) (mixture-of-mixtures - MoM) deney tasarımlarına ilgi son dönemlerde artmaktadır. D.P. Lambrakis bu çalışmalarında karışımları *büyük bileşen* (major component) ve *küçük bileşenlerden* (minor components) oluşan bir sistem olarak ön görmüştür. Burada *büyük bileşenler* her zaman *küçük bileşenlerin* bir karışımı olarak mevcuttur. Yani bu tür tasarımlar karışım içinde karışım tasarımlardır ve endüstride çok önemli bir yer tutmaya başlamıştır. Örneğin tablet ilaç formülasyonlarında aktif

hammadde (ilaç) ve aktif olmayan katkıları (excipient) gibi iki büyük bileşen grubu vardır. Aktif hammadde kısmı iki veya daha fazla aktif ilaç hammaddesinden; aktif olmayan katkıları ise, yine bu aktif hammaddelerin içinde homojen dağıtıldığı ve bunları bir arada tutmaya yarayan iki ya da daha fazla bileşenden oluşur. Burada büyük bileşen(ler) katkılarıdır. Küçük bileşen(ler) ise, tablette çok daha az miktarda bulunan aktif hammaddelerdir (Piepel,1999).

G. F. Piepel (1999), KaK türü deney tasarımlarını iki grupta toplar. Bunlar A ve B grubu olarak adlandırılır. A grubu KaK'larda büyük bileşenlerin oranı sabittir ve sadece küçük bileşenlerin oranları değişir (Dingstad vd., 2003). B grubu KaK'larda ise her iki bileşen grubunun bileşenlerinin oranları da değişir (Cornell ve Ramsey, 1998). Büyük bileşen grubu kategorilerden oluşuyorsa bu tür tasarımlara kategorik-bileşenler problemi (categorized-components problem) adı verilir (Smith, 2005).

Şekil 3.28'de KaK türü tasarımların genel gösterimi, merkez noktası eklenmiş iki adet $\{3, 1\}$ simpleks-kafes tasarımı için, verilmiştir. Burada x_i 'ler birinci karışımın bileşenlerini; z_i 'ler ise, ikinci karışımın bileşenlerini göstermektedir.



Şekil 3.28 Merkez noktası eklenmiş $\{3, 1\}$ simpleks-kafes tasarımlarının birleştirilmesi ile oluşturulmuş KaK tasarımları (Dingstad vd., 2003).

Son olarak, birinci bölümde adı geçen karışım-miktar deney tasarımları (KMDT) incelendiğinde, bu tür tasarımlarda karışımındaki bileşenlerin toplamının sabit kalmadığı ve dolayısıyla birden fazla üst toplamın oluştuğu görülür. Nitelik olarak bu tür karışımların KSDT'lerden bir farkı yoktur. KSDT'lerdeki süreç değişkenlerinin yerini burada üst toplamlar almaktadır. Yani üst toplamlar süreç değişkeni gibi davranmaktadır. Örneğin bir

böcek ilacında ürünün bileşimindeki maddelerin oranlarının yanı sıra, uygulamada ne miktarda kullanıldığı da önemlidir. Dolayısıyla farklı miktarlarda kullanılan ilacın her bir miktarı bir süreç değişkeni olarak (değişken seviyesi) kabul edilebilir. Bir diğer örnek te ekmek mayasıdır (ya da gıda endüstrisinde kullanılan tüm mayalar). Burada da maya bileşenlerinin yanı sıra, ne miktarda maya kullanıldığı ölçülen performans (cevap) adına önem taşımaktadır (Cornell, 2002).

3.7 KDT'lerde Kötü Koşulluluk Sorunu

KDT'lerde kanonik çokterimliler genelde ek kısıtlamalara maruz kaldıklarından iç ilişki ya da kötü koşulluluk olarak bilinen istenmeyen durumlar ortaya çıkar. İç-ilişki aslında eş doğrusallık (collinearity) olarak ta adlandırılmaktadır. Ayrıca bu durum KDT'lerde bileşenlerin değişim aralıklarının birbiriyle uyumlu olarak oluşturulamamasından kaynaklandığı için kötü koşulluluk olarak adlandırılmaktadır (Belsley vd., 1980). Eş-doğrusallık şu durumlarda ortaya çıkar:

1. Karışımı oluşturan bileşenlerden herhangi birinin ya da birden fazlasının oranı, diğer bileşenlerin herhangi birinin ya da birden fazlasının oranlarından belirgin olarak daha büyük ise,
2. Karışımı oluşturan bileşenlerden herhangi birinin ya da birden fazlasının değişim aralığı, diğer bileşenlerin herhangi birinin ya da birden fazlasının değişim aralıklarından belirgin olarak daha geniş ise,

Tasarlanmış deneylerde ve özellikle tasarlanmış karışım deneylerinde eş-doğrusallık sorunu çoğunlukla kullanılan modelin derecesi "1" den büyük ise ortaya çıkmaktadır. Bu durumun temel nedeni, yüksek dereceli modellerin AB , ABC ve ABC^2 gibi çarpım bileşenleri içermesinden kaynaklanmaktadır. Eş-doğrusallık ayrıca tasarım için açıklayıcı değişken seviyelerinin (değişim aralıklarının) ölçüm yoluyla atanmayıp, gözlem yoluyla tespit edildiği durumlarda da oluşmaktadır.

KDT'lerde bileşenler üzerindeki bu ek kısıtlamalardan kaynaklanan kötü koşulluluğu ya da iç ilişki sorununu belirlemek için genelde özdeğerler ve değişkenlik şişirme faktörleri (VIF) kullanılır. Ayrıca, iç ilişki problemini azaltmak için sözde-bileşen dönüşümü ve değişkenlerin standartlaştırılması da kullanılır (St.John, 1984).

3.7.1 Çoklu Eş-doğrusallık ya da Kötü Koşulluluk Nedir?

Eş-doğrusallığın istatistikî tanımı şu şekilde yapılabilir: Eş-doğrusallık herhangi bir regresyon değişkenleri kümesinde değişkenler arasında oluşan bir ya da daha fazla *yaklaşık doğrusal bağımlılıklardır* (near linear dependencies). Dolayısıyla, yaklaşık doğrusal bağımlı veri kümeleri “kötü koşullandırılmış veri kümeleri” olarak adlandırılabilir (Belsley vd., 1980)

Scheffé kanonik çokterimli modeli matris formunda,

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.70)$$

ile gösterilir. (3.70)'teki modelde, \mathbf{X} , $n \times p$ ($p \geq q$) tipinde ve i -inci satırı, i -inci gözleme karşılık gelen p tane x_i değişkeninin değerlerini içeren matrisi; \mathbf{y} , $n \times 1$ türünde cevap değişkeninin bir sütun vektörünü; $\boldsymbol{\beta}$, $p \times 1$ türünde tahmin edilecek parametrelerinin bir sütun vektörünü; $\boldsymbol{\varepsilon}$, $n \times 1$ tipinde $E(\boldsymbol{\varepsilon}) = 0$ ve $\text{var}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \sigma^2 \mathbf{I}$ (\mathbf{I} : birim kare matrisi) özelliklerini sağlayan rastgele hataların bir sütun vektörünü göstermektedir. Bu model için en küçük kareler tahmin edicisi,

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y} \quad (3.71)$$

ve varyans-kovaryans matrisi,

$$\text{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \quad (3.72)$$

biçimindedir.

\mathbf{X} matrisinin sütunları arasında tam bir lineer bağımlılık varsa, yani,

$$\sum_{j=1}^p c_j \mathbf{x}_j = \mathbf{0} \quad (3.23)$$

olacak şekilde tümü sıfır olmayan c_j 'ler varsa, \mathbf{X} matrisinin rankı p 'den küçük olur. Burada p terim sayısını; c_j , $j = 1, 2, \dots, p$ için, tümü sıfır ve rastgele olmayan katsayıları; \mathbf{x}_j ise, $n \times p$ tipindeki \mathbf{X} matrisinin kolon vektörünü göstermektedir. \mathbf{x}_j ayrıca genelleştirilmiş regresör olarak (generalized regressor) ta adlandırılır. Eşitlik 3.23 durumunda $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ matrisi *tekildir* (singular) ve tersi yoktur. Diğer taraftan eşitlik 3.24 durumunda ise, çoğu kez, kötü koşulluluk olarak tanımlanan durum oluşur.

$$\sum_{j=1}^p c_j X_j \cong 0 \quad (3.24)$$

Kötü koşulluluk ya da iç ilişkinin istenmeyen etkileri vardır (St. John, 1984). İç ilişki ya da kötü koşulluluk problemi olan bir deney tasarımında regresyon katsayıları beklenenden daha büyük çıkabilir. Bunun yanı sıra tahmin edilen parametrelerin işareti beklenenden farklı olabilir ve bu parametreler modelin yapısında küçük değişikliklere, örneğin bir ya da iki verinin çıkartılmasına, tepki verirler.

Eş-doğrusallığın diğer bir sonucu da model terimlerinin çok yüksek standart hatalara ulaşmasıdır. Bu standart hatalar σ^2 'den bağımsız olarak c_{ii} katsayı tahminlerinin değişkenlikleriyle orantılıdır. $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ matrisinin köşegen değerlerine eşit olan ve c_{ii} ile gösterilen bu köşegen değerlerinin karekök değerleri ($\sqrt{c_{ii}}$) katsayı tahminlerinin standart hatalarıdır. Standart hataların çok büyük olmasının etkisi, katsayı tahminlerine ait olan t-testlerinin bu hatalara duyarsızlaşmasıdır. Bu durum da aslında “istatistikî olarak etkili olduğu halde, parametre tahmininin etkili olduğunu iddia/ispat edememek” olarak açıklanabilecek Tip II hata yapma riskinin artmasına neden olur.

3.7.2 Çoklu Eş-doğrusallık ya da Kötü Koşulluluk Sorununun Belirlenmesi için Yöntemler

İç ilişki ya da kötü koşulluluğu belirlemek için kullanılan çeşitli yöntemler vardır. Burada bu yöntemlerden üçü incelenecektir:

1. Yöntem: Gorman (1970) tarafından önerilmiştir. R_i^2 kullanılmasına dayanır. R_i^2 , i-inci değişken x_i 'nin kalan diğer değişkenler üzerinde sabit terimsiz Scheffé karma modeli kullanılarak regresyon hesabına tabi tutulması ile elde edilir. Yüksek R_i^2 değerleri kötü koşulluluğun varlığını gösterir. $1 - R_i^2$ tolerans olarak adlandırılır ve tolerans regresyondaki diğer değişkenlerle açıklanamayan değişkenliklerin “varyanslarının” oranıdır. Gorman (1970), $R_i^2 < 0,99$ ise kötü koşulluluğun problem olmadığını belirtmiştir.

2. yöntem: Marquardt (1970) tarafından önerilmiştir. Varyans şişirme faktörlerinin (VIF) hesaplanmasına dayanır. x_i 'ler,

$$W_{ij} = \frac{x_{ij} - \bar{x}_i}{\sqrt{\sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_i)^2}} \quad (3.73)$$

şeklinde standartlaştırılır. Yeni açıklayıcı değişkenler W_1, W_2, \dots, W_p şeklindedir. Eşitlik (3.70) standartlaştırılmış değişkenler cinsinden, eşitlik (3.74)'teki gibi gösterilir:

$$\mathbf{y} = \alpha^* \mathbf{1} + \mathbf{W}\beta^* + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.74)$$

\mathbf{y} vektörü standartlaştırılmadığından model sabit terim içermemektedir. Eşitlik 3.74'te verilen modeldeki parametre tahmini,

$$\mathbf{b}^* = (\mathbf{W}'\mathbf{W})^{-1}\mathbf{W}'\mathbf{y} \quad (3.75)$$

ve varyans-kovaryans matrisi,

$$\text{var}(\mathbf{b}^*) = \sigma^2(\mathbf{W}'\mathbf{W})^{-1} \quad (3.76)$$

biçimindedir.

Scheffé kanonik çokterimlisi sabit terim içermediğinden değişkenleri standartlaştırma yöntemi,

$$W_{ij} = \frac{x_{ij}}{\sqrt{\sum_{j=1}^N x_{ij}^2}} \quad (3.77)$$

biçimindedir. Eşitlik (3.77)'deki standartlaştırılmış değişkenler cinsinden eşitlik (3.70)'teki model, (3.78)'deki biçime dönüşür:

$$\mathbf{y} = \mathbf{W}\beta^* + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.78)$$

Örneğin ikinci dereceden Scheffé modeli, eşitlik (3.79)'daki gibi olup doğrusal (1.dereceden) ve karesel (ikinci dereceden) terimler sırasıyla, eşitlikteki gibi elde edilirler:

$$y = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i \leq j}^q \sum_{i \leq j}^q \beta_{ij} x_i x_j + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.79)$$

Herbir parametre (3.80)'deki gibi standartlaştırılırsa model, eşitlik (3.81)'deki gibi oluşur:

$$W_{ui} = \frac{x_{ui}}{\sqrt{\sum_{u=1}^N x_{ui}^2}} \quad \text{ve} \quad W_{ui}W_{uj} = \frac{x_{ui}x_{uj}}{\sqrt{\sum_{u=1}^N x_{ui}^2 x_{uj}^2}} \quad (3.80)$$

$$y(w) = \beta_1^* w_1 + \beta_2^* w_2 + \beta_3^* w_3 + \beta_{12}^* w_1 w_2 + \beta_{13}^* w_1 w_3 + \beta_{23}^* w_2 w_3 + \varepsilon \quad (3.81)$$

Değişken şişirme faktörleri (VIF)'ler, $(\mathbf{W}'\mathbf{W})^{-1}$ matrisinin köşegen elemanlarıdır. Standart çöktirimli modelde olduğu gibi bir dikey tasarım vardır ve $\mathbf{W}'\mathbf{W}$ birim matristir. $(\mathbf{W}'\mathbf{W})^{-1}$ matrisinde VIF'in minimum değeri 1'dir. Ancak KDT'ler çoğu durumda dikey (orthogonal) değildirler. Çünkü x_i 'ler üzerinde ek kısıtlamalar vardır. Brownlee (1965) yaptığı çalışmada VIF değerinin eşitlik (3.82)'deki gibi olduğunu göstermiştir (Coşkuntuncel, 2002):

$$\text{VIF}_i = \frac{1}{1 - R_i^2} \quad (3.82)$$

Bu eşitlik, büyük R_i^2 (örneğin $R_i^2 > 0,99$) değerlerinden kaçınmanın büyük VIF_i 'den kaçınmaya denk olduğunu gösterir. Gorman (1970), $R_i^2 > 0,99$ durumunda kötü koşulluluk problemi olduğunu belirtmiştir ve bu durum $\text{VIF}_i > 100$ olması demektir. Marquardt (1970), VIF'lerin herhangi birinin 10'dan büyük olması durumunda en küçük kareler kestiricilerinin kullanılması ile elde edilen tahminlerin kararlı olmadıklarını, bunun yerine alternatif model oluşturulması gerektiğini veya alternatif tahmin edicilerin kullanılması gerektiğini belirtmiştir. Alternatif tahmin edici olarak ridge (sırt) regresyon tahmin edicisi kullanılabilir.

3. Yöntem: Kötü koşulluluğun belirlenmesinde uygulanabilecek diğer bir yöntem, $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ matrisinin özdeğerlerine bakmaktır. Sıfırdan farklı özdeğerlerin sayısı matrisin rankını verir. $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ matrisinin özdeğerlerinden biri sıfıra eşitse $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ matrisi singülerdir ve böylece \mathbf{X} matrisinin kolonları üzerinde (3.23)'teki kısıtlama vardır. $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ matrisi çok küçük özdeğerlere sahipse ($\lambda_i < 0,001$ gibi), \mathbf{X} matrisinin kolonları üzerinde (3.24)'teki kısıtlama vardır ve kötü koşulluluk problemi ortaya çıkar. Özdeğerler elde edildikten sonra en büyük özdeğer ile en küçük özdeğerin oranı alınır (3.83)'teki eşitlik elde edilir:

$$\kappa = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \quad (3.83)$$

Eşitlik (3.83)'teki ifadeye $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ matrisinin *koşul sayısı* denir. Belsley vd. (1980), koşul sayısının 25'den büyük olduğu durumların araştırılması gereken durumlar olduğunu belirtmişlerdir. Genel olarak koşul sayısı 100'den küçük ise, çoklu iç-ilişki probleminin ciddi boyutlarda olmadığı, 100 ile 1000 arasında ise, güçlü bir iç ilişki problemi olduğu, 1000'den büyük ise, çok ciddi bir iç ilişki problemi olduğu söylenir.

(3.73) ve (3.77)'deki deęişkenleri standartlaştırma işleme ihtiyacı duyulmasının nedeni, birçok istatistik yazılımının oluşturulmuş modelin en küçük kareler kestiricilerini hesaplariken deęişkenleri standartlaştırıp daha sonra $X'X$ matrisini oluşturmasından kaynaklanmaktadır. Bu nedenle deęişkenler arasındaki iç ilişkinin ölçüsü olarak $W'W$ matrisinin VIF_i deęerleri ve özdeęerleri daha uygundur (Coşkuntuncel, 2002).

Gorman (1970), bileşenler üzerinde alt-sınır kısıtı varsa sözde-bileşen dönüşümünün $X'X$ matrisinin koşul sayısını ve VIF deęerlerini düşüreceğini ve kötü koşulluluęu ya da eş-doęrusallık sorununu azaltacağını belirtmiştir.

3.7.3 Çoklu Eş-doęrusallık Sorununun Azaltılmasında Kullanılan Yöntemler

Eş-doęrusallığın azaltılmasında kullanılan yöntemler, başlıklar halinde, aşağıda verilmiştir. Bu yöntemlerden herhangi biri ya da birkaçı, yapılan tasarıma baęlı olarak, etkili olabilmektedir. Sırt regresyonu yöntemi bunlar içinde, tarafımızca da, en etkili yöntem olarak kabul edilmektedir. Fakat bu regresyon yöntemini kullanarak deney tasarımı (KDT) yapacak bir PC yazılımı bu tezin yazıldığı zamanlarda mevcut olmadığından uygulaması gerçekleştirilememiştir. KDT'lerde eş-doęrusallığı gidermekte etkili olan yöntemler ve ilgili referansları şunlardır:

1. Sözde-bileşen dönüşümü kullanmak (McLean ve Anderson, 1966; Snee, 1975; Snee ve Marquardt, 1976; Piepel, 1982; Smith, 2005),
2. Scheffé tipi kanonik KDT modellerine alternatif modeller kullanmak (Marquardt ve Snee, 1974; Snee ve Rayner, 1982; Cornell, 2002),
3. Sırt (Ridge) Regresyonu uygulamak (St.John, 1984; Box ve Draper, 1987;2007)

Yukarıdaki referanslar dışında bu konularda daha ayrıntılı bilgiler için, özellikle matematik alt-yapısı ve uygulama örnekleri için O. Coşkuntuncel'e (2002) bakılabilir. Ayrıca, W. F. Smith (2005) ve J. A. Cornell (2002) eş-doęrusallığı ve eş-doęrusallığın doğurduğu sonuçları KDT'ler açısından ayrıntılı incelemiştir. Sırt regresyonunun KDT uygulamaları için ise, G.E.P Box ve N. R Draper (2007) tarafından yazılan kitaba bakılabilir. VIF deęerleri ve KDT'lerdeki etkileri bir sonraki bölümde tekrar ele alınacaktır.

4. KARIŞIM DENEY TASARIMLARI İÇİN BİR UYGULAMA

Bu kısımda karışım-süreç deney tasarımları (KSDT) için gerçekleştirdiğimiz çalışma ayrıntılı olarak sunulacaktır. KDT’lerde model oluşturmakta ve oluşturulan modelin yeterliliğini tespit etmekte kullanılan istatistikî analiz yöntemleri de her bir uygulamanın beraberinde verilecektir. Bu biçimdeki bir sunum, yapılan çalışmanın pratik faydalar açısından daha nitelikli olmasını sağlayacaktır.

Çalışmada amaç, 9 adet ürün bileşenine sahip üniversal renklendiriciyi (universal colorant), etkin olduğu tecrübelerimizle ve tarama tasarımlarıyla –önceden– belirlenmiş olan 6 bileşeni ve üretim sürecinde etkili olduğu düşünülen 2 adet 2 seviyeli süreç değişkeni için modellemek ve optimum reçeteler elde etmektir. Çalışma boyunca kullanılan “sağlıklı” ifadesi analizin ya da çıktının istatistikî olarak anlamlı ve matematik model açısından da yeterli olduğunu ifade edecektir.

KDT’ler genellikle iki kısımda gerçekleştirilmektedir: Tasarım aşaması ve Analiz aşaması. Bu çalışmada kullanılan tasarım süreci aşağıdaki gibi gösterilebilir (Smith, 2005):

1. Deney Tasarımı Aşaması

1.1. Başlangıç hedefleri

- 1.1.1. Oluşacak deney tasarımı uzayını yeterince iyi temsil edebilecek bir tasarım hazırlamak,
- 1.1.2. “*Model uyumsuzluğunu*” test edebilmek için yeterli deneme noktası olan bir tasarım hazırlamak,
- 1.1.3. “*Saf deneysel hatayı*” tespit edebilmek için yeterince tekrar edilen deney noktası içeren bir tasarım oluşturmak,
- 1.1.4. Tasarımlarda “*bloklama*”yı sağlamak,
- 1.1.5. Tasarımların ardışık ve arttırılabilir olmasını sağlamak,
- 1.1.6. Tasarımın zaman ve maliyet bakımından uygun olmasını sağlamak.

1.2. Tasarım *değerlendirme* aşaması

- 1.2.1. Yüksek kaldıraç etkili deney noktalarının kontrolü,
- 1.2.2. “*Aykırı nokta*”lara (outlier) karşı deneyin dayanıklı olup olmadığının kontrolü,
- 1.2.3. Tahmin değişkenliklerinin dağılımlarının kontrolü,

2. Analiz, Kontrol ve Değerlendirme Aşaması

- 2.1. Homojen değişkenlik dağılımı varsayımı,
- 2.2. Normal dağılmış artıkların kontrolü,
- 2.3. Aykırı noktaların tespiti,
- 2.4. Gereken durumlarda cevap değişkenlerinin dönüştürülmesi (model transformasyonu),
- 2.5. Tasarımın ve modelin “*bloklama*” yapılarak arttırılması.

Çalışmada kullanılan Design-Expert v7.1.x (DE) yazılımı yukarıdaki sıralamaya benzer bir tasarım süreci uygulamaktadır. Dolayısıyla çalışma boyunca, mümkün olduğunca, yukarıdaki adımlara – tasarımın bloklama yapılarak arttırılması adımı hariç – uyulmuştur.

4.1 Ürünün Genel Özellikleri

Üniversal renklendiriciler boya endüstrisinde yaygın olarak kullanılan “*pigment pastaları*”dır. Bu tür pigment pastaları ortalaması μm ya da nm boyutundaki pigment tozlarının uygun ıslatıcılar (dispersanlar) yardımıyla hazırlanmış kararlı ve belirli bir viskoziteye sahip endüstriyel ara ürün ya da nihai ürünlerdir. Bu pastalar piyasada, genellikle, son tüketicinin istediği rengi hazırlayabilmek için kullanılırlar. Ayrıca hazır renkli boya yerine baz (beyaz) boya üreten ve piyasaya baz boya arz eden üreticilerin yoğun ihtiyaç duyduğu bir ara ürün olarak ta kullanılmaktadır. Üniversal renklendirici olarak adlandırılmasının nedeni, hem solvent bazlı, hem de su bazlı boyalarda kullanılabilir olmasındandır.

Bu tür ürünlerde beklenen öncelikli nitelikler: yüksek ya da yeterli renk haslığı verebilmeleri, viskozitelerinin işlenebilirliğe elverişli olması ve içine katıldıkları sistemde faz ayrışması, pigment kusması gibi teknik sorunlara yol açmamalarıdır. Diğer bileşenlerine göre pigment miktarı yüksek olan bu tür “konsantre” ürünlerde doğal olarak pigment en önemli bileşendir ve çoğunlukla pigment konsantreleri ile karıştırılırlar. Aradaki temel fark bu ürünlerin ayrıca son ürün olarak satılabilmesi ve son tüketiciler tarafından çok farklı amaçlarla da kullanılabilmesidir.

Güneş ışığına dayanıklılık (solmazlık), iklim koşullarına dayanıklılık gibi (alkali etkilere dayanım, bozunma direnci (reaktif olmama) vb.) özelliklerinin, aynı renklerdeki inorganik pigmentlere göre daha kaliteli olmasından dolayı organik pigmentler endüstride çok tercih

edilmektedir. Bu pigmentlerin kullanıldıkları ürüne kattıkları veya kazandırdıkları özellik şöyle özetlenebilir: çok yüksek ve uzun ömürlü renk haslığı.

Fakat bu tür pigmentleri ıslatmak, yani homojen biçimde bir sıvı ortam (solventler ve ıslatıcılar) içinde dağıtmak görece olarak çok zordur. Bu işlemin zorluğu hem organik pigmentin doğasından; hem de toz pigmentin tanecik boyutunun çok küçük olmasından kaynaklanmaktadır. Küçük tanecik boyutu dağılımı beraberinde topaklanma, elektrostatik yük barındırma vb. ıslatmayı ve dolayısıyla homojen dağılmayı zorlaştırıcı koşullar oluşturmaktadır. Bu ve benzeri sorunları aşabilmek için endüstride uzun zincirli ve çok dallı makro moleküller (polimerler) içeren ıslatıcı kombinasyonları kullanılmaktadır.

Boya endüstrisinde ürünlerinin (boya, renklendirici vb.) bileşenleri ana bileşenler ve yardımcı bileşenler olmak üzere iki grupta toplanabilir. Yukarıda da belirtildiği gibi bu çalışmada tasarlanacak ürün, toplam dokuz adet bileşene sahiptir. Bu bileşenler pigment, 2 adet solvent, 3 adet dispersan ve 2 adet yüzey aktif ve 1 adet bakterisitten oluşmaktadır. Bu ürünün içeriğindeki ana bileşenler pigment, bir adet dispersan ve bir adet solventtir. Diğer bileşenler ana bileşenlere görece olarak çok daha küçük oranlarda bulunmaktadır ve katkı maddeleri olarak nitelendirilebilirler.

Endüstride organik pigment içeren renklendirici üretimi iki aşamalı olarak gerçekleştirilmektedir. Bu aşamalar dispersiyon ve öğütme aşamalarıdır. Söz konusu KSDT çalışması sadece dispersiyon aşaması için gerçekleştirilmiş olup, üretim ortamında öğütme aşamasının kontrol edilebilir parametre sayısının çok az olmasından ve bu parametrelere birçok gürültü parametresinin eşlik etmesinden dolayı, endüstriyel üretimde (*scale-up* çalışmasında) bu aşama ve aşamaya ait bütün koşullar (parametreler) sabit (*ceteris paribus*) tutulmaya çalışılmıştır. Ayrıca laboratuardaki öğütme yöntemi ile üretim ortamındaki öğütme yöntemleri arasındaki çok belirgin farklılıklardan ve yukarıda belirtilen nedenlerden dolayı üretimdeki öğütme aşamasına herhangi bir DT çalışması uygulanmamıştır.

Dispersiyon aşamasının "*scale-up*" kısmı için bu endüstride çok iyi bilinen ve geçerliliği kanıtlanmış el-yordamları (rule of thumb) kullanılmıştır. Dispersiyon işlemi için – laboratuvar ve üretim ortamlarında– yüksek hızlı disperser (dağıtıcı) sistemleri kullanılmaktadır. Bu tür yüksek hızlı disperserlerin kullanılmasındaki amaç, toz pigment topaklarını parçalayıp, pigment taneciklerini polimerik dispersanların dallarına tutundurmak ve böylelikle ortam içerisinde kararlı ve homojen kalmasını sağlamaktır.

Diğer taraftan çalışmada amaç renklendiricinin yeterince homojen dağılımlı olmasını sağlamak, yani optimum koşulları sağlayan reçeteler elde etmek olduğundan, dispersanların dağıtma kapasitesini/yeteneğini aşan daha küçük boyutlardaki topakların (agglomerates) dağıtılmasını ve böylelikle renk haslığının daha net ortaya çıkmasını sağlayan öğütme işlemi *laboratuvar ortamında* da karışım deney tasarımına dâhil edilmemiştir. Bunun yerine öğütme süresi ve öğütmede kullanılan farklı öğütücülerin (belirli ortalama tanecik boyutlarına sahip zirkonyum boncuklar, cam boncuklar ve seramik türevi boncuklar) ve öğütücü miktarlarının faktör olarak kullanıldığı daha basit deney tasarımları (kısmî-faktöriyel, faktöriyel DT) kullanılmıştır. Çalışmanın kapsamı ve ticari içeriği açısından bu çalışma detaylandırılmayacaktır.

Bütün bu çalışmalar boyunca şu temel hedef gözetilmiştir: Eğer yeterince iyi bir dispersiyon işlemi gerçekleştirilirse, öğütme aşaması hem çok kolay olacak, hem de üretim zaman ve maliyet bakımından daha az masraflı olacaktır.

4.1.1 Ürün ve Süreç Bileşenleri

Ürüne ait bileşenler ve bileşenlerin genel kimyasal nitelikleri Çizelge 4.1’de verilmiştir. Ürünün ticari niteliğinden dolayı, bileşenlerin ticari isimleri ve açık formülleri verilmeyecektir. KSDT çalışmasından önce etkili bileşenlerin tespiti çalışması yapılmıştır. Bu çalışmanın sonucunda tasarımda kullanılacak bileşen sayısı azaltılmış olup toplam 6 bileşen ve 2 süreç değişkeni için tasarım gerçekleştirilmiştir.

Ayrıca, üründe benzer etkiler gösterdiği tecrübelerimize ve önceden yapılan çalışmalara (tarama tasarımları) bağlı olarak tespit edilen iki bileşen (su ve alkol) tek bir bileşen olarak ele alınmıştır. Bu işlem kullanılan DT programı (DE) yardımıyla yapılmıştır ve böylelikle tasarım uzayının boyutu azaltılmış, yani parametre sayısı azaltılmış ve dolayısıyla hem deney noktası sayısı azaltılmış, hem de istatistikî analizlerin kolaylaşması sağlanmıştır. Bu şekilde parametre sayısını azaltmak tasarım sürecinden iki adet kısıt kaldırmaktadır. Kısıt sayısının fazlalığından ve bileşenin çalışma aralığının küçük olmasından kaynaklanan doğrusal bağımlılık ya da eş doğrusallık (collinearity), yani kötü koşulluluk (ill-conditioning) sorunu bir miktar azaltılmış olacaktır (Cornell, 2002; Coşkuntuncel, 2002; Smith, 2005).

Çizelge 4.1 KSDT için kullanılan ürün bileşenleri ve kimyasal grupları.

Ürün Bileşenleri	Kimyasal Grubu
Pigment	Benzimidazolone türevi 20nm ortalama tanecik boyutlu toz pigment
Dispersan 1	Polioksialkilen bazlı blok kopolimer ıslatıcı
Dispersan 2	Amino alkol türü ıslatıcı
Dispersan 3	Alkol etoksile bazlı fosfat esterleri
Solvent	Musluk suyu + -diol türü alkol karışımı

Bu ürünün üretim sürecinde en önemli adımın pigmentin solvent ve ıslatıcı sistemi içinde homojen dağılmasını sağlamak olduğu yukarıda ifade edilmişti. Pigmentin ıslatılmasına kimyasallarla beraber mekanik katkı sağlayan yüksek dispersiyon devir hızı (devir/dakika (dbd.)) ve dispersiyon süresi (dakika (dk.)) de, bundan dolayı, süreç değişkenleri olarak alınmıştır.

4.1.2 Ürün Bileşenleri için Kısıtlar ve Süreç Bileşen Seviyeleri

Ürün bileşenleri aşağıdaki gibi isimlendirilmiştir ve bu bileşenlere ait toplam ya da eşitlik kısıtı (3.1) ve pozitif değer alma kısıtına (3.2) bağlı kalınarak alt- ve üst- sınır değerleri tanımlanmış ve bileşen oranları yüzde oranlar olarak verilmiştir. Bu çalışmada çok-bileşen kısıtları kullanılmamış olup, sadece tek-bileşen kısıtları kullanılmıştır. Sınırlar belirlenirken tecrübelerimizden ve bileşenleri (hammaddeleri) üreten firmaların tecrübelerinden yararlanılmıştır. Ayrıca, bu tasarımın öncesinde yapılmış olan tarama tasarımları da bileşenlerin ne oranlarda kullanılması gerektiği konusunda ışık tutmuştur.

Ürün bileşenlerinin kısıtları alt ve üst-sınır değerleri ve süreç değişkeni seviyeleri şöyledir:

Ürün Bileşenleri:

$$\text{Pigment: } x_1 \quad \% 25.22 \leq x_1 \leq \% 35.39$$

$$\text{Dispersan 1: } x_2 \quad \% 07.08 \leq x_2 \leq \% 24.33$$

$$\text{Solvent (Su + Alkol): } x_3 \quad \%40.70 \leq x_3 \leq \% 61.50$$

Dispersan 2: x_4 % 00.00 $\leq x_4 \leq$ % 04.42

Dispersan 3: x_5 % 00.88 $\leq x_5 \leq$ % 03.54

Bu bileşenlerden en geniş aralığa sahip olan solvent bileşeni; en dar aralığa sahip olan ise, 3. dispersandır.

Bileşen kısıtları sonucu oluşan toplam ya da eşitlik kısıtı şöyle ifade edilebilir:

$$\sum_{i=1}^5 x_i = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 = \% 100$$

A-sözde bileşen dönüşümü uygulandığında ürün bileşenleri için kısıtlar şu şekilde olacaktır A, B, C, D, E harfleri (x_1, \dots, x_5), sırasıyla, matematik modeldeki terimlerde kullanılan bileşen isimlerini göstermektedir. Burada bileşenler, bileşen oranları olarak gösterilmiştir:

$$A: 0.00 \leq x_1 \leq 0.39$$

$$B: 0.00 \leq x_2 \leq 0.66$$

$$C: 0.00 \leq x_3 \leq 0.80$$

$$D: 0.00 \leq x_4 \leq 0.17$$

$$E: 0.00 \leq x_5 \leq 0.10$$

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 = 1.00$$

Süreç Değişken Seviyeleri:

	<u>-1 seviyesi</u>	<u>+1seviyesi</u>
Dispersiyon devir hızı (dbd.) z_1 :	5000	10000
Dispersiyon süresi (dk.) z_2 :	5	15

4.2 Cevap Değişkenleri

Deney tasarımında iki adet cevap değişkeni kullanılmıştır. Bunlardan birincisi CIE (Commission Internationale de l'Eclairage – Uluslararası Işıklandırma Komisyonu) renk sisteminde renk hasılığının bir ölçüsü olan ve dE ile gösterilen cevap değişkenidir. Diğeri ise, basitçe ürünün akışkanlığa karşı direnci olarak tanımlanan viskozitedir.

dE cevap değişkeni, L (koyu-açık), a* (kırmızı-yeşil) ve b* (sarı-mavi) değerleri ile gösterilen 3-boyutlu renk uzayında referans renge göre ölçülen rengin konumunu gösteren ΔE fark vektörüdür ve şu şekilde formüle edilir:

$$dE = \sqrt{\Delta L^2 + \Delta a^{*2} + \Delta b^{*2}} \quad (4.2)$$

Viskozite değişkeni ise, Krebs-Stormer tipi sabit dönüş hızlı viskometreyle ölçülen ve KU birimiyle gösterilen bir bağımlı (cevap) değişkendir.

Ayrıca hazırlanacak reçetenin maliyetini inceleyebilmek için, maliyet te cevap değişkeni olarak eklenmiştir. Bu değişken sadece ürün bileşenlerinin miktarından etkileneceği için modellenmesi oldukça kolaydır ve model uyumluluğu % 100'dür. Analiz kısmında bu konuya geri dönülecektir.

4.3 Deney Tasarımı Aşaması

Yukarıda da ifade edildiği gibi bu çalışma ürün ve süreç tasarımlarının birleştirilmesinden oluşturulmuş bir çaprazlanmış tasarımdır. Bu tasarım gerçekleştirilirken tasarım optimizasyonu için D-optimum kriteri ve aday nokta kümesinin elde edilmesi için de nokta-değişim algoritması kullanılmıştır. Deney tasarımı için DE'nin *Combined D-optimal* tasarım seçeneği kullanılmıştır. Süreçte oluşan aday noktası sayısı 50000'dir. Deney tasarımı yazılımı, D-optimum kriterini kullanarak, *kareselel x kareselel* Scheffé çokterimli model için bu noktaları, 5 adet blok değişkeni dahil, toplam 94 adet deney noktası oluşturmuştur. Ayrıca yazılımın varsayılanı (default) olan 5 adet tekrar noktası ve 5 adet te model uyumsuzluğunun testi noktasıyla beraber sonuçta toplam 104 adet deney noktası önermiştir. Blok değişkeni eklenmesinin nedeni, denemelerin farklı günlerde gerçekleştirilmesinden ve denemeleri gerçekleştiren kişilerden kaynaklanabilecek olan rastsal deney hatasını ortadan kaldırmaktır.

Yukarıdaki D-optimum KSDT içerdiği deney noktası sayısından dolayı hem çok zaman alıcı hem de pigment ve dispersan maliyetleri dikkate alındığında oldukça maliyetli bir

çalışma olacaktır. Dolayısıyla, yine tecrübelerimiz ve tasarım kısmının aşağıda detaylandırılacak istatistikî göstergeleri ışığında tasarımda kullanılacak model olarak *indirgenmiş karesel x 2FI* (reduced quadratic x 2FI) Scheffé çokterimli modeli seçilmiştir. Bu model, *karesel x karesel* çokterimli modelin karışım tasarımı kısmından bazı terimlerin atılması ve süreç tasarımı için karesel bir model yerine, en fazla iki süreç değişkeninin iç-etkileşimini içeren 2 faktör etkileşimli (2FI) çokterimli modelin kullanılmasıyla elde edilmiştir. KSDT’de kullanılacak, öngörülen deneysel (*emprical*) model eşitlik (3.69)’a benzer biçimde gösterilebilir:

$$E(y)_{KS} = \sum_{i=1}^5 \beta_i^0 x_i + \beta_{12}^0 x_1 x_2 + \sum_{i=1}^5 \sum_{j=1}^2 \beta_i^j x_i z_j + \sum_{i=1}^5 \sum_{j,k=1, j < k}^2 \beta_i^{jk} x_i z_j z_k + \varepsilon \quad (4.1)$$

Bu model daha açık biçimde yazılırsa, toplam 21 terimli Scheffé tipi bir kanonik model elde edilir. Bu model şu tip terimlerden oluşur:

- Süreç değişkeni içermeyen doğrusal terimler:

$$\beta_1^0 x_1 + \beta_2^0 x_2 + \beta_3^0 x_3 + \beta_4^0 x_4 + \beta_5^0 x_5$$

Bu terimler sadece ürün bileşenleri olup matematik modelde mutlaka bulunması gereken terimlerdir.

- Süreç değişkeni içermeyen 2.dereceden terim:

$$\beta_{12}^0 x_1 x_2$$

Bu terim pigmentle dispersan 1’in iç-etkileşimde olduğu varsayımıyla modele eklenmiştir. Zira bu alandaki tecrübemiz göstermiştir ki ana dispersanın pigmentle olan etkileşimi çok önemlidir ve dispersiyon kalitesini ve renk haslığını birincil dereceden etkilemektedir.

- Süreç değişkeni ve karışım bileşenlerini içeren 2.dereceden terimler:

$$\beta_1^1 x_1 z_1 + \beta_1^2 x_1 z_2 + \beta_2^1 x_2 z_1 + \beta_2^2 x_2 z_2 + \beta_3^1 x_3 z_1 + \beta_3^2 x_3 z_2 + \beta_4^1 x_4 z_1 + \beta_4^2 x_4 z_2 + \beta_5^1 x_5 z_1 + \beta_5^2 x_5 z_2$$

Bu terimler, süreç değişkenleri ile karışım bileşenlerinin etkileşimini göstermektedir ve genel model açısından 2.dereceden terimlerdir.

- Süreç değişkeni ve karışım bileşenlerini içeren 3.dereceden terimler:

$$\beta_1^{12} x_1 z_1 z_2 + \beta_2^{12} x_2 z_1 z_2 + \beta_3^{12} x_3 z_1 z_2 + \beta_4^{12} x_4 z_1 z_2 + \beta_5^{12} x_5 z_1 z_2$$

Bu terimler ise, süreç değişkenlerinin 2 faktör iç-etkileşimini (2FI) ve bu etkileşimin karışım bileşenleri ile olan etkileşimini gösterir.

Sonuç olarak bu sistemi modeli gerçekleştirebilmek için 21 adetten daha fazla deney noktasına ihtiyaç vardır.

Oluşturulan bu -yeni- model için D-optimum kriteri kullanıldığında DT yazılımının önerdiği toplam nokta sayısı 5 adet blok noktası (5 gün) dâhil 25'tir. Model uyumsuzluğunun testi ve tekrar noktalarıyla beraber (5'er adet nokta) toplam önerilen deney noktası sayısı 35 adettir. Tasarıma ilave edilen bazı noktalarla (8 adet merkez noktası, 3 adet ilave nokta ve 7'şer adet tekrar ve model uyumsuzluğu testi noktası) ve her bir güne 10 adet deneme düşmesi için toplam deney noktası sayısı 50 olarak belirlenmiştir.

Diğer taraftan deney tasarımında A-sözde-bileşen dönüşümü uygulanmış olup, bileşenlere ait kodlanmış değerler ve bileşenlerin gerçek miktarlarının alt- ve üst-limit değerlerinin ortalamasından elde edilmiş olan ortalama değerler ve bu değerlere ait standart sapmalar Çizelge 4.2'de verilmiştir. Burada standart sapma değerlerinin büyüklüğü dikkat çekicidir. Ama bu durum sadece alt- ve üst-sınır değerlerinin farkının büyüklüğünden kaynaklanmaktadır.

Çizelge 4.2 KSDT Tasarımı için bileşenler ve kodlanmış alt- ve üst-sınır değerleri.

Bileşen	Bileşen Adı	Türü	Alt- (Kodlanmış)	Üst- (Kodlanmış)	Ortalama	Standart Sapma
A	Pigment	Karışım Bileşeni	0.000	0.390	70.174	9.950
B	Dispersan 1	Karışım Bileşeni	0.000	0.661	30.595	15.997
C	Solvent (su + alkol)	Karışım Bileşeni	0.000	0.797	115.243	13.959
D	Dispersan 2	Karışım Bileşeni	0.000	0.169	5.173	4.478
E	Dispersan 3	Karışım Bileşeni	0.000	0.102	4.815	2.710
F	Disp. devir hızı	Nicel	-1.000	1.000	7275.000	2203.548
G	Disp. süresi	Nicel	-1.000	1.000	9.850	4.313

A-sözde-bileşen dönüşümü uygulanan deney tasarımı için D-optimum noktalar ve bu noktaların DT uzayındaki yerleri Çizelge 4.3'te gösterilmiştir. Bileşenlere ait değerler ve süreç değişken seviyeleri kodlanmış olarak verilmiştir. Tasarım dikkatle incelendiğinde birçok noktanın polytopik uzayın uç noktalarına yerleştirildiği görülebilir (<vertex> x

vertex). Daha öncede bahsedildiği üzere bu durum D-optimum kriteri için kullanılan algoritmadan kaynaklanmaktadır.

Bundan dolayı, tasarım uzayının iç bölgelerinde var olduğu düşünülen eğriselliklerin ve optimizasyonda iç noktaların da var olmasını sağlamak için tasarıma fazladan merkez noktaları eklenmiştir. Burada <.> işaretiyle gösterilen nokta bileşen karışım tasarımına, işaretsiz olanı ise süreç tasarımına aittir. F ve G ile gösterilen sıfır değerleri ilgili süreç değişkenlerinin orta noktalarını göstermektedir. Ayrıca uygulanan bloklamadan dolayı, deney tasarımı 5 gün içinde her gün için 10'ar adet deneme gerçekleştirilecek şekilde oluşturulmuştur. Deney noktalarının türleri çizelgenin altında açıklanmıştır.

Çizelge 4.3 KSDT uygulaması için A-sözde dönüşümlü deney noktaları ve nokta tipleri.

D. Sırası	Blok	Deney n. tipi	A:	B:	C:	D:	E:	F:	G:
			Pigment	Disp. 1	Solvent	Disp. 2	Disp. 3	Disp.d. hızı	Disp.süresi
1	1.gün	<Vertex> x Vertex	0.000	0.661	0.339	0.000	0.000	-1	-1
2	1.gün	<Center> x Center	0.171	0.301	0.393	0.085	0.050	0	0
3	1.gün	<Interior> x Center	0.085	0.300	0.473	0.090	0.052	0	0
4	1.gün	<Center> x Center	0.171	0.301	0.393	0.085	0.050	0	0
5	1.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.441	0.169	0.000	-1	-1
6	1.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.610	0.000	0.000	0.000	1	1
7	1.gün	<Vertex> x Vertex	0.000	0.000	0.729	0.169	0.102	1	1
8	1.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.441	0.169	0.000	-1	-1
9	1.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.508	0.000	0.102	-1	-1
10	1.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.339	0.000	0.169	0.102	1	-1
11	2.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.441	0.169	0.000	1	-1
12	2.gün	<Vertex> x Vertex	0.000	0.661	0.339	0.000	0.000	1	-1
13	2.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.610	0.000	0.000	0.000	-1	-1
14	2.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.508	0.000	0.102	1	-1
15	2.gün	<CentEdge> x CentEdge	0.051	0.000	0.797	0.051	0.102	-1	0
16	2.gün	<Center> x Center	0.171	0.301	0.393	0.085	0.050	0	0
17	2.gün	<Vertex> x Vertex	0.068	0.661	0.000	0.169	0.102	1	1
18	2.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.441	0.169	0.000	1	-1
19	2.gün	<Center> x Center	0.171	0.301	0.393	0.085	0.050	0	0
20	2.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.610	0.000	0.000	1	1
21	3.gün	<Vertex> x CentEdge	0.000	0.661	0.339	0.000	0.000	1	0
22	3.gün	<Center> x Center	0.171	0.301	0.393	0.085	0.050	0	0
23	3.gün	<Vertex> x CentEdge	0.390	0.441	0.000	0.169	0.000	0	-1
24	3.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.441	0.169	0.000	-1	1
25	3.gün	<CentEdge> x Vertex	0.102	0.102	0.797	0.000	0.000	-1	-1
26	3.gün	<Vertex> x Vertex	0.000	0.000	0.729	0.169	0.102	1	-1
27	3.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.441	0.169	0.000	1	1

Çizelge 4.3'ün devamı

28	3.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.441	0.169	0.000	1	1
29	3.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.508	0.000	0.102	-1	1
30	3.gün	<Vertex> x CentEdge	0.068	0.661	0.000	0.169	0.102	-1	0
31	4.gün	<Vertex> x Vertex	0.000	0.661	0.339	0.000	0.000	-1	1
32	4.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.610	0.000	0.000	0.000	-1	-1
33	4.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.610	0.000	0.000	1	-1
34	4.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.441	0.169	0.000	1	1
35	4.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.508	0.000	0.102	1	1
36	4.gün	<Vertex> x Vertex	0.000	0.661	0.339	0.000	0.000	1	1
37	4.gün	<Vertex> x AxialCB	0.068	0.661	0.000	0.169	0.102	0.5	-0.5
38	4.gün	<Vertex> x Vertex	0.000	0.000	0.729	0.169	0.102	-1	-1
39	4.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.508	0.000	0.102	-1	1
40	4.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.508	0.000	0.102	-1	1
41	5.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.610	0.000	0.000	-1	1
42	5.gün	<Center> x Center	0.171	0.301	0.393	0.085	0.050	0	0
43	5.gün	<Center> x Center	0.171	0.301	0.393	0.085	0.050	0	0
44	5.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.339	0.000	0.169	0.102	-1	1
45	5.gün	<Vertex> x Vertex	0.000	0.661	0.068	0.169	0.102	-1	-1
46	5.gün	<Vertex> x Vertex	0.000	0.661	0.068	0.169	0.102	-1	-1
47	5.gün	<Vertex> x Vertex	0.000	0.000	0.729	0.169	0.102	-1	1
48	5.gün	<Center> x Center	0.171	0.301	0.393	0.085	0.050	0	0
49	5.gün	<Vertex> x Vertex	0.000	0.000	0.729	0.169	0.102	-1	1
50	5.gün	<Vertex> x Vertex	0.390	0.000	0.610	0.000	0.000	-1	-1

Vertex: uç nokta; CentEdge: kenar orta noktaları; Center: merkez nokta ve AxialCB: CB düzlemi üzerinde aksel nokta

4.4 Deney Tasarımının Değerlendirilmesi

Öngörülen model için (indirgenmiş karesel x 2FI) hiçbir eşdeş/eşlenik nokta (aliased point) bulunmamaktadır. Eğer tasarımda modeldeki terim sayısından *daha az* deney noktası mevcut olsaydı, bazı parametreler (regresyon katsayıları) bağımsız olarak tespit edilemeyecek ve dolayısıyla birçok eşdeş nokta oluşacaktı.

Deney tasarımında parametre tahminleri için kullanılacak bağımsız karşılaştırmaların ölçütü olarak nitelendirilebilecek olan serbestlik derecesi (df) ve modeldeki gruplara düşen sayıları aşağıda verilmiştir. Serbestlik derecesi terim grupları için genel olarak modeldeki nokta/parametre/blok sayısının bir eksiğine eşittir. Örneğin bu çalışmada toplam 50 deney noktası olduğu için, toplam serbestlik derecesi sayısı 49 adet olacaktır. Serbestlik derecesinin düşük olması, genellikle, model uyumsuzluğu testi için yeterli nokta bulunmadığını gösterir.

Serbestlik Dereceleri:

Bloklar:	4
Model:	20
Artıklar:	25
Model uyumsuzluğu:	15
<u>Saf Hata:</u>	<u>10</u>
TOPLAM:	49

DE yazılımı, uygulanan tasarımı değerlendirmek için birçok gösterge sunmaktadır. Bu kısımda bu tür göstergeler üzerinde durulacaktır. Çizelge 4.4'te tasarımın istatistikî olarak tutarlı olup olmadığını değerlendirmekte kullanılan göstergeler verilmiştir. Bunlar - çizelgedeki sırasıyla- standart hata, değişkenlik şişirme faktörü ya da VIF değeri (Variance Inflation Factor), R_i^2 değeri ve güç hesabı (power calculation) dır.

Çizelge 4.4 Tasarım değerlendirmesi için istatistikî göstergeler ve değerleri.

Terimler	Standart Hata*	VIF	R_i^2	Sinyal/Gürültü Oranlarının Tespiti ($\alpha=5\%$ için Güç Hesapları)		
				0.5'lik std. sapma	1'lik std. sapma	2'lik std. sapma
1.gün	0.318					
2.gün	0.322					
3.gün	0.320					
4.gün	0.313					
5.gün						
A	0.964	3.638	0.725	6.8 %	12.4 %	35.2 %
B	0.615	2.548	0.608	7.3 %	14.3 %	42.5 %
C	0.595	3.737	0.732	6.4 %	10.9 %	29.3 %
D	2.074	2.891	0.654	5.4 %	6.5 %	11.2 %
E	3.579	2.809	0.644	5.2 %	5.7 %	7.9 %
AB	3.765	3.717	0.731	8.0 %	17.6 %	53.3 %
AF	0.798	2.241	0.554	6.0 %	9.3 %	22.6 %
AG	0.824	2.487	0.598	6.0 %	9.0 %	21.5 %
BF	0.530	1.516	0.341	7.4 %	14.8 %	44.2 %
BG	0.577	1.572	0.364	7.0 %	13.3 %	38.5 %
CF	0.540	2.657	0.624	7.3 %	14.5 %	42.9 %
CG	0.571	2.723	0.633	7.1 %	13.4 %	39.1 %
DF	1.999	2.219	0.549	5.2 %	5.7 %	7.7 %

Çizelge 4.4'ün devamı

DG	1.999	2.210	0.547	5.2 %	5.7 %	7.7 %
EF	3.569	2.404	0.584	5.1 %	5.2 %	5.8 %
EG	3.657	2.247	0.555	5.0 %	5.2 %	5.8 %
AFG	0.827	2.400	0.583	6.0 %	9.0 %	21.4 %
BFG	0.581	1.499	0.333	7.0 %	13.2 %	38.1 %
CFG	0.585	2.858	0.650	7.0 %	13.0 %	37.6 %
DFG	2.121	2.334	0.571	5.1 %	5.6 %	7.4 %
EFG	3.751	2.338	0.572	5.0 %	5.2 %	5.8 %

*1.0'lık bir standart sapma temel alınmıştır.

4.4.1 Standart Hatalar

Standart hatalar için en önemli koşul: Ne kadar küçük, o kadar iyi şeklindedir. Ayrıca parametre grupları içinde, standart hata değerlerinin birbiriyle benzer olması istenen bir durumdur (Cornell, 2002). Çizelgeden görüldüğü üzere en yüksek standart hata değerleri AB = 3.76, EFG = 3.75, EG = 3.66, E = 3.58 ve EF = 3.57 terimleri için oluşmuştur.

AB terimi hariç tutulursa tüm terimlerde E bileşeni (x_5 : Dispersan 3), yani en dar değişim aralığına sahip bileşen vardır ve bileşenin kendisi (E) de yüksek standart hata değeri almıştır. Diğer taraftan yukarıda F ve G değişkenlerinden birinin bulunduğu bütün terimler ve her ikisinin birlikte bulunduğu terim yüksek standart hata değerine sahiptir. Bu durum E bileşeninin yüksek standart hata değerinden kaynaklanmaktadır. AB teriminin yüksek standart hata değeri almasının sebebi ise, her iki bileşenin de karışım bileşeni olması ve aralarında eş-doğrusallık -KDT'lerin doğası gereği oluşan- olmasından kaynaklanmaktadır. Ayrıca, modelde *sadece* karışım bileşenleri içeren tek 2.dereceden bileşen AB olduğu için, değerlerin yüksekliği ya da düşüklüğüne karar vermek zordur.

Standart hatalar parametre grupları için incelendiğinde ise, dar aralık değerlerine sahip E ve D bileşenlerinin girdiği terimler hariç tutulursa, birbirine yakın değerlerin varolduğu gözlemlenebilir.

4.4.2 VIF ve R_i^2 Değerleri

VIF değeri, deney tasarımlarının dikey (orthogonal) olmaması durumunda model katsayılarının değişkenliklerinin ne kadar artabileceğinin bir ölçüsüdür (Cornell, 2002). Eğer modeldeki herhangi bir parametre diğer parametrelerle dikey ise VIF değeri 1.0'e eşittir. 1.0 ve üstündeki VIF değerleri çoklu eş-doğrusallık (multicollinearity) olduğunu; 10.0'un üstündeki VIF değerleri ise, çoklu eş-doğrusallıktan kaynaklanan sorunların

olduğunu gösterir (Goupy, 2000; Statease Inc., 2008). Çoklu eş-doğrusallıktan kaynaklanan yüksek VIF değerli tasarımlarda, model katsayı tahminleri sağlıklı olamayacaktır. Dolayısıyla, deney tasarımları için ideal VIF değeri 1.0'dir ve 10.0 değerine kadar sorun olmayacağı düşünülür (Lewis vd., 1999; Goupy, 2000; Cornell, 2002; Smith, 2005). Fakat başka bazı yazarlar korkulacak VIF değerinin üst sınırını 100.0'e kadar çıkarmaktadır (Myers ve Montgomery, 2002).

Diğer taraftan, model katsayısının standart hata değeri $\sqrt{\text{VIF}}$ değeriyle doğru orantılı olarak artar. Örneğin modeldeki bir katsayının VIF değeri 25 ise, bu katsayının standart hata değeri dikey (orthogonal) tasarımdaki değerinden 5 kat daha yüksek olacaktır. VIF değeri ile aşağıda anlatılacak olan ve çoklu korelasyon katsayısı (multiple correlation coefficient) olarak adlandırılan R_i^2 değeri arasında, eşitlik (4.3)'teki gibi bir ilişki vardır:

$$\text{VIF} = \frac{1.0}{1-R_i^2} \quad (4.3)$$

İdeal R_i^2 değeri 0.0'dır ve yüksek R_i^2 değerleri, VIF değerlerinin artmasına ve terimler arasında korelasyonların oluşmasına dolayısıyla, kötü modellerin elde edilebilmesine neden olmaktadır.

Belirtme katsayısı olarak ta bilinen R_i^2 değeri -1 ve +1 arasında değer alır ve cevap değişkeninin birleştirilmiş doğrusal tahmin değişkenleriyle olan ilişkisinin derecesini gösteren bir katsayıdır (Cornell, 2002). R_i^2 değeri hesaba konu olan değişkenin, tüm diğer değişkenler üzerinde regresyon hesabına tabi tutulması ile bulunur. Hesaba konu olan değişkeni (x_i) Y ile gösterirsek, eşitlik (4.4)'teki gibi bir ifade elde ederiz (Statease Inc., 2008):

$$R_i^2 = \frac{\text{SYY}-\text{RSS}}{\text{SYY}} \quad (4.4)$$

Burada SYY x_i 'nin ortalama değeri için düzeltilmiş kareler toplamını (corrected sum of squares); RSS ise, x_i 'nin tüm diğer değişkenler üzerinde regresyon hesabına tabi tutulması ile hesaplanan artıkların kareler toplamını göstermektedir. Deney tasarımı dikey ise bu iki kareler toplamının farkı sifira eşit olacaktır ve dolayısıyla R_i^2 değeri sifir olacaktır. Eğer (SYY - RSS) sifirdan farklı ise, x_i bileşeninin değişkenliğinin var olduğu söylenir ve bu değişkenliğin diğer bileşenlerin değerlerinden etkilendiği söylenir. Sonuç olarak, R_i^2 değeri x_i bileşeninin diğer bileşenlerle eş-doğrusallığının bir ölçüsü olarak kullanılabilir (Box ve Draper, 2007; Statease Inc., 2008).

VIF ve R_i^2 değerleri için Çizelge 4.4 incelendiğinde hiçbir VIF değerinin 4'ün üzerinde olmadığını ve tasarımın bu anlamda tutarlı ve dikeyliğe çok yakın olduğu söylenebilir. A ve C bileşenleri için R_i^2 değerleri, sırasıyla, 0.72 ve 0.73'dür. Bu değerlerden dolayı VIF değerleri de, sırasıyla, 3.64 ve 3.74 olmuştur. Bu değerlerin yüksek olmasının sebebi, bileşenler arasındaki çoklu eş-doğrusallığın varlığıdır.

KDT'ler kısıtlardan dolayı yüksek korelasyona sahip tasarımlar olduğundan, VIF değerlerinin yüksek olması doğal bir sonuçtur ve bu gösterge KDT'lerde tam bir tasarım değerlendirme ölçütü olarak kullanılmamalıdır. Fakat VIF değerleri aynı bileşenler için farklı KDT'lerin karşılaştırılması için kullanılabilir (Statease Inc., 2008). Ortalamada düşük VIF değerli bir KDT modelleme için çok daha uygundur. Ayrıca, bu çalışmanın tasarım değerlendirme aşamasında uygulandığı gibi, VIF değerleri modeldeki terimlerin hiyerarşik olarak indirgenmesi ile azaltılabilmekte ve daha tutarlı modeller elde edilebilmektedir (Cornell, 2002; Smith, 2005).

4.4.3 Güç Hesapları

TYYY'lerde güç hesabı tasarımın verileri modelleyebilme yeteneğini belirleyecek etkili bir değerlendirme aracı ya da gösterge değildir (Myers ve Montgomery, 2002). Aynı şekilde, TYYY'lerin farklı bir biçimi olan KDT'ler ve KSDT'ler için de uygun bir istatistikî gösterge değildir (Goupy, 2000; Cornell, 2002; Statease Inc., 2008).

Güç, bir tasarımda belirli boyuttaki bir etkiyi ($\frac{1}{2}$, 1 veya 2'lik standart sapma değerleri için) bulabilme olasılığı olarak tanımlanmaktadır (Myers ve Montgomery, 2002; Statease Inc., 2008). Güç değeri, tasarıma nokta sayısı eklendikçe artmaktadır. KDT'ler için bu işlem şu şekilde yapılmaktadır: KDT'lerdeki güç hesaplarında doğrusal etki için temel olarak 0 ve +1 değerleri arasındaki fark alınır. Doğrusal etkiler üzerindeki bu sınır değerleri, diğer tüm yüksek dereceli etkilerin de aralığını belirler. Dolayısıyla doğrusal etki için aralık 0'dan +1'e kadarsa, karesel etki için bu aralık, 0'dan $+\frac{1}{4}$ 'e kadardır (A*B'nin maksimum değeri).

Diğer taraftan, çaprazlanmış tasarımlarda (KSDT, KMDT ve KaK gibi) güç hesapları ise şöyle yapılır: Herhangi bir çapraz etki (crossed effect) için, çapraz etkinin aralık değeri temel alınır. Doğrusal karışım bileşeni ve doğrusal süreç değişkeninin çarpımının etkisi (0, 1) ve (-1, +1) aralıklarının çarpımıyla hesaplanır ve aralık değerleri -1'den +1'e kadar olur. Doğrusal karışım bileşeni ve karesel süreç değişkeni çarpımının etkisi ise, (0, 1) ve (0, +1) aralıklarının çarpımıyla hesaplanır ve aralık değerleri 0'dan +1'e kadardır.

Çizelge 4.5'ten görüleceği üzere, ($\frac{1}{2}$, 1) ya da ($\frac{1}{2}$, 2) gibi ikili standart sapma değerlerinin etkisi, modelde bu etkinin alt ve üst değerlerini birbirinden ayıran çok yüksek standart sapmaların olması anlamına gelir (Smith, 2005; Statease Inc., 2008).

Yukarıda Çizelge 4.4'ten görüleceği üzere KDT'ler oldukça düşük güç değerleri vermektedir. Bu değerler genellikle % 5'ler civarındadır. Bu durumun sebebi şöyle açıklanabilir: D-optimum kriteri kullanarak bir KDT gerçekleştirilirken, çalışmamızda olduğu gibi, bileşen aralıkları birbirinden farklı değerler alabilmektedir. Bu tür farklı aralık değerleri alan bileşenlerden bazıları doğal olarak daha dar aralıklara sahip olacaklardır ve dolayısıyla KDT tasarımının dikeyliği sağlanamamış (non-orthogonal design) olacaktır. Bu gibi durumlarda güç değerleri düşük olmaktadır (Goupy, 2000; Statease Inc., 2008).

Çizelge 4.5 KDT'lerde güç hesapları için etki aralıkları.

Etki	Alt	Üst
Doğrusal A	0	+1
Karesel AB	0	+1/4
Özel kübik ABC	0	+1/27
Kübik AB(A-B)	-3/32	+3/32

Sonuç olarak, KDT'lerde güç değerlerinin düşük olması şu iki durumun etkisiyle açıklanabilir:

1. KDT'nin temel kısıtları ve bileşenler için uygulanan alt- ve üst-limit değerlerinin oluşturduğu dar aralıklar, bileşenlerin etkilerinin tahminlerinde çok yüksek standart sapmaya ve regresyon katsayılarının tahmin edicilerinin eş-doğrusal olmasına neden olmaktadır. Sonuçta regresyon katsayıları yüksek standart sapmalı olmaktadır.

2. İkili standart sapma değerinin etkisi tüm simpleks boyunca ölçülmektedir. Fakat çok küçük aralıkta değer alabilen bileşenler için bu etki, çok küçük bir bölgede görülebilmektedir. Örneğin, Dispersan 3'ün (x_5) değer aralığı $00.88 \leq x_5 \leq 01.50$ biçiminde olsaydı, 3 standart sapmalı bir x_5 etkisi için tasarımda ölçülecek standart sapma değeri sadece $(1.50 - 0.88)*3 = 1.86$ standart sapma seviyesinde olacaktı.

İşte bu iki durumdan dolayı sinyal/gürültü oranı (signal/noise ratio) oldukça düşük olmaktadır. Bu durum ise, bir etkinin tespit edilebilme olasılığının ölçüsü olan güç değerlerini düşük yapmaktadır.

4.4.4 Kaldıraç (Leverage) Değerleri

Kaldıraç değeri, bir deney noktasının model katsayılarının uyumluluğunu (fit) etkileme potansiyeli olarak tanımlanmakta ve bilgi matrisinden elde $((\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1})$ edilmektedir (Cornell, 2002). 1.0'e yakın olan kaldıraç değerlerinden kaçınılmalıdır. Eğer bir deney noktasının kaldıraç değeri 1.0 ise, model bu nokta üzerinden gitmeye zorlanacaktır ve bu nokta modeli kontrol etmeye başlayacaktır. Diğer bir ifadeyle, kaldıraç değerinin 1.0 olması tahmin edilen değer ile gerçek değer birbirine eşit olması ve dolayısıyla artık değerinin sıfır olması demektir. Kaldıraç değerinin azaltılması için bu nokta ya tekrarlanmalı, ya da çok dikkatli bir şekilde denenmelidir. Diğer bir seçenek te, tasarıma daha fazla deney noktası eklenmesidir. Bu çalışmada yüksek kaldıraç değerlerinin giderilmesi için DE'nin seçilen tasarım için varsayılanı değeri olan 5 adet tekrar noktasına ilave olarak fazladan 2 tekrar noktası eklenmiştir.

Diğer taraftan kaldıraç değerlerinin ortalaması, modelde bloklamalar dahil terim sayılarının toplamının deney noktası sayısına bölünmesi ile bulunur. Bu çalışma için ortalama değer 0.5'tir. Kaldıraç değerlerinin toplamı ise, modeldeki parametre sayısına eşittir ve bu çalışmada 21 adet terim ve 4 adet bloklama (görünen 5 bloklamanın 1 tanesi zaten tasarımın kendisinden gelmektedir) ile beraber toplam değer 25 olmaktadır. Ayrıca bir deney tasarımındaki maksimum kaldıraç değeri, k tasarımın tekrar sayısı olmak üzere $1/k$ 'dir.

Çizelge 4.6'da deney noktaları ve bu noktalara ait kaldıraç değerleri verilmiştir. Bu değerler incelendiğinde, yüksek kaldıraç değerli deney noktalarının varlığı gözlenmektedir. Bu noktalar incelendiğinde ise, 0.7 değerinden büyük olanların tamamının <Vertex> x

Vertex tipi deney noktaları olduğu görülür. Bu durum makul karşılanmalıdır. Çünkü kaldıraç değerleri de diğer bazı göstergeler gibi KDT'lerde sağlıklı çalışmamaktadır ve D-optimum kriterinden dolayı da bu tasarımda bu tip noktaların (Vertex > x Vertex) sayısı çok fazladır.

KDT'ler genellikle tam tekrarlanan tasarımlar değildir ve mümkün olan en az sayıda denemeden oluşturulmalıdır. Bu kısıtlar ve doğaları gereği sahip oldukları yüksek korelasyondan dolayı KDT'ler, özellikle indirgenmemiş modeller için, yüksek kaldıraç değerleri oluştururlar. Tasarımın analizi sırasında etkili olmadığı tespit edilen birçok terim elendiğinde yüksek kaldıraç değerleri de azalacaktır.

Çizelge 4.6 KSDT uygulaması için kaldıraç değerleri ve deney noktası tipleri.

Standart Sıra	Kaldıraç	Deney noktası tipleri
1	0.783	<Vertex> x Vertex
2	0.715	<Vertex> x Vertex
3	0.129	<Center> x Center
4	0.796	<Vertex> x Vertex
5	0.853	<Vertex> x Vertex
6	0.461	<Vertex> x Vertex
7	0.779	<Vertex> x Vertex
8	0.832	<Vertex> x Vertex
9	0.550	<Vertex> x Vertex
10	0.440	<Vertex> x Vertex
11	0.785	<Vertex> x Vertex
12	0.490	<Vertex> x Vertex
13	0.427	<Vertex> x Vertex
14	0.929	<Vertex> x Vertex
15	0.341	<Vertex> x Vertex
16	0.562	<CentEdge> x Vertex
17	0.830	<Vertex> x Vertex
18	0.455	<Vertex> x CentEdge
19	0.445	<Vertex> x Vertex
20	0.337	<Vertex> x Vertex
21	0.693	<Vertex> x Vertex
22	0.865	<Vertex> x Vertex
23	0.778	<Vertex> x Vertex
24	0.521	<Vertex> x Vertex
25	0.468	<Vertex> x Vertex
26	0.583	<Vertex> x Vertex
27	0.485	<Vertex> x Vertex
28	0.819	<Vertex> x Vertex
29	0.411	<Vertex> x Vertex
30	0.146	<Center> x Center

Çizelge 4.6'nın devamı

31	0.144	<Interior> x Center
32	0.713	<Vertex> x Vertex
33	0.344	<CentEdge> x CentEdge
34	0.430	<Vertex> x CentEdge
35	0.452	<Vertex> x AxialCB
36	0.146	<Center> x Center
37	0.129	<Center> x Center
38	0.134	<Center> x Center
39	0.134	<Center> x Center
40	0.391	<Vertex> x CentEdge
41	0.135	<Center> x Center
42	0.890	<Vertex> x Vertex
43	0.645	<Vertex> x Vertex
44	0.146	<Center> x Center
45	0.461	<Vertex> x Vertex
46	0.440	<Vertex> x Vertex
47	0.341	<Vertex> x Vertex
48	0.337	<Vertex> x Vertex
49	0.468	<Vertex> x Vertex
50	0.411	<Vertex> x Vertex
Ortalama kaldırma değeri:	0.500	

Vertex: uç nokta; CentEdge: kenarların orta noktaları; Center: merkez nokta ve AxialCB: CB düzlemi üzerinde aksenal nokta

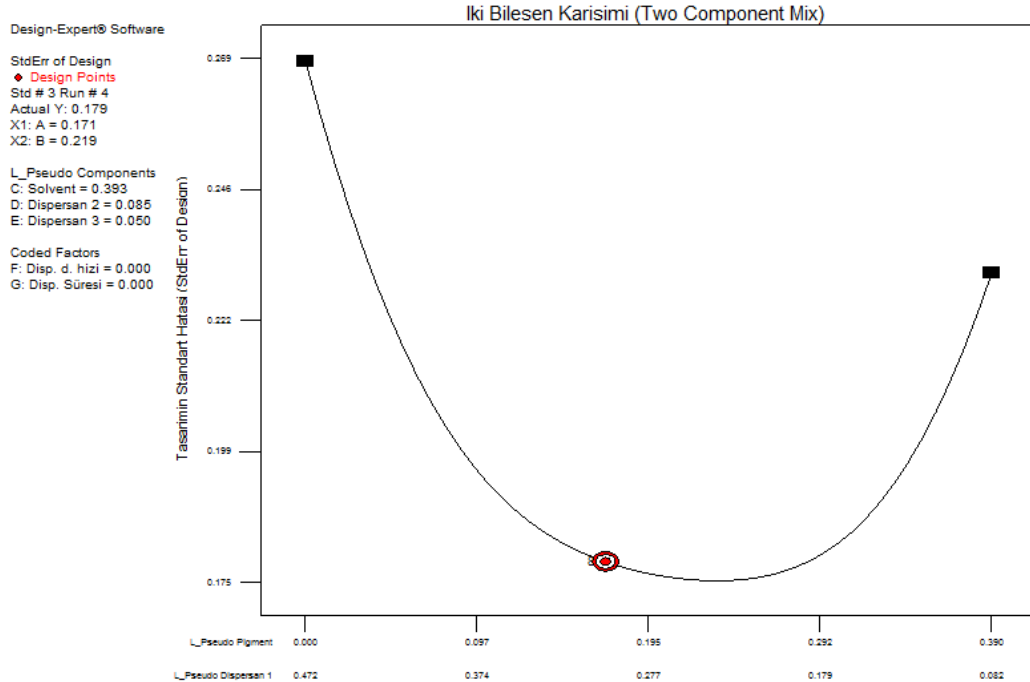
Sonuç olarak yüksek VIF değerleri, düşük güç ve yine yüksek kaldırma değerlerine rağmen KDT'ler, model terimlerinin etkisini gösterebilecek kullanışlı tepki yüzeyi grafikleri oluşturabilmektedirler.

KDT'lerde yukarıdaki tasarım değerlendirme göstergeleri için henüz sağlıklı hesaplama yöntemleri oluşturulamamıştır. Ayrıca, endüstriyel formül tasarımları için çok önemli olan bir KDT modelinin toplam gücünü hesaplamakta kullanılacak bir yöntem de yoktur (Statease Inc., 2008).

4.4.5 Grafikselleştirme Yöntemleri:

Deney tasarımlarının değerlendirilmesi için birçok grafikselleştirme yöntemi bulunmaktadır. Bu tür grafiklerle tasarımın kestirim hatasını başka bir deyişle kestirim gücünü tespit etmek mümkündür (Montgomery, 2004). Bu tür grafikler henüz tasarım çıktıları için hiçbir veri toplanmadan oluşturuldukları için, yani elimizde standart sapmaya dair bir değer bulunmadığı için, görece kestirim hatalarının hesaplanmasında 1.0'lık bir standart sapma

değeri kullanılmaktadır (Statease Inc., 2008). Değerlendirme grafiklerinden en basiti iki karışım bileşenin eşzamanlı istatistikî anlamlılığını göstermekte kullanılabilecek iki bileşenin karışım grafiğidir. Şekil 4.1 etkinliğini tarama testleriyle tespit ettiğimiz iki ana bileşenin (pigment ve dispersan 1) tasarımın standart hatası üzerindeki etkisini, yani tasarımın standart hata değerinin bu iki bileşene ne kadar duyarlı olduğunu göstermektedir. Şekilden de anlaşılacağı üzere merkez noktaya yakın noktalarda tasarım çok küçük standart hata değerleri üretmektedir. Bu durum tasarımın dayanıklılığı açısından istenilen bir koşuldur (Cornell, 2002; Özol-Godfrey, 2004). Bu kısımdaki grafiklerde bileşen oranları A-sözde-bileşenler (L_pseudo) cinsinden; süreç değişkenleri ise kodlanmış değişkenler cinsinden verilmiştir.



Şekil 4.1 KSDT Çalışması için İki Bileşenin Karışımı Grafiği (halka içindeki nokta bir deney noktasıdır ve min. σ 'yı verecek bir deney noktasının da bulunduğunu gösterir)

4.4.5.1 Tasarım Uzayının Kesri - FDS (Fraction of Design Space) Grafikleri

Genel olarak bir FDS grafiği, ortalama tahmin değerinin göreceli standart hatalarını gösterir. Diğer türlü söylenirse, FDS grafiği tasarım uzayının hacmi ile kestirimin hata miktarı arasındaki ilişkiyi göstermektedir. Eğri tasarım uzayının ne kadarlık bir kesrinin ya da yüzdesinin verilen ya da beklenen tahmin (kestirim) hatasına sahip olduğunu göstermektedir. Genellikle, daha yatık (flat) ve düşük standart hata değerli eğriler daha

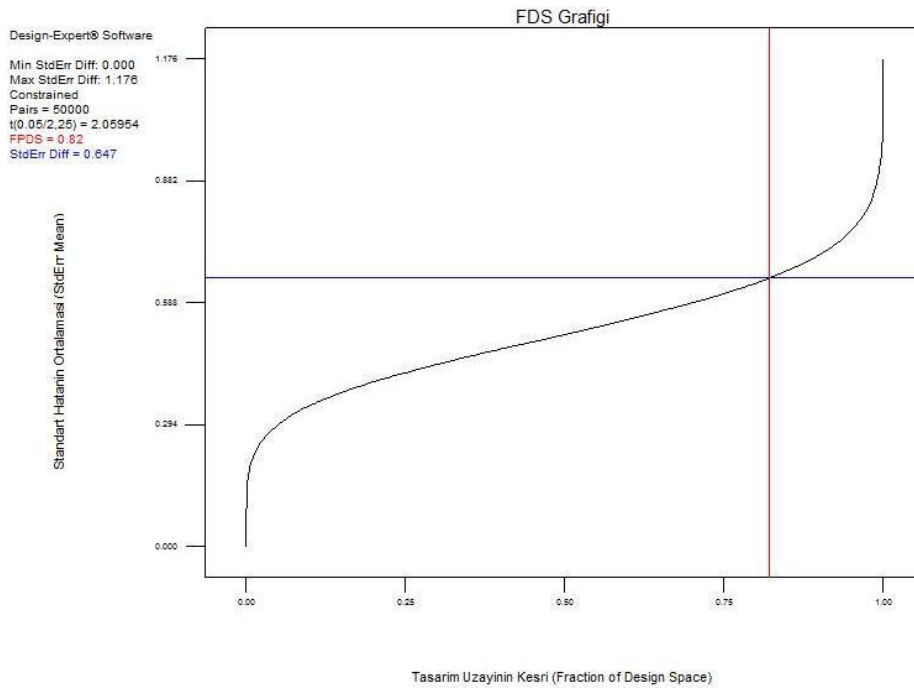
kabul edilebilirdir ve düşük standart hata değeri yatıklıktan daha önemlidir. Düşük standart hata değerli bir grafik tasarımının daha büyük bir kısmının (yüzdesinin) doğru yani kullanışlı olduğunu gösterir (Statease Inc., 2008). Yatıklık tüm tasarım boyunca kestirim hatasının sabit olacağını; düşük standart hata değeri ise, tüm tasarım boyunca kestirim hatasının değerinin küçük olacağını gösterir. Faktör seviyelerinin ve/veya karışım bileşenlerinin verilen bir kombinasyonunda tahmin edilen cevabın kestirim (tahmin) aralığı, kestirimin standart hata (standard error of prediction) değeriyle ilişkilidir. Yani kestirimin standart hata değeri ne kadar büyük ise, sonuçların tekrar edilebilme olasılığı o kadar düşük ve etkili (significant) bir değerin tespit edilebilmesi de o kadar düşük olacaktır.

DE yazılımında FDS grafiği için üç hata türünün (Mean, Prediction, ve Difference) irdelenebileceği seçenekler vardır. Bu hata türlerinden TYY'ler ve KDT'ler için elverişli olanı Fark (Difference) tipi hatanın değişken olarak kullanıldığı fonksiyonel ilişkidir (Statease Inc., 2008). Zira bu tip hatanın kullanıldığı fonksiyonel ilişki daha anlamlı sonuçlar üretmektedir (Zahran vd., 2003). Fark, aslında, farkların standart hatası demektir ve deney uzayından rastgele seçilen bir nokta çiftinin farkının standart hatasını temel alır. Daha açık bir ifadeyle, tasarım uzayından rastgele seçilen iki nokta için beklenen değerlerinin farkının standart hatasıdır. Bu hata tipi KDT'lerin doğası gereği hesaplanması henüz tam olarak mümkün olmayan güç hesaplarının yerine kullanılabilir (Statease Inc., 2008).

Diğer taraftan DE yazılımında hata tipine bağlı olarak 3 parametrenin kullanıldığı FDS grafikleri elde etmek mümkündür. Bu parametreler d (delta), s (standart sapma) ve α (alfa) tipi risk yani Tip I risk) parametreleridir. d parametresi Fark tipi hatalar için deney tasarımı bölgesinden seçilen herhangi bir nokta çifti için cevapta (bağımlı değişkende) oluşacak farkın tespit edilmesinde kullanılır. Standart sapma (s) parametresinin değeri tasarım bitirilinceye kadar net olarak bilinemez. Dolayısıyla sadece tahmini değerler kullanılabilir. Bu çalışmanın genelinde α değeri %5 olarak alınmıştır. Çünkü daha büyük alfa değeri FDS'yi de artırır (Statease Inc., 2008).

Şekil 4.2'de Fark tipi hatanın kullanıldığı bir FDS grafiği gösterilmektedir. Bu grafikten de görülebileceği üzere standart hataların farkının minimum değeri 0.000 ve maksimum değeri 0.176 dır ve çalışma 50000 çift kısıtlı deney noktası için gerçekleştirilmiştir. $\alpha = 0.05$ değeri için t değeri 2 civarında olup alfa değeri azaldıkça artmaktadır. Cevap değişkeninde $d = 2$ birimlik bir farklılık görmek için, 1.5'lik bir standart sapma (s) değerinde, 4/3'lük bir Sinyal/Gürültü oranı seçelim. Tasarım uzayında rastgele seçilen nokta çiftlerinin %82'si bu Sinyal/Gürültü oranını tespit edecektir. FDS grafiği üzerinde bu

nokta (x-eksenini dik kesen doğru) ve noktaya karşılık gelen farkların standart hata değeri (y-eksenini dik kesen doğru) görülmektedir. Tahmin edilen deney uzayının kesir değeri (FPDS) grafikte 0.82 olarak ve bu değere karşılık oluşan farkların standart hata değeri de 0.647 olarak gösterilmiştir. Genel olarak, KDT'ler için %80'lik bir FDS değeri uygun görülmekte olup; bundan daha düşük değerler için ya standart sapma azaltılmalı ya da beklenti değeri azaltılmalıdır. Fakat yapılacak daha uygun işlem tekrarlı ölçümler yapıp ortalama standart sapma değerleri girmek ve/veya tekrarlı DT'ler kurmaktır. Ayrıca yüksek kaldıraç etkili noktaların tekrarı da uygun sonuçlar verebilmektedir (Statease Inc., 2008).

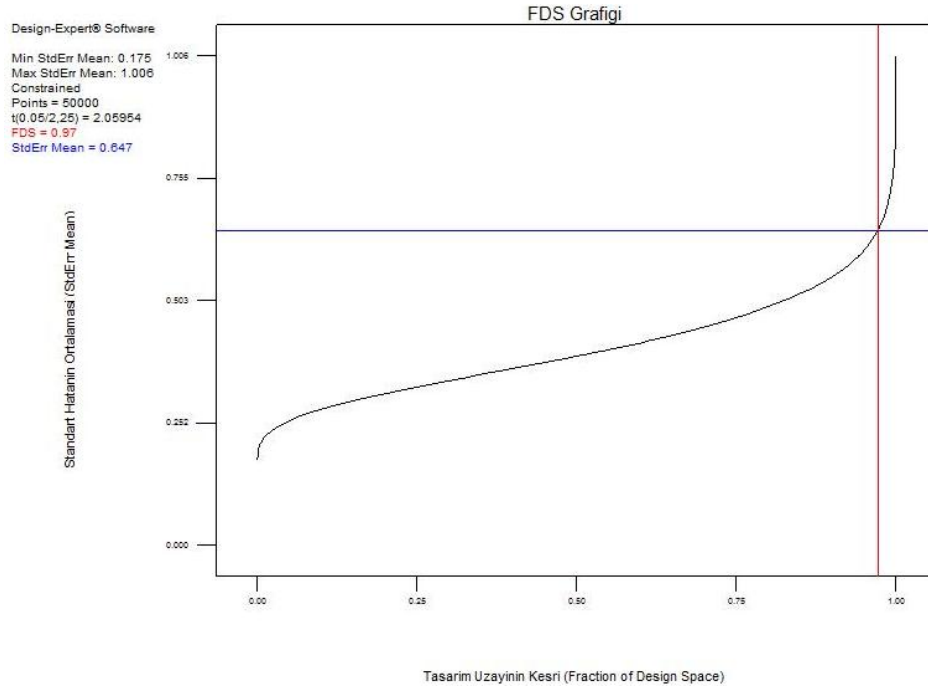


Şekil 4.2 KSDT Çalışması için Tasarım Uzayının Kesri (FDS) – Fark Tipi Hata

Diğer taraftan eğer amaç optimum bir model elde etmek ise, Ortalama (Mean) tipi hata kullanılabilir. Bu hata tipi beklenen değerlerin standart hatası demektir. Yani seçilmiş bir model kullanılarak yapılan kestirimle elde edilen ortalama çıktı değerinin değişkenliği demektir. Bu tip hatada d parametresi gerçek ortalama değer için güven aralığının “yarı aralığı”nı göstermektedir. Daha büyük bir FDS’e sebep olacak olan daha geniş bir “yarı aralığı” önemli (significant) olarak tespit etmek daha kolaydır.

Şekil 4.3’te Ortalama tipi hatanın kullanıldığı bir FDS grafiği gösterilmektedir. Bu grafikten de görülebileceği üzere standart hataların ortalamasının minimum değeri 0.175 ve maksimum değeri 1.006’dır ve çalışma 50000 çift kısıtlı deney noktası için

gerçekleştirilmiştir. $\alpha = 0.05$ değeri için t değeri 2 civarında olup, alfa değeri azaldıkça artmaktadır. Cevap değişkeninde $d = 2$ birimlik bir farklılık görmek için, 1.5'lik bir standart sapma (s) değerinde, 4/3'lük bir Sinyal/Gürültü oranı seçelim. Deney uzayının kesri, 1.5'lik bir standart sapmada, gerçek ortalama değerinin %97'sini tahmin etmeye muktedirdir. FDS grafiği üzerinde bu nokta (x-eksenini dik kesen doğru) ve noktaya karşılık gelen farkların standart hata değeri (y-eksenini dik kesen doğru) görülmektedir. Deney uzayının kesir değeri (FDS) grafikte 0.97 olarak; bu değere karşılık oluşan ortalamaların standart hata değeri de 0.647 olarak gösterilmiştir. Özol-Godfrey (2004), KDT'lerde ve TYY'lerde tasarımın dayanıklılığının bir ölçüsü olarak kullanılan FDS grafikleri ve KDT'lerde kullanımlarıyla ilişkili ayrıntılı bilgiler vermiştir.



Şekil 4.3 KSDT Çalışması için Tasarım Uzayının Kesri (FDS) – Ortalama Tipi Hata

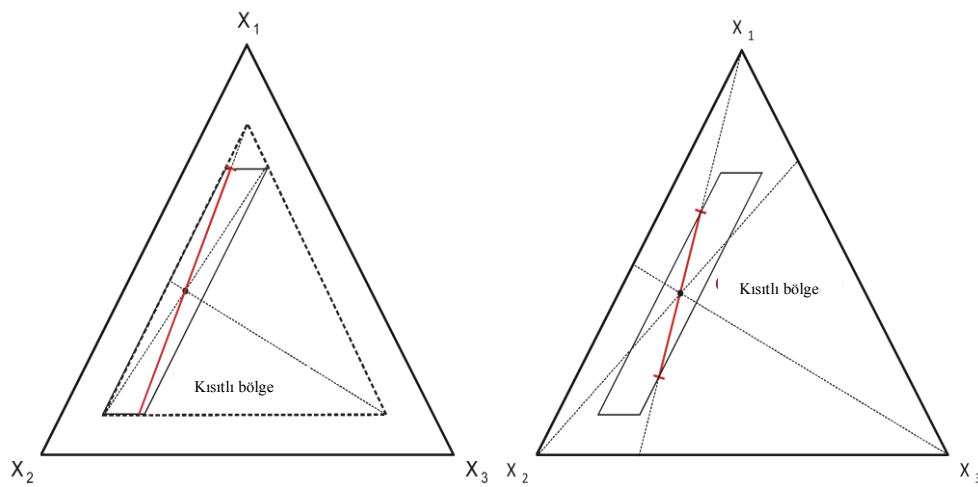
4.4.5.2 İz (Trace) Grafikleri

TYY ve faktöriyel DT'lerde duyarlılık (perturbation) grafikleri olarak da adlandırılan iz grafikleri, tasarım uzayındaki tüm bileşenleri karşılaştırmakta kullanılabilir. Bu grafiklerdeki eğriler, diğer tüm bileşenler sabit tutulurken bir karışım bileşenini değiştirince ortaya çıkacak etkiyi göstermektedir. Tasarımın değerlendirilmesinde bu grafikler, bir referans karışım noktasından ilgili bileşenin tepe noktasına (1.0) doğru

çıkarken oluşacak standart hata değerlerini gösterir şekilde çizilir. Genellikle varsayılan referans karışımı, tasarımın merkez noktasıdır. İlgili bileşenin miktarı arttıkça, diğer bileşenlerin değerleri azalır. Fakat ilgili bileşen dışında kalanların birbirlerine oranları hep sabit kalır.

3-bileşenli bir simpleks biçimli KDT'yi örnek alırsak, B bileşenine bağlı standart hata izi bu bileşenin değeri merkez noktadan ($A= 1/3, B= 1/3, C= 1/3$) tepe değerine doğru (0.0, 1.0, 0.0) artarken çizilebilir. Bu durumda B'nin değeri artarken; A ve C'nin değerleri azalır, fakat ikisinin birbirlerine oranları hep sabit kalır.

İz grafikleri Piepel doğrultusu ya da Cox doğrultusu kullanılarak çizilebilir. Ayrıca DE yazılımında dikey (orthogonal) doğrultuları kullanarak da iz grafikleri çizilebilir. Fakat bu doğrultu kullanılarak çizilen iz grafikleri sadece simpleks biçimli yüzeyler için anlamlı sonuçlar üretmektedir. Bu çalışmada simpleks yüzeyli bir KDT oluşmadığı için bu iz grafiği kullanılmayacaktır. Ayrıca Cox ve Piepel doğrultuları kullanılarak elde edilen iz grafikleri KDT'ler açısından daha gerçekçi sonuçlar üretmektedir (Statease Inc., 2008). Piepel doğrultusu için iz grafikleri sözde-bileşen değerlerini kullanırken; Cox doğrultusu için bileşenlerin gerçek değerlerini kullanır. Şekil 4.4'te kısıtlar tarafından sınırlandırılmış tasarım bölgesi için Piepel ve Cox doğrultuları görülmektedir. Şekilden de anlaşılacağı üzere Cox doğrultuları simpleksin tamamı için söz konusu iken Piepel doğrultuları sözde-bileşen dönüşümü sonucu oluşan yine simpleks biçimli küçük üçgen (kesikli çizgilerle belirtilen) için geçerlidir. Ayrıca Cox doğrultusu için Şekil 3.25 ve ilgili metne başvurulabilir



Şekil 4.4 Kısıtlı Bölgeler için Piepel (sol) ve Cox (sağ) Doğrultuları (Statease Inc., 2008)

Herhangi bir Piepel doğrultusu boyunca ilgili bileşen hariç diğer tüm bileşenlerin değiştirilebilir miktarlarının oranları sabit tutulurken; yine herhangi bir Cox doğrultusu boyunca ilgili bileşen hariç diğer tüm bileşenlerin birbirine oranları sabittir. Görüldüğü gibi Piepel doğrultusu için yukarıda verilen ifade çok net anlaşılammaktadır. Bunu daha açık ifade edebilmek için eşitlik 4.5'i kullanabiliriz.

$$\text{Oran} = \frac{\frac{x_2 - A_{x_2}}{\bar{U}_{x_2} - A_{x_2}}}{\frac{x_3 - A_{x_3}}{\bar{U}_{x_3} - A_{x_3}}} = \text{Sabit} \quad (4.5)$$

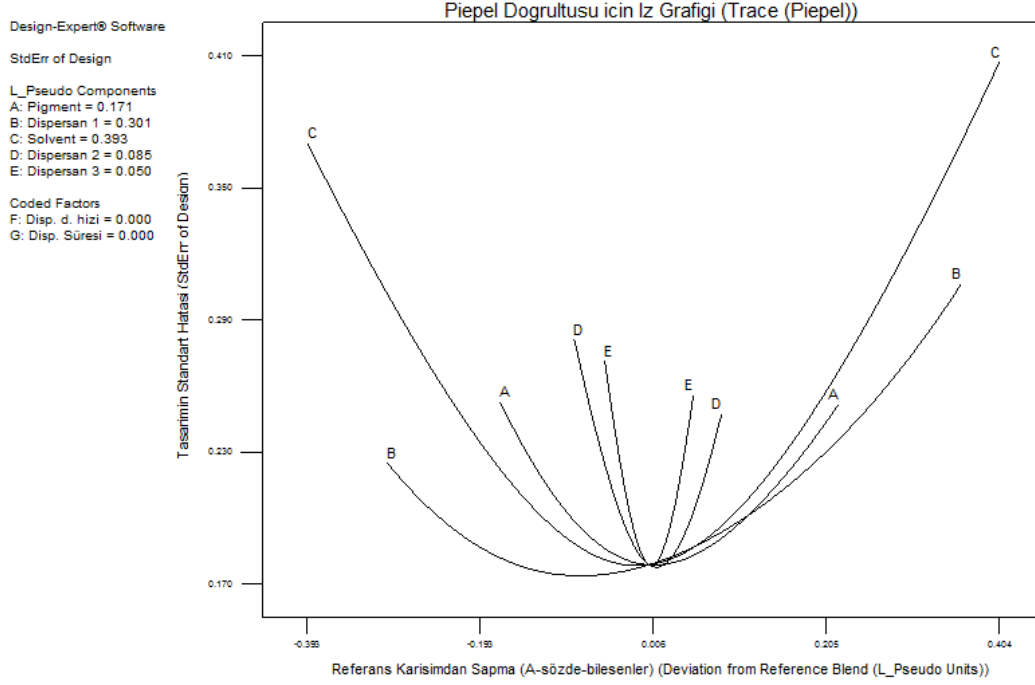
Bu eşitlikte x_1 bileşenine ait Piepel doğrultusu boyunca hareket edilirse uç noktalara doğru gidildikçe doğrultu üzerindeki her noktada diğer iki bileşen için sabit bir oran elde edilir.

İz grafiklerinin x-eksenleri için hem referans karışımından ne kadar uzakta olduğunu gösteren delta (fark) birimleri, hem de sözde-bileşenlerin değişim aralıkları (range) kullanılabilir. Şekil 4.5'te Piepel doğrultusu için delta birimlerinin kullanıldığı iz grafiği verilmiştir. Bu grafikte değişim aralığı en geniş olan C bileşeninin eğrisi en geniş değişim aralığına sahiptir ve değişim aralığı daha küçük olan bileşenler (D ve E) den sonra standart hataya en duyarlı bileşendir. Beklendiği üzere dar değişim aralıklı D ve E bileşenlerindeki değişim standart hataya çok hızlı değiştirmektedir. Şekil 4.6'da ise Cox doğrultusunun kullanıldığı iz grafiği verilmiştir. Bu grafiğin Şekil 4.5'tekinden en önemli farkı aynı bileşenler (farklı x-ekseni değerleriyle) kullanılmasına rağmen standart hatanın daha büyük olmasıdır. Ayrıca Cox doğrultusu için iz grafiğinin x-ekseninin değişim aralığı daha dardır. Buna rağmen tahmin edilen standart hata değerlerinin daha büyük olduğu söylenebilir.

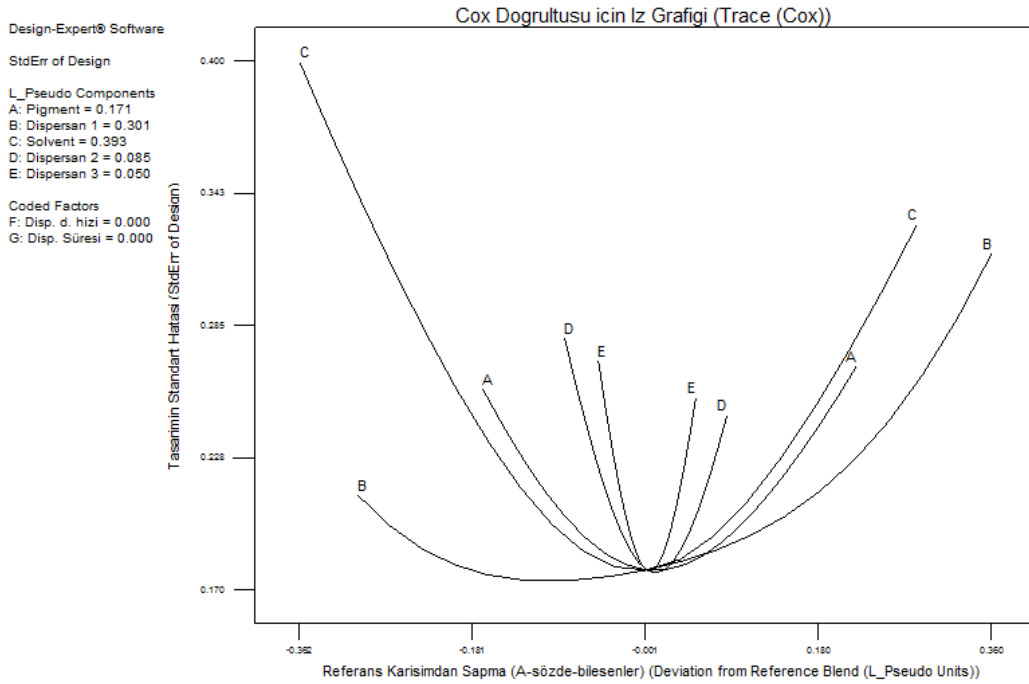
Diğer taraftan Cox doğrultusu için iz grafikleri çizildiğinde, gerçek bileşen oranları kullanıldığı için, dar değişim aralıklı bileşenler için eğriler kısa olmaktadır, yani kısa değişim aralığının uç noktalarında kesilmektedir. Bu durum Şekil 4.4 Piepel ve Cox x_1 bileşeni için karşılaştırıldığında da görülebilir. Birçok DT uzmanı ilgili bileşen dışında kalan diğer bileşenlerin sabitliğinin bu noktadan sonra korunamayacağını tartışmaktadır (Statease Inc., 2008). Bundan dolayı, Cox doğrultusu için iz grafikleri çok dar değişim aralıklı bileşenlerin olduğu sistemlerde sağlıklı sonuçlar vermemektedir.

Çalışmamızda D ve E bileşenleri görece olarak çok dar değişim aralıklarına sahiptir ve aynı sorun bu çalışma için de geçerlidir. Sonuç olarak, Piepel doğrultusu için iz grafikleri bileşenler için daha geniş değişim aralıkları sunduğu için, kısıtlı KDT'lerde en anlamlı iz grafiklerdir. Bununla beraber, bu tür grafikler tek-boyutlu eğri(ler) boyunca bileşen

oranlarındaki deęişimin etkisini göstermektedir. Bunların yerine 2-boyutlu (eş-yükselti) ya da 3-boyutlu TYY grafiklerinin kullanılması daha kolay ve elverişlidir.



Şekil 4.5 Piepel Doğrultusu için İz Grafikleri - KSDT Çalışması



Şekil 4.6 Cox Doğrultusu için İz Grafikleri - KSDT Çalışması.

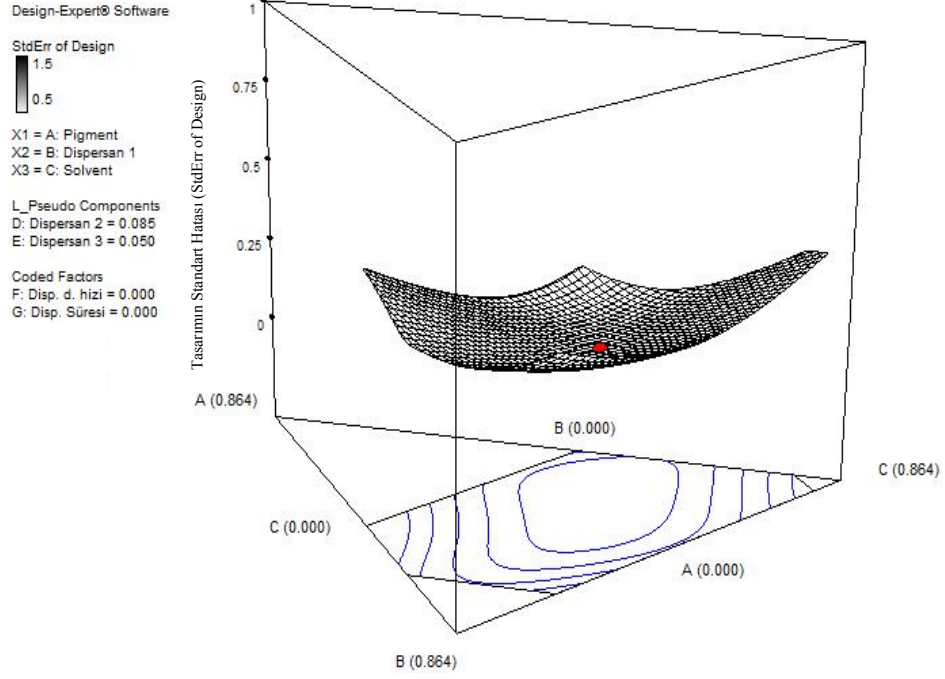
4.4.5.3 Tasarımın Standart Hata Grafiği

Bu tür grafikler de (eş-yükselti ya da 3-boyutlu TYY grafikleri) tasarım uzayında oluşturulan tasarım bölgeleri için kestirimin standart hata değerini göstermektedir. Ortalamanın standart hata grafiği tahmin edilen cevaptaki hatanın, tasarım uzayında nasıl değiştiğini gösterir. Bu durum deney noktası sayısına, konumuna ve ANOVA tablosundan elde edilecek olan artıkların standart hata değerine bağlıdır. Fakat tasarımın başlangıcında, yani değerlendirme aşamasında, elimizde standart hata değerine dair hiçbir bilgi bulunmadığı için 1.0'lık bir standart sapma değeri kullanılarak hesaplamalar yapılır.

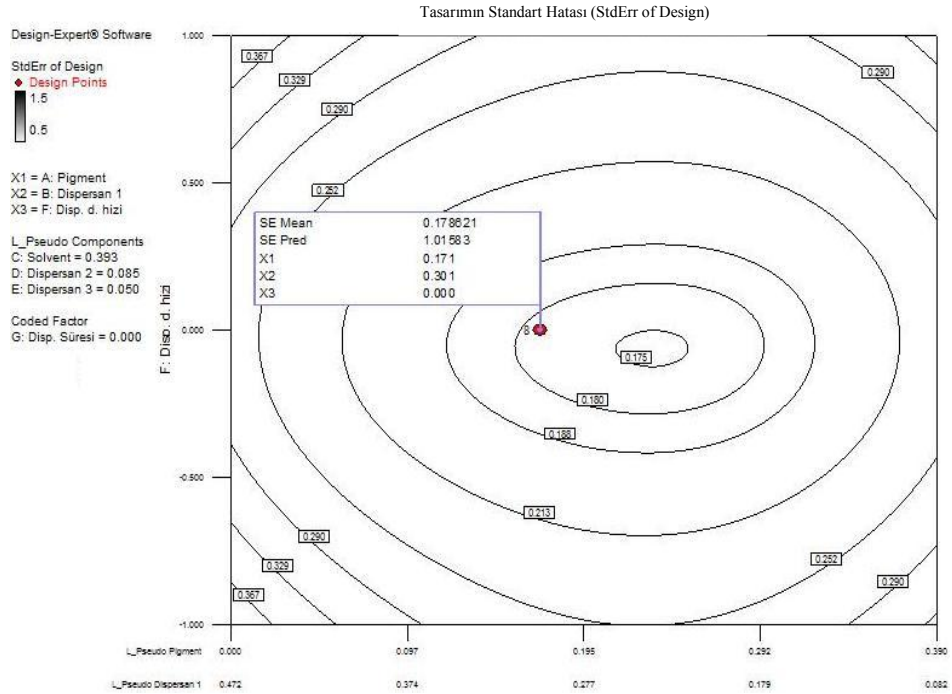
Veri analizinden sonra elde edilen sigma değeri (standart hata/sapma) ise, bu durumda bir çarpan gibi davranır (Statease Inc., 2008). Örneğin, artıkların ortalamasının karesinden (mean square residual) tahmin edilen sigma değeri 2.0 ise, daha önce 1.0'lık bir sigma değeri kullanılarak hesaplanmış olan 0.3'lük eş-yükselti ya da standart hatanın ortalama değeri yeni durumda $0.3 \times 2.0 = 0.6$ olacaktır.

Genellikle bu tür grafiklerin tasarım bölgesi boyunca düşük standart hata değerlerine sahip olması istenir. Burada düşük ile kastedilen değer 1.0 veya daha düşük değerlerdir (Statease Inc., 2008). Şekil 4.7'de 3 karışım bileşeninin tepe noktalarını oluşturduğu standart hata grafiği görülmektedir. Burada D ve E karışım bileşenleri ve F, G süreç değişkenleri sabit tutulmuştur. Süreç değişkenleri için görülen 0.000 değerleri bu değişkenlerin kodlanmış ortalama değerleridir. Şekil 4.7'den görüldüğü üzere ortalama standart hata değeri 0.20'ler civarındadır.

Şekil 4.8'de ise, bir adet süreç değişkeninin (y-ekseni) ve iki adet karışım bileşeninin (x-ekseni) kullanıldığı eş-yükselti eğrisi grafiği verilmiştir. Eş-yükselti eğrileri tahmin edilen değere karşılık gelen standart hata değerini gösterir. 3-boyutlu gösterimde olduğu gibi bu grafikte de bir deney noktası (reel değeriyle) yer almaktadır. Bu nokta için oluşturulan gösterge de hem koordinat bileşenlerinin değerleri hem de ortalama standart hata değeri (0.178) ve kestirilen standart hata değeri (1.016) yer almaktadır. Göstergede süreç değişkeninin değerinin ortalama olması dikkat çekicidir.



Şekil 4.7 KSDT Çalışması için Tasarımın Standart Hata Grafiği – 3-boyutlu gösterim.



Şekil 4.8 KSDT Çalışması için Tasarımın Standart Hata Grafiği – Eş-yükselteli gösterim.

4.5 Deney Tasarımının Analizi

DT'lerin en temel amacı, istatistikî analiz yöntemlerini kullanarak, ölçülen cevap verileri üzerinde bileşen ya da faktör etki/etkileşimlerinin niteliğini ortaya çıkaracak matematik modeller oluşturmaktır. Bu tür matematik modellemeler istatistikî model oluşturma olarak ta adlandırılmaktadır. Sonrasında bu istatistikî modellerin parametre optimizasyonları gerçekleştirilip optimum reçeteler elde edilebilmektedir. Ayrıca bu tür modeller yardımıyla bileşen ya da süreç değişkenlerinin ürün performansları üzerindeki etkileri kolaylıkla izlenebilir. Burada şu önemli noktanın altını tekrar çizmekte fayda vardır. Hiçbir deneysel matematik model deney değişkenlerinin aralıkları dışında (deney tasarımı uzayı dışında) sağlıklı sonuçlar vermezler ve bu tür modellerle yapılan ekstrapolasyonlar da anlamsız sonuçlar üretir. Bu kısımda elde edilen bu cevap değişkenlerinin değerleri öngördüğümüz veya önerilen/uygun modele uydurulmaya çalışılacak ve modelin detaylı istatistikî analizleri gerçekleştirilecektir.

Tasarımın hazırlık ve değerlendirme aşamalarından sonra oluşturulan 50 adet deney noktası (deneme) beş gün içinde gerçekleştirilip, her bir deneyin ardından gerekli ölçümler gerçekleştirilmiştir. Viskozite cevap değişkeninin ölçümü için ürünün piyasadaki kullanım şekli ve üründe kullanılan pigmentin doğasından kaynaklanan viskozite ölçüm sorununu kısmen gidermek için Krebs-Stormer tipi viskozimetre kullanılmıştır. Zira bu ürün ortalaması nano-boyutta olan (20nm) pigment tanecikleri içermektedir ve bu pigment kimyasal yapısından dolayı veya üretim yönteminden kaynaklandığı düşünülen yoğun elektrostatik yük ihtiva etmektedir. Aynı kimyasal yapıya sahip farklı pigment ile karşılaştırıldığında elektrostatik yük sorunu gözlenmemiştir. Dolayısıyla sorun büyük ihtimalle üretim sürecinden kaynaklanmaktadır. Ayrıca söz konusu pigmentin kullanıldığı muadil ürünler incelendiğinde viskozite davranışının kesme şiddetinin yanı sıra zamana bağımlı olduğu (tikotropik) gözlenmiştir. Bu sorun söz konusu çalışmada da ölçüm hassasiyetini ve doğruluğunu büyük ölçüde etkilemiştir. Bu sorunu çözmek adına yapılan Gage R&R çalışmalarında da istenilen sağlıklı netice alınamamıştır. Bütün bunların sonucunda ise bu cevabın matematik modeli çok sağlıklı olarak oluşturulamamıştır.

Daha önce bahsedildiği üzere bu çalışmada toplam üç adet cevap değişkeni kullanılmıştır. Bu bileşenler şunlardır: dE, viskozite ve maliyet. dE renk haslığının bir ölçütü olarak tanımlanır. dE ve viskozite ölçümleri için üçer adet farklı ölçüm örneği hazırlanmış ve bu örnekler eşit koşullarda ölçüme tabi tutulmuştur. Reçete maliyeti değişkeni ise, doğrudan

bileşen oranlarına ve bu bileşenlerin satın alma maliyetlerine bağlı olduğu için, model uyumluluğu ve parametre etkileri için istatistikî analizler burada verilmeyecektir. Bu değişken için model uyumluluğu %100'dür ve ayrıca R^2 değeri de, bekleneceği üzere, 1.00'dir. Çizelge 4.7'de deney noktası tipi, blok tipi ve cevap değişkenlerinin ortalama değerleri verilmiştir.

Çizelge 4.7 KSDT çalışması için cevap değişkenleri

D. Sırası	Bloklar	Deney n. Tipi	dE	Maliyet (€)	Viskozite (KU)
1	1.gün	<Vertex> x Vertex	4,80	3,74	71,00
2	1.gün	<Center> x Center	2,88	4,16	82,70
3	1.gün	<Interior> x Center	3,83	3,88	72,40
4	1.gün	<Center> x Center	2,72	4,16	81,30
5	1.gün	<Vertex> x Vertex	0,55	4,74	108,40
6	1.gün	<Vertex> x Vertex	0,50	5,00	108,30
7	1.gün	<Vertex> x Vertex	4,75	3,49	64,30
8	1.gün	<Vertex> x Vertex	0,47	4,74	110,80
9	1.gün	<Vertex> x Vertex	0,40	4,70	117,90
10	1.gün	<Vertex> x Vertex	0,32	4,96	132,80
11	2.gün	<Vertex> x Vertex	0,58	4,74	105,40
12	2.gün	<Vertex> x Vertex	4,82	3,74	65,90
13	2.gün	<Vertex> x Vertex	0,24	5,00	109,00
14	2.gün	<Vertex> x Vertex	0,36	4,70	117,80
15	2.gün	<CentEdge> x CentEdge	4,57	3,61	65,20
16	2.gün	<Center> x Center	2,99	4,16	83,80
17	2.gün	<Vertex> x Vertex	4,06	4,07	93,60
18	2.gün	<Vertex> x Vertex	0,42	4,74	105,50
19	2.gün	<Center> x Center	2,86	4,16	82,30
20	2.gün	<Vertex> x Vertex	0,37	4,67	99,40
21	3.gün	<Vertex> x CentEdge	4,63	3,74	66,80
22	3.gün	<Center> x Center	2,79	4,16	84,70
23	3.gün	<Vertex> x CentEdge	0,45	4,98	137,80
24	3.gün	<Vertex> x Vertex	0,64	4,74	107,40
25	3.gün	<CentEdge> x Vertex	3,69	3,77	67,80
26	3.gün	<Vertex> x Vertex	5,21	3,49	65,90
27	3.gün	<Vertex> x Vertex	0,42	4,74	105,80
28	3.gün	<Vertex> x Vertex	0,44	4,74	105,20
29	3.gün	<Vertex> x Vertex	0,47	4,70	119,20
30	3.gün	<Vertex> x CentEdge	3,94	4,07	97,90
31	4.gün	<Vertex> x Vertex	5,38	3,74	126,00
32	4.gün	<Vertex> x Vertex	0,28	5,00	109,00
33	4.gün	<Vertex> x Vertex	0,35	4,67	100,80
34	4.gün	<Vertex> x Vertex	0,43	4,74	100,50
35	4.gün	<Vertex> x Vertex	0,36	4,70	117,40
36	4.gün	<Vertex> x Vertex	4,64	3,74	70,10
37	4.gün	<Vertex> x AxialCB	3,89	4,07	95,50
38	4.gün	<Vertex> x Vertex	5,24	3,49	68,10
39	4.gün	<Vertex> x Vertex	0,29	4,70	119,80
40	4.gün	<Vertex> x Vertex	0,44	4,70	117,40
41	5.gün	<Vertex> x Vertex	0,61	4,67	102,10
42	5.gün	<Center> x Center	2,79	4,16	84,50
43	5.gün	<Center> x Center	3,01	4,16	83,00
44	5.gün	<Vertex> x Vertex	0,45	4,96	134,20
45	5.gün	<Vertex> x Vertex	4,97	3,85	87,10
46	5.gün	<Vertex> x Vertex	4,94	3,85	86,80
47	5.gün	<Vertex> x Vertex	4,96	3,49	66,10
48	5.gün	<Center> x Center	2,87	4,16	84,40
49	5.gün	<Vertex> x Vertex	5,20	3,49	65,20
50	5.gün	<Vertex> x Vertex	0,52	4,67	101,10

4.5.1 Model Analizleri

Cevap değişkenleri için model öngörüsü yapıldıktan ve cevap değişkenlerinin ölçümü gerçekleştirildikten sonra yapılması gereken ilk iş, kullanılan parametrelerin/terimlerin (bileşenler, süreç değişkenleri ve bunların kendi aralarında ve çapraz etkileşim etkileri) hangilerinin etkili olduğunun tespitidir. Bu tür istatistikî analizlerde çoğunlukla regresyon yöntemleri kullanılmaktadır. Daha öncede belirtildiği üzere DT alanında kullanılan birçok regresyon yöntemi vardır. KDT'lerde ise, genellikle SEK (sıradan en küçük kareler) tipi regresyon yöntemi kullanılmaktadır. SEK yönteminin temel kullanım amacı, eşitlik 4.5 ile verilen artıkların kareler toplamı (residual sum of squares) değerini minimum yapan “tek-adımlık” tahminler yapıp, belirlenmiş bir model için eşitlik 4.6'da (Eşitlik 3.20) matris biçiminde verilen parametre tahminlerini (kestirim değerlerini) bulmaktır. Eşitlik 4.5'teki y_i değeri gözlemlenen ya da ölçülen cevap değerini, \hat{y}_i ise tahmin edilen cevap değerini göstermektedir.

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (4.5)$$

$$\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y} \quad (4.6)$$

Değişkenlerin hiçbirinin model üzerinde etkisinin bulunmadığı modeller sabit (null) model olarak adlandırılmaktadır. KDT'lerde bu modellerin anlamı, bileşenlerin oranlarının değişiminin cevap üzerinde etkisiz olmasıdır. Yani, doğrusal kestiricilerin hepsinin birbirine eşit olması ($\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \dots = \beta_q$) demektir. Bu tek terim β_0 ile gösterilirse, eşitlik 4.7'deki gibi bir model elde edilir:

$$E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i = \beta_0 \sum_{i=1}^q x_i = \beta_0 \quad (4.7)$$

Burada β_0 en küçük kareler tahmin edicisi, cevap değişkeninin ortalama değeri \bar{y} 'ye eşittir. Sabit modelde $\hat{y}_i = \bar{y}$ 'dir ve dolayısıyla minimum olması arzulanan $\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$ denklemi eşitlik (4.8)'e dönüşür:

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \quad (4.8)$$

Bu denklem *düzeltilmiş tam kareler toplamı* (the corrected total sum of squares) olarak adlandırılır. Düzeltilmiş olarak adlandırılmasının sebebi, y_i değerlerinin değişkenliklerinin ortalama değere göre ölçülmesidir. Bu durum Scheffé tipi KDT modelleri için her zaman

geçerlidir. Gözlenen ya da ölçülen değerin ortalamadan farkını aşağıdaki gibi gösterirsek, artıkların karelerinin toplamı olan eşitlik (4.5) te aşağıdaki gibi hesaplanabilir:

$$y_i - \bar{y} = (y_i - \hat{y}_i) + (\hat{y}_i - \bar{y})$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 &= \sum_{i=1}^n [(y_i - \hat{y}_i) + (\hat{y}_i - \bar{y})]^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)(\hat{y}_i - \bar{y}) + \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \end{aligned}$$

Ortadaki terim şu şekilde yazılırsa,

$$2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)(\hat{y}_i - \bar{y}) = 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \hat{y}_i - 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \bar{y} = 2 \sum_{i=1}^n \hat{y}_i e_i - 2\bar{y} \sum_{i=1}^n e_i \quad (4.9)$$

Eşitlik (4.9) elde edilir ve şöyle yorumlanır: Değişkenlik ortalama cevap değişkeni değerine göre ölçülürken, SEK kumlanılarak uydurulmuş olan modellerin bir özelliği olarak, uydurulmuş (kestirilen) ilgili cevap değişkeni değerleriyle ağırlıklandırılmış olan artıkların toplamı (Eşitlik (4.9)'da en sağdaki ilk toplam terimi) ve salt artıkların toplamı (Eşitlik 4.9'da en sağdaki ikinci toplam terimi) sıfıra eşittir (Draper ve Smith, 1998). Dolayısıyla tam kare toplamı açılımının ortanca terimi yok olur ve artıkların kareleri toplamı eşitlik 4.10'daki gibi olur.

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \quad (4.10)$$

Eşitlik (4.9)'daki e_i , i . bileşen için ölçülen cevap değeri y_i ile, bu cevabın kestirim değeri olan \hat{y}_i arasındaki farkı, yani artık değeri (residual) göstermektedir ($e_i = y_i - \hat{y}_i$ – eşitlik 3.14) ve kavramsal hata olarak ta bilinen ve i . ölçüm için ölçülen y_i değeri ile, aynı ölçüm için beklenti fonksiyonunun değeri olan $E(y_i)$ arasındaki fark olarak tanımlanan ε_i ile karıştırılmamalıdır ($\varepsilon_i = y_i - E(y_i)$). Zira bu sonuncusu modele eşlik eden gürültü (disturbance) terimi olup, gerçekte ölçümlerin hiçbir zaman modele tam olarak uyamayacağını göstergesi olarak kullanılır (Cornell, 2002).

Eşitlik (4.10)'u aşağıdaki gibi göstermek genel kabul görmektedir:

$$SST = SSE + SSR \quad (4.11)$$

Fakat literatürde $SST = SSR + SSE$ biçimindeki gösterim daha çok kabul görmektedir. Burada SST düzeltilmiş tam kareler toplamını; SSR regresyonun ya da modelin kareler toplamını; SSE ise, hataların ya da artıkların kareler toplamını göstermektedir. Eşitlik

4.11'deki ifade toplam deęişkenlięin model tarafından açıklanabilen deęişkenlik ve rastsal deęişkenlik arasında üleştirmek olarak da nitelendirilebilir (Smith, 2005).

Bilimsel araştırmalarda ve DT çalışmalarında kullanılan regresyon yöntemlerine ait regresyon modelleri şöyle sıralanabilir:

1. Tam regresyon modelleri: Bu tür modellerde tüm bloklar ve aday noktaları, modele katkılarına bakılmaksızın, uydurulmaya çalışılır.
2. Adımsal regresyon modelleri: Üç temel tipte gruplandırılabilir
 - a. İleri yer deęiştirmeli seçim yöntemi (forward selection with replacement – stepwise regression ya da stepwise selection olarak ta adlandırılır): Her adımda bir faktör ya da parametre eklenir, çıkarılır ya da yer deęiştirilir.
 - b. Geri elemeli seçim yöntemi (Backward elimination): Her seferinde bir parametre elenir
 - c. İleri eklemeli seçim yöntemi (Forward elimination): Her seferinde bir parametre eklenir.

İyi tasarlanmış, minimum eş-doęrusallık içeren bir deneyde, genellikle, her üç adımsal regresyon modelinin aynı indirgenmiş modeli vermesi beklenir. Fakat eęer bazı deney noktaları için sağlıklı cevap verisi elde edilememişse, farklı adımlar farklı sonuçlar üretmektedir. KDT'ler açısından bakıldığında geri elemeli seçim yöntemi en dayanıklı (robust) yöntemdir (Smith, 2002; Statease Inc., 2008). Yaptığımız çalışmalar da bu yargıyı destekler nitelikte sonuçlar vermiştir. Zira bu yöntemde başlangıçta bütün terimlere modelde yer alma şansı verilmektedir. Oysa ileri eklemeli seçim yönteminde minimum terimli çekirdek model ile yola çıkılmaktadır ve bu durum KDT'lerin doğasından kaynaklanan terimler arası etkileşimlere (collinearities) baęlı p-deęeri deęişimlerini dikkate almamaktadır. Çünkü modele terim eklenmesi ya da çıkarılması esnasında birçok terimin p-deęeri de bu işleme baęlı olarak deęişmektedir. Sonuç olarak a ve c yöntemleri, birçok durumda, KDT'ler için sağlıklı sonuçlar üretememektedir.

Geridelemeli seçim yöntemi adımsal regresyona çok benzer sonuçlar üretmektedir. Bu yöntemin seçim algoritması şu şekilde ifade edilebilir. Öncelikle bütün blok deęişkenleri ve zorunlu terimler (örneğin, ürün bileşenleri) dikkate alınır. Sonrasında kalan aday terimler göz önüne alınır. Algoritma kısaca şöyledir:

1. Bir α deęeri belirle (alpha out),
2. Bütün terimleri içeren modelle başla,

3. En yüksek kısmî olasılık değerli (p-değeri) terimi ele,
4. Bir sonraki terimin p değeri alfa değerinden küçük ise dur.
5. Sonuçta, mecburi terimler, bloklar ve alfa değerinden daha küçük kısmi olasılık değerine sahip terimler modeli oluşturur.

4.5.1.1 dE için Model Oluşturma

KSDT için kullanılan DE yazılımı model uydurma ve regresyonlar için, yani model katsayılarının hesaplanmasında, tasarım matrisi (\mathbf{X}) üzerinde QR ayrıştırma algoritmasını (QR decomposition algorithm) kullanmaktadır (Statease Inc., 2007; 2008). Sayısal kararsızlıklar ve kesme hatalarından kaçınmak için bütün hesapları tasarım matrisinin standartlaştırılmış biçimleri üzerinden yürütmektedir. DE yazılımı ilgili cevap değişkeni için birçok çokterimli modelin regresyon hesabını yapmaktadır. Bu hesaba modellerin ardışık kareler toplamı (the sequential model sum of squares) denir. Ardışık kareler toplamı tip 1 kareler toplamı olarak ta bilinir. Burada hiçbir satır tam modelin “tam verisini” temsil etmemektedir. Her bir satırda modele eklenen terimler ve bu terimlerin etkileri gösterilmektedir. Bu tablo ANOVA tablosuna çok benzemesine rağmen, ANOVA tabloları çok daha model bağımlı olup kısmî kareler toplamlarını (partial sum of squares) özetlemektedir. Çizelge 4.8, renk haslığı (dE) cevap değişkeninin $\lambda = 0.82$ 'lik Box-Cox üstel dönüşümünün ((dE)^{0.82}) model uyumluluğu tablosunu göstermektedir. Burada ürün bileşenleri A-sözde-bileşen biçiminde verilmiş olup önerilen model (karışımxsüreç) *doğrusal x 2FI* biçimindedir. Ek-1 Çizelge E.1'de ise, dE cevap değişkeni için doğal logaritma dönüşümü (ln(dE)) uygulanmış modelin özet uyum tablosu verilmiştir.

Çizelge 4.8 (dE)^{0.82} cevap değişkeni için çokterimli modellerin model uyumu özet tablosu.

Modelin Derecesi		Ardışık p-değeri		İstatistikî Özet			
Karışım	Süreç	Karışım	Süreç	Model Uyumsuzluğu Değeri (Lack-of-Fit Value)	Ayarlı R ² (Adjusted R ²)	Kestirilen R ² (Predicted R ²)	Modelin Durumu
M	M						
M	L		0.9459	< 0.0001	-0.0438	-0.3698	
M	2FI		0.7832	< 0.0001	-0.0667	-0.4448	
M	Q		0.0325	< 0.0001	0.0563	-0.2646	
M	C	*	* 0.9568	< 0.0001	-0.0117		Eşlenmiş (Aliased)
M	M						
L	M	< 0.0001		0.1155	0.9951	0,9932	
L	L	< 0.0001	0.0012	0.5037	0.9972	0,9939	
<u>L</u>	<u>2FI</u>	<u>< 0.0001</u>	<u>0.0216</u>	<u>0.8271</u>	<u>0.9980</u>	<u>0,9956</u>	<u>Önerilen</u>
L	Q	* < 0.0001	* 0.3632	0.9044	0.9981		Eşlenmiş
L	C	* < 0.0001	*	0.9044	0.9981		Eşlenmiş
L	M						

Çizelge 4.8'in devamı

Q	M	* 0.9118	*	0.0654	0.9944	Eşlenmiş
Q	L	* 0.6480	* 0.0170	0.3632	0.9970	Eşlenmiş
Q	2FI	* 0.8236	* 0.2218	0.5373	0.9974	Eşlenmiş
Q	Q	* 0.9682	* 0.5995	0.3994	0.9973	Eşlenmiş
Q	C	* 0.9682	*	0.3994	0.9973	Eşlenmiş
Q	M					
SC	M	*	*	0.0654	0.9944	Eşlenmiş
SC	L	*	* 0.0170	0.3632	0.9970	Eşlenmiş
SC	2FI	*	* 0.2218	0.5373	0.9974	Eşlenmiş
SC	Q	*	* 0.5995	0.3994	0.9973	Eşlenmiş
SC	C	*	*	0.3994	0.9973	Eşlenmiş
SC	M					
C	M	*	*	0.0654	0.9944	Eşlenmiş
C	L	*	* 0.0170	0.3632	0.9970	Eşlenmiş
C	2FI	*	* 0.2218	0.5373	0.9974	Eşlenmiş
C	Q	*	* 0.5995	0.3994	0.9973	Eşlenmiş
C	C	*	*	0.3994	0.9973	Eşlenmiş

*Çaprazlanmış modelin eşlenmiş (aliased) olduğunu gösterir; M = Ortalama L = Doğrusal Q = Karesel SC = Özel Kübik C = Kübik 2FI = 2 faktör etkileşimi

Çizelgedeki ilk iki sütun tüm ürün bileşenleri ve süreç değişkenleri için model seçimlerini göstermektedir. Tablonun son sütunu ilgili modelin terimlerinin kendi içinde çakışıp çakışmadığını (eşdeşliğini/eşlenmişliğini) gösterir. Eşdeşlik istenmeyen bir durumdur ve tüm model katsayılarını tahmin edecek yeterli sayıda özgü (münhasır) deney noktasının bulunmamasından kaynaklanır. Çünkü eşlenikliğin söz konusu olduğu durumlarda en küçük kareler tahminleri münhasır olmayacaktır. Bu durum eş-yükselteli yüzeylerde anlamsız şekillerin oluşmasına sebep olabilmektedir (Goupy, 2000). Ayrıca eşlenmiş modeller cevap değişkenlerinin tahmininde kullanılamazlar.

Üçüncü ve dördüncü sütunlar ise, bu modellerin F-testi ışığında oluşan ardışık p-değerlerini (Probability > F-values) göstermektedir. F-testi, aynı adlı olasılık dağılımını kullanarak değişkenlikleri karşılaştırmakta kullanılır. Bu test için değişkenlikler birbirine oranlanır. Eğer değişkenlikler birbirine eşit olursa F-değeri 1.0 olacak ve yüksek bir p-değeri oluşacaktır ($p > 0.1$). Daha açık ifade etmek gerekirse, F-değeri model tarafından açıklanabilen değişkenlik ile model tarafından açıklanamayan ortalama değişkenlikleri karşılaştırır. Oran, yani F-değeri, ne kadar büyük ise modelin açıkladığı değişkenlik o kadar büyüktür.

Eşitlik 4.12'deki değişkenliklerin analizinde (ANOVA) kullanılan F-değeri, regresyon ya da terimlerin kareler ortalamasının ($\text{mean squares}_{\text{terms}}$) artıkların kareler ortalamasına ($\text{mean squares}_{\text{residuals}}$) bölünmesi ile elde edilir. Kareler ortalamaları ise ilgili ardışık kareler toplamının, yine ilgili serbestlik derecesine bölünmesiyle elde edilir.

$$F = \frac{\frac{SS_{\text{terimler}}}{df_1}}{\frac{SS_{\text{artıklar}}}{df_2}} = \frac{MS_{\text{terimler}}}{s^2} \quad (4.12)$$

$\varepsilon_i \sim \text{NID}(0, \sigma^2)$ varsayımı ışığında istatistikî teorem Eşitlik (4.12)'nin bir F dağılımı oluşturacağını ifade eder. Bu eşitlikte df_1 ve df_2 , sırasıyla, pay ve paydadaki ardışık kareler toplamlarının serbestlik derecelerini göstermektedir. İstatistikî olarak F-testi sıfır hipotezinin doğruluğunu test etmekte kullanılır. Eğer sıfır hipotezi H_0 : "Cevap değişkeni modele eklenen terimlerin varlığından veya yokluğundan etkilenmemektedir." biçiminde kurulursa ve bu hipotezi reddetmek mümkün değil ise, F-değeri 1.0'e yakın ya da bu değerden küçük olacaktır. Sonuç olarak hipotez doğru olup, reddedildiğinde alınacak risk, örneğin $\alpha = 0.05$ değerinden, çok daha yüksek olacaktır.

Çizelge 4.8'in 5.sütunu model uyumsuzluğu değerlerini göstermektedir. Bu değer deney tasarımında tekrar edilen noktalar varsa ortaya çıkmaktadır. Aksi takdirde model uyumsuzluğu değeri oluşmamaktadır.

3.bölümde anlatıldığı gibi, deney tasarımındaki noktalar kümesini üç farklı alt kümede toplayabiliriz:

- Model noktaları alt kümesi,
- Model uyumsuzluğu noktaları alt kümesi
- Tekrar noktaları

D-optimum kriteri kullanıldığında bu alt kümelerden öncelikle model noktaları alt kümesi kriterine bağlı olarak seçilir. İkinci olarak model uyumsuzluğu noktaları seçilir. Bu noktalar ise, mesafe-temelli algoritma kullanılarak seçilir. Tekrar noktaları ise, yine D-optimum kriteri kullanılarak seçilir. DE yazılımında tekrar ve model uyumsuzluğu testleri için nokta sayıları için kural, q, KDT'deki bileşen sayısını göstermek üzere, q+1 adet olup en fazla 5'er adet nokta varsayılan olarak kullanılmaktadır. Fakat bu değerler isteğe bağlı olarak değiştirilebilmektedir.

Model uyumsuzluğu testi yardımıyla kullanılan modelin yeterli, yani uygun olup olmadığına karar verilir. Eğer testin sonucu istatistikî olarak anlamlı (significant) ise, daha yüksek dereceli bir modelin kullanılması gerektiği sonucuna varılır (Smith, 2005). Model uyumsuzluğu istenmeyen bir durum olduğu için 0.10'den (DE yazılımında) büyük bir olasılık değeri yani küçük bir F-değeri (probability > F-value) istenilen durumlardır. Eğer modelde 'uyumsuzluk' sorunu varsa, bu model cevap değerlerinin tahmininde kullanılamaz. dE modeli için ve genel olarak ANOVA'nın anlatılacağı bir sonraki alt

kısımda model uyumsuzluğu değerinin nasıl hesaplandığı ayrıntılandırılacaktır. Ayrıca, ayarlı ve kestirilen R^2 değerleri de yine aynı alt bölümde açıklanacaktır.

Çizelge 4.8 incelendiğinde birçok modelin eşlenmiş olduğu için uygun olmadığı ve birçok ilgili değerinin hesaplanmadığı görülebilir. Bu tür çizelgeler ile ilgili üzerinde durulması gereken ölçütleri özetlemek gerekirse: düşük olasılık değerli (p-değeri) süreç ve karışım modelleri, yüksek olasılık değerli model uyumsuzluğu testi sonucu (probability > F-value), yüksek değerli ayarlı ve kestirilen R^2 'ler, bir modelin istenilen model olup olmadığının göstergesi olarak kullanılmaktadır. DE yazılımı uygun değerli modeli önerilen model olarak seçip (altı çizili) sonraki işlem adımında, yani ANOVA'da bunu varsayılan model olarak kullanılmaktadır. Fakat ilgili istatistikî ölçütleri sağlayan daha uygun modeller elde etmek genellikle daha sağlıklı sonuçlar vermektedir.

4.5.1.2 dE için ANOVA

ANOVA bir varsayım testini irdelemek amacıyla herhangi bir veri kümesindeki toplam değişkenliği, ilgili değişkenlik kaynaklarıyla beraber alt-bileşenlerine ayrıştırarak analiz etmeye yarayan bir istatistikî tekniktir (Draper ve Smith, 1998). Bu teknikte anahtar kelime değişkenliktir (variance). Aslında bir kısaltma olan ANOVA, “ANalysis Of VAriance”tan türetilmiş olup, değişkenliklerin analizini gerçekleştirmekte kullanılır. Bu yöntem F-dağılımı üzerine kurulmuştur ve *sıfır hipotezinin doğruluğunu* test etmek için kullanılır. Çizelge 4.9'da (dE)^{0.82} cevap değişkeni için ANOVA tablosu verilmiştir. Bu çizelge Tip III olarak adlandırılan kısmî kareler toplamını ve her bir terime ait F-testi sonucunu göstermektedir.

Çizelge 4.9 (dE)^{0.82} cevap değişkeni için kısmî kareler toplamının ANOVA tablosu

Kaynak	Kareler Toplamı	df	Kareler Ortalaması	F-değeri	p-değeri (Prob. > F)
Bloklar	3.357	4	0.839		
Model	94.500	14	6.750	1571.962	< 0.0001 <i>Etkili</i>
Doğrusal Karışım	94.214	4	23.553	5485.233	< 0.0001
AG	0.040	1	0.040	9.378	0.0045
BF	0.036	1	0.036	8.285	0.0072
BG	0.059	1	0.059	13.826	0.0008
CF	0.102	1	0.102	23.697	< 0.0001
CG	0.012	1	0.012	2.826	0.1028
EF	0.018	1	0.018	4.093	0.0518
EG	0.019	1	0.019	4.365	0.0450
BFG	0.024	1	0.024	5.527	0.0253

Çizelge 4.9'un devamı

CFG	0.042	1	0.042	9.773	0.0038	
EFG	0.021	1	0.021	4.993	0.0328	
Artık	0.133	31	0.004			
Model Uyumsuzluğu	0.076	21	0.004	0.636	0.8171	Etkisiz
Saf Hata	0.057	10	0.006			
Düzeltilmiş Toplam	97.989	49				

Tip III kareler toplamı yöntemi diğer iki yöntemden farklı olarak (Tip I ve Tip II) bir terimin kareler toplamını modeldeki diğer terimlerin her biri için düzelttikten sonra hesaplar. Yani eşitlik 4.13'teki gibi bir model denklemi için Tip III kısmî kareler toplamı işlemi yapılırsa, herhangi bir terimin kareler toplamı $SS(b_1) = SS(b_1 | b_2, b_3, b_{12}, b_{13}, b_{23}, b_{123})$ ve $SS(b_{13}) = SS(b_{13} | b_1, b_2, b_3, b_{12}, b_{23}, b_{123})$ örneklerindeki gibi hesaplanır.

$$\hat{y} = b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3 \quad (4.13)$$

Bu işlem kısaca şöyle açıklanabilir: b_{13} teriminin kareler toplamı hesaplanırken diğer tüm model terimleri modele dâhildir ve b_{13} , modeldeki terimlerin her birine göre ayarlanarak hesaplanmıştır.

Tip I ardışık kareler toplamı hesabında ise, terimler eklendikçe eklenen terimin kareler toplamı eklenen terimden önceki terimlere göre hesaplanır ($SS(b_3) = SS(b_3 | b_1, b_2)$). Diğer taraftan Tip II, klasik kareler toplamını ifade etmektedir. Burada kareler toplamı hesabı eklenen terimi içermeyen terimlere göre yapılır ($SS(b_2) = SS(b_2 | b_1, b_3, b_{13})$). Tip III kareler toplamı ise, en çok kullanılan yöntemdir ve tek dezavantajı dikey olmayan tasarımlarda terimlerin kareler toplamının düzeltilmiş toplama eklenememe ihtimalinin var olmasıdır (Statease Inc.,2008).

F-değerinin KDT'lerdeki kullanımı yukarıda kısmen anlatılmıştı. Burada her bir terim ya da model grubu için incelemekte fayda vardır. İlk olarak Çizelge 4.9'da görülen 1571.96'lık F-değeri modelin çok anlamlı olduğunu ve bu değerin ancak % 0.01'lik bir olasılıkla gürültüden kaynaklanabileceğini ifade eder. Diğer taraftan, 0.64'lük model uyumsuzluğu F-değeri model uyumsuzluğunun olmadığını gösterir. Burada ise bu F-değerinin oluşması % 81.71 olasılıkla gürültüden kaynaklanmaktadır.

Model terimleri için F-değerleri her bir terimin kareler ortalamasının artıkların kareler ortalamasına bölünmesiyle elde edilir. Burada değer 1.0'e ne kadar yakınsa bu terim cevap üzerinde o kadar etkisiz olur. Bu modelde bütün etkisiz terimler geri elemeli adimsal regresyon yöntemiyle yok edildikleri için hemen bütün terimler cevap üzerinde etkilidir.

Bu durumun tek istisnası CG terimidir. Çizelgeden görüleceği üzere F-değeri = 2.826 olup diğer terimlere göre 1.0 değerine daha yakındır. Ayrıca bu terimin p-değeri (0.1028) 0.05'ten çok büyüktür. Normal şartlarda etkisiz bir terim olarak kabul edilmelidir. Ama bu terimi içeren CFG terimi etkili görünmektedir. Öncelikle tecrübelerimiz ve ayrıca terim elemesindeki hiyerarşi ilkesinden dolayı bu terim elenmeden CG terimi elenemez.

Diğer taraftan, p-değerinin 0.05'ten küçük olması durumunda ilgili terim çok etkili (strongly significant) kabul edilirken; $0.05 < p < 0.10$ için oldukça etkili (strongly significant) kabul edilmektedir (Cornell, 2002; Myers ve Montgomery, 2002; Minitab Inc., 2008; Statease Inc., 2008). Sonuç olarak p-değeri 0.10'e çok yakın olan bu terim, modelde bırakılmıştır.

Çizelge 4.9'da F-değeri kolonunda ilk dikkati çeken durum blokların ve saf hatanın değerlerinin olmamasıdır. Bu durum normal karşılanmalıdır. Zira bloklama için temel varsayım: hiçbir blok değişkeninin faktörlerle etkileşiminin olmadığıdır. Bu durum KSDT'ler için de geçerli bir varsayımdır. Blok değişkenleri klasik DT'lerde, genellikle, bazı faktör etkilerinin eşlenikleştirilmesi (aliased) yoluyla tasarıma eklenir. Yani tasarımda söz konusu faktörün etkisi görülmez; bunun yerini blok değişkeni alır. Dolayısıyla, blok değişkenleri için F-değerinin hesaplanmaması beklenen bir sonuçtur.

Saf hata (pure error) tekrarlanmış deney noktaları için cevap değişkeninde oluşan değişkenlik miktarının ölçütü olarak tanımlanır. Çizelge 4.9'da saf hatanın F-değerinin hesaplanmamasının nedeni ise, bu artık ya da hata tipi için kullanılan deney noktalarının daha önceden model içinde kullanılan noktaların tekrarları olmasıdır.

Diğer taraftan, blok değişkenleri için beklenen en önemli özellik, karelerin ortalaması (MS_{blok}) değerinin artıkların kareler ortalaması değerinden ($MS_{\text{artık}}$) 3-4 kat daha büyük olmasıdır. Ancak bu durumda bloklamanın etkili olduğu kabul edilir (Statease Inc.,2008). Bu cevap değişkeni için $MS_{\text{blok}} = 0.839$ iken, $MS_{\text{artık}} = 0.004$ 'tür ve dolayısıyla aralarındaki oran 209.5 kattır. Bundan dolayı bloklama bu tasarımda oldukça etkilidir sonucuna varılır.

Çizelge 4.9'da dikkati çeken ikinci durum ise, ürün bileşenlerine ait ANOVA değerlerinin listelenmemiş olmasıdır. Bu durumun sebebi ise şöyle açıklanabilir: Bir doğrusal terim için t veya F gibi bir istatistikî test sıfır hipotezini $H_0 : \beta_i = 0$ şeklinde test etmektedir. Bu test ancak sabit model $\hat{y} = 0$ olsaydı anlamlı olurdu. Oysa KDT'ler için sabit modelin $\hat{y} = \bar{y}$ olduğu yukarıda gösterilmişti. Ayrıca, doğrusal kestiriciler (bu çalışmada tüm ürün bileşenleri) basitçe tasarım uzayının (sözde-bileşen simpleksinin) uç noktalarında cevap

değişkeninin değerini tahmin ederler. Yani bu terimler parametre etkilerini tahmin etmedikleri için her birinin F- ve p-değerlerini hesaplamının hiçbir anlamı yoktur. Model parçaları -doğrusal karışım hariç- bütün kare ortalamaları ilgili terimlerin değişkenliğinin göstergesi olarak kullanılabilirler. Artıklara ait kareler ortalaması değerinin karekökü ise, sürecin standart sapma değerini (0.066) göstermektedir.

Tasarım matrisinin (\mathbf{X}) bir satırı olan \mathbf{x}_i ' vektörünün r_i ($r_i \geq 1$) sefer tekrar edildiği varsayılırsa, i.deney noktasının j.tekrarı için $(y_{ij} - \hat{y}_i)$ gibi bir artık değer aşağıdaki gibi tanımlanabilir:

$$y_{ij} - \hat{y}_i = (y_{ij} - \bar{y}_i) + (\bar{y}_i - \hat{y}_i)$$

Burada \bar{y}_i , i.deney noktası için r_i adet tekrarın toplamının ortalama cevap değişkeni değeridir. Yukarıdaki ifade herhangi bir \mathbf{x}_i ' vektörü için y_{ij} tekrar noktalarında \bar{y}_i değerlerinin ve kestirilen \hat{y}_i değerlerinin birbirine eşit olacağı gerçeğinden hareket etmektedir. Eğer ifadenin her iki tarafının karesi ve sonrasında toplamı alınırsa eşitlik 4.14 elde edilir (Smith, 2005):

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{r_i} (y_{ij} - \hat{y}_i)^2 &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{r_i} (y_{ij} - \bar{y}_i)^2 + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{r_i} (\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2 \\ &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{r_i} (y_{ij} - \bar{y}_i)^2 + \sum_{j=1}^m r_i (\bar{y}_i - \hat{y}_i)^2 \end{aligned} \quad (4.14)$$

Burada da tam kare farkı açılımının orta terimlerinin -eşitlik (4.9)'daki gibi- sıfıra eşit olacağı kolaylıkla görülebilir (Draper ve Smith, 1998; Smith, 2005). Eşitlik (4.14)'ün sol tarafı SSE değerine yani artıkların kareler toplamına eşittir (Eşitlik (4.10)'un sol tarafı). Bu eşitlikte dikkat edilmesi gereken bir diğer nokta ise, ilk toplamın genellikle n ile simgelenen deney noktası sayısı yerine üst sınırın m ile gösterilmesidir. m'nin n'den farkı: n tüm deney noktaları için kullanılırken; m, tekrar sayıları hariç tüm deney noktalarını simgelemektedir. Eşitliğin sağındaki ilk terim tekrar noktalarının değişkenliğinin ölçüsü olan saf hatayı; ikinci terim ise ağırlıklandırılmış tekrarların ortalamasının (\bar{y}_i), uydurulmuş değerlere (\hat{y}_i) göre sapmalarını göstermektedir. Başka bir deyişle model uyumsuzluğunu göstermektedir. Burada ağırlıklandırılma i. deney noktası için tekrar sayısı olan r_i ile yapılmaktadır. Eşitlik (4.14) aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$SSE = SS_{PE} + SS_{LOF} \quad (4.15)$$

Burada SS_{PE} tekrar noktaları için saf hatanın kareler toplamını; SS_{LOF} ise, tüm artıklardan saf hatayı ayırdıktan sonra kalanlar için kareler toplamını gösterir. Yani, uydurulmuş modele göre verilerde oluşan değişkenliğin ölçüsü olan model uyumsuzluğunun kareler toplamıdır. Bu değer ilgili serbestlik derecesine oranı model uyumsuzluğunun tahmin değerini verir.

Model uyumsuzluğu testi, saf hata hariç, artıkların kareler ortalaması ile saf hatanın kareler ortalamasını karşılaştırır. Model uyumsuzluğu istenmeyen bir durum olduğu için F dağılımından elde edilen değer (Prob. > F: sıfır hipotezi doğrudurken oluşan F-değerini görebilme ihtimali) 0.10'den büyük olması gerektiği yukarıda anlatılmıştı. Dolayısıyla, model uyumsuzluğunun olup olmadığının ölçüsü olan bu değer (F-değeri = $MS_{artıklar} / MS_{saf\ hata}$) hesaplanmasında artıklara ait serbestlik derecelerinin saf hata ile model uyumsuzluğu arasında nasıl paylaşılacağı çok önem kazanmaktadır.

W. F. Smith'e göre (2005) bu sorun, F-dağılımından faydalanarak çözülebilir. F-dağılım tablosunda sütunlar boyunca ilerlendiğinde (df_2 – saf hatanın serbestlik derecesi) F_{kritik} ($F_{0.05, df_1, df_2}$) değerlerinin çok hızlı azaldığı, oysa satırlar boyunca ilerlendiğinde ise (df_1 – model uyumsuzluğunun serbestlik derecesi) F_{kritik} değerlerinin daha yavaş değiştiği gözlenebilir. DE yazılımının bu paylaşım işlemini nasıl yaptığı tarafımızca bilinmemesine rağmen yapılacak en mantıklı iş, saf hataya ait serbestlik derecesinin model uyumsuzluğuna ait serbestlik derecesinden yeterince küçük olarak belirlemektir.

Sonuç olarak F-değeri 1.0'e ne kadar çok yaklaşırsa, model uyumsuzluğunun oluşmama ihtimali o kadar çok artar. Aksi durumda ise, model uyumsuzluğu oluşur. Yani, model noktalarına ait değişkenlik, tekrar noktalarından kaynaklanan değişkenlikten oldukça farklı olur. Matematik model açısından bakılırsa, saf hatadan daha büyük bir model uyumsuzluğu hatası, artıklarda daha uygun bir model yardımıyla kurtarılabilir ve temsil edilebilecek anlamlı bir bilginin kaldığını gösterir.

Çizelge 4.10'da dE cevap değişkeni için oluşturulan matematik modelin istatistikî göstergeleri verilmiştir. Bu çizelgedeki ilk değer artıkların kareler ortalamasının karekök değeridir (s). Bu değer deney tasarımının (dE değişkeni için) standart sapmasının tahmini değeridir ve deneysel hatalardan kaynaklanmaktadır. dE cevap değişkeni için 0.066'lık bir standart sapma değeri bu modelleme sürecinde hemen hiç sapma olmadığını gösterir. İkinci sıradaki Ortalama değeri cevap değişkeninin (dE) tüm deney noktaları için yapılan ölçüm değerlerinin ortalamasıdır. Bu değer küçük olması beklentisi dışında bir anlamı

yoktur. Zira bu tasarımın amaçlarından birisi mümkün olduğunca sifıra yakın bir renk haslığı farkı ($\Delta E = dE$) elde etmektir.

C.V.%, modelin değişkenlik katsayısının yüzde olarak gösterilmesinden ibarettir. Bu değer standart sapma değerinin ortalamaya oranının yüzdesi olarak hesaplanır ($C.V.\% = \frac{\text{Standart Sapma}}{\text{Ortalama}} 100$). Tek başına bu değer anlamlılığı irdelenemez. Fakat görece olarak küçük değişkenlik katsayılı tasarımlar daha kabul edilebilirdir (Myers ve Montgomery, 2002; Segurold vd., 1999).

Çizelge 4.10 $(dE)^{0.82}$ cevap değişkeni için istatistikî özet değerler.

İstatistik	Değer
Standart Sapma	0.066
Ortalama	1.885
R^2	0.999
Ayarlı R^2	0.998
Kestirilen R^2	0.996
Yeterli Kesinlik (Adequate Precision)	90.276
C.V. %	3.476
PRESS	0.383

Çoklu regresyon hesaplarında *belirtme katsayısı* olarak ta tanımlanan ve ortalama değere göre model tarafından açıklanabilen değişkenliğin bir ölçüsü olan R^2 değeri için yukarıda bazı bilgiler verilmişti. Bu kısımda R^2 ve türevlerinin biraz daha ayrıntılı matematik analizi gerçekleştirilecektir. R^2 model tarafından açıklanabilen bilginin toplam bilgiye oranı olarak ifade edilebilir ve eşitlik (4.16)'daki gibi gösterilir:

$$R^2 = \frac{SSR}{SST} = \frac{SST - SSE}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SSR + SSE} \quad (4.16)$$

Yani, R^2 değeri düzeltilmiş kareler toplamında regresyon ile (SSR) elde edilen bilginin düzeltilmiş kareler toplamına oranı ya da hatalardan dolayı azalan düzeltilmiş kareler toplamının (SST - SSE), SST'ye oranı olarak tanımlanır. Değer aralığı 0.0 ile 1.0 arasındadır. Deneysel matematik model oluşturulurken saf hatanın oluşması kaçınılmaz olduğu için, R^2 değerinin 1.0'e ulaşması pratik olarak mümkün değildir (Draper ve Smith, 1998). Fakat ulaşılabilecek maksimum R^2 değeri sözkonusu olabilir. Bu değer (4.17)'deki gibi tanımlanır:

$$\text{Maksimum } R^2 = \frac{SST - SS_{PE}}{SST} \quad (4.17)$$

Mükemmel bir matematik model için R^2 ve maksimum R^2 değerlerinin birbirine eşit olması beklenir. dE değişkeni için elde edilen R^2 değeri 0.999 olup maksimum R^2 değerinden fark, ancak, üçüncü ondalıkta oluşmaktadır ($R^2 = 0,99859$; maks. $R^2 = 0,99941$).

R^2 gibi bir istatistikî göstergenin DT'lerde kullanılması pek sağlıklı değildir (Cornell, 2002; Box ve Draper, 2007). Çünkü oluşturulan modele terim eklendikçe bu değer 1.0'e hızla yaklaşmaktadır. 1.0'a çok yakın bir R^2 değeri mükemmel bir model oluşturulduğu izlenimi uyandırmaktaysa da, bunun istatistikî değeri yoktur. Bunun yerine modeldeki terim sayısı kullanılarak tanımlanan ayarlı R^2 ve kestirilen R^2 değerlerinin kullanılması çok daha sağlıklı olup, 0.70 değerinden yüksek ayarlı ve kestirilen R^2 değerleri KDT'ler için sağlıklı değerlerdir (Minitab Inc., 2008; Statease Inc., 2008).

Ayarlı R^2 istatistiği kareler toplamı (SS) yerine, kareler ortalamasını (MS) kullanır. Bu istatistik eşitlik 4.18'deki gibi tanımlanır:

$$R_{\text{ayarlı}}^2 = \frac{\text{MST}-\text{MSE}}{\text{MST}} = 1 - \frac{\text{MSE}}{\text{MST}} \quad (4.18)$$

Eşitlik 4.18'deki ölçülen y değerlerinin ortalama y değerine (\bar{y}) göre oluşturdukları değişkenliği ifade eden kareler ortalamasının toplamı (MST) ise, şöyle ifade edilir:

$$\text{MST} = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n-1}$$

MSE ise, hatanın kareler ortalaması yani, modelden artık (kalan) değişkenliktir ve s^2 ya da σ^2 olarak ta bilinir. Tasarımlarda ardışık model oluşturulurken MST ve SST sabit olduğu için $R_{\text{ayarlı}}^2$ değrinin yükseltilmesi için MSE değerinin, yani artıkların azaltılmasına çalışılır. Sonuç olarak, (4.18) eşitliği, değişkenliğin model uydurulmak suretiyle azaltılması olarak ta ifade edilebilir.

Herhangi bir model için $R_{\text{ayarlı}}^2$ değeri, her zaman, R^2 değerinden küçük olacaktır. DT'ler açısından çok yüksek R^2 değerleri sağlıklı olmamasına rağmen $R_{\text{ayarlı}}^2$ değerlerinin yüksek olması ve ikisinin arasındaki farkın az olması tasarımlarda istenilen bir durumdur. dE değişkeni için bu iki değer, sırasıyla, 0.999 ve 0.998 olup aralarındaki fark %0.1'dir.

Diğer taraftan modelden herhangi bir deney noktasını (i.deney noktası) regresyon hesabından çıkarılıp, bu nokta için (i.deney noktası) kestirim yapılırsa, ölçüm değeri (y_i) ile bu kestirim ($\hat{y}_{i,-i}$) değeri arasındaki fark ($y_i - \hat{y}_{i,-i}$) PRESS istatistikî göstergesi olarak adlandırılır. Bu istatistikî gösterge modelin veriye uyup uymadığının bir göstergesi olarak kullanılabilir. Herhangi bir modelde $\hat{y}_{i,-i}$ uydurulan bir değeri temsil etmektedir ve bu

çalışma boyunca bu terim yer yer kestirilen, tahmin edilen ya da uydurulan değer olarak adlandırılmaktadır. Doğrusu uydurulan (fitted) değerdir. Oysa $\hat{y}_{i,-i}$ ile kastedilen, tam olarak kestirilen ya da tahmin edilen değerdir.

PRESS istatistiği zaman zaman *artık PRESS* ya da *çıkarılan artık* (deleted residual) olarak ta adlandırılır ve $e_{i,-i}$ ile gösterilir (Belsey vd., 1980; Smith, 2005). PRESS bir kısaltma olup, “tahmin hatasının kareler toplamı” tümcesinin İngilizcedeki karşılığının (PREdiction Error Sum of Squares) kelimelerinin ilk harflerinden oluşur ve eşitlik 4.19’deki gibi tanımlanır:

$$PRESS = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_{i,-i})^2 = \sum_{i=1}^n e_{i,-i}^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{e_i}{1-h_{ii}} \right)^2 \quad (4.19)$$

(4.19) eşitliğinde en sağdaki terimin parantez içindeki kısmı, PRESS istatistiği ile artıklar arasındaki ilişkiyi göstermektedir. Bu ilişki şu şekilde tanımlanır:

$$e_{i,-i}^2 = \frac{e_i}{1-h_{ii}} \quad (4.20)$$

Burada e_i eşitlik (3.24)’teki hata ya da artık terimini; h_{ii} ise, şapka (hat) matrisinin (**H**) köşegen elemanlarını yani i .verinin kaldıraç değerini göstermektedir. (Bu konu aşağıda açıklanacaktır.) Eşitlik (4.16)’da ($R^2 = 1 - \frac{SSE}{SST}$) SSE yerine PRESS değeri konulursa, (4.21) ile gösterilen “kestirilen R^2 ” ifadesi elde edilir:

$$R_{\text{kestirilen}}^2 = 1 - \frac{PRESS}{SST} \quad (4.21)$$

Bu eşitlikten anlaşılacağı üzere PRESS değeri SSE değerine yaklaştıkça $R_{\text{kestirilen}}^2$ değeri de R^2 değerine yaklaşacaktır. PRESS değeri ile SSE değeri arasındaki fark modelin kestirim gücünü belirlemekte kullanılabilir (Cornell, 2002). DE yazılımı el-yordamı kuralı olarak $R_{\text{kestirilen}}^2$ ile $R_{\text{ayarlı}}^2$ arasında 0.2’lik veya daha küçük farkların sağlıklı sonuçlar doğuracağını iddia etmektedir (Statease Inc., 2008). DE cevap değişkeni için bu değer 0,00201’dir ve 0.20 değerinden çok çok küçüktür. Ayrıca PRESS değeri SST değerini bazı durumlarda geçebilir ve dolayısıyla $R_{\text{kestirilen}}^2$ negatif değerler alabilir. Bu durum tasarımlarda istenmeyen, yani olumsuz sonuçlar doğuran bir durumdur.

Çizelge 4.10’deki PRESS değeri (0.383) ile Çizelge 4.9’deki SSE değeri (0.133) karşılaştırıldığında, aralarındaki farkın |0.250| olduğu görülür. Fakat $R_{\text{kestirilen}}^2$ değeri (0,99595) ile ve R^2 değeri (0,99859) kıyaslandığında aralarındaki fark: 0,00264’tür. Dolayısıyla $R_{\text{kestirilen}}^2$ değerleri ölçekten bağımsız oldukları için, kıyaslamaların R^2

değerleri üzerinden yapılması daha sağlıklı olacaktır (Smith, 2005). Ayrıca, görel olarak küçük PRESS değerleri oluşturulan modelin sağlamlığının bir göstergesidir.

Eşitlik (4.20)'de h_{ii} değerleri 1.0'e çok yaklaştıkça *çıkarılan artık değerleri* ($e_{i..}$), yani PRESS istatistiği çok yüksek değerler alır ve tam 1.0 değerinde ise hesaplanamaz olur. Başka bir deyişle, yüksek kaldıraç (leverage: h_{ii}) değerleri için artıklar (e_i) ile PRESS artıkları arasındaki fark çok büyüyecektir. Bu durum, belirli bir veri değerinin regresyon hesabını çok fazla etkilediğini gösterir.

Burada önemle belirtilmesi gereken bir durum da R^2 , $R_{kestirilen}^2$, $R_{ayarlı}^2$ ve PRESS gibi istatistiklerin $\varepsilon_i \sim NID(0, \sigma^2)$ varsayımını gerektirmemesi fakat F-testi ve t-testi gibi istatistikî testler bu temel varsayım üzerine kurulmuştur.

Tasarımın değerlendirilmesi kısmında kaldıraç etkileri anlatılırken analiz kısmına geçmeden bu etkilerin hesaplanabileceği söylenmişti. Bunun nedeni varyans-covaryans ya da kısaca kovaryans matrisinden $[(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}]$ sonra KDT'lerde ve diğer tüm DT'lerde en önemli matris olan şapka matrisinin (\mathbf{H}), sadece, tasarım/Fisher matrisine (\mathbf{X}) bağlı olmasından kaynaklanmaktadır. Bu bağımlılık eşitlik (4.22)'de verilmiştir (Draper ve Smith, 1998):

$$\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}' \quad (4.22)$$

Burada \mathbf{X} matrisi $n \times p$ tipi; $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ matrisi $p \times p$ tipi ve \mathbf{X}' matrisi ise, $p \times n$ tipi bir matristir. Dolayısıyla \mathbf{H} matrisi $n \times n$ tipi bir kare matristir.

Bu matrise şapka matrisi denilmesinin sebebi, cevap değişkenleri üzerine “^” işareti (\hat{y}) koymasından kaynaklanmaktadır. Bu ilişki matris formunda eşitlik (4.23)'teki gibi gösterilir:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{y} \quad (4.23)$$

Bu eşitlikte $\hat{\mathbf{y}}$ ve \mathbf{y} $n \times 1$ tipinde vektörlerdir. Uydurulan y değerlerini (\hat{y}) bulmak için şapka matrisi kullanılarak yapılan matris hesabı 3 deney noktası için eşitlik (4.24)'te gösterilmiştir:

$$\begin{bmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \hat{y}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} \quad (4.24)$$

(4.24)'ten herhangi bir deney noktası için cevap değişkeni için oluşacak uydurulmuş değer matris çarpımından şu şekilde elde edilir (Örnekte 2.deney noktası kullanılmıştır):

$$\hat{y}_2 = h_{21}y_1 + h_{22}y_2 + h_{23}y_3 \quad (4.25)$$

Eşitlik (4.25) \hat{y}_i değerlerinin şapka matrisinin ilgili elemanlarıyla ağırlıklandırılmış doğrusal birleşimini göstermektedir. Bu n adet ağırlıktan birisi \hat{y}_i elemanın kendi ağırlığı h_{ii} olacaktır (Draper ve Smith, 1998; Smith, 2005). Şapka matrisinin köşegen elemanları olan bu ağırlıklara, kaldıraç denilmektedir. Eğer uydurulmuş değer hesabında \hat{y}_i elemanın kendi ağırlığı h_{ii} 'nin değeri diğer ağırlıklardan büyük ise uydurulan cevap değişkeni değeri bu ağırlıkca belirlenecektir. Yukarıda da anlatıldığı gibi bu tür “*kaldıraç etkileri*” DT’lerde istenmeyen durumlardır.

Kaldıraç etkileri matris formunda eşitlik (4.26)’daki gibi gösterilir:

$$h_{ii} = \mathbf{x}_i'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}_i \quad (4.26)$$

Son olarak Çizelge (4.10)’da verilen cevap değişkeni için yeterli kesinlik (adequate precision) ya da sinyal/gürültü oranı, dE için 90.276 olarak bulunmuştur. 4.0 ve üzerindeki değerler sağlıklı kabul edilmektedir (Myers ve Montgomery, 2002; Statease Inc., 2008). Dolayısıyla bu model oldukça sağlıklı kabul edilmelidir. Aksi durum sözkonusu olsaydı, ortalamalar arasındaki farkın standart hata değerine oranını kullanan t-testi ve değişkenliklerin oranını kullanan F-testi gibi istatistik testleri sağlıklı sonuçlar üretemeyecekti.

Yeterli kesinlik (YK), n, deney sayısını, p, modeldeki tüm parametrelerin sayısını ve s^2 de artıkların kareler ortalaması ya da süreç değişkenliğini göstermek üzere, eşitlik (4.27)’deki gibi ifade edilebilir (Smith, 2005):

$$YK = \frac{\text{maksimum } \hat{y}_i - \text{minimum } \hat{y}_i}{\sqrt{s^2 \left(\frac{p}{n}\right)}} \quad (4.27)$$

Burada payda eşitlik (4.28) ile gösterilen ortalama kestirim değişkenliğinin (average prediction variance) kareköküdür.

$$\overline{\text{var}}(\hat{y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \text{var}(\hat{y}) = s^2 \frac{p}{n} \quad (4.28)$$

Fakat bu gösterge, modeldeki parametre sayısı (p), kesme değerini yani sabit terimi (b_0) de içerdiği için, kanımızca, TYY’ler için daha anlamlı ve sağlıklı sonuçlar üretmektedir.

4.5.1.3 dE için Kestirim Denklemi

Değişkenliklerin analizi yapıldıktan sonra model terimlerinin katsayı tahminleri elde edilir. Bu katsayı tahminleri için, belirli bir risk değeri için oluşturulmuş güven aralıkları mevcut olmalıdır. Örneğin, %10 risk ($\alpha = 0.10$) barındıran bir güven aralığında model denklemi herhangi bir terimin katsayı değerini %90 güvenilirlikle tahmin edecektir. Yani katsayı değeri %90 olasılıkla ilgili güven aralığında kalacaktır. Bu çalışmada risk değeri $\alpha = 0.05$ olarak seçilmiş olup terimler %95 güvenilirlikle, ilgili güven aralıklarında kalacaklardır. Güven aralıkları kısaca şu şekilde hesaplanır:

β model parametrelerini temsil etmek üzere ve b'de bu parametrenin SEK tahmini olmak üzere, β 'nin %100(1- α)'lık güven aralığı t-testi kullanılarak,

$$b - t_{\frac{\alpha}{2}, n-p} \cdot sh(b) \leq \beta \leq b + t_{\frac{\alpha}{2}, n-p} \cdot sh(b)$$

ifadesi ile bulunur. Burada n-p artıkların serbestlik derecesini; sh(b) ise, katsayı tahminlerinin standart hata değerini ($sh(b) = \sqrt{s \cdot c_{ii}}$) ifade eder.

dE değişkeni için oluşturulan terimler, güven aralıkları ile birlikte terim katsayı tahminleri (regresyon katsayıları), terimlere ait standart hata değerleri ve VIF değerleri Çizelge 4.11'de verilmiştir. Regresyon katsayılarına ait standart hata değerleri oldukça düşük çıkmıştır. dE için oluşturulan diğer model (ln(dE)) analizleri ve çizelgeler Ek-1'de verilmiştir.

Bu çizelge (4.11) incelendiğinde blok değişkenlerinin katsayı tahminlerinin sıfıra çok yakın oldukları yani blok etkilerinin modelde olmasının bir anlamının olmayacağı söylenmelidir. Blok değişkenleri bileşen ya da faktör değillerdir ve tahmin yapmakta kullanılmazlar. Zira DT'lerde blok değişkenleri 1.bölümde anlatıldığı üzere kullanıcı hataları vb. hataları azaltmak için rastsallaştırmanın şartlandırılmasından başka bir şey değildir.

Çizelge 4.11 dE cevap değişkeni için model terimleri ve bazı istatistikî göstergeleri.

Bileşen	Katsayı Tahmini	df	Standart Hata	Güven Aralıkları (95% CI)		
				Alt	Üst	VIF
1.gün	-0.013	4				
2.gün	0.030					
3.gün	-0.015					
4.gün	-0.030					
5.gün	0.028					
A-Pigment	-4.536	1	0.049	-4.637	-4.435	2.233
B-Dispersan 1	3.664	1	0.032	3.598	3.730	1.646
C-Solvent	3.778	1	0.033	3.711	3.845	2.638
D-Dispersan 2	4.166	1	0.131	3.899	4.434	2.698
E-Dispersan 3	3.150	1	0.226	2.690	3.610	2.599
AG	0.159	1	0.052	0.053	0.265	2.294
BF	-0.098	1	0.034	-0.168	-0.029	1.462
BG	0.137	1	0.037	0.062	0.212	1.484
CF	-0.145	1	0.030	-0.206	-0.084	1.891
CG	<u>-0.060</u>	<u>1</u>	<u>0.036</u>	<u>-0.132</u>	<u>0.013</u>	<u>2.456</u>
EF	<u>0.435</u>	<u>1</u>	<u>0.215</u>	<u>-0.004</u>	<u>0.874</u>	<u>2.036</u>
EG	-0.451	1	0.216	-0.892	-0.011	1.825
BFG	-0.086	1	0.036	-0.160	-0.011	1.370
CFG	-0.097	1	0.031	-0.161	-0.034	1.885
EFG	0.511	1	0.229	0.045	0.978	2.025

Karışım bileşenleri için SS değeri bileşenlerin tamamı için hesaplanmıştır. Bunun sebebi sabit modelin sıfır hipotezini ($H_0: \beta_i = 0$), sıfır değeri yerine ortalama üzerine kurmasından kaynaklanmaktaydı. Oysa çizelgeden görüleceği üzere karışım bileşenlerinin her biri için katsayı tahminleri verilmiştir.

Bu doğrusal etkiler, bileşenin diğer bileşenlerden (q-1) ne kadar farklı olduklarını ölçmek suretiyle belirlenir. En büyük katsayı değerine sahip pigment bileşeni bekleneceği üzere dE üzerinde zıt/azaltıcı (antagonistic) etki göstermektedir. Diğer tüm bileşenler ise arttırıcı yönde (synergistic) çalışmaktadırlar. Burada dikkat çekici olan durum dispersan 2 ve dispersan 3'ün katsayıları değerlerinin çok yüksek olmasıdır. Bu bir yanılgıdır. Zira bu bileşenlerin değişim aralıkları görece olarak hem çok dardır hem de standart hata ve VIF değerleri (diğer doğrusal bileşenlere göre) daha yüksektir. Değişim aralıkları dar olan bileşenler yukarıda da anlatıldığı üzere KDT'lerde yüksek standart hata ve yanıltıcı yüksek katsayı değerleri gibi sorunlara sebep olmaktadır. Diğer taraftan solvent bileşeninin dE'yi arttırıcı etkisi beklenen bir durumdur.

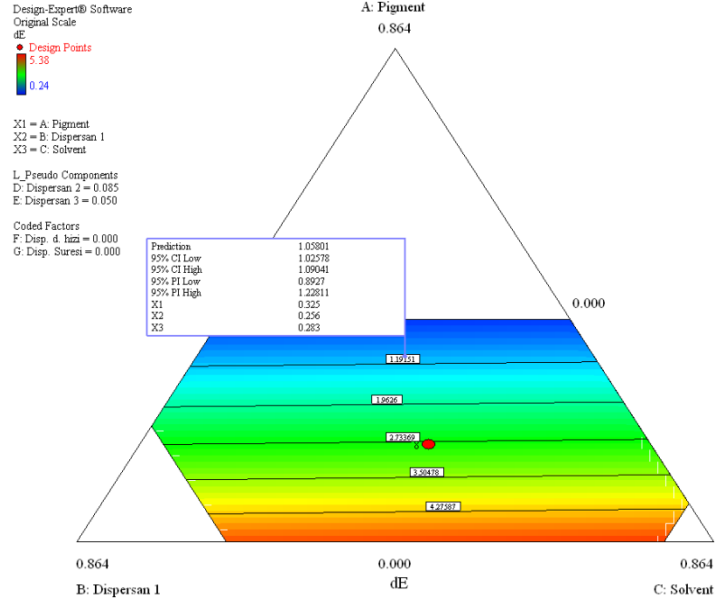
Bu model için VIF değerleri oldukça düşük çıkmıştır ve bu durum modelin çok sağlıklı kurulduğunun göstergesidir. Çünkü KDT'lerde VIF değerlerinin, bazı yazarlara göre, 100 hatta 1000'den küçük olması bile kabul edilebilirdir. VIF değerlerinin bu kadar düşük olması değişkenlerin, KDT'lerde pratikte mümkün olmayan, dikeyliğe çok yakın (nearly-orthogonal) olduklarını kanıtlamaktadır.

Güven aralıkları incelendiğinde altı çizili terimlerin aralık değerlerinin, 0 (sıfır) değerini de içerdiği görülür. Bu durumda bu terimlerin modelde etkili olmadıkları söylenmelidir ve etkili oldukları F-testleriyle kanıtlanmasına rağmen, çıkarılmalarında bir sakınca yoktur. Diğer taraftan, DE yazılımı etkili terimleri A, EG, BFG, CFG ve EFG olarak belirlemiştir. Oysa bütün istatistikî göstergeler bu terimlerin dışındakilerin de, CG ve EF hariç, etkili olduklarını kanıtlamaktadır. Ayrıca, CG ve EF terimlerinin modelden atılmamasının öncelikle hiyerarşiden ve kişisel tercihimizden kaynaklandığını hatırlamak gerekmektedir.

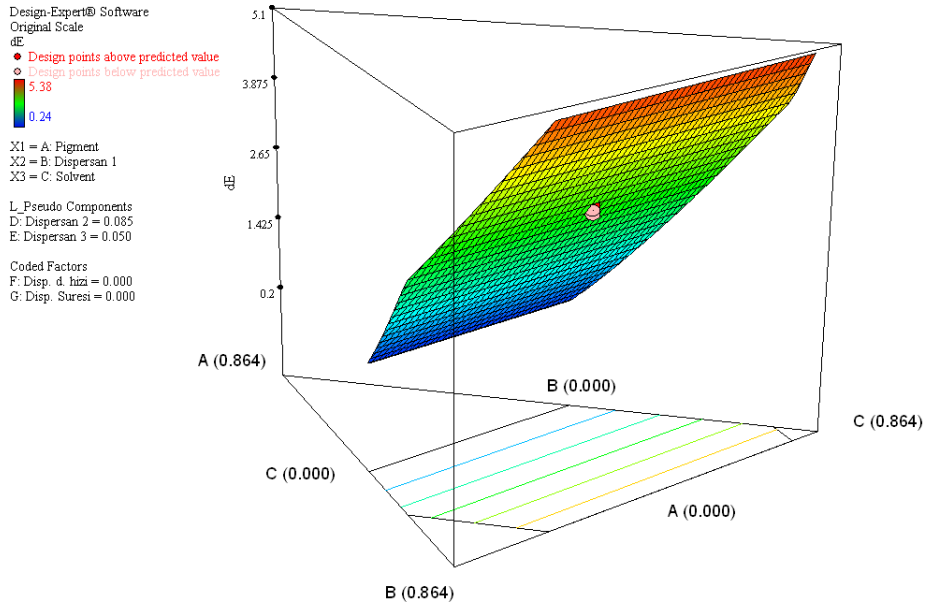
Modelde, Çizelge 4.10'dan da görülebileceği gibi, doğrusal terimler dışında kalan diğer tüm terimlerin regresyon katsayı değerleri çok düşüktür. Bu durum modelin neredeyse doğrusal olması gerektiğini ve özellikle bileşenler arası ilişkinin az ya da hiç olmadığı (aksi durum için Ek-1 Şekil E.1 ve E.2'ye bakılabilir) ve süreç değişkenleri (F ve G) ile olan etkileşimin de düşük olduğu anlamına gelmektedir. $(dE)^{0.82}$ için model denklemi, A-sözde-bileşenler cinsinden, (4.29)'da verilmiştir.

$$(dE)^{0.82} = -4.54A + 3.66B + 3.78C + 4.17D + 3.15E + 0.16AG - 0.098BF + 0.14BG - 0.15CF - 0.060CG + 0.44EF - 0.45EG - 0.086BFG - 0.097CFG + 0.51EFG \quad (4.29)$$

Bu model *İndirgenmiş doğrusal x 2FI* Scheffé tipi çokterimli modeli olup 15 terimlidir. Çizelge 4.8'den hatırlanacağı üzere önerilen model *Doğrusal x 2FI* Scheffé tipi çokterimli modeliydi. Bu modelden p-değeri 0.05'ten yüksek "atılabilir" terimler elenmiştir. (4.29)'daki modelin eş-yükselti grafiği ve 3-boyutlu grafikleri, sırasıyla, Şekil 4.9 ve 4.10'da verilmiştir. Ayrıca, modelin farklı bileşenler için oluşturulan görüntüsü Ek-2'de Şekil E.16'da verilmiştir.



Şekil 4.9 $(dE)^{0.82}$ için eş-yükselteli karışım grafiği.



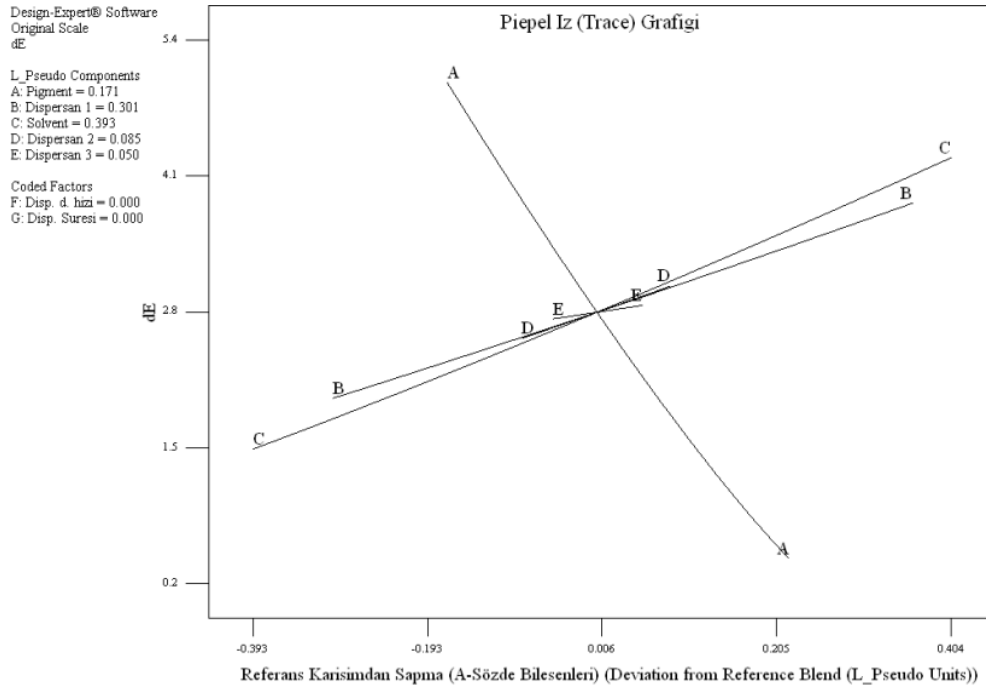
Şekil 4.10 $(dE)^{0.82}$ için 3-boyutlu karışım grafiği

Şekil 4.9'daki dikdörtgen ilgili eş-yükselteli eğrisi için yapılan tahmin değerini ve tahmin katsayısı için %95'lik güven aralıklarını göstermektedir. Şekil 4.10'daki içi dolu küreler ise, tahmin değerinin altında ve üstünde kalan deney noktalarını göstermektedir.

Karışım bileşenleri etkisini görmek için Piepel ve Cox doğrultulu iz grafiklerinin sağlıklı sonuçlar verdiği tasarım değerlendirme kısmında anlatılmıştı. Süreç değişkenlerinin

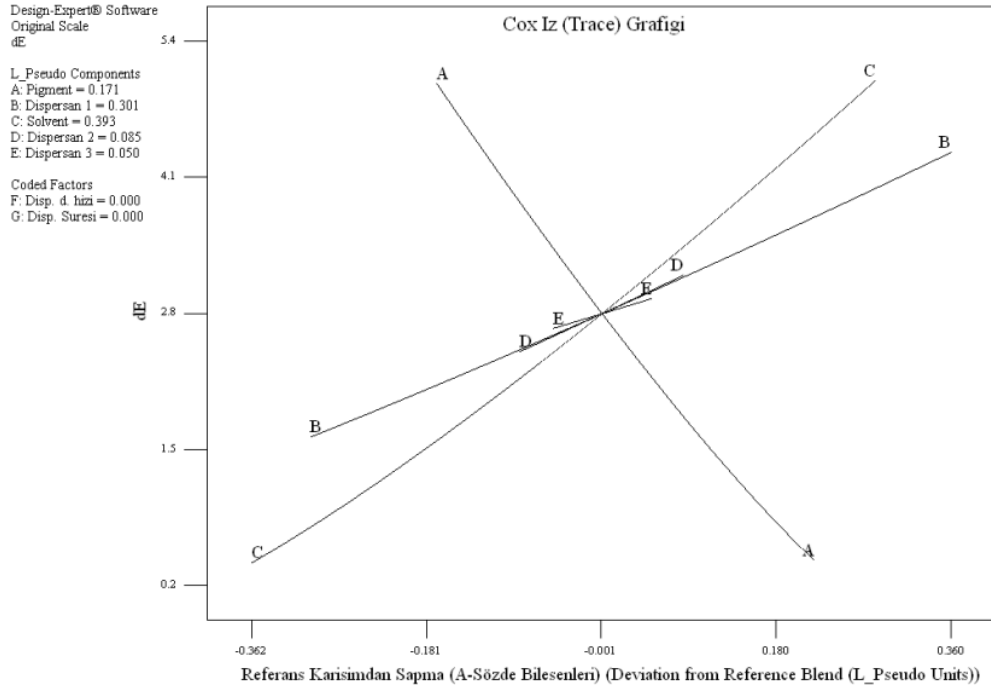
etkileşimini görmek için en sağlıklı çalışan grafik türü ise, etkileşim (interaction) grafikleridir. Şekil 4.11’de Piepel doğrultusu grafiği, Şekil 4.12’de Cox doğrultusu grafiği ve Şekil 4.13’te ise, süreç değişkenleri için etkileşim grafiği verilmiştir.

Burada dikkat edilmesi gereken nokta: grafiklerin DE yazılımının varsayılan grafikleri olduğudur. Çünkü değişken ya da bileşen değerleri ile oynanarak yüzlerce farklı grafik görüntüsü elde edilebilir. Burada yazılımın varsayılan olarak kabul ettiği değerler, genelde ortalama değerler, için grafik gösterimleri sunulmaktadır.



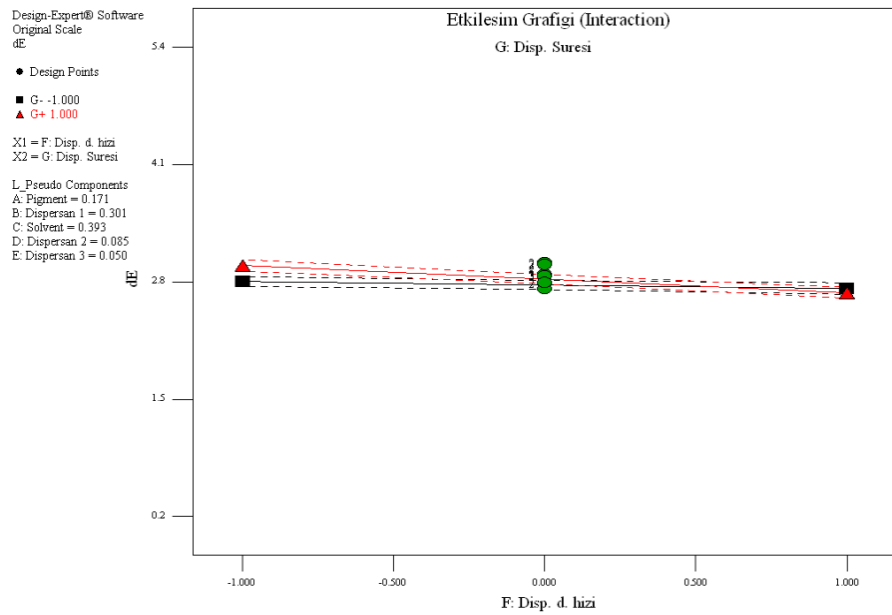
Şekil 4.11 (dE)^{0.82} için Piepel doğrultulu iz grafiği.

Şekil 4.11 ve 4.12 birbirine çok benzer görüntüler üretmişlerdir. Cevap üzerinde en etkili bileşenler, sırasıyla, A, C ve B bileşenleridir. E bileşeni regresyon katsayısının yanıtıcı büyüklüğüne rağmen dE üzerinde etkili değildir. B ve D bileşenlerinin dE üzerindeki etkileri birbiriyle çok benzerdir, fakat D'nin değişim aralığı çok dar olduğu için etkisi kısıtlıdır.



Şekil 4.12 (dE)^{0.82} için Cox doğrultulu iz grafiği.

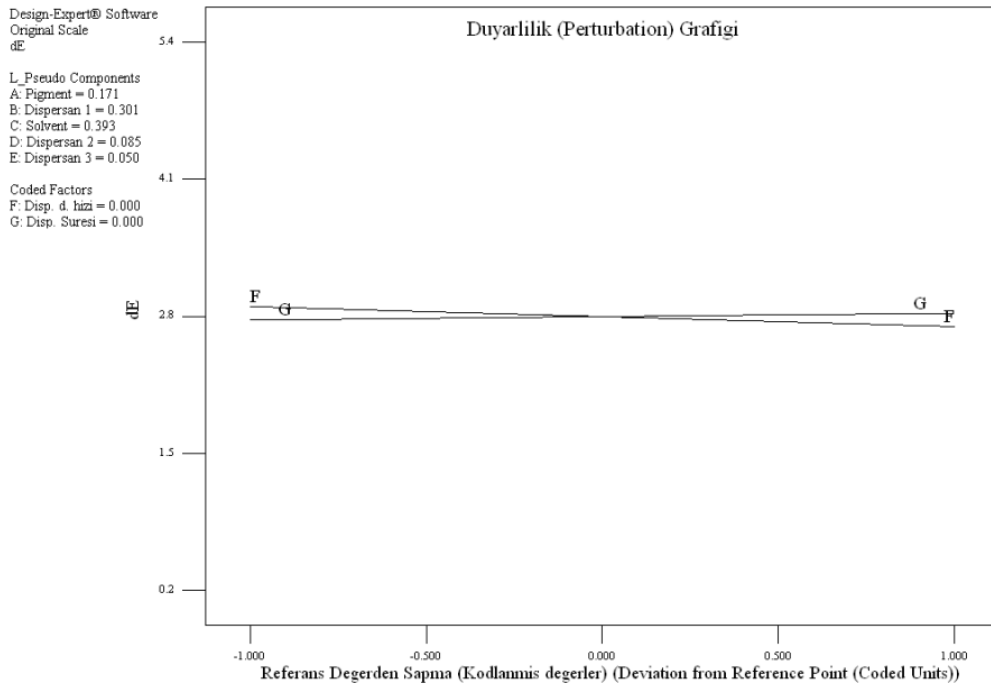
Cox ve Piepel doğrultulu izler arasında farklılık C bileşeni için belirgindir. Çünkü bu bileşen en geniş değişim aralığına sahiptir ve bilindiği gibi Cox doğrultusu bu tür geniş değişim aralıklarını yeterince sağlıklı tespit edememektedir (Statease Inc., 2008). Yukarıda da belirtildiği üzere bileşen kısıtlarının olduğu KDT'lerde Piepel doğrultulu iz grafikleri daha sağlıklı sonuçlar üretmektedir.



Şekil 4.13 (dE)^{0.82} için süreç değişkenlerinin etkileşim grafiği

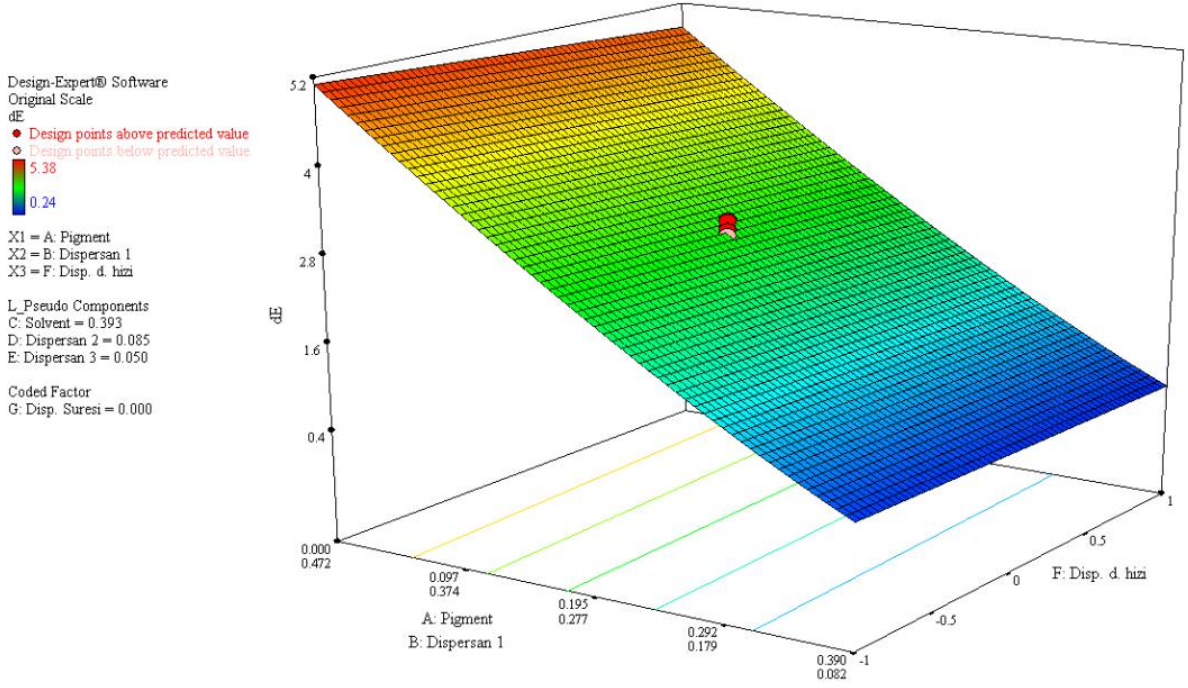
Şekil 4.13 dispersiyon devir hızı (F) ve dispersiyon süresi (G) süreç değişkenlerinin etkileşim grafiğinin dE üzerindeki etkilerini göstermektedir. Şekilden anlaşılacağı üzere her iki değişkenin değerlerinin artmasının birbirleri üzerinde etkileri çok düşüktür.

Şekil 4.14 ise, bu iki süreç değişkeninin dE üzerindeki etkilerini bir başka deyişle dE'nin bu iki değişkenin değişimine duyarlılığını (perturbation) göstermektedir. Bu grafikten de anlaşılacağı üzere dispersiyon devir hızı (F) dE değerini azaltırken; dispersiyon süresi (G) dE değerini çok fazla değiştirmemektedir. Bu sonuç hem model yardımıyla hem de tecrübelerimizle desteklenmektedir.



Şekil 4.14 (dE)^{0.82} için süreç değişkenlerinin duyarlılık grafiği.

Süreç değişkenleri ve karışım bileşenlerinin dE üzerinde nasıl etkili olduğu görülmek istenirse DE yazılımında kullanılacak en sağlıklı grafik türü 3-boyutlu karışım-süreç grafiğidir. Ayrıca yazılımın karışım-süreç eş-yükselti grafiği de vardır fakat yorumlanması kafa karıştırıcı olduğu için tercih edilmemiştir. Şekil 4.15 her iki değişken türünün dE üzerindeki etkisini göstermektedir. Dispersiyon devir hızının artması dE değerini azaltmaktadır.



Şekil 4.15 $(dE)^{0.82}$ için 3-boyutlu karışım-süreç grafiği.

4.5.1.4 Viskozite için Model Oluşturma

Viskozite için model oluşturma süreci dE için model oluşturma sürecinden çok daha sorunlu olmuştur. Yukarıda da anlatıldığı üzere kullanılan pigmentin doğasından kaynaklanan tiksotropik viskozite davranışı mil (spindle) temelli kesme kuvveti uygulayan standart viskozmetrelerle sağlıklı ölçülememiştir. Modelleme çalışmasında kullanılan 50 adet deney noktasından, Bölüm 4.6'da anlatılacak sebeplerden dolayı, 5 tanesi çıkarılmıştır (ignored) ve modelleme çalışması 45 deney noktası yani 44 serbestlik derecesi (df) üzerinden yürütülmüştür.

Çıkarılan deney noktaları deney numarasına göre şöyledir: 1, 3, 15, 23 ve 31. Deney noktaları yok sayıldıktan sonra model oluşumu -kısmen- daha sağlıklı hale gelmiştir. Çizelge 4.12'de viskozite cevap değişkeni için model uyumu özet tablosu verilmiştir.

Viskozite için önerilen en uygun model *Doğrusal x Ortalama* Scheffé tipi çokterimlisidir ve R^2 değerleri dE için önerilen modelden daha düşüktür. Ayrıca önerilen modelin süreç değişkenleri kısmı için ardışık p-değeri hesaplanamamıştır.

Diğer taraftan, viskozite modeli için herhangi bir dönüştürme işlemi yapılmamıştır. Bu konu bir sonraki kısımda incelenecektir.

Çizelge 4.12 Viskozite değişkeni için çokterimli modellerin model uyumu özet tablosu.

Modelin Derecesi		Ardışık p-değeri		İstatistikî Özet			
Karışım	Süreç	Karışım	Süreç	Model Uyumsuzluğu Değeri (Lack-of-Fit Value)	Ayarlı R ² (Adjusted R ²)	Kestirilen R ² (Predicted R ²)	Modelin Durumu
M	M						
M	L		0.3812	< 0.0001	-0.0005	-0.3470	
M	2FI		0.3283	< 0.0001	-0.0010	-0.3930	
M	Q		0.1678	< 0.0001	0.0444	-0.3788	
M	C	*	* 0.6607	< 0.0001	0.0116		Eşlenmiş
M	M						
<u>L</u>	<u>M</u>	< 0.0001	-	< 0.0001	0.9607	0.9433	Önerilen
L	L	< 0.0001	0.2226	< 0.0001	0.9649	0.8872	
L	2FI	< 0.0001	0.1369	< 0.0001	0.9700	0.7707	
L	Q	* < 0.0001	* 0.0037	0.0002	0.9845		Eşlenmiş
L	C	* < 0.0001	*	0.0002	0.9845		Eşlenmiş
L	M						
Q	M	* < 0.0001	*	0.0094	0.9915		Eşlenmiş
Q	L	* < 0.0001	* 0.0258	0.0530	0.9954		Eşlenmiş
Q	2FI	* < 0.0001	* 0.2831	0.0348	0.9958		Eşlenmiş
Q	Q	* 0.0002	* 0.0446	0.0976	0.9969		Eşlenmiş
Q	C	* 0.0002	*	0.0976	0.9969		Eşlenmiş
Q	M						
SC	M	* 0.2938	*	0.0093	0.9916		Eşlenmiş
SC	L	*	* 0.0250	0.0530	0.9954		Eşlenmiş
SC	2FI	*	* 0.2830	0.0349	0.9958		Eşlenmiş
SC	Q	*	* 0.0445	0.0977	0.9969		Eşlenmiş
SC	C	*	*	0.0977	0.9969		Eşlenmiş
SC	M						
C	M	*	*	0.0093	0.9916		Eşlenmiş
C	L	*	* 0.0250	0.0530	0.9954		Eşlenmiş
C	2FI	*	* 0.2830	0.0349	0.9958		Eşlenmiş
C	Q	*	* 0.0445	0.0977	0.9969		Eşlenmiş
C	C	*	*	0.0977	0.9969		Eşlenmiş

*Çaprazlanmış modelin eşlenmiş (aliased) olduğunu gösterir; M = Ortalama L = Doğrusal Q = Karesel SC = Özel Kübik C = Kübik 2FI = 2 faktör etkileşimi

4.5.1.5 Viskozite için ANOVA

Önerilen en uygun model *Doğrusal x Ortalama* Scheffé tipi çokterimlisi yerine geri eleme yöntemi kullanılarak *İndirgenmiş karesel x Doğrusal* Scheffé tipi çokterimlisi elde edilmiştir. Zira önerilen model model uyumsuzluğu sorunu oluşturmaktadır. Oluşturulan modelin p-değeri 0.05 değerinden çok küçüktür ve model uyumsuzluğunun 1.625'lik F-değerini oluşturma olasılığı 0.1'den büyüktür (0.2123). Dolayısıyla, modeldeki terimler istatistikî göstergeler itibariyle sağlıklıdır ve bu terimler viskozite cevap değişkenini modellemekte kullanılabilirler. Ayrıca çizelgede toplam serbestlik derecesinin 44 olduğu ve düzeltilmiş kareler toplamının dE modelininkinden oldukça büyük olduğu dikkate

alınmalıdır. Bu büyüklüğün (0.2123) sebebi tabii ki ölçülen cevap verisinin değerlerinden kaynaklanmaktadır.

Çizelge 4.13 Viskozite cevap değişkeni için kısmî kareler toplamının ANOVA tablosu.

Kaynak	Kareler Toplamı	df	Kareler Ortalaması	F-değeri	p-değeri (Prob. > F)	
<i>Bloklar</i>	925.411	4	231.353			
<i>Model</i>	15486.406	12	1290.534	920.845	< 0.0001	<i>Etkili</i>
<i>Doğrusal Karışım</i>	14975.990	4	3743.997	2671.485	< 0.0001	
<i>AD</i>	112.970	1	112.970	80.609	< 0.0001	
<i>AE</i>	108.514	1	108.514	77.429	< 0.0001	
<i>AF</i>	7.981	1	7.981	5.694	0.0240	
<i>BC</i>	6.758	1	6.758	4.822	0.0365	
<i>BD</i>	89.218	1	89.218	63.660	< 0.0001	
<i>BG</i>	10.400	1	10.400	7.421	0.0110	
<i>DF</i>	11.431	1	11.431	8.157	0.0080	
<i>DG</i>	21.279	1	21.279	15.184	0.0006	
<i>Artık</i>	39.241	28	1.401			
<i>Model Uyumsuzluğu</i>	29.334	18	1.630	1.645	0.2123	<i>Etkisiz</i>
<i>Saf Hata</i>	9.907	10	0.991			
<i>Düzeltilmiş Toplam</i>	16451.058	44				

Çizelge 4.13'te görülen 920.845'lik F-değeri modelin anlamlı olduğunu ve bu değer ancak % 0.01'lik bir olasılıkla gürültüden kaynaklanabileceğini ifade eder. Diğer taraftan, saf hataya göreli olarak 1.645'lik model uyumsuzluğu F-değeri model uyumsuzluğunun olmadığını gösterir. Burada ise, bu F-değerinin oluşması % 21.23 olasılıkla gürültüden kaynaklanmaktadır. Bu % değeri dE için oluşan %81.71'lik değerle kıyaslandığında modelin risk değerinin yani uyumsuzluğun oluşma ihtimalinin yüksek olduğu söylenmelidir.

Ayrıca BC terimi için sıfır hipotezi doğru olursa oluşacak olan F-değeri (4.822) itibariyle terimler içinde 1.0'e en yakın olanıdır. Dolayısıyla bu değer oluşma olasılığı olan 0.0365 değeri bu terimin aynı zamanda etkisiz olma olasılığıdır. Yani terimler içinde etkisiz olabilme ihtimali en yüksek olan terim BC'dir.

Viskozite cevap değişkeni için Çizelge 4.14'ten okunan standart sapma değeri 1.184'tür. Bu değer dE için standart sapma değeri olan 0.066 ile karşılaştırılırsa, modelleme sürecinde göreli olarak anlamlı bir sapmanın oluştuğunu gösterir. Fakat yine de bu sapma değeri 1.0 varsayılan sapma değerine çok yakın olduğu için önemsiz kabul edilebilir.

Ölçülen viskozite değerlerinin *Ortalaması* olan 95.178 değeri cevap değişkeninin tüm deney noktaları için yapılan ölçüm değerlerinin aritmetik ortalamasıdır. Bu değer küçük olması beklentisi dışında bir beklenti yoktur. Zira bu tasarımın amaçlarından birisi de akıcılığı sudan çok fazla düşük olmayan bir renklendirici elde etmektir.

Çizelge 4.14 Viskozite cevap değişkeni için istatistikî özet değerler.

İstatistik	Değer
Standart Sapma	1.184
Ortalama	95.178
R ²	0.997
Ayarlı R ²	0.996
Kestirilen R ²	0.991
Yeterli Kesinlik (Adequate Precision)	98.625
C.V. %	1.244
PRESS	135.916

C.V.%, modelin değişkenlik katsayısının yüzde olarak gösterilmesinden ibarettir ve tek başına bu değer anlamlılığı irdelenemez. Fakat görel olarak küçük değişkenlik katsayılı tasarımlar daha makuldür (Myers ve Montgomery, 2002). Bu değer (1.244) ile dE değişkeni için oluşan 3.476 değeri ile kıyaslanmasının ise istatistikî olarak hiçbir anlamı yoktur.

Görel olarak küçük PRESS değerlerinin, oluşturulan modelin sağlamlığının göstergesi olduğu yukarıda söylenmişti. Viskozite cevap değişkeni için PRESS değeri 135.916 gibi yüksek bir değer olmuştur. Bu değer yüksekliği e_i teriminden ziyade, yüksek h_{ii} değerlerinden kaynaklanmaktadır. Bir sonraki kısımda açıklanan kaldıraç grafikleri incelenirse bir çok h_{ii} değerinin 1.0'a yaklaştığı, dolayısıyla PRESS değerinin şişmesine sebep oldukları görülebilir. Eğer 5 deney noktası yok sayılmasaydı, bu değer hesaplanamaz olacaktı.

Çizelge 4.14'te R² değerleri incelenecek olursa bu değerlerin dE'nin değerlerinden çok az düşük; ama 0.70 değerinden çok büyük oldukları görülür. Kestirilen ve Ayarlı R² değerleri arasındaki fark |0.005| olup, 0.2 değerinden çok çok düşüktür. Dolayısıyla bu model ölçülen veriye uymaktadır ve sağlıklıdır.

Son olarak, Çizelge 4.14'te verilen cevap değişkeni için yeterli kesinlik (adequate precision) ya da sinyal/gürültü oranı viskozite için 98.625 olarak bulunmuştur ve 4.0 değerinden oldukça yüksek olduğu için model sağlıklı kabul edilmelidir.

4.5.1.6 Viskozite için Kestirim Denklemi

Yukarıda da ifade edildiği üzere viskozite modeli ölçüm yetersizliğinden kaynaklanan sorunlardan dolayı sağlıklı modellenememiştir. Bu duruma bir de KDT'lerin doğasından kaynaklanan dikey olmama (non-orthogonality) sorunu ve görelî olarak dar deęişim aralıklı bileşenler (D ve E) eklenince, Çizelge 4.15'teki gibi yüksek yanıtıcı regresyon katsayıları, yüksek standart hatalar ve eş-doęrusallıklardan yani doğrusal bağımlılıklardan dolayı da yüksek VIF deęerleri elde edilmektedir. Bu cevap deęişkeni için VIF deęerlerinin görelî olarak yüksek olmasının bir sebebi de kullanılan modelin doğrusal deęil karesel olmasıdır. Zira karesel ve daha yüksek dereceli modeller için VIF deęerleri oldukça yüksek deęerler alabilmektedir. Bu konu Bölüm 3.7'de anlatılmıştır.

Çizelge 4.15 Viskozite cevap deęişkeni için model terimleri ve bazı istatistikî göstergeleri.

Bileşen	Katsayı Tahmini	df	Standart Hata	Güven Aralıkları (95% CI)		VIF
				Alt	Üst	
1.gün	-0,516	4				
2.gün	-0,279					
3.gün	0,781					
4.gün	0,004					
5.gün	0,009					
A-Pigment	179,217	1	5,048	168,877	189,557	68,233
B-Dispersan 1	64,677	1	3,469	57,571	71,784	47,897
C-Solvent	50,528	1	3,016	44,349	56,706	61,484
D-Dispersan 2	-8609,069	1	971,214	-10598,512	-6619,626	425990,568
E-Dispersan 3	14634,050	1	1634,950	11285,007	17983,093	393462,001
AD	22301,497	1	2483,954	17213,348	27389,647	201445,236
AE	-36972,193	1	4201,688	-45578,961	-28365,424	167581,849
AF	-1,888	1	0,791	-3,509	-0,267	1,571
BC	32,930	1	14,995	2,213	63,646	43,786
BD	88,723	1	11,120	65,945	111,501	6,587
BG	1,948	1	0,715	0,483	3,413	1,333
DF	-5,816	1	2,036	-9,988	-1,645	1,636
DG	-7,446	1	1,911	-11,360	-3,532	1,366

Dispersan 2 (D) ve 3 (E) için elde edilen regresyon katsayıları çok yüksek olmasına rağmen istatistikî olarak hiçbir anlamları yoktur. Bu deęerleri düşürmek için

uygulanabilecek olan A-sözde-bileşen dönüşümleri ve standartlaştırmalar yapılmasına rağmen hiçbirisi bu model için yeterince etkili sonuçlar üretememiştir. Fakat buna rağmen bir çok yazara göre yüksek VIF değerleri ve dar değişim aralıklarından kaynaklanan anlamsız regresyon katsayıları ve standart hata değerlerine rağmen KDT'ler için oluşturulan modeller çalışmaktadır (Statease Inc, 2007; 2008 – kişisel iletişim)

Kullanılan yazılım (Design-Expert) bu değerleri hesaplarken SEK regresyon yöntemini kullanmaktadır ve piyasada KDT oluşturmakta kullanılabilir tüm PC yazılımları (Minitab, JMP, MODDE ve Nemrod-w) benzer yöntemleri kullanmaktadır. Dayanıklı regresyon ve sırt regresyon yöntemlerini kullanan bir yazılım geliştirilirse bu değerlerin indirilebilme ve daha sağlıklı modeller elde edebilme ihtimali oluşacaktır. S-PLUS istatistikî yazılımı bu işlemleri kesme katsayılı modeller için yapabilmesine rağmen Scheffé tipi modelleri kullanamamaktadır. Bir karışım bileşeninden vazgeçmek suretiyle bu işlemler S-PLUS'ta gerçekleştirilebilir, fakat getireceği işlem yükünden dolayı pratik değildir.

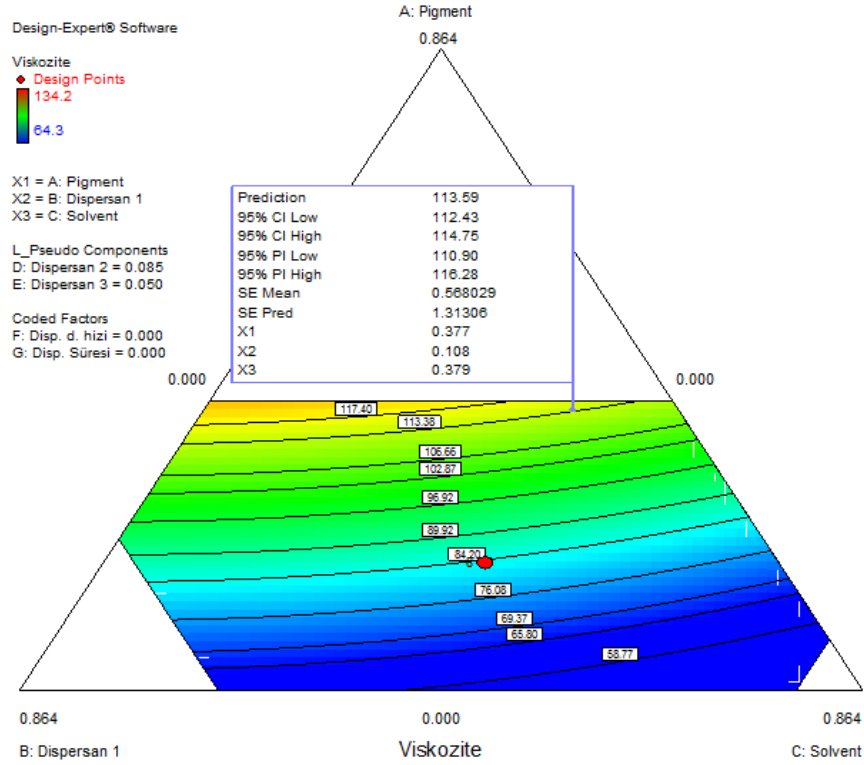
A bileşeni, Çizelge 4.15'ten de görüleceği üzere, dE değişkeni için olduğu gibi viskozite değişkeni için de en yüksek katsayılı doğrusal terimdir. Bu terim viskozite cevap değişkeni için beklendiği gibi olumlu çalışmaktadır. Bu terimi, sırasıyla, B ve C terimleri takip etmektedir. DE yazılımı etkili terimler olarak A, BD, BG, DF ve DG'yi belirlemiştir. Oysa, D, E doğrusal terimlerini ve AD, AE karesel terimlerini dışarda tutacak olursak diğer tüm terimler etkili görünmektedir ve istatistikî göstergeler de bu durumu kanıtlamaktadır.

p-değerleri itibariyle etkili olduğu görülen AD ve AE terimlerinden herhangi birini elediğimizde model uyumsuzluğu etkili olmaktadır. Sonuç olarak bu terimlerin modelde kalmasına karar verilmiştir. Fakat bu model kullanılarak yapılacak viskozite kestirimlerinin tutarlı sonuçlar vermeyeceği göz ardı edilmemelidir.

Viskozite için model denklemi, A-sözde-bileşenler cinsinden, (4.30)'da verilmiştir. Bu model 13 terimlidir.

$$\begin{aligned} \text{Viskozite} = & 179.22A + 64.68B + 50.53C - 8609.07D + 14634.05E + 22302.50AD - 36972.19AE \\ & - 1.89AF - 32.93BC - 88.72BD + 1.95BG - 5.82DF - 7.45DG \end{aligned} \quad (4.30)$$

(4.30)'daki modelin eş-yükselti grafiği ve 3-boyutlu grafikleri, sırasıyla, Şekil 4.16 ve 4.17'de verilmiştir. Ayrıca, modelin farklı bileşenler için oluşturulan görüntüleri Ek-2 Şekil E.18'de verilmiştir.

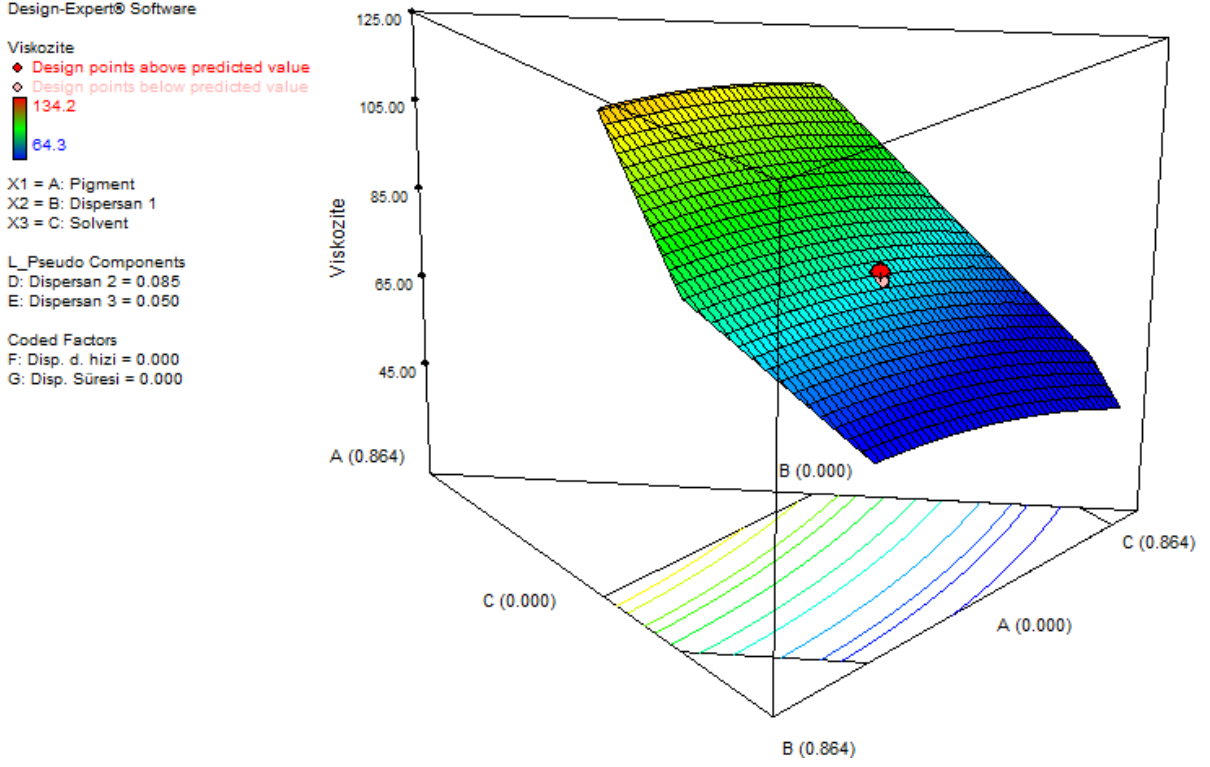


Şekil 4.16 Viskozite için eş-yükselteli karışım grafiği.

Şekil 4.16 ile Şekil 4.9 karşılaştırıldığında karesel terimlerden dolayı oluşan eğrisellik dışında ilk dikkati çeken durum gösterge tablosunda standart hata değerlerinin de (SE Mean ve SE Pred) yer aldığıdır. Bunun sebebi viskozite cevap değişkeni için oluşturulan modelin standart hata değerininin DE yazılımının varsayılan değeri olan 1.0'dan büyük (1.184) olmasıdır.

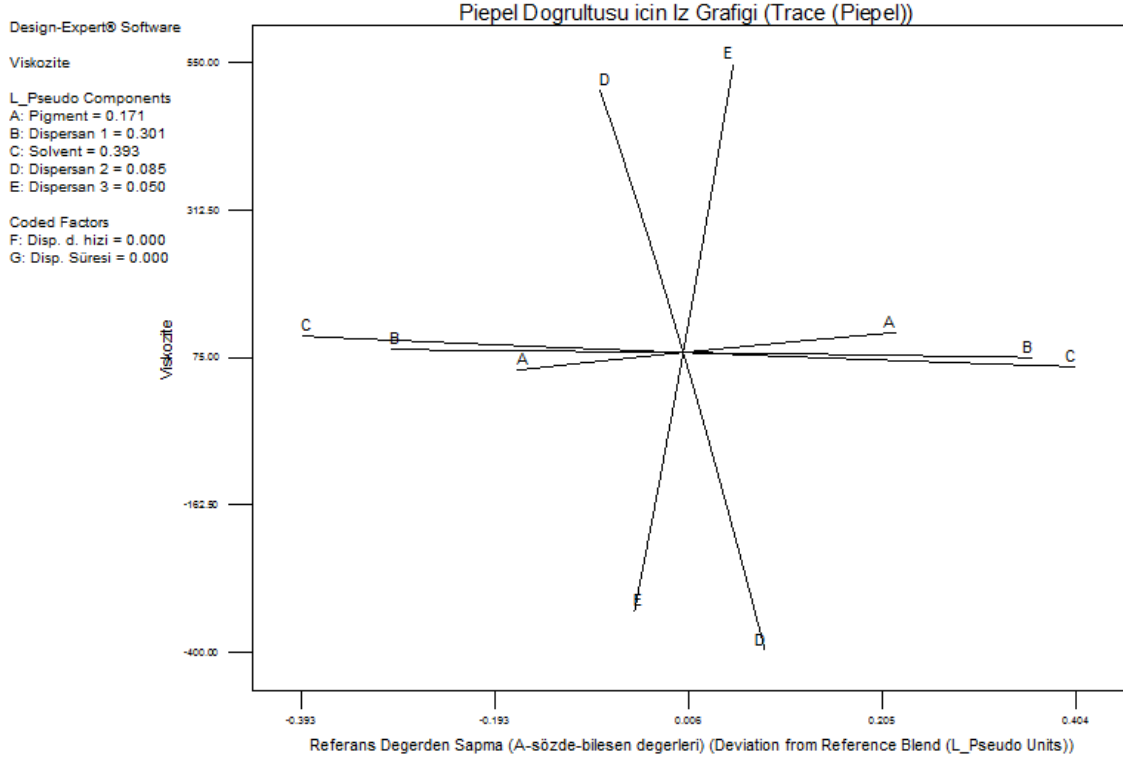
Şekil 4.17'de A bileşeninin aksenal doğrultusu boyunca gidildiğinde viskozite değerinin çok hızlı değiştiği gözlenir. Bu durum beklentilerimizle de uyuşmaktadır. Zira pigmentin doğası gereği, karışımda oranı arttıkça viskozite davranışının kararsızlığı ya da daha doğrusu tiksotropik davranışı belirginleşmektedir.

Ayrıca, Ek-2 Şekil E.18'e bakılırsa sadece dispersanların 3-boyutlu grafiğinde karışımda pigment oranının sıfır olmasına rağmen çok büyük viskozite değerleri veren yüzeylerin oluşabildiği görülebilir. Bu durum D ve E bileşenlerinin çok yüksek ama anlamsız katsayı değerlerinden kaynaklanmaktadır.



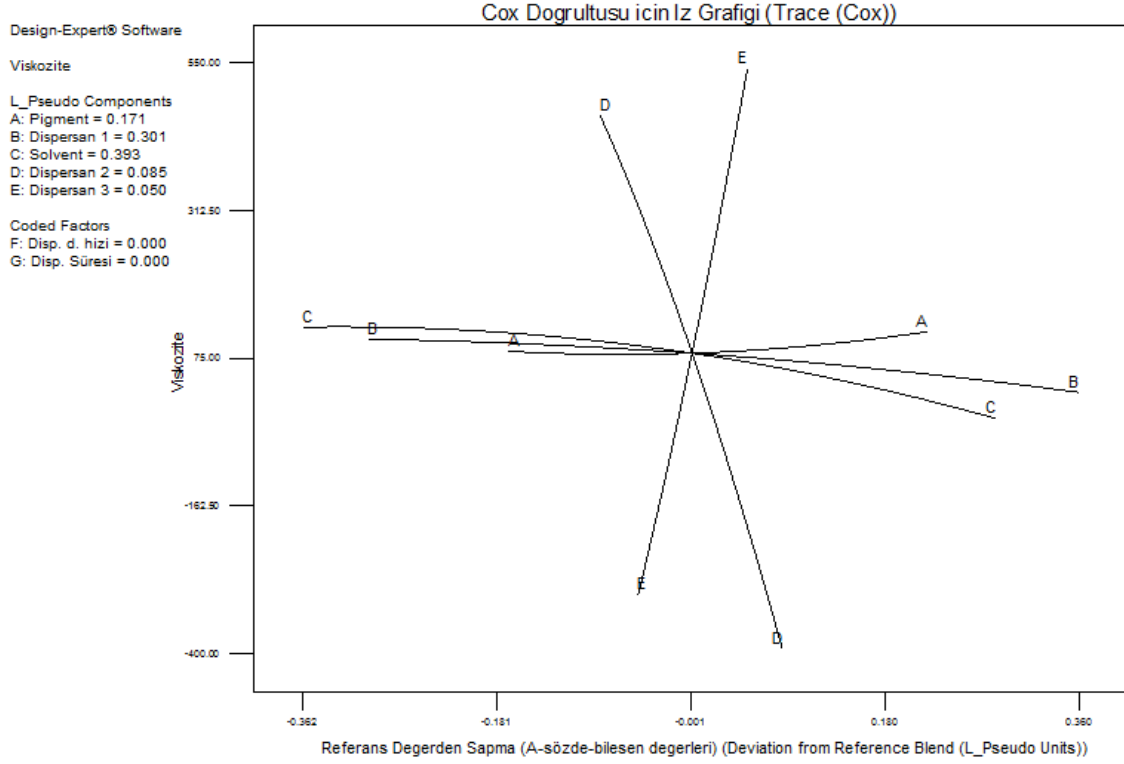
Şekil 4.17 Viskozite için 3-boyutlu karışım grafiği.

Bileşenlerin viskozite üzerindeki etkisi incelendiğinde Şekil 4.18 ve 4.19'dan, D ve E dışarıda tutulmak suretiyle, viskoziteyi en hızlı değiştiren bileşenlerin pozitif yönde A; negatif yönde ise, C olduğu görülür.



Şekil 4.18 Viskozite için Piepel doğrultulu iz grafiği.

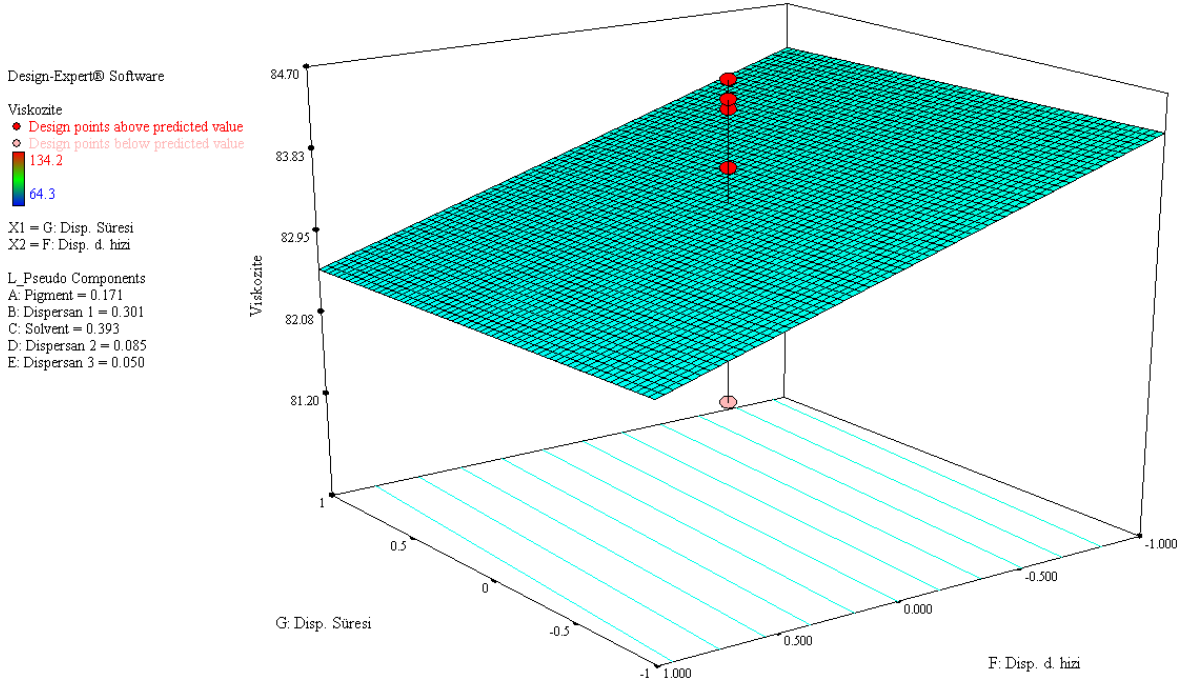
Bu iki grafik arasında ilginç bir farklılık Cox doğrultusu boyunca eğriselliklerin oluşmasıdır. Bunun sebebinin Cox doğrultusunun kısıtlı bölgede gerçek bileşenler üzerinden tanımlanması ve dar aralıklı bileşenlerden dolayı uçlara doğru sabit oranların korunamaması olduğu düşünülmektedir.



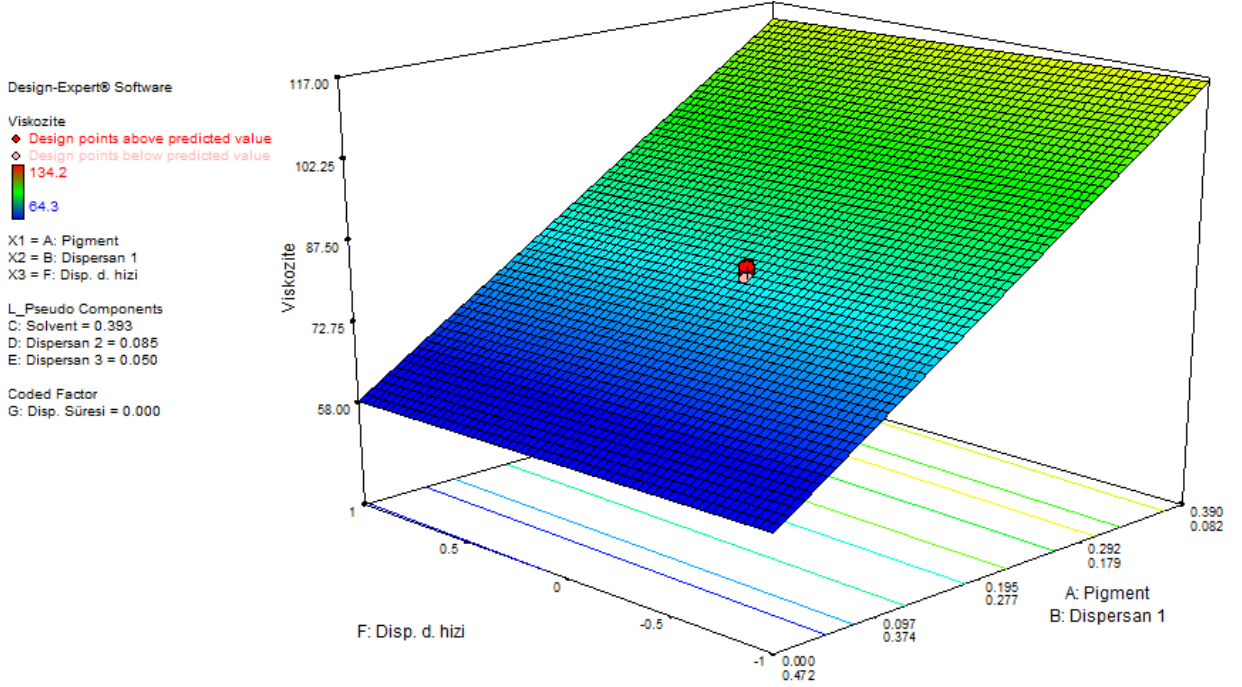
Şekil 4.19 Viskozite için Cox doğrultulu iz grafiği.

Viskozite değerinin süreç değişkenleri ile nasıl değiştiği Şekil 4.20’de verilmiştir. Grafikten anlaşılacağı üzere, dE değişkeninde olduğu gibi, viskozite değişkeni üzerinde de dispersiyon süresinin çok fazla etkili olmadığı, fakat dispersiyon devir hızının etkili olduğu anlaşılmaktadır. Bu durum tecrübelerimiz doğrultusunda beklenen ve istenilen bir durumdur. Zira endüstriyel üretimin hızlı olması enerji maliyeti, pazar beklentisi ve süreç iyileştirme gibi kritik durumları rahatlatan bir unsurdur.

Görüntüleri birbirine çok benzese de Şekil 4.21’in 4.20’den en temel fark 4.21’in iki adet ürün bileşenini (A ve B) boyut olarak kullanmış olmasıdır. Görüldüğü gibi viskozite üzerinde bileşenlerin etkisi, değişkenlerle kıyaslanamayacak kadar büyüktür. Burada viskozite ölçüğüne dikkat edilmelidir. Zira grafiklerde farklı aralıklar kullanılmıştır.



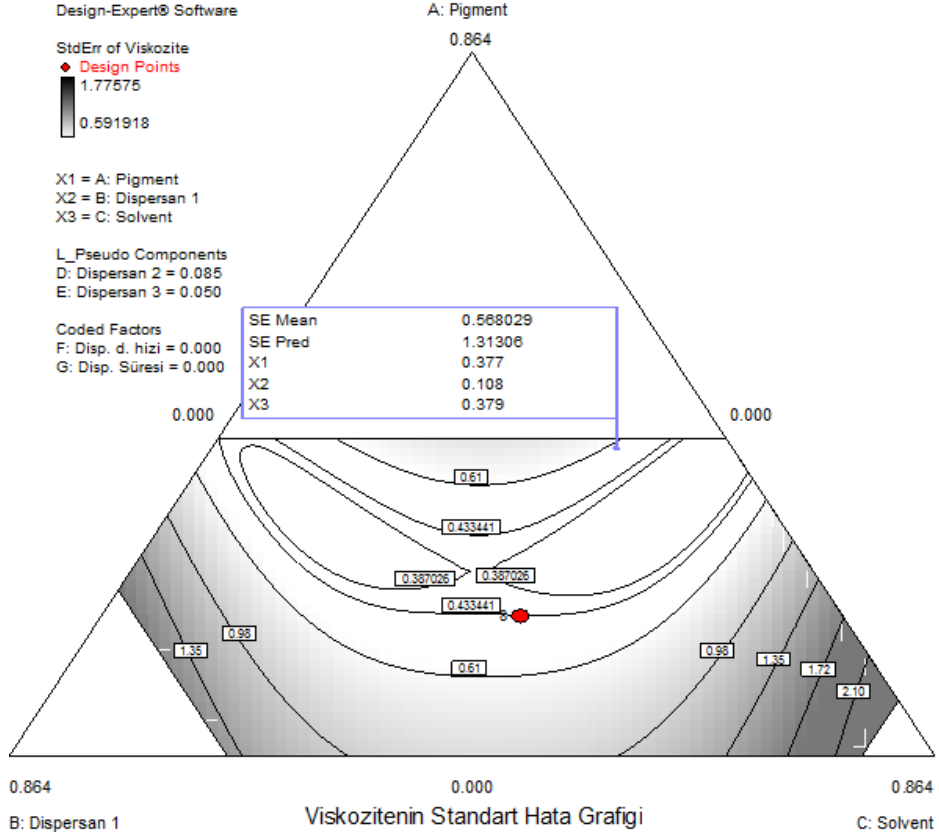
Şekil 4.20 Viskozite için süreç değişkenleri ile değişim grafiği.



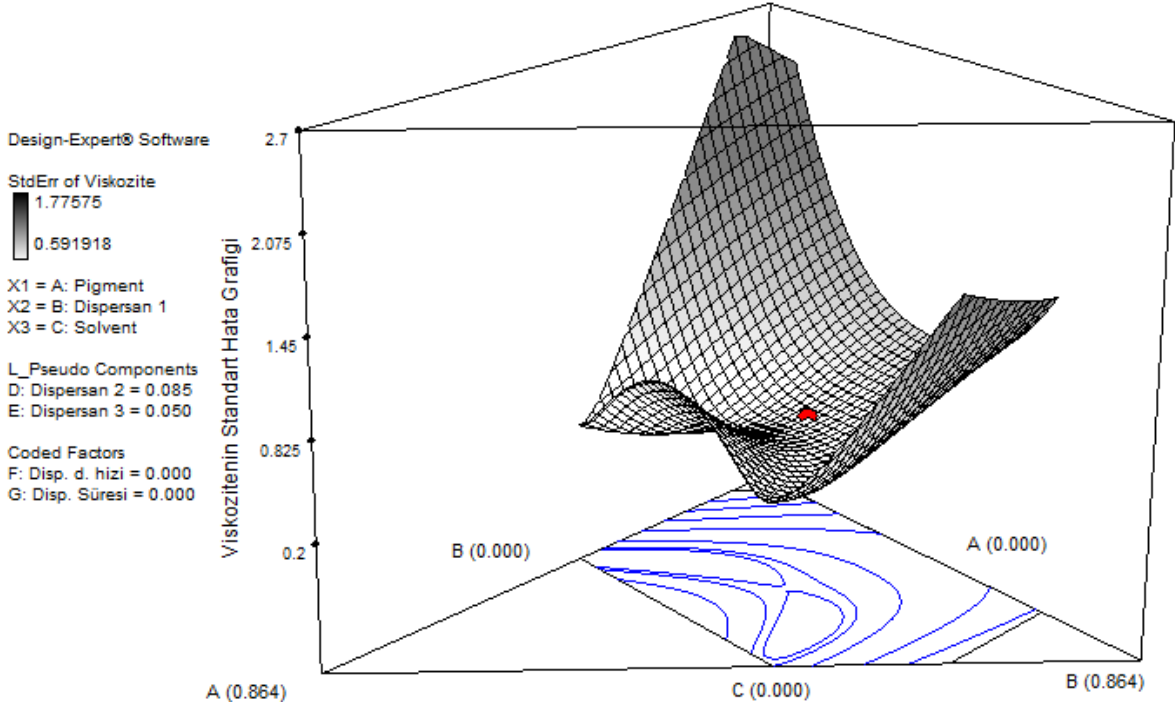
Şekil 4.21 Viskozite için 3-boyutlu karışım-süreç grafiği.

Son olarak standart hatanın bileşenlere bağlı değişkenliğini görmek için Şekil 4.22 ve 4.23 verilmiştir. Görüldüğü gibi bileşen değerlerinin uç kısımlarına doğru hata değeri çok hızlı

artmaktadır. C ve B bileşenlerinin uç değerlere yaklaşması A'ya göre standart hata değerini çok hızlı arttırmaktadır. Standart hata değerinin en düşük olduğu bölge tasarımın orta noktası civarındadır.



Şekil 4.22 Viskozite için eş-yükselteli standart hata grafiği.



Şekil 4.23 Viskozite için 3-boyutlu standart hata grafiği.

4.6 Deney Tasarımının Tanı/Yeterlilik Analizleri

Yeterlilik analizleri özellikle kavramsal hatayı (ϵ_i) temsil ettiğine inanılan artıkların (e_i) analizi üzerine kurulmuştur. Bu tür analizler model varsayımlarından ne kadar sapıldığını, aykırı noktalar ya da şüpheli noktaların tespiti, yüksek etkili veri noktaları ve planlanmamış sistematik değişkenliklerin tespiti için kullanılır. Bu tür analizler için birçok grafik mevcuttur ve genel olarak iki başlık altında incelenebilirler: teşhis grafikleri ve etki grafikleri.

Bu alt bölümde öncelikle bu grafiklerin oluşturulmasında kullanılan artıkların ölçeklendirilmesi ya da standartlaştırılması (scaling residuals) incelenecektir.

4.6.1 Artıkların Ölçeklendirilmesi/Standartlaştırılması

Önceki bölümlerde artıkların kavramsal hata ve sıradan artıklar diye aslında birbirinin benzeri olarak varsayılan hatalar ve bu hataların model kurulumundaki rolleri üzerinde durulmuştu. Bu kısımdan itibaren bu sınıflandırma sıradan ve standartlaştırılmış artıklar olarak iki başlıkta irdelenecektir.

İki sınıfa ayrılmış olan hatalardan hangisinin teşhis koyulması açısından daha anlamlı sonuçlar üreteceği çok önemlidir. Fakat burada akıldan çıkarılmaması gereken şey standartlaştırma işleminin nasıl yapıldığıdır. Çünkü standartlaştırma işlemi için artıkların değişkenlikleri ve bu değişkenliklerin karekök değeri olan standart hata değerleri kullanılmaktadır. Yani, artıkların standartlaştırılması işlemi, artık değişkenliklerinin standart hata değerlerine bölünmesi yoluyla yapılmaktadır.

İlk cümlede geçen kavramsal hata ile artık değerlerinin arasındaki benzerlik varsayımı ilişkisi aşağıda verilecektir. Eşitlik (4.23)'ten hatırlanacağı üzere uydurulan cevap değerleri ile ölçülen cevap değerleri arasındaki matematik ilişki bir doğrusal kestirici (**H**) üzerinden kurulmuştur. Ayrıca, artık değeri e_i ile ölçülen ve uydurulan değerler arasındaki ilişki matris biçiminde eşitlik (3.14)'ten ve şapka matrisinden yararlanılarak kurulabilir. Matematik olarak bu ifadeler şu şekilde gösterilebilir:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{y} \quad (4.23)$$

olmak üzere,

$$\mathbf{e} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{y} = (\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{y} \quad (4.32)$$

(4.32)'deki **I** matrisi $n \times n$ tipi bir birim kare matris; **H** ise, şapka matrisidir. Bu eşitlik artıkların ölçülen cevap değerlerinin doğrusal kombinasyonları olduğunu göstermektedir. Deney tasarımlarında kullanılan modellerin genel matris gösterimi olan eşitlik (3.18)'i kullanırsak (4.32) şu şekilde yeniden düzenlenebilir:

$$\begin{aligned} \mathbf{e} &= (\mathbf{I} - \mathbf{H})(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}) \\ &= \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{H}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + (\mathbf{I} - \mathbf{H})\boldsymbol{\varepsilon} \\ &= \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + (\mathbf{I} - \mathbf{H})\boldsymbol{\varepsilon} \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{H})\boldsymbol{\varepsilon} \end{aligned} \quad (4.33)$$

Burada $\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$ ve $\mathbf{I} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{X}$ olduğuna dikkat edilmelidir. Bu işlemlerin matematik ayrıntıları Draper ve Smith (1998) ve Weisberg'ten (2003) elde edilebilir. Eşitlik (4.32) ve (4.33) ışığında artıkların da kavramsal hatalar gibi bir doğrusal kombinasyon olduğu görülebilir.

(4.33)'ün sağ tarafını $\mathbf{A}\boldsymbol{\varepsilon}$ şeklinde kısaltılırsa (Smith, 2005) bu tür bir doğrusal kestirimin kovaryans matrisi şu şekilde hesaplanır:

$$\text{var}(\mathbf{A}\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{A}\text{var}(\boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{A}' \quad (4.34)$$

Bu eşitliğin skaler benzeri de, c herhangi bir sabit sayı ve y de rastsal bir değişken olmak üzere, $\text{var}(cy) = c^2\text{var}(y)$ biçiminde verilir.

Dolayısıyla hataların kovaryans matrisi (eşitlik (4.33)) bu veriler yardımıyla aşağıdaki biçime dönüştürülebilir:

$$\begin{aligned} \text{var}(\mathbf{e}) &= \text{var}[(\mathbf{I} - \mathbf{H})\boldsymbol{\varepsilon}] \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{H})\text{var}(\boldsymbol{\varepsilon})(\mathbf{I} - \mathbf{H})' \\ &= \sigma^2(\mathbf{I} - \mathbf{H})(\mathbf{I} - \mathbf{H})' \\ &= \sigma^2(\mathbf{I} - \mathbf{H}) \end{aligned} \quad (4.35)$$

Bu eşitlik elde edilirken 3.bölümde anlatılan ikinci G-M varsayımı ($\text{var}(\varepsilon_i) = \sigma^2$) ve $\mathbf{I} - \mathbf{H}$ matrisinin simetrik ve denkgüçlü (idempotent) olma özellikleri kullanılmıştır. Eşitlik (4.35)'in köşegen elemanları $1 - h_{ii}$ biçiminde; diğer elemanları ise $-h_{ij}$ biçiminde olacaktır.

Sonuç olarak artıkların değişkenlik ve eşdeğişkenlikleri (variance and covariance) skaler olarak aşağıdaki gibi verilebilir:

$$\text{var}(e_i) = \sigma^2(1 - h_{ii}) \quad (4.36)$$

$$\text{cov}(e_i, e_j) = -\sigma^2 h_{ij} \quad (4.37)$$

(4.37)'den kolaylıkla anlaşılacağı üzere artıkların kendi aralarında ilişim/korelasyon mevcuttur. Oysa kavramsal hataların 3.G-M şartı gereği korelasyonsuz oldukları varsayımı yapılır.

Eşitlik (4.36)'dan yola çıkılırsa artıkların değişkenliklerinin, \mathbf{x}_i deney noktalarının tasarım uzayındaki konumlarına bağlı oldukları görülür. Burada büyük bir h_{ii} (kaldıraç) değeri çok küçük bir artık değişkenliğinin oluşmasına, yani küçük artık değerinin oluşmasına sebep olacaktır. İlk görünüşte bu durum istenilir bir şeymiş gibi algılanabilir. Oysa kaldıraç değerlerinin özellikleri hatırlanacak olursa 1.0'lik bir kaldıraç değerinin tasarımın o nokta ile tam uyumluluğunun bir göstergesi olduğu görülecektir. Bu yukarıda ve bu kısmın ilerleyen bölümlerinde de anlatılacağı üzere istenmeyen bir durumdur/sorundur.

Dolayısıyla e_i 'nin doğru bir standartlaştırması, tasarım uzayındaki konumları mutlaka dikkate alınmalıdır. Standartlaştırılmış artıklar şu şekilde gösterilebilir:

$$\frac{e_i}{sh(e_i)} = \frac{e_i}{\sigma\sqrt{1-h_{ii}}} \quad (4.38)$$

Eşitlik (4.38) örneklem için yeniden yazılırsa, Studentleştirilmiş artık (Studentized residual) olarak bilinen ifade elde edilir. Bu ifade (4.39)'daki gibidir:

$$r_i = \frac{e_i}{s\sqrt{1-h_{ii}}} \quad (4.39)$$

Sıradan artıklar (e_i) yerine Studentleştirilmiş artıkları (r_i) kullanmanın en önemli avantajı: r_i 'nin sıfır ortalama değerine ve birim değişkenliğe ($s^2 = 1.0$) sahip olmasıdır. Bu biçimde yazılan hatalar hem ölçekten bağımsızdır, hem de konum etkilerini ortadan kaldırmaktadır.

İstatistik literatüründe, maalesef, bu biçimde ölçeklendirilen artıklar için birçok farklı isimler kullanılmaktadır. Bunlardan en sık kullanılan üçü, standartlaştırılmış artıklar, dâhili Studentleştirilmiş artıklar (internally Studentized residual) ve standartlaştırılmış PRESS artıklarıdır. Standartlaştırılmış PRESS artıkları olarak adlandırılmalarının sebebi, PRESS artıklarının standartlaştırılması sürecinin Studentleştirilmiş artıkları da oluşturmasıdır. Bu durum aşağıdaki matematik ilişkilerden anlaşılabilir:

$$\text{var}(e_{i,-i}) = \text{var}\left(\frac{e_i}{1-h_{ii}}\right) = \frac{1}{(1-h_{ii})^2} [\sigma^2(1-h_{ii})] = \frac{\sigma^2}{1-h_{ii}} \quad (4.40)$$

Standartlaştırılmış PRESS artıkları eşitlik (4.41)'deki gibi verilir:

$$\frac{e_{i,-i}}{sh(e_{i,-i})} = \frac{\frac{e_i}{(1-h_{ii})}}{\sqrt{\frac{\sigma^2}{1-h_{ii}}}} = \frac{e_i}{\sigma\sqrt{1-h_{ii}}} \quad (4.41)$$

Görüldüğü gibi standartlaştırılmış PRESS artığı ve standartlaştırılmış artık aynı şeyi ifade etmektedir.

Artıkları ölçeklendirmenin diğer bir yolu da i . veri noktasını regresyon analizinden elemek üzerine kuruludur. Burada standart hatanın (σ) tahmini s yerine s_{-i} 'ye dönüşür. Bu istatistikî yöntem R-student yöntemi olarak adlandırılır. DE yazılımı bu istatistik için eski versiyonlarında outlier-t ve R-student ifadelerini kullanırken yeni versiyonlarda (v7.0 ve üstü) bu istatistik harici Studentleştirilmiş artık olarak adlandırmaktadır. Ayrıca, Studentleştirilmiş artıklarda olduğu gibi, bu artık için de literatürde çok farklı isimler

kullanılmaktadır. Bunlardan bazıları şöyledir: deletion, cross-validators, jack-knife ve Studentized-deleted artıklar. Bu çalışmada harici studentleştirilmiş artık olarak adlandırılacak olan R-student artık istatistiği aşağıdaki gibi verilir:

$$t_i = \frac{e_i}{s_{-i} \sqrt{1-h_{ii}}} \quad (4.42)$$

i.ölçümü iptal edilmiş artıkların kareler toplamı, SSE_{-i} , ile normal SSE arasında (4.43)'teki gibi bir ilişki mevcuttur:

$$SSE_{-i} = SSE - \frac{e_i^2}{1-h_{ii}} \quad (4.43)$$

Dolayısıyla görece olarak büyük bir artık değeri ve yüksek kaldıraç değerinin birleşiminden, SSE için yüksek bir düzeltme faktörü (correction factor) doğacaktır (Smith, 2005). Fakat ilgilenilen değer kareler toplamından ziyade hataların kareler ortalaması (s_{-i}^2) olduğu için serbestlik derecesinin de dikkate alındığı (4.44) ifadesi bu istatistiği daha sağlıklı yansıtmaktadır.

$$s_{-i}^2 = \sqrt{\frac{(n-p)s^2 - \frac{e_i^2}{1-h_{ii}}}{n-p-1}} \quad (4.44)$$

Sonuç olarak dâhili ve harici Studentleştirilmiş artıklar arasındaki en temel fark ilkinin tüm ölçüm değerleri üzerinden yürütülüyor olmasıdır. Çalışma boyunca bütün teşhis ve yeterlilik grafikleri ya dâhili ya da harici Studentleştirilmiş artıklar üzerinden verilecektir.

4.6.2 Teşhis/Tanı Grafikleri

Aşağıda incelenecek olan teşhis grafikleri şu iki model varsayımı üzerine kurulmuştur:

1. Homojen değişkenlik varsayımı (Gauss-Markov'un ikinci koşulu: $\text{var}(\varepsilon_i) = \sigma^2$, her i için eşitlik (3.16))
2. Normal dağılım varsayımı

Bu iki koşul ANOVA'nın temel model varsayımları olan artıkların normal dağılımı ve homojen değişkenlik varsayımlarından başka bir şey değildir.

Hojjen değişkenlik varsayımının kontrolü, sıradan ya da Studentleştirilmiş artıkların uydurulmuş değerler için dağılımını veren "artıklar vs. uydurulmuş cevap değerleri" grafikleri yardımıyla gösterilir. Burada çok önemli olan bir nokta, ölçülen y değerlerinin

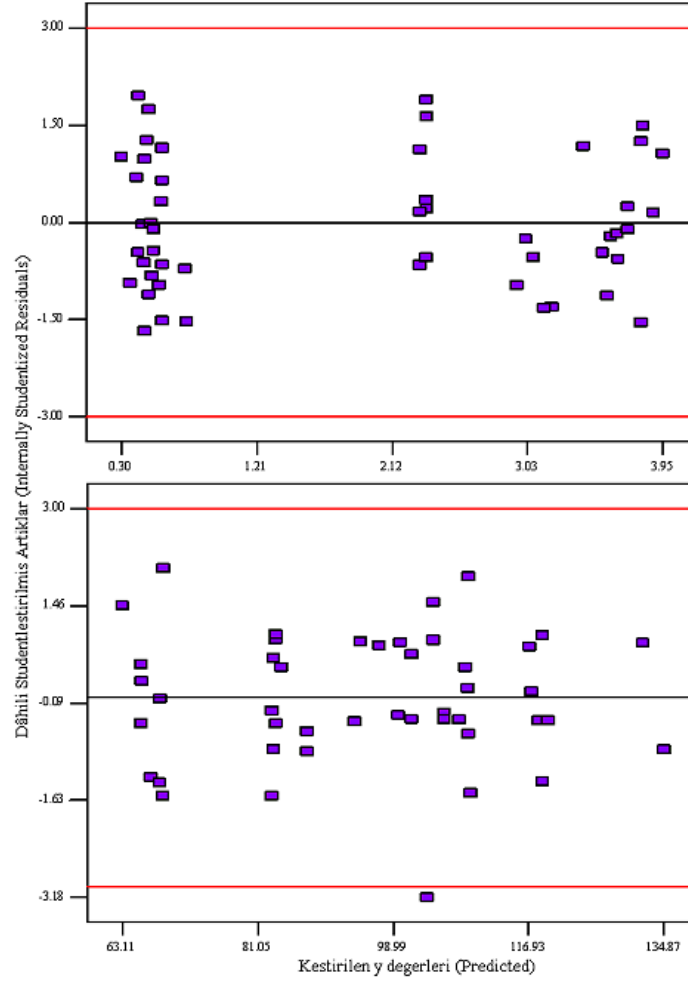
neden artıklarla karşılaştırılmadığıdır. Çünkü artıklarla y değerleri çok yüksek korelasyona ($r_{e,y} = \sqrt{1-R^2}$ burada $r_{e,y}$ hata ile ölçüm değeri arasındaki ilişim/korelasyon katsayısını göstermektedir) sahiptir, fakat uydurulan değerler için aynı durum söz konusu değildir (Draper ve Smith, 1998; Weisberg, 2003; Smith, 2005).

4.6.2.1 Artıkların Karşılaştırılması Grafikleri

Burada sunulacak olan ilk grafik artan y kestirim değerlerinin (uydurulan y değerlerinin) artıklarına göre nasıl dağıldığını gösterir ve homojen değişkenlik varsayımını kontrol eder. Eğer anlamlı bir desen -konik ya da belirgin bir geometrik şekli andıran- söz konusu değilse, dağılımın homojen olduğu ve varsayımın doğru olduğu kabul edilir. Herhangi bir dağılım deseni söz konusu ise daha çok cevap değişkenlerinin dönüştürülmesine (Box-Cox transformation) başvurulur.

Şekil 4.24 dE ve viskozite için artıkların uydurulan y değerlerine göre dağılımını göstermektedir. Bu ve bu bölümde incelenecek tüm grafiklerde üstteki grafik dE cevap değişkeni ($dE^{0.82}$) için alttaki grafik ise viskozite değişkeni için verilen grafiği göstermektedir. Şekilde herhangi bir desen söz konusu değildir ama dE için oluşan desen anlamlı olmamasına rağmen ilgi çekicidir.

Viskozite için ± 3 sigma (s) dışında kalan bir noktanın (34.deney noktası) olduğu görülmektedir. Bu noktanın verileri Ek-2 Çizelge E.7'de viskozite için teşhis raporundan elde edilebilir.



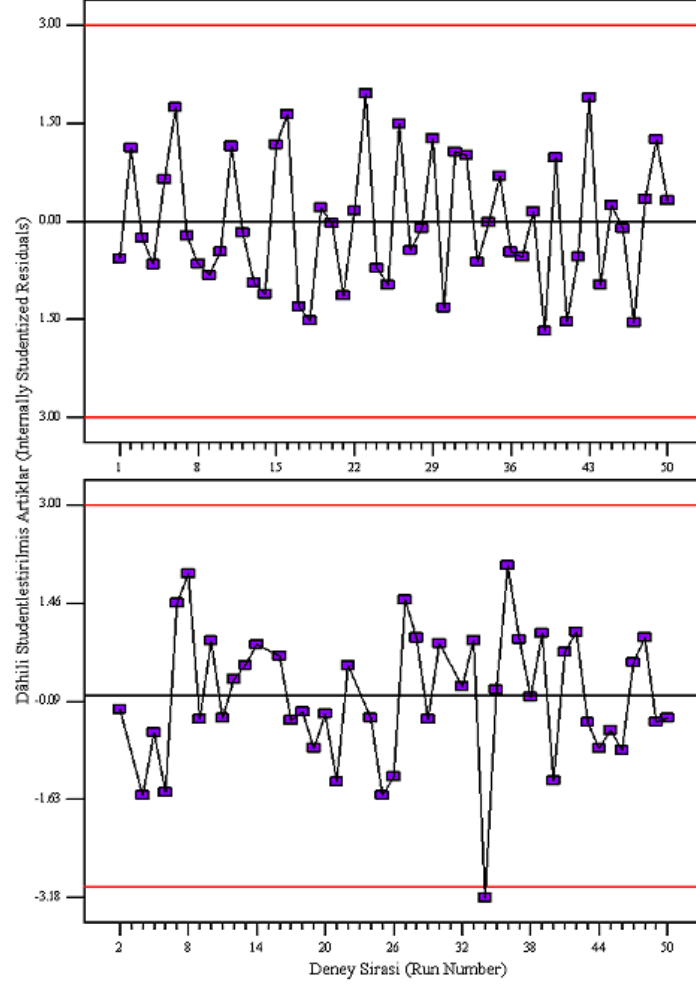
Şekil 4.24 Cevap değişkenleri için hataların cevap tahminleri ile değişimi.

Alt: viskozite, Üst: dE

Diğer taraftan gizli ya da gürültü kaynaklı, yani kontrol edilemeyen değişkenliklerin cevap üzerinde etkili olup olmadığını test etmekte artıkların deney sırasıyla değişimi grafikleri kullanılabilir. Şekil 4.25'te verilen grafik bu amaçla elde edilmiştir ve beklenen durum bu grafikte değişken değerlerinin rastgele dağılımının gözlenebilmesidir. Her iki grafikte de artıklar deney sırasına göre, mümkün oldukça, rastsal bir değişim göstermiştir ama her iki grafikte de ardı ardına üç deney noktasının benzer eğilim oluşturma yönünde çalıştığı da not edilebilir. Fakat bu durumlar İPK'lardaki mantıkla yorumlanamayacak kadar kısıtlı bir anlama sahiptir. Diğer taraftan burada da viskozite değişkeni için bir deney noktası ortalamadan ± 3 sigmalı sapmayla sınırın dışında kalmıştır (34. deney noktası).

Bloklama ve rastsallaştırma işlemleri bu tür gizli değişkenlikleri ortadan kaldırmakta oldukça faydalıdır (Myers ve Montgomery, 2002) Eğer değişim rastsal olmasaydı yani

artıklar herhangi bir eğilim (trend) takip etselerdi, bu durumun sebebi zamana bağlı bir gizli değişken olabilirdi (Weisberg, 2003).



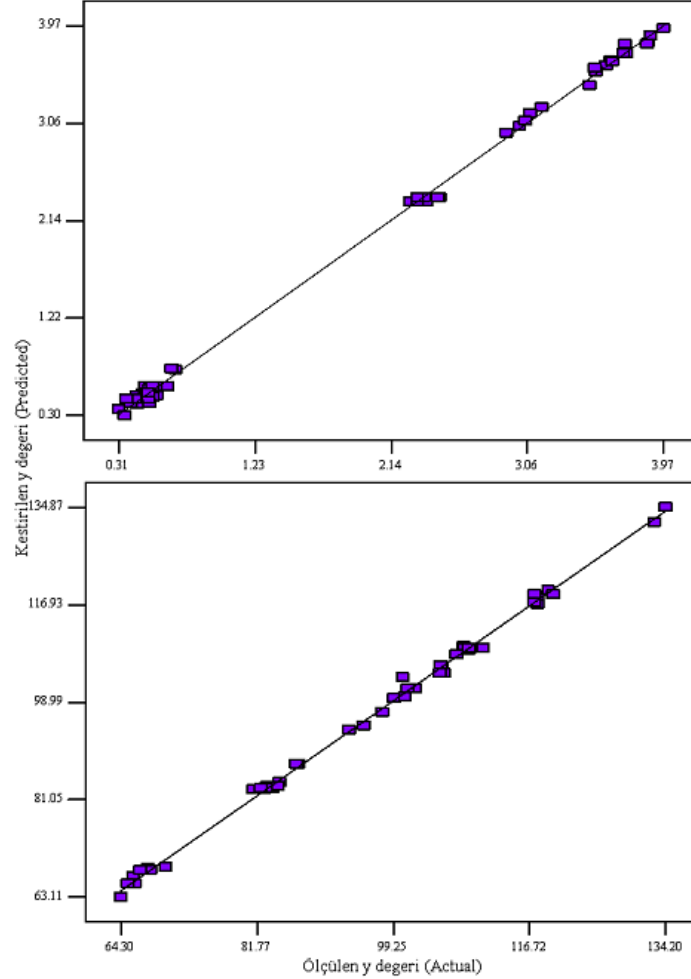
Şekil 4.25 dE (üstte) ve viskozite (altta) cevapları için artıkların deney sırasına göre değişimi.

Smith'e (2005) göre dâhili Studentleştirilmiş artıklar tam olarak t-dağılımına uymadıkları için bu dağılıma tam uyan harici Studentleştirilmiş artıkları kullanarak aykırı noktaları tespit etmek daha kolay olmaktadır. Ayrıca bu yöntem hipotez testlerini kullanmayı da mümkün kılmaktadır.

Bu kısımda son olarak kestirilen/uydurulan y değerlerinin, ölçülen y değerlerine göre nasıl değiştiğini gösteren grafikler üzerinde durulacaktır. Bu grafikler açıktır ki tahmin edilen cevap değerlerinin ölçülen değerlere göre durumunu göstermektedir.

Bu grafikten beklenen görünüm ise, verinin $y = x$ doğrusu üzerinde düzgün dağıldığının tespit edilebilmesidir. Şekil 4.26 her iki cevap değişkeni için kestirilen ve ölçülen y

değerlerinin karşılaştırmalı grafiklerini sunmaktadır. Bu grafikten de anlaşılacağı üzere, viskozite için ölçülen veriler herhangi bir dönüşüme tabi tutulmadan $y = x$ üzerinde homojen bir şekilde dağılmıştır. Ayrıca her iki grafik için de sorun teşkil edecek bir dağılım mevcut değildir.



Şekil 4.26 dE (üstte) ve viskozite (altta) cevapları için ölçülen y değerlerinin kestirim değerleri ile karşılaştırılması.

4.6.2.2 Artıkların Normal Dağılımı

Artıkların dağılım grafikleri matematik modellerin yeterliliğinin ölçümünde çok yararlı yöntemlerdir. İsminden de anlaşılacağı üzere bu test artıkların normal dağılım oluşturup oluşturmadığı üzerine kuruludur. Burada beklenen şey artık verisinin bir doğru üzerinde dağılmasıdır.

KDT tipi tasarımlarda ve bazı TYY tipi tasarımlarda belir bir dereceye kadar saçılımın olması normalliği bozan bir durum değildir (Smith, 2005). Eşitlik 4.33 skaler biçimde yazılırsa aşağıdaki eşitlik elde edilir:

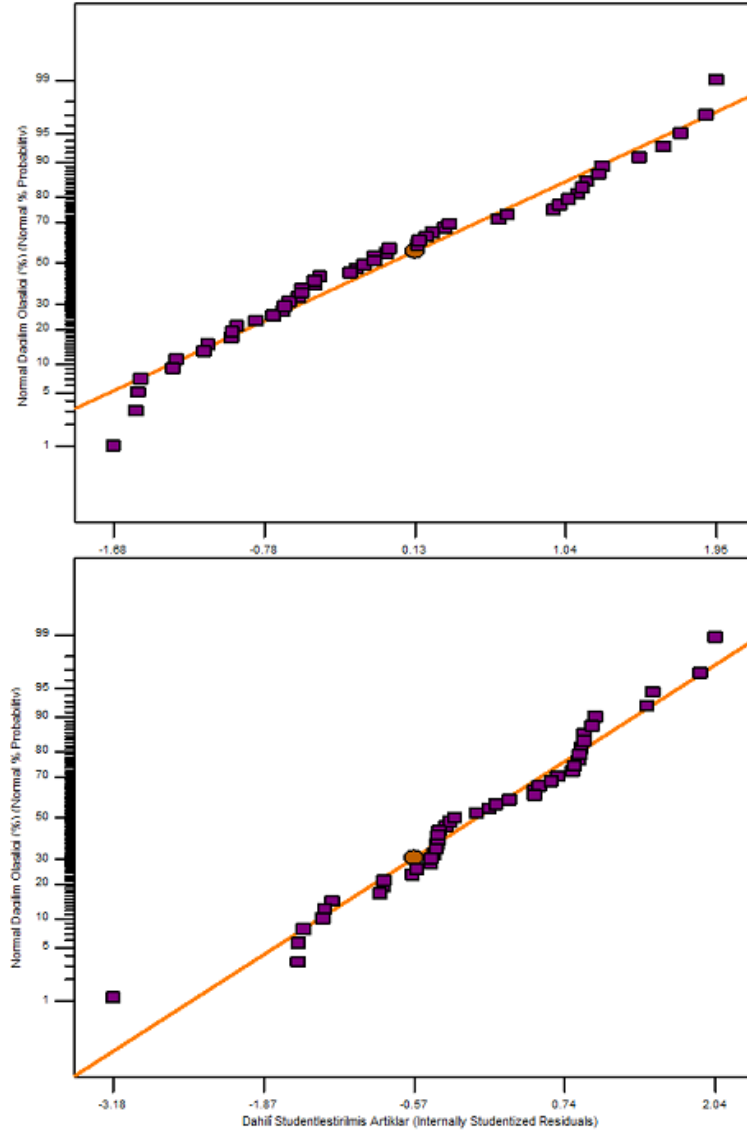
$$e_i = \varepsilon_i - \sum_{j=1}^n h_{ij} \varepsilon_j \quad (4.45)$$

Bu eşitlik, belirli bir artık değerin kavramsal hatanın doğrusal kombinasyonu biçiminde yazılabileceği anlamına gelir. Burada düşük sayıdaki örneklem için h_{ij} , görece olarak büyük olabilir ve dolayısıyla eşitliğin sağındaki terimin baskınlığı artar. Hatta kavramsal hatalar normal dağılmasa da artıkların, merkezi limit teoreminden dolayı, normale yakın bir dağılımı vardır (Montgomery, 2004). Örneklem boyutu büyüdükçe h_{ij} değerleri küçülecek ve birinci terimin baskınlığı artacaktır. Eşitlik (4.45)'ten görüleceği üzere bu durumda e_i ve ε_i değerleri birbirine yaklaşır ve benzer dağılımlar gösterirler. Sonuçta istatistikî çıkarım (inference) testleri daha sağlıklı sonuçlar verir.

Şekil 4.27'de her iki cevap değişkeni için artıkların normal dağılımı grafiği verilmiştir. Bu cevaplara ait modellerin artık değerlerinin normal dağılım gösterdikleri söylenebilir.

Birçok DT uzmanına göre ancak "S" şeklinde bir dağılım biçimi söz konusu ise, model transformasyonlarına başvurulmalıdır (Weisberg, 2003; Statease Inc., 2008; Minitab Inc, 2008)

Diğer taraftan etkilerin normal dağılımda olup olmadığının kontrolünde kullanılan Shapiro-Wilks normallik testi artıkların dağılımına uygun değildir. Çünkü bu tür verilerde, özellikle KDT'lerde, yüksek miktarda oto korelasyon mevcuttur (Weisberg, 2003).



Şekil 4.27 dE (üstte) ve viskozite (altta) cevapları için artıkların normal dağılım grafikleri.

4.6.2.3 Güç Dönüşümleri için Box-Cox Grafikleri

Yukarıda da açıklandığı üzere dönüşüm işlemleri daha çok şu üç sebepten dolayı söz konusu olur:

1. Homojen olmayan değişkenliğin düzeltilmesi için,
2. Hataların normal olmayan dağılımlarının düzeltilmesi için,
3. Modelin basitleştirilmesi işlemi (simplicity of structure) için.

İlk iki sebep üzerinde daha önceden duruldu. Üçüncü sebebi biraz açıklamak gerekirse, modellerin birinci dereceden terimlerle ifade edilmesi daha yüksek terimlerle ifade

edilmesinden -etkileşimlerin birden fazla etken gerektirmesinden dolayı- daha kolaydır. Genellikle en basit model, en sade modeldir kuralına uymak daha kolaydır.

Diğer taraftan cevap ölçümlerinde yapılan/yapılacak hatanın oranı cevabın büyüklüğü ile orantılı olarak büyümektedir. Bu durum daha çok minimum ve maksimum cevap değerlerinin oranlarının on veya daha yüksek katları olması durumu dikkate alınarak yorumlanır. Yani eğer cevabın en büyük değeri ile en küçük değeri arasında on kat ya da daha yüksek bir oran varsa bu durumda cevap değişkeni dönüşüme tabi tutulmalıdır denir. Çünkü bu tür durumlar değişkenliğin homojen dağılmamasına ve normal olmayan dağılıma sebep olmaktadır (Cornell, 2002). Bununla birlikte uygulanan dönüşümler sonrası her iki sorunun da ortadan kalkacağı kesin değildir. Fakat genellikle cevap değişkenini dönüştürmek işe yarayan bir yöntemdir.

Ayrıca, Smith'e göre (2005) "süpernormallik" olarak adlandırılan durumdan dolayı tam olarak normal dağılan artıkların varlığı dönüştürme yapılması gerekliliğini açıklayacak en uygun teşhis yöntemi olmamalıdır. Burada kullanılacak ilk teşhis grafiği Şekil 4.24'te verilen Studentleştirilmiş artıkların uydurulan cevap değerleri ile değişimini gösteren grafikdir. Bu tür grafiklerde "megafon biçimli" bir artık dağılımı standart sapmanın (σ) beklenti fonksiyonunun değerine ($E(y)$) bağımlı olduğunu gösterir.

Eğer standart sapma (σ), beklenti fonksiyonunun değerine ($E(y)$) bağımlı ise, bu durumda $\sigma \sim E(y)^\alpha$ gibi bir üstel ilişki vardır denilir. Dönüştürülmüş olan y değeri $y' = y^{(1-\alpha)} = y^\lambda$ şeklinde gösterilir ve bu tür bir üstel dönüştürme işleminin değişkenliği daha kararlı hale getireceği öngörülür. Ayrıca bu tür dönüşümlerin uygulanabilmesi için cevap değişkeninin değerlerinin pozitif olması gerekmektedir. Eğer negatif değerli cevaplar söz konusu ise, uygun sabit sayılar kullanmak suretiyle bu cevap değerlerinin pozitifleştirilmesi gerekmektedir. Çizelge 4.16'da bazı güç dönüşümü değerleri ve bunlara uygun dönüşümler verilmiştir.

Bu çizelgede en dikkat çekici durum $\alpha = 1.0$, $\lambda = 0.0$ olduğu durum için söz konusudur. Bu değer için $y^0 = 1.0$ olacaktır. Yani tüm cevap değerlerinin değerleri 1.0'e eşit olacaktır. Elbette ki bu istenmeyen bir durumdur. İşte bu yüzden Box ve Cox (Cornell, 2002) kendi adlarıyla anılan ve $\lambda = 0.0$ için doğan süreksizlik sorununu gidermek için parametrik güç dönüşümü fonksiyonunu tanımlamıştır. Bu fonksiyon (4.46)'da verilmiştir:

Çizelge 4.16 Bazı güç dönüşümleri (Smith, 2005)

İlişki	α	$\lambda = (1-\alpha)$	Dönüşüm
$\sigma \sim E(y)^0$	0.0	1.0	-
$\sigma \sim E(y)^{0.5}$	0.5	0.5	\sqrt{y}
$\sigma \sim E(y)^{1.0}$	1.0	0.0	$\ln(y)$
$\sigma \sim E(y)^{1.5}$	1.5	-0.5	$\frac{1}{\sqrt{y}}$
$\sigma \sim E(y)^{2.0}$	2.0	-1.0	$\frac{1}{y}$

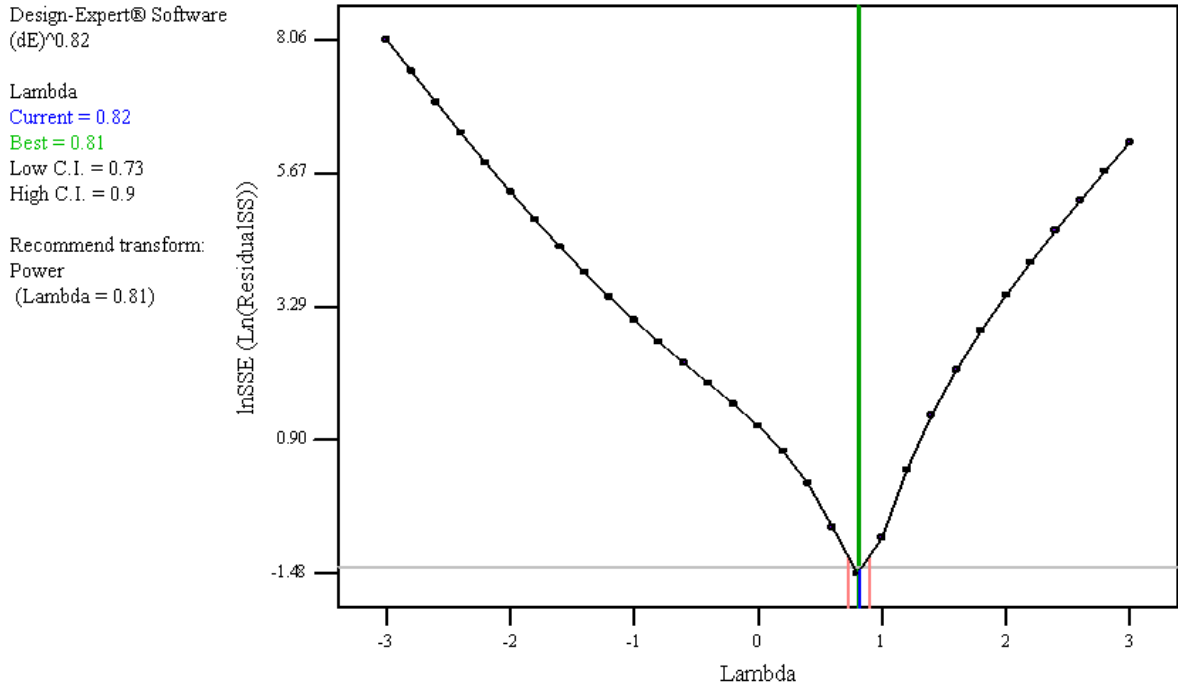
$$y^\lambda = \begin{cases} \frac{y^\lambda - 1}{\lambda} & \lambda \neq 0 \\ \ln(y) & \lambda = 0 \end{cases} \quad (4.46)$$

Bu parametrik fonksiyon yardımıyla $y^0 = 1.0$ cevap değerleri doğal logaritma fonksiyonuna ($\ln(y)$) dönüştürülmüş olur ve oluşan süreksizlik te böylelikle giderilmiş olur.

Box-Cox dönüşümleri homojen dağılım ve normal dağılım koşullarını sağlayabilecek mümkün olan en uygun λ değerlerini bulabilmek için, maksimum olasılık (maximum likelihood) yöntemini kullanmaktadır (Goupy, 2000; Smith, 2005). λ değerleri için maksimum olasılık tahmini, uydurulan model için hataların kareler toplamı (SSE) değerini minimum yapacak λ değerini bulmak üzerine kurulmuştur (Lewis vd., 1999). Bu yöntemde SSE ya da $\ln(\text{SSE})$ değerlerinin λ değerine karşı grafikleri çizilir ve λ değerinin minimum olduğu SSE değeri grafikten okunur.

Şekil 4.28 ve 4.29 da sırasıyla dE ve viskozite cevap değişkenleri için Box-Cox dönüşüm grafikleri verilmiştir. DE yazılımı dE cevap değişkeninin maksimum ve minimum değerleri için $\frac{\text{maksimum dE}}{\text{minimum dE}} = 22.4167$ gibi bir oran değerinden dolayı dönüşüm önermiştir. Yapılan dönüşüm sonrasında dE cevap değişkeni $(dE)^{0.82}$ biçiminde bir üstel cevap değişkenine dönüşmüştür. Şekil 4.28'den de görüleceği üzere önerilen en iyi λ değeri son durumda 0.81'lik bir üs değeri için üstel dönüşüm olup, başlangıçta bu en iyi λ değerinin, 0.82 olmasını önermekteydi. Bu durum yazılımın doğasından kaynaklanmaktadır ve esas uyulması gereken koşul önerilen en iyi ile sonuçta oluşan en iyi arasında çok büyük bir farkın olmamasıdır (Statease Inc., 2008).

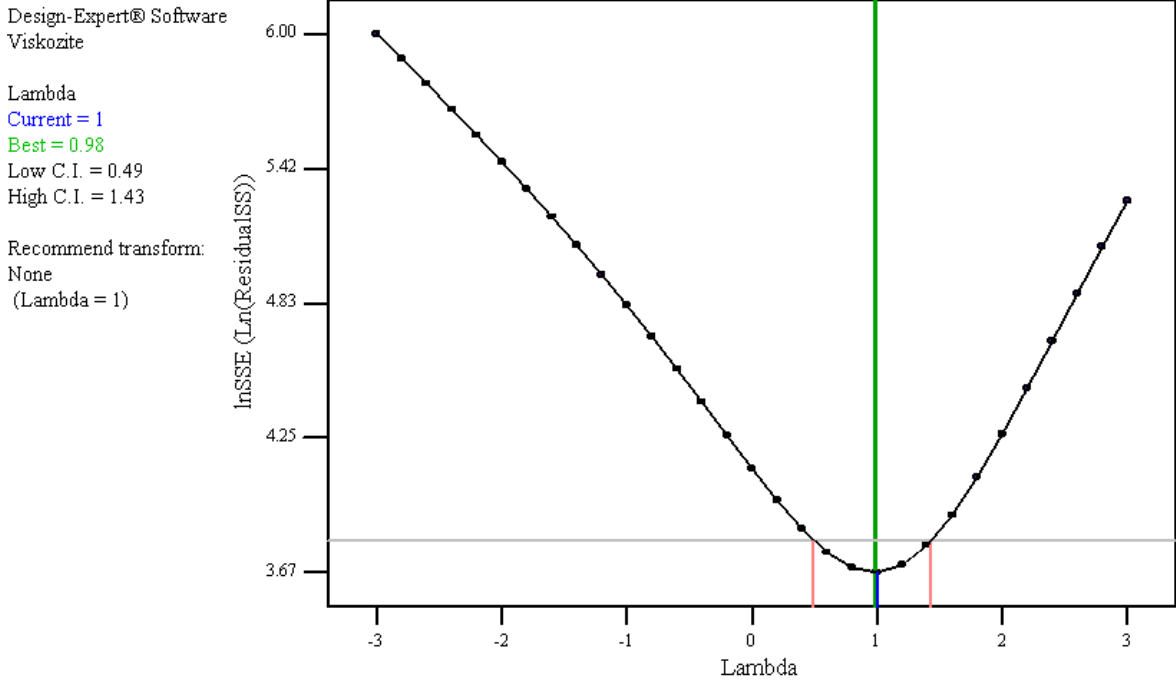
Box-Cox dönüşüm grafiğinde minimum λ değeri için oluşturulan %95'lik güven aralıkları da verilmektedir. DE yazılımı Çizelge 4.16'daki önerilen dönüşümlere benzer şekilde en iyi λ değerine karşılık gelen en yakın standart bir dönüşüm değeri önermektedir (Statease Inc., 2008). Eğer güven aralığı içinde herhangi bir standart dönüşüm değeri mevcut değilse bu durumda en iyi λ değeri için dönüşüm önerilmektedir.



Şekil 4.28 dE cevap değişkeni için Box-Cox dönüşüm grafiği.

Şekil 4.28'den de görüleceği üzere yapılan 0.82'lik üstel dönüşüm modele tam olarak uymaktadır ve bu değeri için güven aralığında standart bir λ değeri mevcut değildir. Artıkların kareler toplamı için minimum olasılık ln değeri yaklaşık -1.50 dir ve güven aralığı oldukça dar oluşmuştur. Bu nitelikler yapılan dönüşümün çok sağlıklı olduğunu göstermektedir.

Diğer taraftan Şekil 4.29'da viskozite için herhangi bir dönüşüm önerilmemektedir. Çünkü ölçülen $\frac{\text{maksimum Viskozite}}{\text{minimum Viskozite}}=2.0879$ oranı 3 veya daha büyük olmadığı için, dönüşüm yapmak anlamlı değildir. Fakat Smith (2005) tek başına bu orana bakarak dönüşüm yapmanın veya yapmanın sağlıklı olmadığını ve bu değer dışında Bonferroni kritik değerlerinin de dikkate alınması gerektiğini kaydetmektedir. Oysa diğer birçok deney tasarımcısı yapılan dönüşümlerin her halükarda istatistikî analizleri ve teşhis grafiklerini iyileştireceğini iddia etmektedir (Statease Inc., 2008; Minitab Inc., 2008)



Şekil 4.29 Viskozite cevap değişkeni için Box-Cox dönüşüm grafiği.

Şekil 4.29'dan görüleceği üzere 1.0 değeri güven aralığının içinde kalmaktadır ve DE yazılımı bu cevap değişkeni için herhangi bir dönüşüm önermemektedir. En iyi λ değeri 0.98 olup 1.0 değerine çok yakındır.

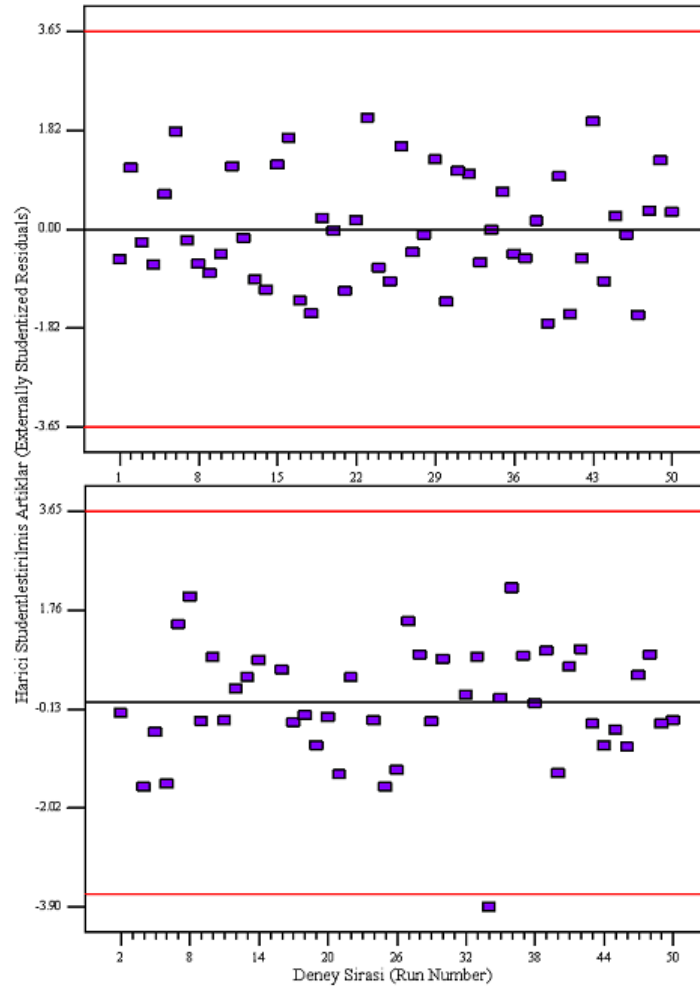
4.6.3 Etki Grafikleri

Bu tür grafikler her bir deney noktasının potansiyel ya da fiili olarak etkili olup olmadıklarını test etmek üzerine kurulmuştur. Diğer türlü söylenecek olursa etki grafikleri hangi parametre tahminleri ve uydurulmuş değerlerin tekil ölçümlerden etkilendiğini göstermek için kullanılır.

Etki grafiklerinden başlıcalar şöyle sıralanabilir: deney sırasına bağlı olarak harici Studentleştirilmiş artıkların değişimi, kaldıraç değerlerinin değişimi, DFFITS'lerin değişimi, DFBETAS'ların değişimi ve Cook mesafesinin değişimi.

y doğrultusu boyunca aşırı noktalara varmış olan her nokta aykırı nokta olarak tanımlanabilir. Bu durumu harici Studentleştirilmiş artıkların değişimi ya da standartlaştırılmış PRESS değerlerine (dâhili Studentleştirilmiş artıkların değişimi), bakarak belirlemek oldukça kolaydır.

Şekil 4.30'da her iki cevap değişkeni için harici Studentleştirilmiş artıkların deney sırasına bağlı değişimleri verilmiştir. Viskozite grafiğinde (altta) bir noktanın (34.deney noktası) ± 3 sigmalık standart sapma aralığının dışında kaldığı görülmektedir. Bu durum şu şekilde yorumlanabilir 34.deney noktası için elde edilen (ölçülen) y değeri elenerek aynı nokta için yapılacak olan kestirim değeri ± 3 sigmalık standart sapma aralığının dışında kalmaktadır. Dolayısıyla ölçülen bu nokta hâlihazırdaki modele tam olarak uydurulamamış, yani uymamış bir noktadır. Ya model ya da deney noktasının verisinin sorunlu olduğu söylenebilir. Fakat daha önce de açıklandığı üzere durum, viskozite ölçümlerinin sağlıklı olarak yapılamamasından kaynaklanmaktadır.



Şekil 4.30 de (üstte) ve viskozite (altta) cevapları için harici Studentleştirilmiş artıkların deney sırasına bağlı değişim grafikleri.

Harici Studentleştirilmiş artıkların dağılımı grafiklerinde alt- ve üst-limit değerleri çift taraflı (iki kuyruklu) t-testi için düzeltilmiş Bonferroni ($\frac{\alpha}{n}$) limit değerleridir. Bu değerler, α Tip I hata için risk değerini (bu çalışmada $\alpha = 0.05$) ve n de deney noktası sayısını göstermek üzere, (artıklar - 1) serbestlik derecesi için t-testi kullanılarak hesaplanır.

4.6.3.1 Kaldıraç Grafikleri

Bir deney noktası için kaldıraç değerleri, n , deney noktası sayısı ve r_i tekrarlanan deney noktası sayısı olmak üzere $\frac{1}{n} \leq h_{ii} \leq \frac{1}{r_i}$ aralığında değişir. Buradan kaldıraç değerinin neden maksimum 1.0 olacağı ve bu değer ancak tekrarlanan deney noktalarıyla azalabileceği, kolaylıkla, anlaşılabilir.

Kaldıraç değerleri deneyler yürütülmeden bilineceği için, baştan bilinen yüksek kaldıraç değerli noktaları tekrarlamak suretiyle bu değerler azaltılabilir. DE yazılımı tasarım aşamasında önerdiği tekrar noktalarını bu şekilde seçtiğini iddia etmektedir (Statease Inc., 2008). Ayrıca bu yöntemle D-optimum kriteri olan *arttırılmış* bilgi matrisinin determinant değerinin ($|\mathbf{X}'\mathbf{X}|$) maksimumlaştırılması da sağlanabilmektedir.

Diğer taraftan kaldıraç değerleri deney noktası verilerinin (x 'ler) merkezinden, yani orta noktadan uzaklığın standartlaştırılmış değeri olarak ta tanımlanabilir (Montgomery ve Voth, 1994). Dolayısıyla, yüksek bir kaldıraç değeri i.ölçümün, n adet ölçümün orta noktasından ne kadar uzakta olduğunun bir göstergesi olur.

1.0'lık veya yakın kaldıraç değerli noktalar cevap yüzeyinin bu noktanın çok yakınından geçmesine sebep olacaktır. Çünkü uydurulan ve ölçülen y değerleri birbirine çok yakın olacaktır. Tam 1.0 değerinde ise uydurulan ve ölçülen değerler eşit olacak ve cevap yüzeyi tam bu noktadan geçecektir. Bundan dolayı yanlış sonuçlar elde etmemek için eğer tasarımdaki deney noktası sayısını artırma imkanı yok ise en azından 1.0'lık kaldıraç değerli deney noktalarının elenmesi modellemenin daha sağlıklı olmasını sağlayacaktır. Dikkat edilmesi gereken bir diğer durum da her yüksek kaldıraç değerli noktanın regresyon katsayılarının üzerinde çok etkili olamayacağıdır. Zira eğer bu nokta tasarım uzayının (\mathbf{X}) merkezinden çok uzak olmasına rağmen diğer noktalarla benzer ya da yakın bir konumdaysa katsayı tahmin değerlerinin üzerinde etkili olmayabilir.

Bunun yanı sıra kaldıraç değerlerinin bir özeliği de uydurulmuş cevap değerlerinin (\hat{y}) değişkenlikleri, σ^2 hariç olmak üzere, kaldıraç değerlerine eşittir. Bu durum eşitlik (4.31)'de gösterilmiştir:

$$\text{var}(\hat{y}|\mathbf{x}_i) = \sigma^2 \mathbf{h}_{ii} = \mathbf{x}_i'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}_i \quad (4.31)$$

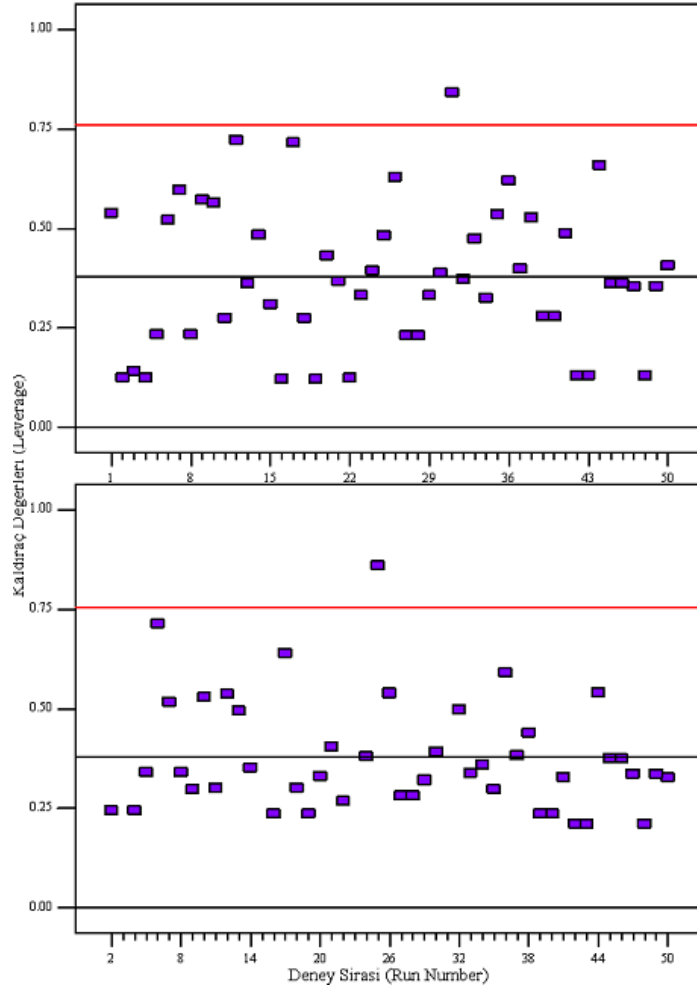
Bu eşitlik matris formunda eşitlik (3.62)'ye benzer şekilde eşitlik (4.32)'de verilmiştir:

$$(\text{var}(\hat{\mathbf{y}}))_{n \times n} = \sigma^2 \mathbf{H}_{n \times n} \quad (4.32)$$

Burada $\hat{\mathbf{y}}$ $n \times 1$ tipinde uydurulmuş değerlerin bir vektörü iken, $\text{var}(\hat{\mathbf{y}})$ $n \times n$ tipinde bir kovaryans matrisidir.

Sonuçta, uydurulmuş değerlerin iki tür değişkenliklerinin olduğu görülür. Bunlar şapka matrisinin (\mathbf{H}) köşegen değerlerinden oluşan belirli ya da belirlenimsel (deterministik) değişkenlik ve σ^2 'den kaynaklanan stokastik ya da olasılıksal (stochastic) değişkenliktir. Dolayısıyla, yüksek kaldıraç değerli uydurulmuş cevap değerlerinin, düşük kesinliği olacaktır ve yapılacak deney notası tekrarları verinin kaldıraç değerinden kaynaklanan sözde önemliliğini azaltıp, kesinliğini de arttırmış olacaktır.

Şekil 4.31'de her iki cevap değişkeni için kaldıraç değerlerinin deney sırasına göre değişimi verilmiştir. Ortalama kaldıraç değerlerinin iki katından daha yüksek değerler sorunlu görülmektedir (Statease Inc., 2008). Grafiklerde bu durum için üst sınır çizgileri verilmiştir. Her iki cevap değişkeni için de birer adet deney noktasının kaldıraç değerleri ortalama değer iki katından yüksektir. Fakat bu yüksek kaldıraç değerleri ait olduğu deney noktaları itibariyle, diğer etki grafiklerinden de görüleceği üzere, etkili değildir. Ayrıca her iki cevap için bu noktalar farklı deney noktalarıdır ve 1.0 değerine çok yakın olmadıkları için ve elenmeleri model uyumsuzluğuna, viskozite için, yol açtığı için tasarımdan çıkarılmamıştır. Kaldıraç değerleri Ek-2'de Çizelge E.6 ve E.7'de verilmiştir.



Şekil 4.31 dE (üstte) ve viskozite (altta) cevapları için kaldıraç değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafikleri.

4.6.3.2 DFFITS ve DFBETAS Grafikleri

En açık ifadesiyle DFFITS değeri her deney noktasının kestirim değerinin üzerindeki etkisini ölçmek için kullanılır. $DFFITS_i$ değeri, tüm uydurulmuş y değerleri (\hat{y}_i) kullanılarak uydurulan model durumu ile i .ölçümün (deney noktasının) elenmesi sonucu tahmin edilen i . y değeri ($\hat{y}_{i,-i}$) kullanılarak oluşturulan model durumunda, her iki y değeri arasında oluşan farkın bir ölçüsüdür. $DFFITS_i$ değeri hem pozitif hem de negatif değerler olabilir. Bu durum kestirilen ve ölçülen y değerlerinin büyüklüklerine bağlıdır ama her durumda uydurulan y değeri ile $DFFITS_i$ 'nin değişim yönleri farklı olacaktır.

DFFITS uydurulan y değerleri arasındaki fark (DiFference of FITS) anlamına gelmektedir. Bu değer eşitlik (4.47)'deki payda değerinden dolayı standartlaştırılmıştır ve standart sapma birimleri ile ifade edilebilir (Montgomery, 2004). $DFFITS_i$ değerleri yüksek kaldıraç

değerleri ile şişen; düşük kaldıraç değerleri ile azalan harici Studentleştirilmiş artık değerleridir. Bu sonuçlar eşitlik (4.48)'den çıkartılabilir:

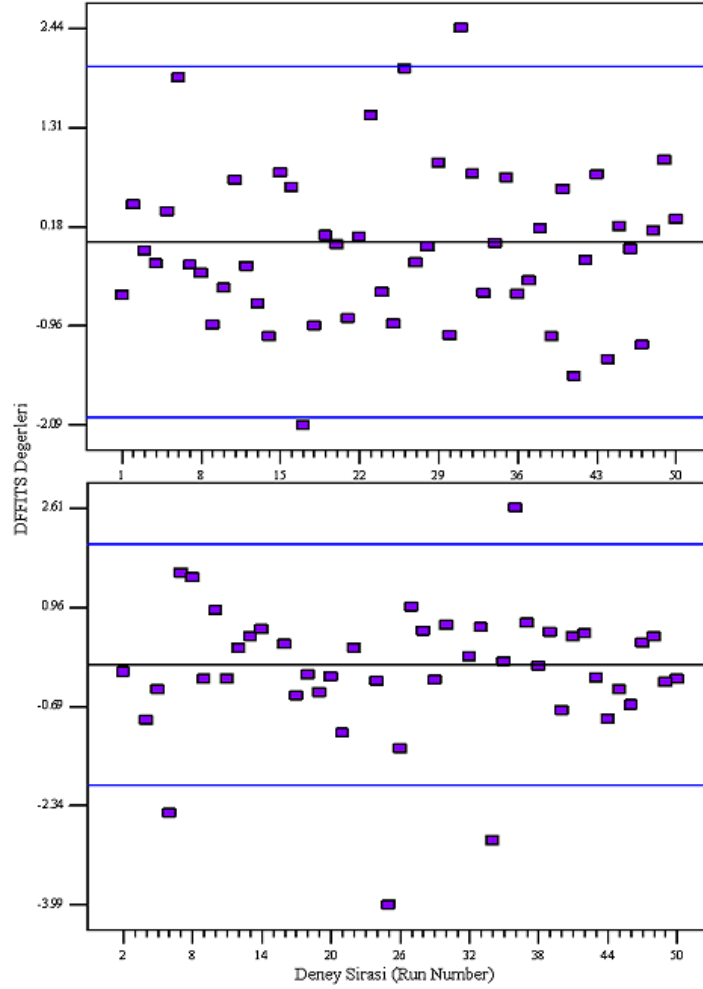
$$DFFITS_i = \frac{\hat{y}_i - \hat{y}_{i,-i}}{s_{-i} \sqrt{h_{ii}}} \quad (4.47)$$

$$DFFITS_i = t_i \left(\frac{h_{ii}}{1 - h_{ii}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.48)$$

Başka türlü söylenirse, DFFITS değeri veri kümesinden i.noktanın elenmesi durumunda uydurulan \hat{y}_i 'de oluşan değişimin tahmin edilen standart sapma değeridir (Belsley vd., 1980). Belsley vd. (1980) bu istatistikî ölçüt için, p modeldeki terim sayısını ve n deney noktası sayısını göstermek üzere, $|DFFITS_i| > \sim 2 \sqrt{\frac{p}{n}}$ kriterini önermişlerdir. Bu sınır değerinden büyük olan değerler, üzerinde durulması gereken değerlerdir. Ayrıca küçük ya da orta ölçekli veri kümeleri için DFFITS_i değerinin 1.0'ı aşmaması gerektiği; büyük veri kümeleri için ise, $2 \sqrt{\frac{p}{n}}$ değerini aşmaması gerektiği belirtilmektedir (Minitab Inc., 2008).

Şekil 4.32'de DFFITS değerlerinin deney sırası ile değişimi gösterilmektedir. Viskozite için tam dört deney noktası değeri oluşturulan ± 2 'lik sınırların dışında kalmıştır. Fakat burada korkulacak bir durum yoktur. Eğer sağlıklı viskozite ölçümü yapılabilirse ve/veya deney noktaları sayısı bu değişken için arttırılırsa bu değerlerin oluşma riski azalacaktır. Diğer taraftan dE değişkeni için hiçbir deney noktasının, kurulan model için, y tahmin değerleri üzerinde belirgin bir etkisi yoktur. DFFITS değerleri Ek-2'de Çizelge E.6 ve E.7'de verilmiştir.

DFBETAS istatistikî ölçütü ise, her deney noktasının her bir regresyon katsayısı üzerindeki etkisini ölçmekte kullanılır. DFBETAS_{j,i} biçiminde gösterilir ve j.regresyon katsayısı için i.deney noktasının elenmesi durumunda ortaya çıkan standart hataların sayısını ifade eder. İstatistiki terimlerle ifade etmek gerekirse DFBETAS_{j,i}, b_j'nin i.deney noktası (yani i.ölçümü) elenmiş en küçük kareler tahmin edicisi olan her b_{j,-i}, j = 1,2,...,p, için b_j ve b_{j,-i} arasında oluşan farkın bir ölçüsüdür (Belsley vd., 1980). Bu ölçüt değeri yüksek bir artık değeri ile görel olarak yüksek bir kaldıraç değerinin varlığı durumunda yüksek değerler alır (Myers ve Montgomery, 2002).



Şekil 4.32 de (üstte) ve viskozite (altta) cevapları için DFFITS değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafikleri.

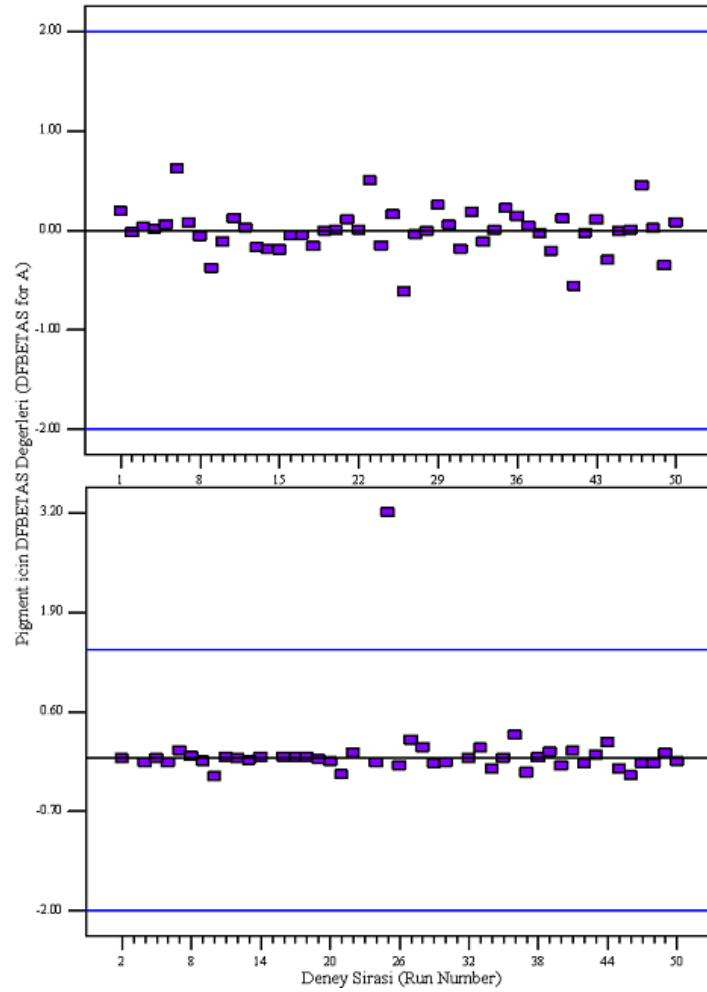
DFBETAS_{j,i} eşitlik (4.49)'daki gibi verilir. Burada c_{jj} kovaryans matrisinin [(X'X)⁻¹] j.köşegen elemanını göstermektedir ve b_j'nin, σ² hariç olmak üzere, değişkenliğini göstermektedir.

$$DFBETAS_{j,i} = \frac{b_j - b_{j,-i}}{s_{-i} \sqrt{c_{jj}}} \quad (4.49)$$

Dolayısıyla bu ölçüt i.deney noktasının veri kümesinden elenmesi durumunda tahmin katsayısı b_j'nin değişmesi sonucu oluşan, tahmin edilen standart hataların sayısını göstermektedir.

Belsley vd. (1980) bu istatistikî ölçüt için ise, yine p modeldeki terim sayısını ve n deney noktası sayısını göstermek üzere, |DFBETAS_{j,i}| > ~ $\frac{2}{\sqrt{n}}$ kriterini önermişlerdir. Bu ölçütün değerleri tek bir regresyon hesabının tüm ölçümler için uygulanması sonucu hesaplanır. Bu konuda ayrıntılı analizler Belsley vd.'den (1980) elde edilebilir.

Şekil 4.33'te pigment bileşeni için DFBETAS değerlerinin deney sırası ile değişimi gösterilmektedir. Diğer terimler için grafiklerin bazıları Ek-2'de verilmiştir. Görüldüğü gibi DFFITS'in aksine bu ölçüt için, viskozite değişkeni modelinde, sadece bir noktanın pigment teriminin regresyon katsayısı üzerinde etkisi yüksektir. dE değişkeni için ise, hiçbir deney noktasının pigment teriminin regresyon katsayısı üzerinde etkisi yoktur. Bu ölçütün limit değerleri DFFITS ile aynıdır (± 2 sigma).



Şekil 4.33 dE (üstte) ve viskozite (altta) cevaplarında pigment bileşeni için DFBETAS değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafikleri.

4.6.3.3 Cook Mesafesi

Bölüm 3'te incelenen güvenilirlik elipsleri (Şekil 3.24) tekrar hatırlanacak olursa, burada farklı Tip I hata riskleri için birçok farklı güvenilirlik elipsleri ya da elipsoidal güvenlik bölgeleri oluşturulabileceği görülür. İstatistikî matematik açısından, %100(1- α)'lık birleşik güvenilirlik bölgeleri için \mathbf{b} vektörü ile gösterilen parametrelerin tahminleri (\mathbf{b}^*) eşitlik (4.50) ile verilir:

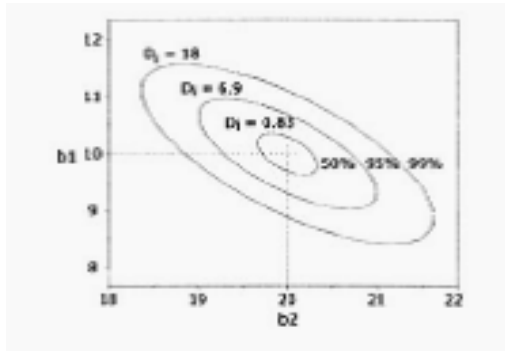
$$\frac{(\mathbf{b}^* - \mathbf{b})' \mathbf{X}' \mathbf{X} (\mathbf{b}^* - \mathbf{b})}{ps^2} \leq F_{\alpha; p, n-p} \quad (4.50)$$

Burada $F_{\alpha; p, n-p}$ değeri, p payın serbestlik derecesini ve n-p de paydanın serbestlik derecesini göstermek üzere, dağılımın üst kuyruğunda α 'lık bir olasılık değeri bırakan F-dağılım değerini göstermektedir. Bu eşitsizliği pratik DT amaçları için kullanmak oldukça zordur.

Cook \mathbf{b}^* parametre tahmin vektörünün değerini i. veri noktası elenmiş olan tasarımda $\boldsymbol{\beta}$ 'nin en küçük kareler tahmini olan \mathbf{b}_{-i} ile değiştirmek suretiyle eşitlik (4.50)'nin değişik ve daha kullanışlı bir biçimini geliştirmiştir (Draper ve Smith, 1998). Bu şekilde oluşturulan ve D_i ile gösterilen ölçüğe Cook mesafesi adı verilmiş olup, (4.51)'deki gibi gösterilebilir:

$$D_i = \frac{(\mathbf{b}_{-i} - \mathbf{b})' \mathbf{X}' \mathbf{X} (\mathbf{b}_{-i} - \mathbf{b})}{ps^2} \quad (4.51)$$

D_i mesafesi ölçeklendirilmiş karesel bir mesafe ölçütü olup \mathbf{b} ve \mathbf{b}_{-i} vektörlerinin aralarındaki mesafe olarak nitelendirilir. Çeşitli risk değerleri için güvenilirlik elipsitleri Şekil 4.34'te verilmiştir:



Şekil 4.34 b_1 ve b_2 parametreleri için birleşik güvenilirlik elipsitleri (Smith, 2005)

Şekil 4.34'ten de görüldüğü üzere güvenlik bölgelerini risk değerlerinin yanı sıra Cook mesafeleri cinsinden de ifade etmek mümkündür. Risk değeri azaldıkça ($\%100(1 - 0.05)$, $\%100(1 - 0.09)$), Cook mesafesinin değeri (6.90, 18.00) artmaktadır. D_i değeri ne kadar büyük ise, elips \mathbf{b} parametre vektöründen o kadar uzaklaşır.

Eşitlik (4.51) incelendiğinde iki önemli ayrıntı fark edilebilir: Birincisi, D_i 'deki alt-indisten de anlaşılacağı üzere her ölçüm değeri ya da deney noktası için ayrı bir Cook mesafesi değeri vardır. İkincisi, Cook mesafesi i.deney noktasının elenmesi durumunda katsayı tahminlerinin SEK vektöründe oluşan etkinin birleşik (composite) ölçüsüdür.

(4.51)'deki terimler yeniden düzenlenirse, Cook mesafesi eşitlik (4.52)'deki gibi de tanımlanabilir. Bu eşitliğin eldesinde devrik matrislerin bir özelliği olan $\mathbf{B}'\mathbf{A}' = (\mathbf{AB})'$ özelliği kullanılmıştır:

$$D_i = \frac{[\mathbf{X}(\mathbf{b}_i - \mathbf{b})]'\mathbf{X}(\mathbf{b}_i - \mathbf{b})}{ps^2} = \frac{(\hat{\mathbf{y}}_i - \hat{\mathbf{y}})'(\hat{\mathbf{y}}_i - \hat{\mathbf{y}})}{ps^2} = \frac{\sum_{j=1}^n (\hat{\mathbf{y}}_j - \hat{\mathbf{y}}_{j,i})^2}{ps^2} \quad (4.52)$$

Burada $\hat{\mathbf{y}}_i$ vektörü bir deney noktası elendikten sonra uydurulan modelde, elenen deney noktası için y değeri kestirilmiş $n \times 1$ tipinde bir vektördür.

Yukarıdaki (4.52) paydaki matris çarpımlarının sonucu skalerdir. (4.52) eşitliği i.ölçümü elendikten sonra \mathbf{b} vektörünün n adet uydurulmuş değerini kestirmekte kullanılan birleşik bir ölçüdür (Weisberg, 2003). ps^2 hariç olmak üzere D_i değeri, Öklid mesafesinin karesi olup, i.ölçüm elendiğinde uydurulmuş değerlerin vektöründe oluşan yer değiştirme miktarını ifade eder (Snee, 1977).

Cook mesafesi için üçüncü ifade ise, (4.53)'teki gibi oluşturulabilir. D_i değerleri daha çok bu ifade kullanılarak hesaplanır. Bu ifade regresyon analizinde bir veri noktasının elenmesi durumunda ortaya çıkan değişimin bir ölçüsü olarak tanımlanır:

$$D_i = \frac{r_i^2}{p} \left(\frac{h_{ii}}{1-h_{ii}} \right) \quad (4.53)$$

Yukarıdaki ifadede (4.53) eğer yüksek kaldıraç değerleri varsa ve buna eşlik eden yüksek Studentleştirilmiş artıklar mevcutsa, sonuçta, yüksek Cook mesafesi değerleri oluşur. Yani Cook mesafesi dâhili Studentleştirilmiş artık değerlerinin karesinin tekdüze (monoton) kaldıraç fonksiyonu ile çarpımına eşittir. Bu tür yüksek D_i değerli noktalar incelenmelidir.

Yüksek D_i değerleri, genellikle, ya kayıt hatalarından, ya uygun olmayan modellerden ya da diğer deney noktalarından çok uzakta (aykırı) bir ölçüm değerinden kaynaklanmaktadır.

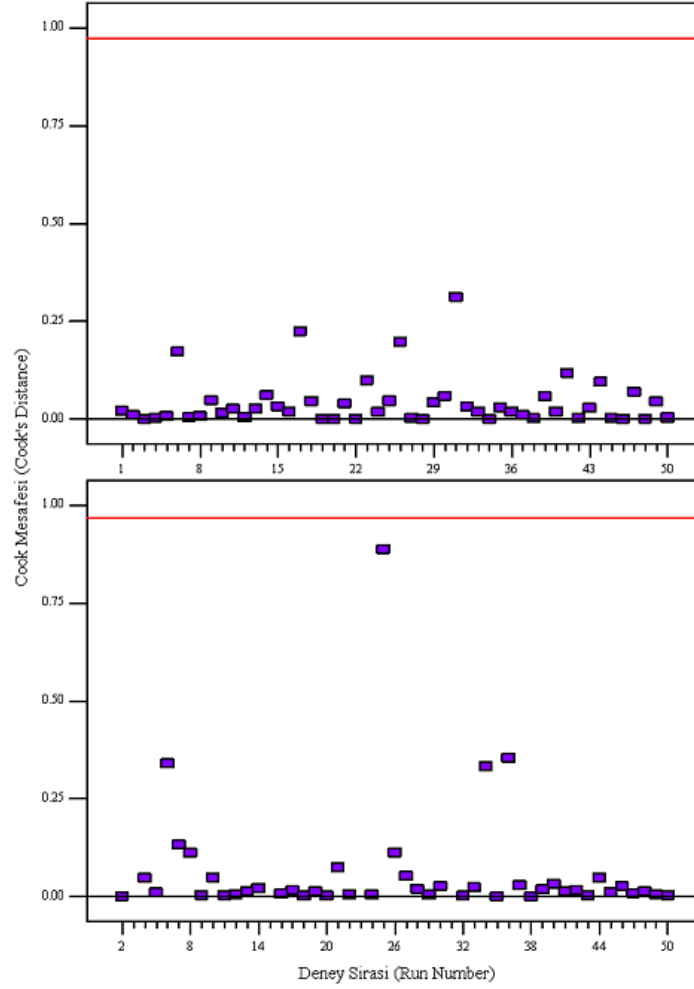
Mükemmel kurulmuş dengeli bir dikey dizide Cook mesafesi ile harici Studentleştirilmiş artık değerleri hemen aynı bilgiyi verecektir (Statease Inc., 2008).

Dolayısıyla, D_i değeri şu iki durumdan etkilenmektedir:

1. i . deney noktası için modelin model uyumsuzluğunun bir göstergesi olan rastsal r_i (Studentleştirilmiş artık) değerinin boyutu,
2. Bağımsız değişken uzayında i . deney noktasının konumunu gösteren h_{ii} kaldıraç değeri,

Cook mesafesinin limit değerleri F-dağılımının $F_{df-model, df-artık}$ değerinin %50'si kullanılarak oluşturulur. Bu F-değeri birçok F-dağılımında 1.0 değerine yakındır. Dolayısıyla $D_i = 1.0$ değerli bir deney noktası sınırlar üzerinde kalacaktır. Yani bu noktanın elenmesi durumunda modelde anlamlı bir değişiklik oluşacaktır. Eğer değer 1.0'den küçük ise bu durumda ilgili noktanın elenmesinin modelde anlamlı bir değişikliğe yol açmayacağı söylenir (Myers ve Montgomery, 2002; Montgomery, 2004). Yani bu deney noktasının elenmesi durumunda regresyon katsayılarının tahminlerinde çok büyük bir değişme olmayacaktır. Sonuç olarak $D_i > 1.0$ için deney noktasının etkili bir nokta olduğu söylenir (Weisberg, 2003).

Şekil 4.35'te her iki cevap değişkeni için Cook mesafelerinin deney noktaları ile değişimi verilmiştir. Bu grafiklerden de anlaşılacağı üzere sadece viskozite değişkeni için bir adet deney noktasının regresyon katsayılarının üzerinde etkisi büyüktür. Bu nokta için oluşan D_i değeri 0.887 olup 1.0'e çok yakındır. Her iki cevap değişkeni için de üst-limit değeri 0.97'ler civarında oluşmuştur.



Şekil 4.35 de (üstte) ve viskozite (altta) cevaplarında Cook mesafesi değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafikleri.

Son olarak DFFITS değerleri ile Cook mesafeleri kıyaslanacak olursa, yüksek bir kaldıraç değeri ile birleşen yüksek bir artık değer her iki ölçütün de en yüksek değerlerine ulaşmasına sebep olacağı görülebilir.

4.7 Tasarım için Çoklu-Cevap Optimizasyonu

Deney tasarımları sonucu oluşturulan istatistikî modeller ilgili süreçlerin/ürünlerin performanslarının daha iyi anlaşılması için kullanılabileceği gibi ürün ya da süreç bileşenlerinin en iyi değerleri için performans göstergelerinde (cevap değişkenlerinde) istenilen en iyi yani optimum niteliklerin ya da beklentilerin elde edilmesinde de kullanılabilirler. Örneğin istatistikî optimizasyon cevap değişkeninin hangi parametreye daha hassas tepki verdiğini ya da hangisine daha duyarsız olduğunu tespit etmek ve

ürünlerin doğa ve piyasa koşullarında dayanıklı ve rekabetçi olmasını sağlamak için kullanılabilir.

Optimizasyon yöntemleri ilk olarak sarp yokuş/iniş (steepest ascent/descent) yöntemiyle başlamıştır. Bu yöntem tek-cevabın türevlenebilir (diferansiyeli alınabilir) sürekli bir doğrusal modelin eğimini temel alır. Cevabın teorik olarak deneye tabi tutulabildiği ve ölçülebildiği bir uygulama bölgesinin olduğu varsayımı ile başlanır. Bu yöntemde temel mantık ardışık olarak veri analizini gerektiren ve bu yolla tasarım bölgesinde sarp yokuş ya da inişin mevcut olup olmadığını irdelemek üzerine kuruludur. Eğer böyle bir eğriselliğin olduğu nokta mevcut ise, bu durumda tasarımın ikinci ya da daha yüksek bir model için artırılması yoluna gidilir. Bu yöntemde kanonik (normal) analiz (canonical analysis) denir ve amaç mümkün olan en basit matris formlarını -köşegen matrisi gibi- elde edip ilgili amaç için kullanmaktır. Sarp yokuş/inişte olduğu gibi bu yöntemde de fonksiyonların eğimi yani birinci türev değerleri kullanılır. Fakat fonksiyonlar karesel ve birinci türevi alınabilir nitelikte olmalıdır.

Herhangi bir deney tasarımında cevaplar için oluşturulan modellerle her bir cevaptan beklenen hedef değerler yani amaçlar söz konusudur. Bu hedefler minimum, maksimum, aralık içinde kalma ya da net bir hedef değer olabilir. Birçok endüstriyel uygulamada birden çok cevap değişkeni için optimizasyon yapılmaktadır. Çoklu-cevap optimizasyonları (multiple-response optimization) olarak adlandırılan bu tür optimizasyonlar için çok çeşitli yöntemler geliştirilmiştir (Del Castillo, 2008). Bu yöntemlerden süreç endüstrilerinde en yaygın olarak kullanılanı Taguchi dayanıklı parametre tasarımının ve TYY'lerin kullandığı ikili-cevap problemi (dual-response problem). Burada amaç eşzamanlı olarak ortalama ve değişkenliğin minimize edilmesidir (Nair, 1992; Myers ve Montgomery, 2002).

Çoklu-cevap optimizasyonunun söz konusu olduğu tasarımlarda kullanılan birçok teknik zaman ve maliyet açısından masraflı olabilmektedir. Karışım ya da ürün formülasyonu için uygulanan tasarımlarda daha çok bileşen kısıtlarının ayarlanması ile elde edilen maksimum değişim aralıkları optimizasyon için uygun bölgeler olarak kullanılabilir. Kısıtların kullanıldığı optimizasyon yöntemine kısıtlı optimizasyon (constrained optimization problem) denilmektedir (Smith, 2005). Burada birincil önemde atanan cevap değişkeni diğer cevapların kısıtlarına bağlı olarak maksimum ya da minimum için zorlanır. Bu maksimumlaştırma/minimumlaştırma işlemi genel indirgenmiş eğim (generalized reduced gradient) yöntemini ya da Nelder-Mead simpleksi gibi türev-bağımsız yöntemlerini kullanmaktadır (Smith, 2005; Del Castillo, 2008).

Diğer taraftan, bu yöntemin alternatifi olarak tüm cevapları tek bir bileşik cevap değişkenine dönüştüren ve bu bileşik cevabın optimizasyonunu sağlayan yöntem güncellik kazanmıştır. Bu yöntem istenirlik fonksiyonu (desirability function) üzerine kuruludur ve ilk defa E.C. Harrington tarafından 1960'lı yıllarda önerilmiştir (Del Castillo, 2008). Daha sonra bu yöntem G. Derringer ve R. Suich tarafından geliştirilmiştir (Smith, 2005). Günümüzde DE ve Minitab gibi birçok DT ve istatistik yazılımı bu yöntemin değiştirilmiş biçimlerini kullanmaktadır. Diğer taraftan Montgomery (1997) bu iki yazar tarafından önerilen ve istenirlik fonksiyonlarını ağırlıklandırmakta kullanılan geliştirilmiş geometrik ortalama yöntemini “maximin” stratejisi olarak adlandırılan tekil kıstaslarla birleştirmeyi önermiştir.

Genel olarak istenirlik fonksiyonları herhangi bir özellikler kümesini tek bir amaç fonksiyonuna çeviren fonksiyonlardır. Eğitim temelli optimum nokta/yüzey arayışındaki aksine birinci türevin mevcut olmadığı nokta ya da noktaların varlığı, istenirlik fonksiyonun en önemli ayrıntısıdır (Smith, 2005).

Optimizasyon yöntemleri kullanılan matematik veya geometri yöntemlerine bağlı olarak ikiye ayrılır. Bunlar nicel optimizasyon ve grafik optimizasyon olarak adlandırılmaktadır.

4.7.1 Nicel Optimizasyon

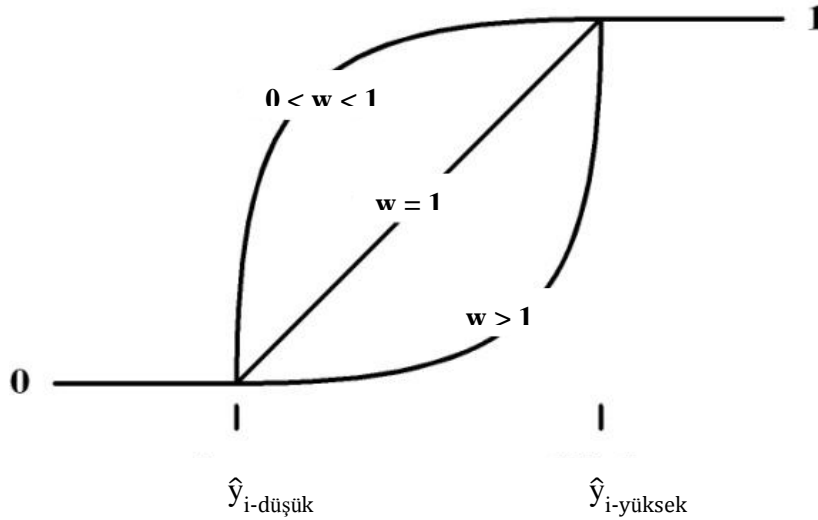
Nicel/Sayısal optimizasyon (numerical optimization) istenirlik fonksiyonunu temel alır. Bu yaklaşımda her bir uydurulan y değeri (\hat{y}_i) değeri, d_i ile simgelenen ve $0.0 \leq d_i \leq 1.0$ aralığında tanımlı olan istenirliklere dönüştürülür. Açıktır ki bu gösterimde istenirlik değeri 1.0 veya buna yakın olan değerler kabul edilir yani istenilir değerlerdir. 0.0 ise tersi durumu ifade eder.

Eğer bir KDT'de r adet cevap değişkeni ölçülüyorsa, buradaki istenirlik değerleri d_1, d_2, \dots, d_r ile gösterilir. Toplam istenirlik ise D ile gösterilir ve tüm bu tekil istenirliklerin geometrik ortalaması olarak tanımlanır:

$$D = (d_1 d_2 \dots d_r)^{\frac{1}{r}} \quad (4.54)$$

Bu ifadeden açıktır ki eğer herhangi bir tekil istenirlik değeri 0.0 ise, toplam istenirlik değeri de sıfır olacaktır. Zaten aritmetik ortalama yerine geometrik ortalamanın kullanılmasının sebebi de budur (Stateae Inc., 2008).

DE yazılımı istenirlik fonksiyonunu maksimum yapmayı amaçlar. Burada hedef sorgusu rastgele bir noktadan başlar ve “en sarp eğimi” bulmayı amaçlar (Stateae Inc., 2008). Doğaldır ki TYY’lerde eğriselliklerden dolayı bir veya daha fazla maksimum nokta söz konusu olabilir. Her bir parametre için maksimum ve minimum limit değerlerinin belirlenmesi gerekmektedir. Bu yöntemde amaç cevaplar için maksimum değer, minimum değer, hedef değer, aralık değeri olabilir. Faktörler için ise kesin istenilen değerler konulabilir. Şekil 4.36’da hedefin maksimum olduğu istenirlik fonksiyonunun görüntüsü verilmiştir. Bu grafikte w simgesiyle gösterilen değerler ağırlık (weight) anlamına gelmektedir. Bu değer DE yazılımında 0.10 ile 10.0 arasında değer almaktadır ve optimizasyon sürecinin bu hedef için en iyi çözüm araştırmasındaki hassasiyetini göstermektedir. Değer 0.1’e yakınken optimum hedef değerini tam karşılamayan bir çok çözüm bulunması mümkünken; 10.0’a yakın bir hassasiyet değeri optimum hedefe çok yakın ya da onu da aşan hedef çözümler bulunmasını sağlar.



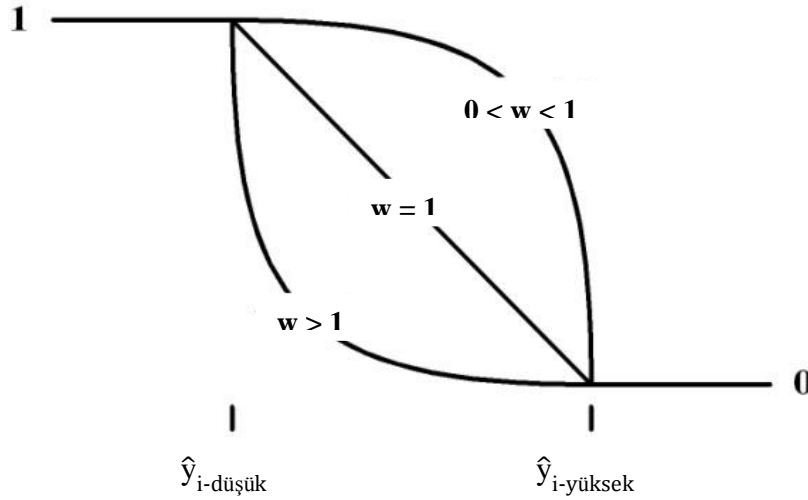
Şekil 4.36 Sayısal optimizasyon için hedefin maksimum olduğu istenirlik görüntüsü.

Maksimum hedef için istenirlik fonksiyonunun üç değişim bölgesi mevcuttur. Bu bölgeler ve bölgelere ait matematik fonksiyonları eşitlik (4.55)’te verilmiştir:

$$d_i = \begin{cases} 0 & \hat{y}_i < \hat{y}_{i-düşük} \\ \left(\frac{\hat{y}_i - \hat{y}_{i-düşük}}{\hat{y}_{i-yüksek} - \hat{y}_{i-düşük}} \right)^w & \hat{y}_{i-düşük} \leq \hat{y}_i \leq \hat{y}_{i-yüksek} \\ 1 & \hat{y}_i > \hat{y}_{i-yüksek} \end{cases} \quad (4.55)$$

$w > 1.0$ 'lı bir üstel değer için grafikten de görüleceği üzere iç bükey (concave) bir eğri oluşur; $0 < w < 1.0$ için ise, dış bükey (convex) bir eğri oluşur.

Optimum hedef minimum olursa Şekil 4.37'deki gibi bir istenirlik fonksiyonu görüntüsü oluşur.



Şekil 4.37 Sayısal optimizasyon için hedefin minimum olduğu istenirlik görüntüsü.

Burada da ağırlık değerlerinin (w) yorumu benzer şekilde yapılabilir. Minimum hedef için istenirlik fonksiyonunun üç değişim bölgesi mevcuttur. Bu bölgeler ve bölgelere ait matematik fonksiyonları eşitlik (4.56)'da verilmiştir:

$$d_i = \begin{cases} 1 & \hat{y}_i < \hat{y}_{i\text{-düşük}} \\ \left(\frac{\hat{y}_{i\text{-yüksek}} - \hat{y}_i}{\hat{y}_{i\text{-yüksek}} - \hat{y}_{i\text{-düşük}}} \right)^w & \hat{y}_{i\text{-düşük}} \leq \hat{y}_i \leq \hat{y}_{i\text{-yüksek}} \\ 0 & \hat{y}_i > \hat{y}_{i\text{-yüksek}} \end{cases} \quad (4.56)$$

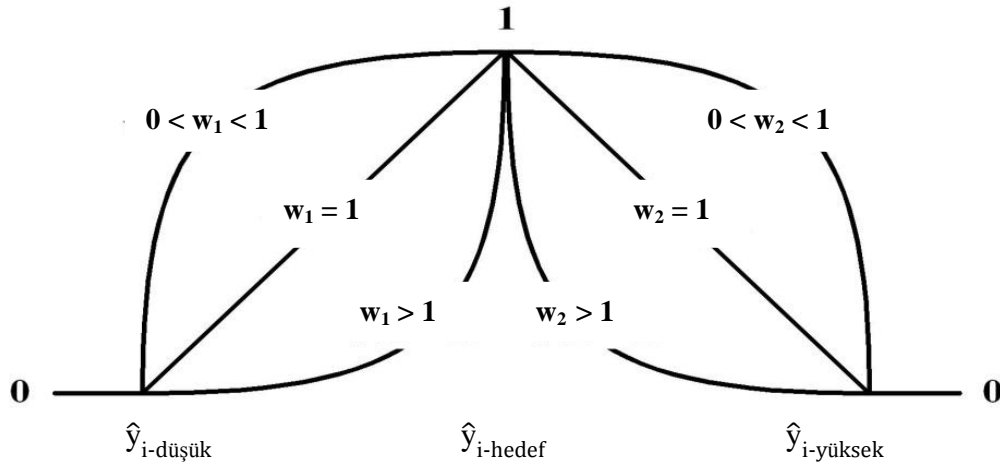
Diğer taraftan eğer amaç belirli bir hedef değere ulaşmak ise bu durumda istenirlik fonksiyonu için değer bölgesi sayısı dört olur. Bu optimum koşul için ayrıca bir duyarlılık/önem derecesi söz konusu olur. Bu derece önem (importance) olarak adlandırılmaktadır ve g ile gösterilmektedir. Önem derecesi DE yazılımında 1 ile 5 arasında bir tamsayı değeri alır ve bir cevap değişkeninin diğerlerine göre önemini ifade eder. Eğer bir cevap değişkeni diğerine göre daha kritik ise, önem derecesini 5 (DE yazılımında beş adet + işareti (++++)) olarak atamak bu cevabın istenilen hedefe götürülmesinin diğerlerinden daha önemli olduğunu ifade eder. Eğer tüm cevap değişkenleri aynı önemdeyse g değeri 3 (DE'de +++) olarak seçilebilir. Toplam istenirlik

fonksiyonu önem derecesi (g) için yeniden tanımlanacak olursa, ifade (4.54)'tekine benzer şekilde aşağıdaki gibi gösterilir:

$$D = (d_1^{g_1} d_2^{g_2} \dots d_r^{g_r})^{\frac{1}{(g_1 + g_2 + \dots + g_r)}} \quad (4.57)$$

Bu fonksiyonda eğer tüm cevaplar eşit önemde olursa yani tüm önem dereceleri birbirine eşit ($g_1 = g_2 = \dots = g_r$) olursa, fonksiyon eşitlik (4.54)'e eşit olur.

Şekil 4.38'de hedef değer için istenirlik fonksiyonunun görüntüsü verilmiştir. Görüntüden de anlaşılacağı üzere hedefin 1.0 olması demek, bir maksimum/minimum nokta demektir. Yani bu tepe noktanın dışındaki tüm noktalarda istenirlik değeri 1.0'den daha düşük olacaktır.



Şekil 4.38 Sayısal optimizasyon için optimum değer hedef olduğu istenirlik görüntüsü.

Hedef değer için istenirlik fonksiyonunun değişim bölgeleri ve tanımlı fonksiyonlar eşitlik (4.58)'de verildiği gibidir:

$$d_i = \begin{cases} 0 & \hat{y}_i < \hat{y}_{i\text{-düşük}} \\ \left(\frac{\hat{y}_i - \hat{y}_{i\text{-düşük}}}{g_i - \hat{y}_{i\text{-düşük}}}\right)^{w_1} & \hat{y}_{i\text{-düşük}} \leq \hat{y}_i \leq g_i \\ \left(\frac{\hat{y}_i - \hat{y}_{i\text{-yüksek}}}{g_i - \hat{y}_{i\text{-yüksek}}}\right)^{w_2} & g_i \leq \hat{y}_i \leq \hat{y}_{i\text{-yüksek}} \\ 0 & \hat{y}_i > \hat{y}_{i\text{-yüksek}} \end{cases} \quad (4.58)$$

Diğer taraftan DE yazılımında hedefin aralık değerleri içinde arandığı istenirlik fonksiyonu koşulu da mevcuttur. Bu koşulun grafiksel gösterimi doğrusal olup Şekil 4.39'da verildiği gibidir. Bu görüntüden de anlaşılacağı üzere eğer cevap değer aralığında olursa istenirlik değeri 1.0 olup; aralığın dışında istenirlik değeri 0.0 olmaktadır.



Şekil 4.39 Sayısal optimizasyon için optimum hedefin değişim aralığında olduğu istenirlik görüntüsü.

KSDT çalışmasında beş ürün bileşeni ve iki süreç değişkeni için oluşturulmuş üç cevap değişkeninin matematik modelleri ışığında optimizasyon kriterleri ve bu kriterlere ilişkin değerler Çizelge 4.17'de verilmiştir. Burada bileşen ve süreç değişkenleri için değerler, sırasıyla, A-sözde-bileşenler ve kodlanmış değişkenler cinsinden verilmiştir. Diğer taraftan tüm cevap değişkenleri ölçülen değerler olarak verilmiştir. Pigent ve buna bağlı olarak değişim duyarlılığı yüksek olan dE cevap değişkeni için önem dereceleri 4 olarak atanmıştır. Ayrıca pigment bileşeninin ağırlık üst-limit değeri de 2 olarak atanmıştır. Bu atamaların hepsi önceki tecrübelerimiz ve oluşturulan modeller ışığında yapılmıştır.

Çalışmada DE yazılımının optimizasyon kriterleri ise şöyledir:

- Birbirinden farklı çözüm değerleri yani istenirlik değerleri bulmak için kullanılan çiftlenmiş çözüm süzgecinin değeri (duplicate solution filter) maksimuma çekilmiştir. Böylelikle birbirinin çok benzeri olan yakın çözüm değerlerinin oluşmaması sağlanmıştır.

- Rastgele başlangıç noktası sayısı yazılımın varsayılanı olan 30 adet deney noktasında sabit tutulmuş ve maksimum 50 deney noktasının kullanılmasına izin verilmiştir.
- Nelder –Mead simpleks kesri varsayılan değer olan %0.1’de tutulmuştur (Del Castillo, 2008).
- Bulunabilecek maksimum çözüm sayısı da 100 adetle sınırlandırılmıştır.

Çizelge 4.17 KSDT çalışması için optimizasyon kriterleri.

Değişken	Hedef	Limitler		Ağırlık		Önem Derecesi
		Alt	Üst	Alt	Üst	
<i>Pigment</i>	aralıkta	0.000	0.390	1	2	4
<i>Dispersan 1</i>	aralıkta	0.000	0.661	1	1	3
<i>Solvent</i>	aralıkta	0.000	0.797	1	1	3
<i>Dispersan 2</i>	aralıkta	0.000	0.169	1	1	3
<i>Dispersan 3</i>	aralıkta	0.000	0.102	1	1	3
<i>Disp. d. hızı</i>	aralıkta	-1.000	1.000	1	1	3
<i>Disp. Süresi</i>	aralıkta	-1.000	1.000	1	1	3
<i>dE</i>	minimum	0.240	5.380	1	2	4
<i>Maliyet</i>	minimum	3.491	4.999	1	1	3
<i>Viskozite</i>	minimum	64.300	137.800	1	1	3

Sonuç olarak yukarıdaki kriterler ışığında toplam 39 adet çözüm noktası elde edilmiştir. Bu çözümler içinde en yüksek istenirlik değeri (altı çizili değer) Çizelge 4.18’den de görüleceği üzere 0.9927 olarak elde edilmiş olup 1.0 değerine çok yakındır. Bu istenirlik değeri için bileşen ve değişken değerleri üç cevap değişkeni için çizelgedeki ilgili değerleri verecektir. Yapılan kontrol ölçümleri de bu durumu destekler nitelikte sonuçlar vermiştir.

Çizelge 4.18’de viskozite değerlerine dikkat edilirse negatif değerlerin de olduğu görülür. Tabi ki bu değerlerin hiçbir anlamı yoktur. Bunun sebebi kurulan modelin bazı parametreler için oluşturduğu katsayı değerlerinin, giderilemeyen eş-doğrusallıklardan dolayı çok yüksek olmasıdır.

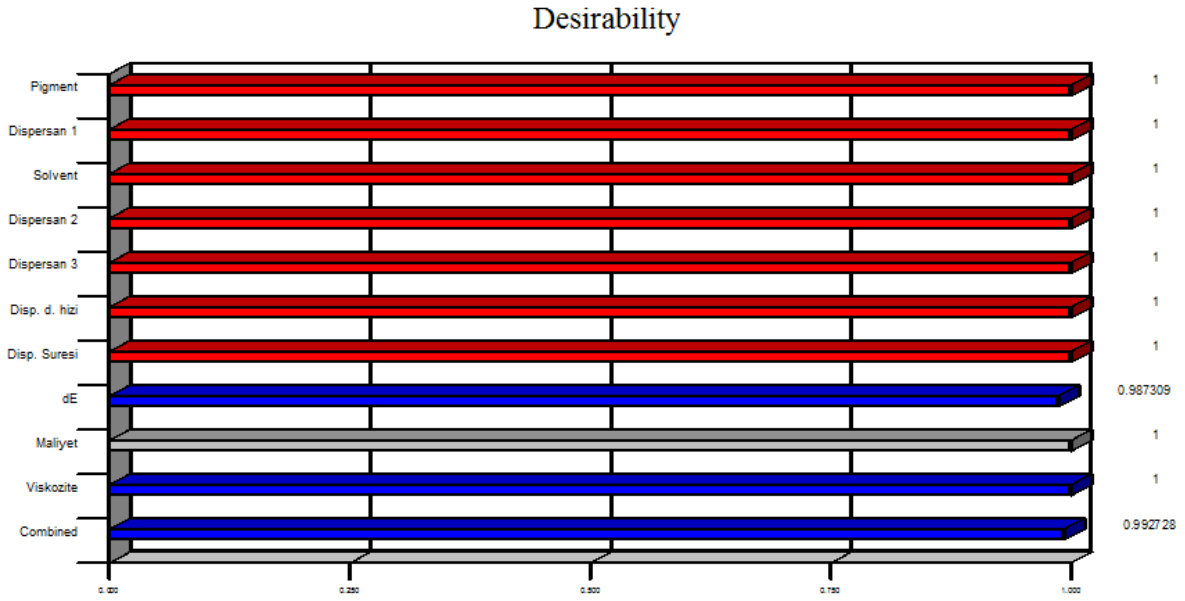
Diğer taraftan çizelgede en düşük istenirlik değeri 0.6187 olup bu değer oluşumunda görev alan değişken/bileşen değerleri kullanılarak elde edilen ürün formülasyonu %62 olasılıkla ilgili cevap değişkeni değerlerini oluşturacaktır denilebilir.

Çizelge 4.18 KSDT çalışması için optimizasyon kriterleri kullanılarak bulunan çözümler.

Ç.Sayı	Pigment	Dispersan 1	Solvent	Dispersan 2	Dispersan 3	Disp. d. hızı	Disp. Süresi	<i>ΔE</i>	Maliyet	Viskozite	İstenirlik
1	0.390	0.583	0.000	0.028	0.000	0.560	-1.000	0.264	4.996	63.350	0.9927
2	0.390	0.571	0.003	0.033	0.003	0.954	-1.000	0.266	4.994	64.294	0.9916
3	0.390	0.586	0.000	0.025	0.000	-0.157	-0.997	0.268	4.997	61.491	0.9910
4	0.390	0.591	0.000	0.019	0.000	-1.000	-0.991	0.271	4.997	64.298	0.9897
5	0.390	0.583	0.000	0.027	0.000	-0.531	-0.993	0.273	4.996	53.138	0.9894
6	0.390	0.465	0.000	0.044	0.102	0.269	-1.000	0.282	4.974	64.291	0.9864
7	0.390	0.576	0.000	0.032	0.002	1.000	-0.787	0.283	4.996	61.029	0.9861
8	0.390	0.450	0.000	0.059	0.102	0.748	-1.000	0.285	4.972	48.045	0.9854
9	0.390	0.470	0.000	0.058	0.082	-0.753	-0.977	0.304	4.976	64.299	0.9794
10	0.390	0.466	0.000	0.042	0.102	-0.385	-0.203	0.349	4.974	64.294	0.9654
11	0.390	0.000	0.596	0.014	0.000	1.000	0.998	0.351	4.676	64.256	0.9646
12	0.390	0.102	0.370	0.037	0.102	1.000	-0.569	0.375	4.775	64.297	0.9572
13	0.390	0.000	0.489	0.019	0.102	0.972	-0.866	0.390	4.712	64.293	0.9527
14	0.390	0.094	0.381	0.054	0.081	1.000	-0.269	0.392	4.771	64.286	0.9523
15	0.390	0.000	0.490	0.019	0.102	0.746	-0.541	0.394	4.712	63.550	0.9516
16	0.390	0.000	0.491	0.018	0.102	-0.132	0.128	0.411	4.711	64.298	0.9466
17	0.390	0.304	0.182	0.124	0.000	1.000	-0.146	0.416	4.888	64.292	0.9451
18	0.390	0.274	0.284	0.052	0.000	0.550	-0.004	0.417	4.840	64.298	0.9447
19	0.390	0.188	0.245	0.076	0.102	0.208	0.579	0.425	4.838	34.781	0.9422
20	0.390	0.000	0.437	0.072	0.102	-0.693	-0.625	0.456	4.735	-13.887	0.9333
21	0.390	0.588	0.000	0.022	0.000	0.543	0.738	0.463	4.997	64.300	0.9312
22	0.388	0.594	0.000	0.018	0.000	0.983	0.987	0.453	4.993	64.997	0.9302
23	0.390	0.000	0.577	0.023	0.010	-0.999	-1.000	0.477	4.683	64.286	0.9270
24	0.379	0.054	0.545	0.023	0.000	0.650	1.000	0.510	4.672	64.299	0.9176
25	0.364	0.618	0.000	0.017	0.000	-0.286	-0.785	0.512	4.928	64.299	0.9171
26	0.390	0.220	0.322	0.062	0.007	0.025	0.992	0.534	4.817	64.298	0.9108
27	0.369	0.000	0.470	0.161	0.000	1.000	0.170	0.646	4.672	64.300	0.8797
28	0.390	0.000	0.596	0.014	0.000	-1.000	0.999	0.662	4.676	64.279	0.8754
29	0.357	0.606	0.000	0.037	0.000	0.901	0.629	0.712	4.906	21.858	0.8619
30	0.341	0.578	0.000	0.081	0.000	0.488	-0.612	0.780	4.855	-15.614	0.8439
31	0.341	0.577	0.000	0.082	0.000	0.593	0.484	0.915	4.855	-21.041	0.8093
32	0.299	0.000	0.611	0.091	0.000	0.996	0.529	1.268	4.409	-61.479	0.7232
33	0.280	0.151	0.388	0.080	0.102	0.986	0.822	1.466	4.458	56.772	0.6773
34	0.280	0.151	0.396	0.071	0.102	-0.935	0.868	1.528	4.455	64.286	0.6633
35	0.280	0.322	0.196	0.099	0.102	0.046	-0.202	1.479	4.560	68.912	0.6560
36	0.295	0.000	0.603	0.102	0.000	-0.687	0.412	1.566	4.402	-62.551	0.6548
37	0.280	0.321	0.196	0.101	0.102	0.956	-0.392	1.451	4.559	72.725	0.6462
38	0.339	0.661	0.000	0.000	0.000	0.798	-0.012	0.798	4.859	101.117	0.6230
39	0.339	0.661	0.000	0.000	0.000	0.446	-0.192	0.800	4.859	101.672	0.6187

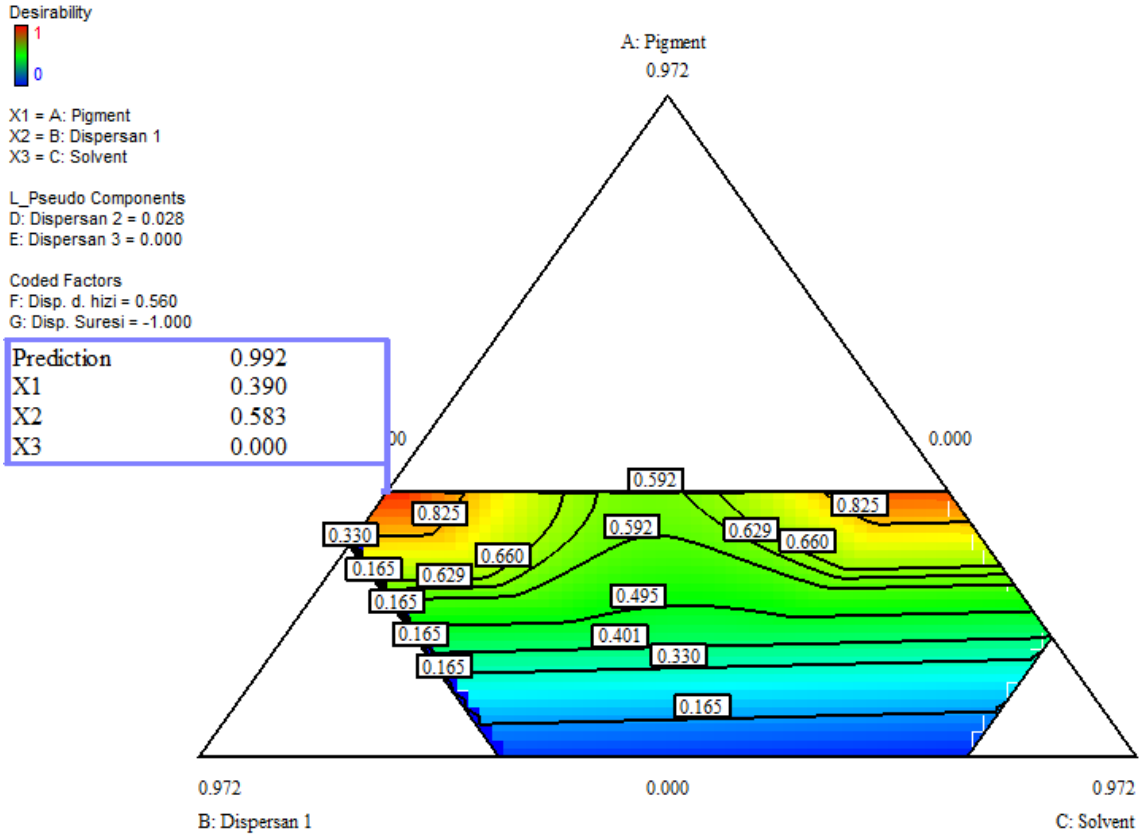
Ayrıca pigment bileşeninin değerlerine bakıldığında birçoğunun sözde bileşen aralığının üst limit değerine çok yakın değerler aldığı görülür. Bu durum beklenen bir sonuçtur. Zira her üç cevap içinde pigment en önemli bileşendir. Bundan dolayı da maliyet değişkeni minimum değerine yaklaşmamış olup; aksine üst-limit değerine yakın çözümler oluşturmuştur.

KSDT çalışması için oluşturulan istenirlik değerlerinin grafiksel gösterimi 1.çözüm (ç.sayısı:4) için Şekil 4.40'ta verilmiştir. Birleşik (combined) yani toplam istenirlik değerinin dE için oluşan (0.9873) istenirlik değerinden dolayı 1.0'in altına düşmesi dikkat çekicidir. Ayrıca tüm değişkenlerin 1.çözüm için rampa gösterimleri Ek-2 Şekil E.23'te verilmiştir.

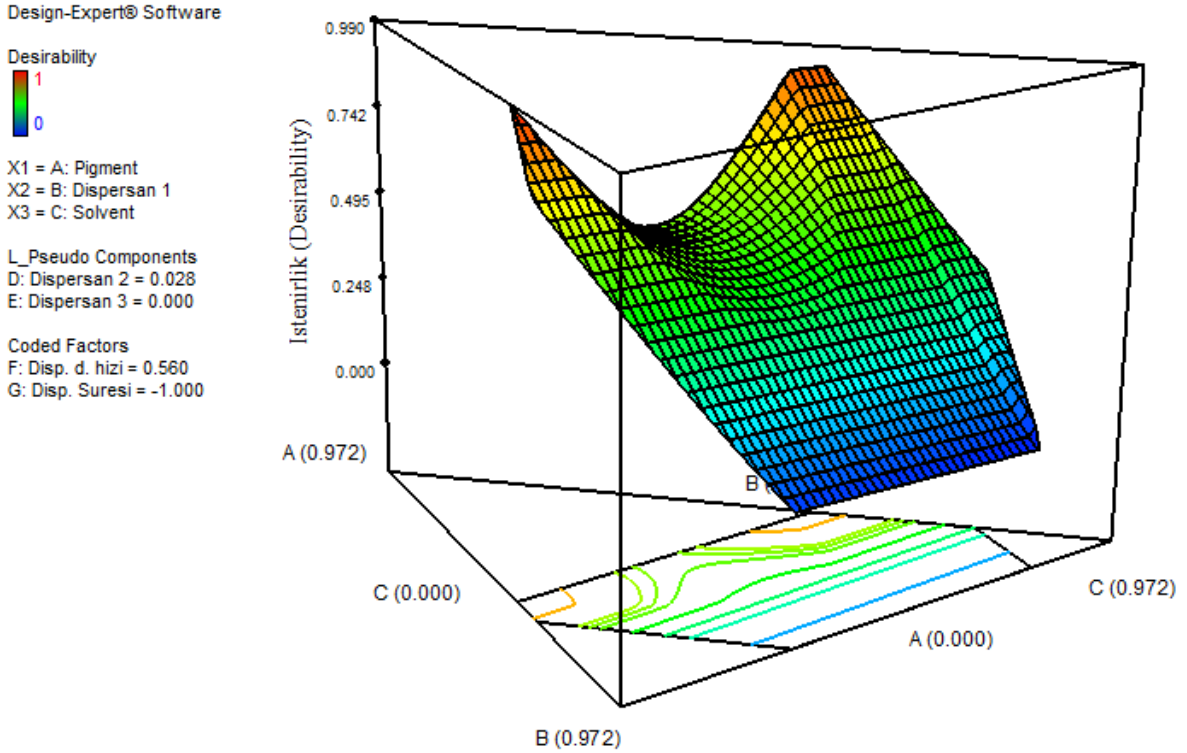


Şekil 4.40 KSDT çalışması için istenirlik fonksiyonunun 1.çözüm için aldığı değerler.

Şekil 4.41 ve 4.42'de ise istenirlik fonksiyonun, sırasıyla, eş-yükselteli ve 3-boyutlu grafikleri verilmiştir. Burada en yüksek istenirlik değerlerinin A'nın ve B'nin tepe (uç) noktaları; C'nin ise tabana yakın (küçük) değerleri için gerçekleştiği görülmektedir.Şekil 4.41'deki gösterge değerlerine bakıldığında C'nin en düşük değeri aldığı kenar üzerinde istenirlik değerinin 0.992 olduğu görülmektedir. Ayrıca F ve G değişkenlerinin gösterge değerlerine de dikkat edilmelidir.



Şekil 4.41 KSDT çalışması için istenirliğin eş-yükselteli grafiği.

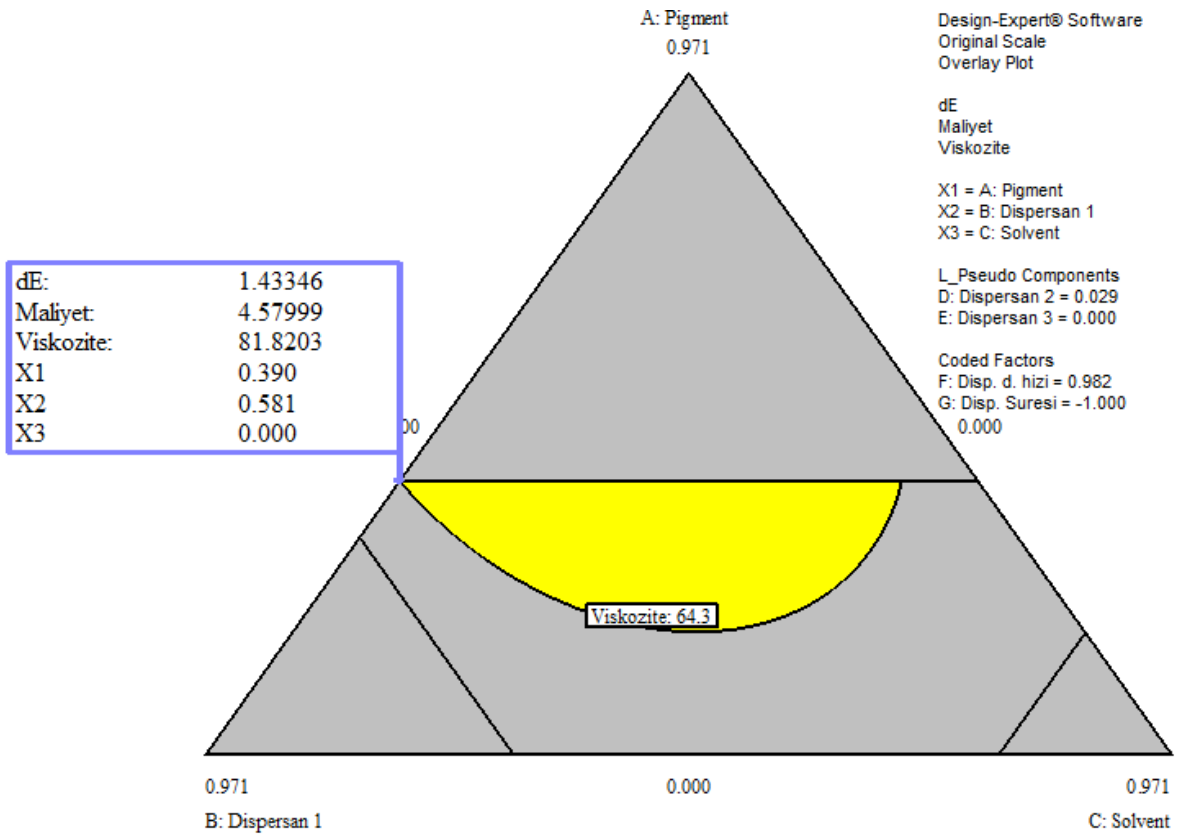


Şekil 4.42 KSDT çalışması için istenirliğin 3-boyutlu grafiği.

4.7.2 Grafiksel Optimizasyon

Bu yöntemde her bir cevap değişkeni için oluşturulan matematik modellerin eş-yükselteli grafikleri çakıştırılarak elde edilen grafik kullanılır. Bu grafik üzerinde her üç cevap değişkeninin ölçüm değerlerinin oluşturdukları aralık ya da kullanıcı tarafından bu değişkenler için uygun bulunan aralıkların çakıştığı yüzey kullanılır. Yani eğer her üç değişkenin de aralıklarının çakıştığı bir değişim bölgesi var ise, bu bölge optimum değerlerin bulunabildiği bir bölge olur.

Çalışmada her üç cevap değişkeninin ölçüm aralıkları yani Çizelge 4.17'deki değerler kullanılmıştır. Bu değerler için elde edilen optimum cevap yüzeyi sayısı 38 olup, 1.çözüm için oluşan yüzey Şekil 4.43'te verilmiştir. Şekildeki açık renkli bölge (göstergenin de içinde bulunduğu bölge) optimum formülasyonların elde edilebileceği bölgedir. Burada aynı nokta için sayısal optimizasyonla elde edilen cevap değerleri ile grafiksel yöntemle elde edilen cevap değerleri birbirinden oldukça farklıdır. Bu durum sayısal optimizasyonun daha sağlıklı sonuçlar verebildiğini göstermektedir.



Şekil 4.43 KSDT çalışması için grafik optimizasyonu ile elde edilen 1.çözüm için grafik gösterim.

5. SONUÇLAR ve ÖNERİLER

5.1. Sonuçlar

Günümüzde birçok ürün ve süreç iyileştirme yöntemlerinin bir araya getirilmesi ile oluşturulmuş olan Yalın Altı Sigma yöntemleri süreçlerde var olan değişkenliklerin azaltılmasını ve daha dayanıklı ve güvenilir süreçlerin oluşturulmasını hedef alır. YAS yöntembilimi bu tür analizleri yaparken, istatistik ve yönetim bilimlerinden devşirdiği yöntemleri, mühendislik yaklaşımları ile harmanlayarak uygular.

Ürünler ve bunları üreten her türlü sürecin optimizasyonu günümüz rekabetçi piyasa koşullarında üretim endüstrilerinin kaçınılmaz olarak uygulamak zorunda olduğu girişimlerdir. İşletmeler pazar koşullarında ayakta kalabilmek için yeniden organize olmak, dahası süreçlerini yani iş yapma şekillerini sayısallaştırabilmek, dahası ölçülebilir dolayısıyla kontrol edilebilir hale getirmek zorundadırlar. Daha açık ifade edilirse, istatistikî kontrol ve değerlendirme yöntemlerini kullanmak zorundadırlar.

Ayrıca, şirketler bu yöntemleri kullanarak düşük maliyetli, yüksek kaliteli ve kısa zamanda üretilebilen, dolayısıyla müşteri memnuniyetini sağlayan ve karlılığı arttırmakla kalmayıp, müşteri sadakati gibi kritik durumları da kendi lehinde tutmaya devam edecektir.

Bu yöntemlerin özellikle ürün/süreç iyileştirme çalışmalarında özelleşmiş formu ise: Altı Sigma İçin Tasarım yöntemleridir. Ürün ya da süreci tasarlamak demek, fikir düzeyinden gerçekleştirme düzeyine kadar her aşamada ürünün/sürecin değişkenlerinin ölçülebilirliğini ve kontrol edilebilirliğini sağlamak demektir.

YAS yöntembiliminde istatistik uygulamaları ve daha genel olarak endüstriyel istatistik uygulamalarının en temel ve en etkin kullanılabilen aracı deney tasarımlarıdır. Deney tasarımları süreç değişkenleri ve performans göstergeleri arasında matematik ilişkiler kurmayı hedef alır. Kurulan matematik ilişkiler daha çok fonksiyonel ilişkiler olup, girdilerin çıktılarla ilişkilerini betimleyen ve genellikle çokterimli modellerin kullanıldığı istatistikî model kurma süreçleridir. DT'lerden amaçlanan şey, girdilerin yani süreç değişkenlerinin performans göstergeleri ya da kalite çıktılarını nasıl etkilediğini ve varsa bu değişkenlerin etkileşimlerinin çıktılarını etkileme biçimi ve yönünü (azaltan-arttıran) belirlemektir.

Tasarımlar kurulurken YAS'ın en önemli göstergesi olan değişkenliklerin (σ^2) minimize edilmesi ve istatistikî olarak daha dayanıklı matematik modellemeler yoluyla dayanıklı ürünler üretilmesi, dikkate alınması gereken en önemli kavramlardır. DT'ler ürün geliştirme sürecinin bir kısmına uygulanabildiği gibi, bu çalışmada yapıldığı şekliyle, eldeki hammadde ve ürün bilgisinin de yardımıyla geliştirme sürecinin/çevriminin tamamına uygulanabilir.

Günümüze kadar, hatta günümüzde bile, daha çok deneme-yanılma yöntemleri ya da her seferinde tek bir değişkeni irdeleyerek kurulan geleneksel araştırma-geliştirme yöntemleri kullanılmıştır. Bu tür deneme-yanılma yöntemlerini kullanmak suretiyle yapılan ürün/süreç geliştirmelerinin doğurduğu birçok sıkıntının aksine, DT'lerin en ilkel /basit biçimleri olan klasik DT'lerde tüm değişkenlerin ve kullanılan DT'nin niteliğine bağlı olarak, değişkenler arası etkileşimlerin performans göstergeleri yani cevap değişkenleri üzerindeki etkisi kolaylıkla incelenebilir. Bu tür tasarımlarda çoğunlukla doğrusal çokterimli modeller kullanılmaktadır.

Klasik deney tasarımlarının daha gelişmiş biçimleri olan ve cevap değişkenlerine ait grafik yüzeylerin ve daha yüksek dereceli modellerin kullanılabilmesine imkan tanıyan tepki yüzeyi yöntemleri geliştirilmiştir. Bu tür deney tasarımları öncelikle kimya endüstrisinde kullanılmak ve sonrasında birçok endüstride ve bilimsel çalışmalarda kullanılmak yoluyla yaygınlaşmıştır.

Diğer taraftan tepki yüzeyi yöntemlerinin özelleşmiş biçimleri olan karışımlar için deney tasarımları, daha çok birden fazla bileşenin karıştırılması ile elde edilen ürünlerin performanslarının modellenmesi ve reçete oluşturulması için geliştirilmiştir. Piyasa koşulları ve hammadde ve zaman kısıtlarından dolayı bu tür deney tasarımlarını kullanarak elde edilen deney noktalarının sayısı gerçekleştirilebilir nitelikte değildir. Bundan dolayı deney noktalarının sayısını indirgemekte kullanılmak üzere deney noktası optimizasyon algoritmaları geliştirilmiştir. Alfabetik optimizasyon algoritmaları olarak bilinen bu algoritmalarından KDT'ler için en çok tercih edileni D-optimum kriteri olup, $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ bilgi matrisinin determinantını minimum yapmayı amaçlar.

Bir ürünü ya da süreci matematik bir eşitlik kullanarak modellemenin yolu deney tasarımından geçer. Deney tasarımları az sayıda denemeyle bir ürün ya da süreci etkili değişkenleri itibariyle modellemek için vazgeçilmez önemdedir. Deney tasarımlarının ürün formülasyonları için kullanılabilen özelleşmiş hallerinden birisi karışım deney tasarımlarıdır. Bu tür tasarımlarda amaç bir ya da birden fazla performans göstergesi için ürün bileşenlerini ve süreç değişkenlerini optimum sayıdaki denemeyle çok terimli bir matematiksel modele oturtmaktır.

Günlük hayatta kullandığımız birçok ürün iki ya da daha fazla bileşenin belirli oranlarda birleştirilmesinden meydana gelmektedir. Her bir bileşen ürünün yapılma/üretilme nedeninin bir parçasına hizmet etmek için katılmaktadır. Ürün performansı itibariyle, bu bileşenlerin her birinin etkisini taşımak zorundadır. Ürünün ya da sürecin bir “bütün” olarak performans(lar)ının optimizasyonu demek, bu ürünün/sürecin görevini ne ölçüde yaptığının belirtilebilen (deterministic) yöntemlerle sayısallaştırılması demektir. Belirtilebilen yöntemlerden kasıt, genelde çokterimli matematik modellerdir. Burada her bir terim bir bileşenin/değişkenin etkisini ya da bileşenlerin/değişkenlerin etkileşim etkisini göstermektedir. Üründe kullanılan bileşenler ürün içinde ancak belirli oranlarda bulunabilirler. Bundan dolayı ürüne katılan her bir bileşenin kendisine ait değişim aralıkları olmak zorundadır. Bu aralıklar KDT’lerde tarsım uzayını kısıtlayan ve bu yüzeyleri düzgün olmayan geometrilere dönüştüren koşul ya da j-kısıtlar olarak tanımlanmaktadır. Birçok endüstriyel ürün alt- ve üst-kısıtları olan bileşenlerden oluşmaktadır.

Diğer taraftan ürünlerin üzerinde bileşenlerin yanı sıra bu ürünlerin üretildiği sürecin kontrol edilebilen yani ölçülebilen parametrelerinin/değişkenlerinin de etkisi vardır. Bu amaçla hem ürün bileşenlerini hem de süreç değişkenlerini birleştirmek suretiyle elde edilen karışım-süreç deney tasarımları geliştirilmiştir. Beş adet ürün bileşeni ve iki adet süreç değişkeni için yapılan karışım-süreç deney tasarımında üç adet cevap değişkeni (dE, viskozite ve maliyet) için Scheffé tipi çokterimli matematik modeller oluşturulmuştur.

Renk haslığı için oluşturulan üstel dönüşüm uygulanmış (dE0.82) matematik modeli KDT’leri ilgilendiren tüm istatistikî göstergeler açısından analiz edilmiş olup, tüm bu göstergeler itibariyle sağlıklı bir matematik model elde edilmiştir. Bu model 15 terimli olup *İndirgenmiş doğrusal x 2FI* Scheffé tipi çokterimli modelidir. Tasarım sürecinin sonucunda oluşan standart sapma değeri 0.066 değerinde olup, sıfıra çok yakın bir değerdir. Bu sonuç ve diğer göstergeler oluşturulan modelin ilgili cevap değişkeni için tasarım uzayında yapılacak kestirimlerde sağlıklı sonuçların elde edileceğini göstermektedir.

Diğer taraftan viskozite değişkeni için oluşturulan model hem cevap ölçümlerinin, ürünün doğasından ve ölçüm yönteminin yetersizliğinden kaynaklanan sonuçlarda dolayı yeterince sağlıklı kurulamamıştır. Yine de elde edilen model birçok gösterge açısından -5 adet deney noktası elendikten sonra- sağlıklıdır. Fakat bu modelin değişken analizinde öncelikle dar değişim aralıklarına sahip bazı bileşenlerin sebep olduğu yüksek VIF değerleri söz konusudur. Bu yüksek VIF değerlerinin yanı sıra, KDT’lerin doğasından kaynaklanan, ama SEK veya benzeri dayanıklı olmayan regresyon yöntemleri ve sözde-bileşen dönüşümü gibi önleyici

işlemlerle aşılamayan eş-doğrusallıklardan (collinearity) dolayı anlamsız yüksek kestirim değerlerine (katsayı değerleri) sahip terimlerden dolayı modelin kestirim gücü zayıftır.

Bu modelin cevap değişkeni (viskozite) için mil temelli viskozimetre yerine daha gelişmiş bir ölçüm aletinin (rheometre) kullanılması ile ölçüm kararsızlığının giderilebileceği düşünülmektedir. Viskozite modeli 13 terimli olup *İndirgenmiş karesel x 2FI* Scheffé tipi çokterimli modelidir. Tasarım sürecinin sonucunda oluşan standart sapma değeri 1.184 değerinde olup, ANOVA'nın varsayılanı olan 1.0 değerine çok yakın bir değerdir. Maliyet değişkeni sadece bileşen oranlarına bağlı olarak hesaplandığı için istatistikî analizi 1.0'lik belirtme katsayısı, R^2 , üreten sıfır standart sapmalı bir doğrusal model olarak elde edilmiştir

Son olarak elde edilen bu modeller cevap değişkenleri için belirlenen hedef değerleri için çoklu-cevap optimizasyonuna tabi tutulmuştur. Optimizasyon süreci ağırlıklandırılmış istenirlik fonksiyonunu kullanmaktadır ve optimum nokta analizleri eğim temelli (sarp yokuş/iniş) kanonik analizlerdir. Hedef kısıtları ışığında Grafik ve sayısal optimizasyon yöntemlerini kullanarak üç cevap değişkeni için elde edilen 39 adet optimum reçete elde edilmiştir. Reçetelerden istenirlik değeri en yüksek olanı 1.sıradaki reçete olup istenirlik değeri 0.993 olarak elde edilmiştir. Bu değer maksimum değer olan 1.0'e çok yakın bir değer olup, ilgili cevap değişkeni değerleri -viskozite hariç olmak üzere- yapılan kontrol denemeleriyle de sağlanmıştır.

5.2. Öneriler

- Tasarımın değerlendirilmesi kısmında, σ^2 hariç olmak üzere, tüm deney noktalarının tahmin değişkenliklerinin toplamının, modeldeki parametre sayısına eşit olduğu söylenmişti. Bu özeliğin verilen bir model için şöyle bir sonuç doğuracağı aşikârdır: Veri noktası sayısından bağımsız olarak, tüm deney noktalarının tahmin değişkenliklerinin toplamı sabittir. Bu sonuç ışığında deney noktası sayısını arttırmak suretiyle toplam tahmin değişkenliği deney bölgesine hem daha düzgün yaydırılabilir; hem de daha düşük bir ortalama tahmin değişkenliğinin elde edilmesi sağlanabilir (Montgomery ve Voth, 1994; Smith, 2005).
- KDT'lerin doğasından kaynaklanan kötü koşulluluk ya da eş-doğrusallık sorununu gidermekte en etkili yöntemler olan sırt (ridge) regresyonunu kullanan DT

yazılımlarının geliştirilmesi ile bu tür sorunların elenmesi mümkün olabilecektir. Bu çalışmanın yazıldığı zamanlarda böyle bir yazılım kişisel bilgisayarlar için S-PLUS yazılımı mevcut olmasına rağmen yazılımın sadece sabit terimli modeller için kullanılabilmesinden dolayı uygulanması pratik değildir.

- Endüstride süreç değişkenlerine genellikle gürültü değişkenleri olarak adlandırılan kontrol edilemeyen değişkenler de eşlik etmektedir. Bu tür değişkenleri de tasarıma katarak gerçekleştirilen tasarımlara Taguchi tasarımları denilmektedir. Bu tür dayanıklı (robust) tasarımlar TYY'ler için de uygulanabilir. Gürültü değişkenlerinin eklenmesi ile elde edilen KSDT'lere örnek olarak Goldfarb vd.'nin (2003) yaptığı çalışma gösterilebilir. Bu çalışmada öncelikle beklenti fonksiyonu ve değişkenlik operatörleri yardımıyla elde edilen uydurulmuş modeller oluşturulmuştur. Bu modeller yardımıyla süreç ortalaması için bir model, süreç değişkenliği için ise başka bir model elde edilmiş olup, tepki yüzeyi yöntemleri kullanılarak her iki modelin birlikte optimizasyonu gerçekleştirilmiştir. Çünkü bu tür modeller gürültü değişkenleri içerdiği için normalde optimize edilebilir değildir.
- Hammadde özelliklerini ve bunlara ait endüstriyel tecrübelerin sonucunda oluşturulmuş veritabanlarını kullanarak seçilen hammadde ve süreç değişkenleri ürün formülasyonları için deney tasarımlarını daha rasyonel ve daha fonksiyonel hale getirecektir.
- Son olarak bileşen sayısı fazla olan ve çok sayıda kısıt barındıran KDT'lerde çoklu eş-doğrusallık problemini ve buna paralel gelişen yüksek kaldıraç değerli deney noktalarının giderilmesinde etkin olarak kullanılabilen tekil değer ayrıştırma (single value decomposition) yaklaşımı üzerinde durulacaktır. Bu yaklaşımın değiş-tokuş algoritmalarına eklenmesi ve bunları kullanan DT yazılımları geliştirilebilirse, eş-doğrusallık sorunu daha sağlıklı olarak giderilebilir.

KAYNAKLAR

Abt, M. ve Pukelsheim F., (1995), "Improving Manufacturing Quality through Planned Experiments: Statistical Methodology", *Surveys on Mathematics for Industry*, 5: 27-33.

Antony, J., (2003), *Design of Experiments for Engineers and Scientists*, Elsevier, New York.

Atkinson, A. C., Donev, A. N. ve Tobias, R. D., (2007), *Optimum Experimental Designs with SAS*, Oxford U. Press, New York.

Belsley, D. A., Kuh, E., Welsch, R.E., (1980) *Regression Diagnostics: Identifying Influential Data and Sources of Collinearity*, J. Wiley & Sons, New York.

Box, G.E.P. and Draper, N. R., (1987), *Empirical Model-Building and Response Surfaces*, J. Wiley & Sons, New York.

Box, G.E.P. and Draper, N. R., (2007), *Response Surfaces, Mixtures, and Ridge Analyses*, J. Wiley & Sons. New York.

Box, G.E.P. and Wilson, K.B., (1951), "Experimental Attainment of Optimum Conditions", *Journal of the Royal Statistical Society B*, (13), 1-45.

Chardon, J., Nony, J., Sergent, M. Mathieu, D. ve Phan-Tan-Luu, R., (1989) "Experimental research methodology applied to the development of a formulation for use with textiles", *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 6(4): 313-321

Chen, J. J, Li, L.-A. ve Jackson, C. D, (1996) "Analysis of Quantal Response Data from Mixture Experiments", *Environmetrics*, 7: 503-512

Chowdhury, S., (2003), *Design for Six Sigma*, FT Prentice-Hall, Guildford & King's Lynn.

Claringbold, P. J., (1955), "Use of the Simplex Design in Study of the Joint Action of Related Hormones", *Biometrics*, (11): 174-185.

Coleman S., Greenfield, T., Stewardson, D., Montgomery, D. C., (2008), *Statistical Practice in Business and Industry*, J. Wiley & Sons, Chichester.

Coleman, D. E. ve Montgomery, D. C., (1993), "A Systematic Approach to Planning for a Designed Industrial Experiment" (tartışmalar ile), *Technometrics*, 35(1): 1-27.

Cook, R. D., ve Nachtsheim, C. J., (1980), "A Comparison of Algorithm for Constructing Exact D-optimal Designs", *Technometrics*, 22(3): 315-325.

Cornell, J. A., (1971), "Experiments with Mixtures: A Review", *Technometrics*, (15), 437-455.

Cornell, J. A., (1979), "Experiments with Mixtures: An Update and Bibliography", *Technometrics*, (21), 95-106.

Cornell, J. A., (2000), "Developing Mixture Models, Are we done?", *Journal of Statist. and Comput. Simul.*, (66), 127-144.

Cornell, J. A., (2002) *Experiments with Mixtures – Designs, Models, and the Analysis of Mixture Data*, (3rd Edt), J. Wiley & Sons, New-York.

Cornell, J. A., ve Ramsey, P.J. (1998), "A Generalized Mixture Model for Categorized Components Problems with An Application to a Photoresist-Coating Experiment", *Technometrics*, 40(1): 48-61.

Coşkuntuncel, O., (2002), *Karma Denemelerde, Tasarımlarda ve Modellerde Kötü Koşulluluk Problemi*, Çukurova Üniversitesi , Yüksek Lisans Tezi.

Crosier, B. R., (1984), "Mixture Experiments: Geometry and Pseudocomponents", *Technometrics*, (26), 209-216.

Crosier, B. R., (1986), "The Geometry of Constrained Mixture Experiments", *Technometrics*, (28): 95-102.

Del Castillo, E., (2008) *Process Optimization – A Statistical Approach*, Springer, New York.

Dingstad, G., Egelanddal, B., ve Naes, T., (2003), "Modelling Methods for Crosses Mixture Experiments. A Case Study from Sausage Production. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 66(2): 175-190.

Draper, N. R., Smith, H., (1998), *Applied Regression Analysis*, (3rd Edt.), J. Wiley & Sons, New York.

Draper, N. R., ve Lawrence, W. E., (1965a), "Mixture Designs for Three Factors ", *Journal of Royal Statistical Society, B*, 27: 450-465.

Draper, N. R., ve Lawrence, W. E., (1965b), "Mixture Designs for Four Factors ", *Journal of Royal Statistical Society, B*, 27, B: 473-478.

Goldfarb, H. B., Borror, C. M., Montgomery, D. C., ve Anderson-Cook, C. M. (2003) "Mixture-process Variable Experiments with Noise Variables", *Journal of Quality Technology*, 35: 393-405.

Gorman, J. W. ve Cornell, J. A., (1982), "A Note on Model Reduction for Experiments with both Mixture Components and Process Variables", *Technometrics*, (24): 243-247.

Gorman, J. W. ve Snee, J. E., (1962), "Simplex-lattice Designs for Multicomponent Systems", *Technometrics*, 4: 463-487.

Gorman, J. W., (1970), "Fitting Equations to Mixture Data with Restraints on Compositions", *Journal of Quality Technology*, (2): 186-194.

Goupy, J., (2000), *Plans d'Expériences: Les Mélanges*, Dunod, Paris

Hahn, G. J. ve Doğanaksoy, N., (2008), *The Role of Statistics in Business and Industry*, J. Wiley - Interscience, New York.

Khuri, A. I., (der), (2006), *Response Surface Methodology and Related Topics*, World Scientific Publishing, Hackensack, NJ.

Lambrakis, D. P., (1968a), "Experiments with mixtures: A generalization of the Simplex Lattice Design", *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, 30(1):123-136.

Lambrakis, D. P., (1968b), "Experiments with p-component Mixtures" *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, 30(1):137-144.

Lambrakis, D. P., (1969a), "Experiments with Mixtures: An alternative to the Simplex-Lattice Design", *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, 31(2): 234-245.

Lambrakis, D. P., (1969b), "Experiments with Mixtures: Estimated Regression Function of the Multiple-Lattice Design", *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, 31(2): 276-284.

Lazic', Z. L., (2004), *Design of Experiments in Chemical Engineering - A Practical Guide*, Wiley-VCH, Weinheim.

Lewis, G. A., Mathieu, D. ve Phan-Tan-Luu, R., (1999), *Pharmaceutical Experimental Design*, Marcel Dekker, New York.

Marquardt, D.W. ve Snee, R. D., (1974), "Test Statistics for Mixture Models", *Technometrics*, 16: 533-537.

Marquardt, D.W., (1970), "Generalized Inverses, Ridge Regression, Biased Linear Estimation, and Nonlinear Estimation", *Technometrics*, (12): 591-612.

McLean, R. D. ve Anderson, V. L., (1966), "Extreme Vertices Design of Mixture Experiments", *Technometrics*, (8): 447-454.

Minitab Inc., (2004, 2008) Minitab v.13 – v.15.1.2 İstatistiki Analiz Yazılımları, Yardım Menüsü ve Öğretici Dökümanları PA., ABD.

Mitchell, T. J. (1974), "Computer construction of "D-optimal" first order designs. *Technometrics*, 20(4): 211-220

Montgomery, D. C., (1997) *Introduction to Statistical Quality Control*, (3.Edt.), J.Wiley & Sons, New York.

Montgomery, D. C., (1999), "Experimental Design for Product and Process Design and Development", *The Statistician*, 48, Part2: 159-177.

Montgomery, D. C., (2004), *Design and Analysis of Experiments*, J. Wiley & Sons. New York.

Montgomery, D. C., ve Voth, S. R., (1994), "Multicollinearity and Leverage in Mixture Experiments", *Journal of Quality Technology*, 29: 96-108.

Muteki, K., MacGregor, J. F. ve Ueda, T., (2007), "Mixture Designs and Models for the Simultaneous Selection of Ingredients and their Ratio", *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 86: 17-25.

Myers, R. H., Montgomery, D. C., (2002), *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, J. Wiley & Sons. New York.

Naes, T., Faergestad, E. M., ve Cornell, J. (1998), "A comparison of Methods for Analyzing Data from a Three Component Mixture Experiment in the Presence of Variation Created by two Process Variables", *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, (41): 221-235.

Nair, V. N., (Der.), (1992), "Taguchi's Parameter Design: A Panel Discussion", *Technometrics*, 34(2): 127-161

Nigam, A. K., (1973), "Multifactor Mixture Experiments", *Journal of Royal Statistical Society, B* 35: 51-56.

Piepel, G. F., (1982), "Measuring Component Effects in Constrained Mixture Experiments", *Technometrics*, 24(1): 29-39.

Piepel, G. F., (1983a), "Defining Consistent Constraint Regions in Mixture Experiments", *Technometrics*, 25(1): 97-101.

Piepel, G. F., (1983b), "Calculating Centroids in Constrained Mixture Experiments", *Technometrics*, 25(3): 279-284.

Piepel, G. F., (1988a), "Programs for Generating Extreme Vertices and Centroids of Linearly Constrained Experimental Regions", *Journal of Quality Technology*, 20(2): 125-139.

Piepel, G. F., (1997), "Survey of Software with Mixture Experiment Capabilities", *Journal of Quality Technology*, 29(1): 76-85.

Piepel, G. F., (1999) "Modeling Methods for Mixture-of-Mixtures Experiments Applied to a Tablet Formulation Problem", *Pharmaceutical Development and Technology*, 4(4): 593-606.

Piepel, G. F., Hicks, R. D., Szychowski, J. M., ve Loepky, J. L. (2002), "Methods for Assessing Curvature and Interaction in Mixture Experiments", *Technometrics*, 44(2): 161-172.

Piepel, G. F., Szychowski, J. M., ve Loepky, J. L. (2002), "Augmenting Scheffé Linear Mixture Models with Squared and/or Cross-product Terms", *Journal of Quality Technology*, 34(3): 297-314.

Piepel, G. F., ve Cornell, J. A. (1994), "Mixture Experiment Approaches: Examples, Discussion, and Recommendations", *Journal of Quality Technology*, 26(3): 177-196.

Piepel, G. F., ve Cornell, J. A., (1985), "Models for Mixture Experiments when the Response depends on the Total Amount", *Technometrics*, 27(3): 219-227.

Piepel, G. F., ve Cornell, J. A., (2005), "50 years of mixture experiment research: 1955-2005" yayınlanmamış çalışma (Rev. 0 ve Rev. 15.1 (1991, 2005) BN-SA-3298, G.F. Piepel ile kişisel iletişim sonucu temin edilmiştir.)

Saxena, S. K., ve Nigam, A. K., (1977), "Restricted Exploration of Mixtures by Symmetric Simplex Design", *Technometrics*, 19(1): 47-52.

Scheffé, H., (1958), "Experiments with Mixtures ", *Journal of Royal Statistical Society, B* 20: 344-360.

Scheffé, H., (1963), "The Simplex-Centroid Design for Experiments with Mixtures ", *Journal of Royal Statistical Society, B* 25: 235-263.

Segurola, J., Allen, N. S., Edge, M. ve McMahon, A., (1999) "Design of Eutectic Photoinitiator Blends for UV/Visible Curable Acrylated Printing Inks and Coatings", *Progress in Organic Coatings*, 37: 23-37

Smith, W. F., (2005), *Experimental Design for Formulation*, ASA-SIAM, Philadelphia.

Snee, R. D., (1971) "Design and Analysis of Mixture Experiments", *Journal of Quality Technology*, 3(4):159-169.

Snee, R. D., (1973), "Techniques for the Analysis of Mixture Data", *Technometrics*, 15: 517-528.

Snee, R. D., (1973), "Experimental Design for Mixture Systems with Component Constraints", *Communications in Statistics, Theory and Methods*, A8: 303-326.

Snee, R. D., (1975), "Experimental Designs for Quadratic Models in Constrained Mixture Spaces", *Technometrics*, 17: 149-159.

Snee, R. D., (1977), "Validation of Regression Models: Methods and Examples. *Technometrics*, 19(4): 415-428.

Snee, R. D., (1979), "Experimental Designs for Mixture Systems with Multicomponent Restraints", *Communications in Statistics, Theory and Methods*, 8(4): 303-326.

Snee, R. D., (1981), "Developing Blending Models for Gasoline and other Mixtures", *Technometrics*, 23(2): 119-130.

Snee, R. D., (1985), "Computer-aided design of Experiments - Some Practical Experiences", *Journal of Quality Technology*, 17(4): 222-236.

Snee, R. D., and Marquardt, D. W. (1976), "Screening concepts and designs for experiments with Mixtures", *Technometrics*, 18(1): 19-29.

Snee, R. D., Marquardt, D. W., (1974), "Extreme Vertices Designs for Linear Mixture Models", *Technometrics*, (16): 399-408.

Snee, R. D., Rayner, A. A., (1982), "Assesing the Accuracy of Mixture Model Regression Calculations", *Journal of Quality Technology*, (14): 67-79.

Snee, R. D., ve Marquardt, D. W., (1984), Collinearity diagnostics depend on the domain of prediction, the model and the data. *Annals of Statistics*, 38: 83-87.

St.John, R. C., (1984), "Experiments with Mixtures, ill conditionning, and Ridge Regression", *Journal of Quality Technology*, (16): 81-96.

Statease Inc., (2007, 2008) Design-Expert v7.x Deney Tasarımı Yazılımı, Yardım Menüsü ve Öğretici Dökümanları (Software for Response Surface Methodology and Mixture Experiments), Minneapolis, MN. ABD.

Steinberg, D. M., (Der.), (2008), "The Future of Industrial Statistics: A Panel Discussion", *Technometrics*, 50(2): 103-127

Taghizadegan, S., (2006), Essentials of Lean Six Sigma, Elsevier - BH, Oxford.

Weisberg, S., (2003), Applied Linear Regression, (3. Edt), J.Wiley & Sons, New-York.

Welch, W. J., (1984), “Computer-Aided Design of Experiments for Response Estimation”, Technometrics, 26(3): 217-224.

Yang, K. ve El-Haik, B., (2003), Design For Six Sigma - A Roadmap For Product Development, McGraw- Hill, New York.

Zahran, A., Anderson-Cook, C. M., Myers, H. M. (2003), “Fraction of Design Space to Assess Prediction Capability of Response Surface Designs”, Journal of Quality Technology, 35(4): 377-386.

Web Siteleri:

www.sixsigmaforum.com – Nisan 2008

EKLER

Ek-1:Renk Haslığı için ln(dE) matematik modeli ve model analizi

Çizelge E.1 ln(dE) cevap değişkeni için çokterimli modellerin model uyumu özet tablosu

Modelin Derecesi		Ardışık p-değeri		İstatistikî Özet			
Karışım	Süreç	Karışım	Süreç	Model Uyumsuzluğu Değeri (Lack-of-Fit Value)	Ayarlı R ² (Adjusted R ²)	Kestirilen R ² (Predicted R ²)	Modelin Durumu
M	M						
M	L		0.9932	< 0.0001	-0.0462	-0.3690	
M	2FI		0.8079	< 0.0001	-0.0696	-0.4454	
M	Q		0.0061	< 0.0001	0.1300	-0.1713	
M	C	*	* 0.9343	< 0.0001	0.0701		Aliased
M	M						
L	M	< 0.0001	-	0.0052	0.9541	0.9405	Suggested
L	L	< 0.0001	0.3085	0.0054	0.9566	0.9261	
L	2FI	< 0.0001	0.6907	0.0034	0.9537	0.7191	
			* <				
L	Q	* < 0.0001	0.0001	0.5052	0.9887		Aliased
L	C	* < 0.0001	*	0.5052	0.9887		Aliased
L	M						
Q	M	* < 0.0001	*	0.1850	0.9829		Aliased
Q	L	* < 0.0001	* 0.0366	0.6108	0.9896		Aliased
Q	2FI	* 0.0007	* 0.7302	0.3638	0.9881		Aliased
Q	Q	* 0.6577	* 0.6205	0.2428	0.9874		Aliased
Q	C	* 0.6577	*	0.2428	0.9874		Aliased
Q	M						
SC	M	*	*	0.1850	0.9829		Aliased
SC	L	*	* 0.0366	0.6108	0.9896		Aliased
SC	2FI	*	* 0.7302	0.3638	0.9881		Aliased
SC	Q	*	* 0.6205	0.2428	0.9874		Aliased
SC	C	*	*	0.2428	0.9874		Aliased
SC	M						
C	M	*	*	0.1850	0.9829		Aliased
C	L	*	* 0.0366	0.6108	0.9896		Aliased
C	2FI	*	* 0.7302	0.3638	0.9881		Aliased
C	Q	*	* 0.6205	0.2428	0.9874		Aliased
C	C	*	*	0.2428	0.9874		Aliased

*Çaprazlanmış modelin eşlenmiş (aliased) olduğunu gösterir; M = Ortalama L = Doğrusal Q = Karesel SC = Özel Kübik C = Kübik 2FI = 2faktör etkileşimi

Çizelge E.2 ln(dE) cevap değişkeni için kısmî kareler toplamının ANOVA tablosu

Kaynak	Kareler Toplamı	df	Kareler Ortalaması	F-değeri	p-değeri (Prob. > F)	
<i>Block</i>	3.290	4	0.822			
<i>Model</i>	62.348	14	4.453	315.691	< 0.0001	significant
<i>Linear Mixture</i>	60.160	4	15.040	1066.126	< 0.0001	
<i>AB</i>	0.350	1	0.350	24.806	< 0.0001	
<i>AC</i>	0.288	1	0.288	20.433	< 0.0001	
<i>AG</i>	0.102	1	0.102	7.202	0.0116	
<i>BC</i>	0.263	1	0.263	18.665	0.0001	
<i>BD</i>	0.078	1	0.078	5.520	0.0254	
<i>BG</i>	0.115	1	0.115	8.135	0.0077	
<i>CD</i>	0.123	1	0.123	8.738	0.0059	
<i>CE</i>	0.109	1	0.109	7.699	0.0093	
<i>CF</i>	0.104	1	0.104	7.386	0.0107	
<i>CG</i>	0.090	1	0.090	6.358	0.0170	
<i>Residual</i>	0.437	31	0.014			
<i>Lack of Fit</i>	0.278	21	0.013	0.832	0.6554	not significant
<i>Pure Error</i>	0.159	10	0.016			
Cor Total	66.076	49				

Çizelge E.3 ln(dE) cevap değişkeni için istatistikî özet değerler.

İstatistik	Değer
Standart Sapma	0,119
Ortalama	0,302
R ²	0,993
Ayarlı R ²	0,990
Kestirilen R ²	0,980
Yeterli Kesinlik (Adequate Precision)	41,737
C.V. %	39,382
PRESS	1,225

Çizelge E.4 ln(dE) cevap değişkeni için model terimleri ve bazı istatistikî göstergeleri.

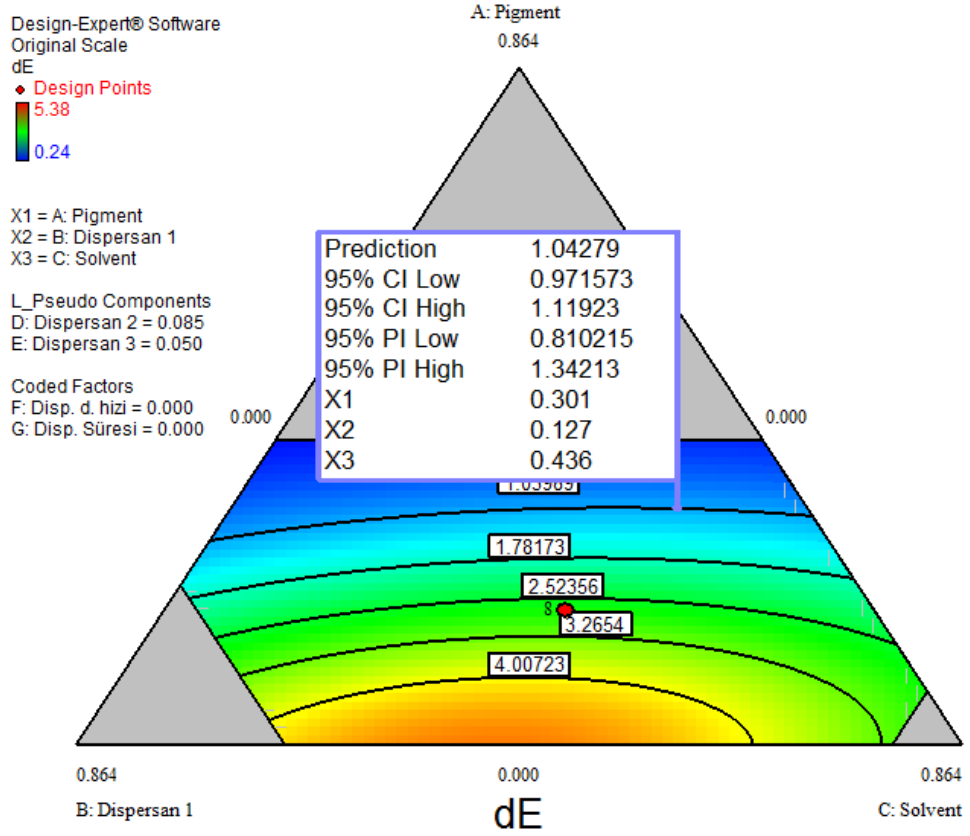
<u>Bileşen</u>	<u>Katsayı Tahmini</u>	<u>df</u>	<u>Standart Hata</u>	<u>Güven Aralıkları (95% CI)</u>		
				<u>Alt</u>	<u>Üst</u>	<u>VIF</u>
1.gün	0.028	4.000				
2.gün	-0.010					
3.gün	0.011					
4.gün	-0.093					

Çizelge E.3'ün devamı

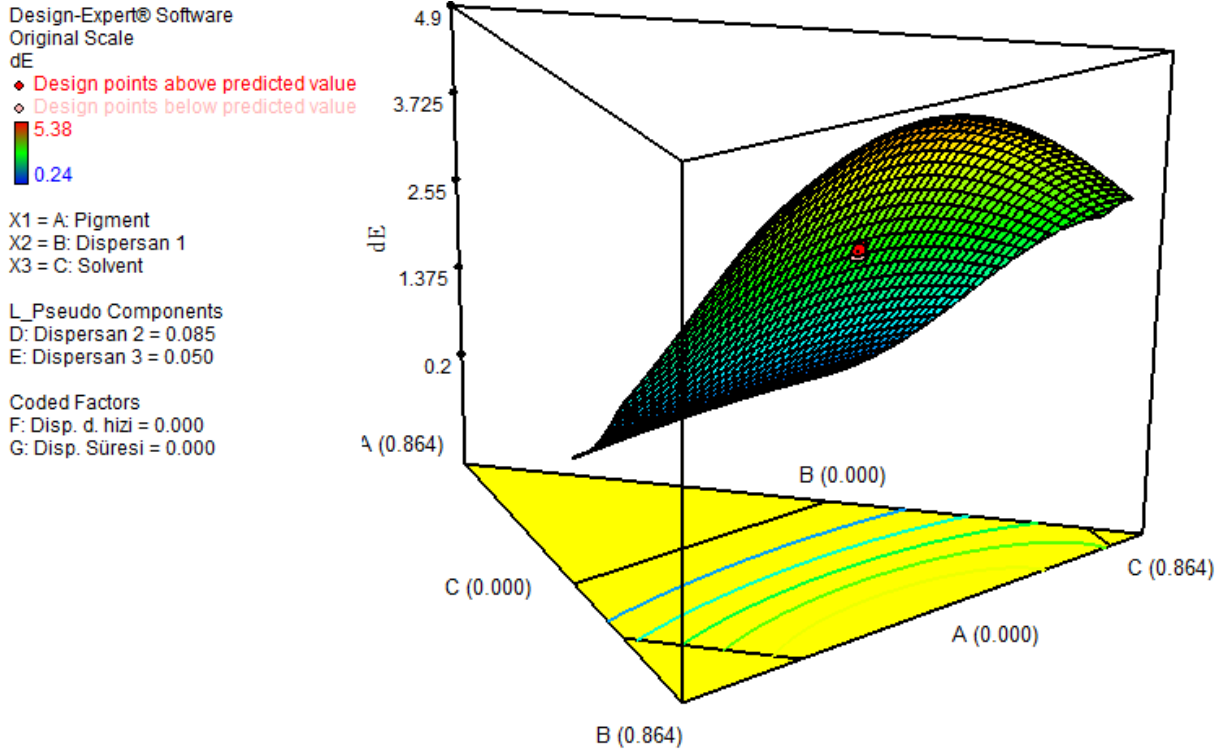
5.gün	0.064					
A-Pigment	-13.095	1.000	1.986	-17.145	-9.045	1094.215
B-Dispersan 1	1.182	1.000	0.253	0.666	1.699	30.666
C-Solvent	0.776	1.000	0.214	0.338	1.213	34.426
D-Dispersan 2	16.899	1.000	4.467	7.789	26.010	951.071
E-Dispersan 3	0.120	1.000	1.415	-2.767	3.007	31.155
AB	14.077	1.000	2.826	8.313	19.842	148.435
AC	16.148	1.000	3.572	8.862	23.434	673.010
AG	0.255	1.000	0.095	0.061	0.448	2.336
BC	2.562	1.000	0.593	1.352	3.771	9.803
BD	-18.018	1.000	7.669	-33.659	-2.377	337.539
BG	0.180	1.000	0.063	0.051	0.309	1.335
CD	-21.105	1.000	7.140	-35.666	-6.543	482.897
CE	10.414	1.000	3.753	2.759	18.069	53.803
CF	-0.132	1.000	0.048	-0.231	-0.033	1.516
CG	-0.150	1.000	0.059	-0.271	-0.029	2.083

Ln(dE) için Kestirim Denklemi:

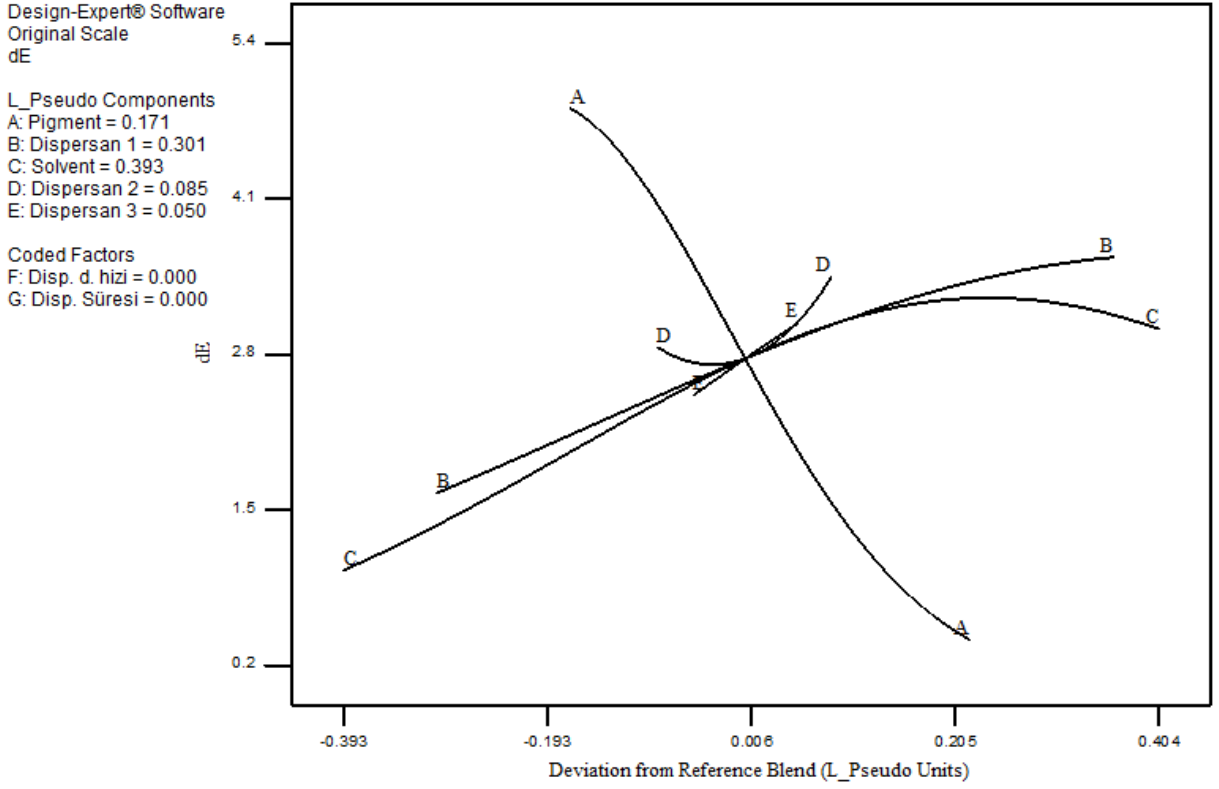
$$\ln(dE) = -13.10A + 1.18B + 0.78C + 16.90D + 0.12E + 14.08AB - 16.15AC + 0.25AG + 2.56BC - 18.02BD + 0.18BG - 21.10CD + 10.41CE - 0.13CF - 0.15CG \quad (E.1)$$



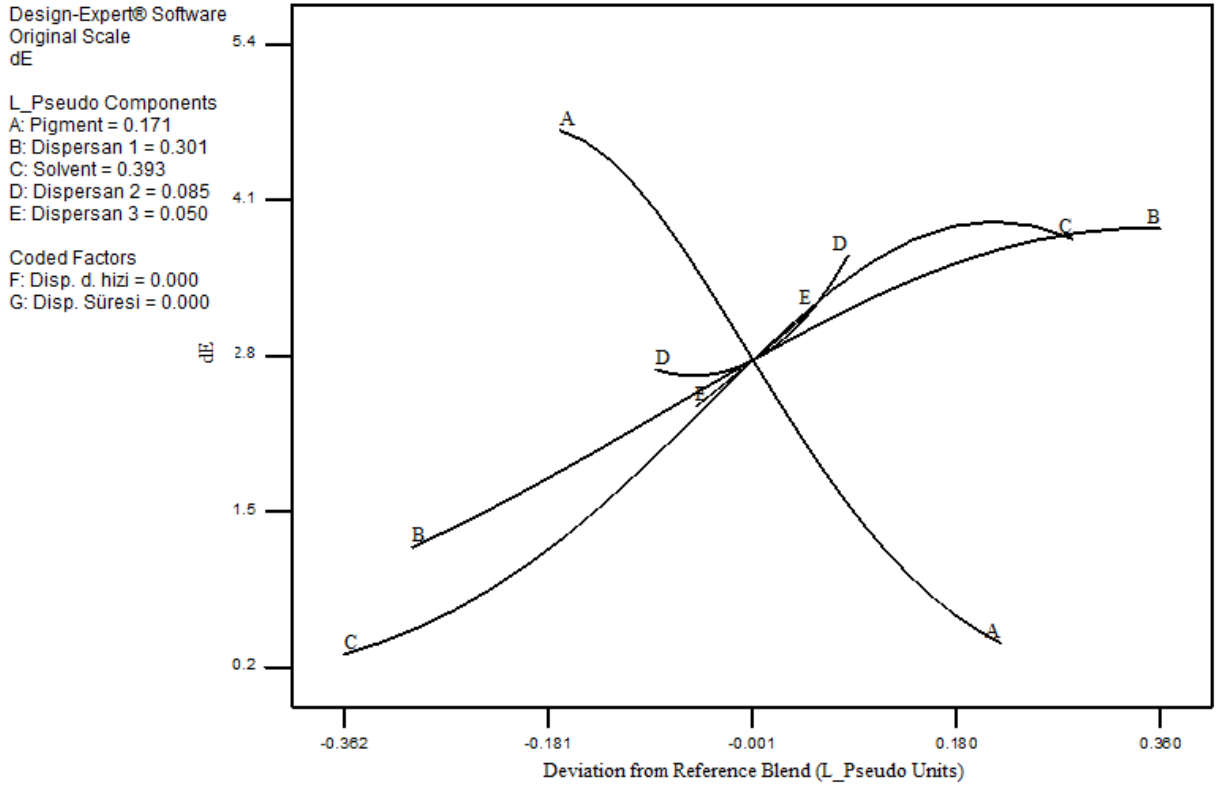
Şekil E.1 ln(dE) için eş-yükselteli karışım grafiği.



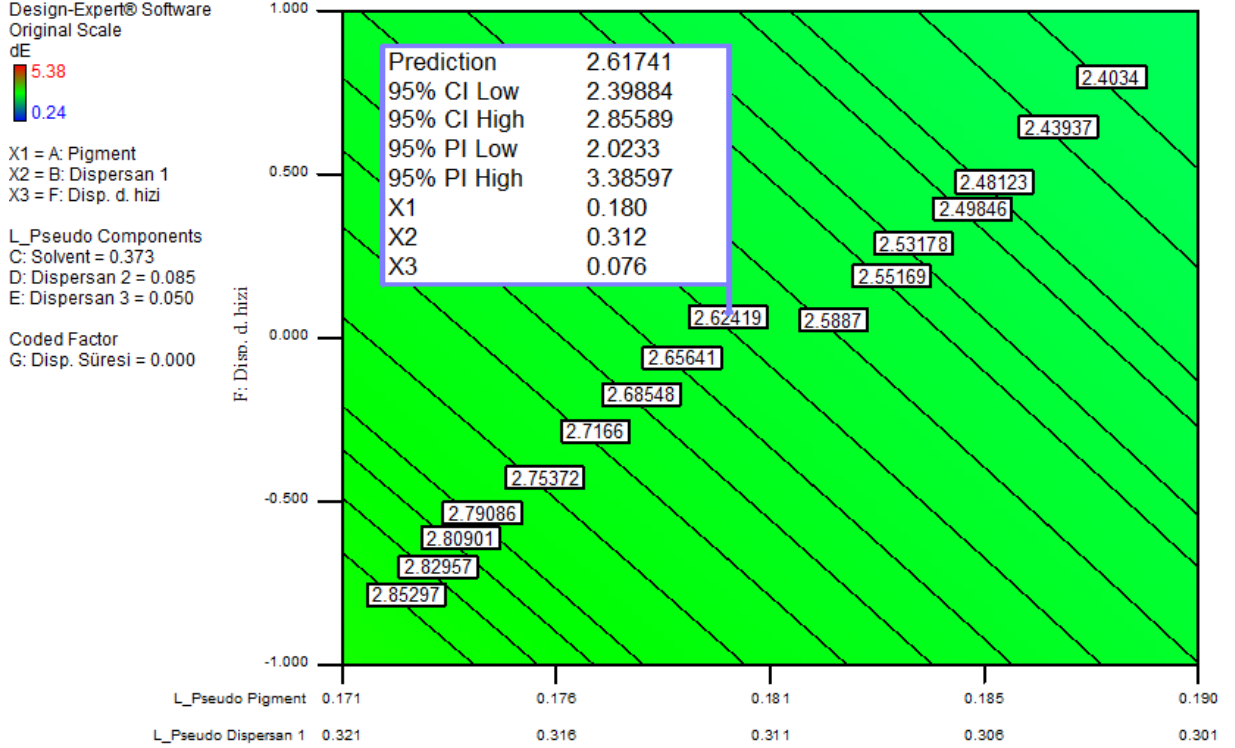
Şekil E.2 ln(dE) için 3-boyutlu karışım grafiği.



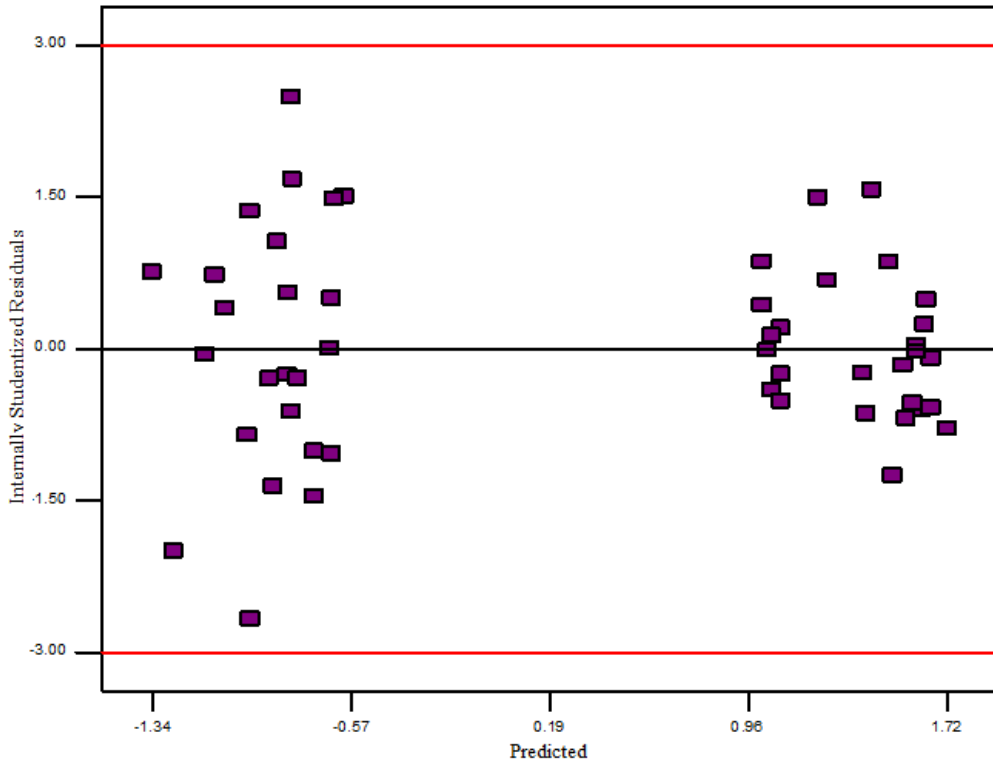
Şekil E.3 $\ln(dE)$ için Piepel doğrultulu iz grafiği.



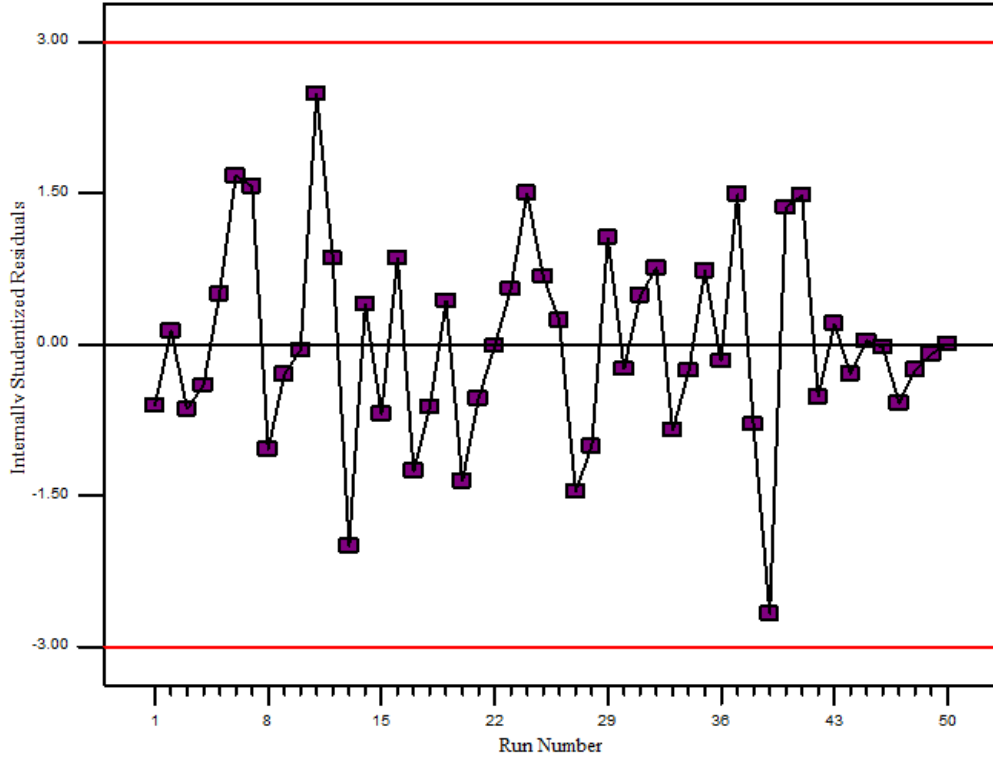
Şekil E.4 $\ln(dE)$ için Cox doğrultulu iz grafiği.



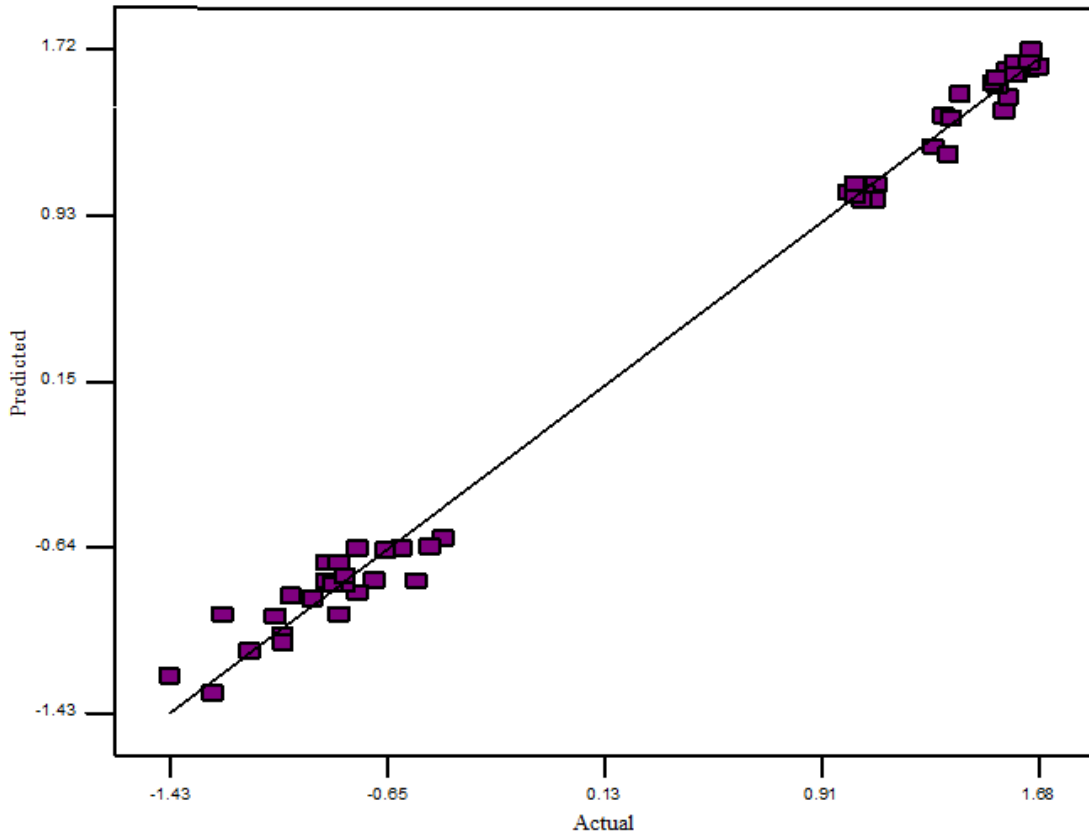
Şekil E.5 ln(dE) için karışım-süreç eş-yükselti grafiği.



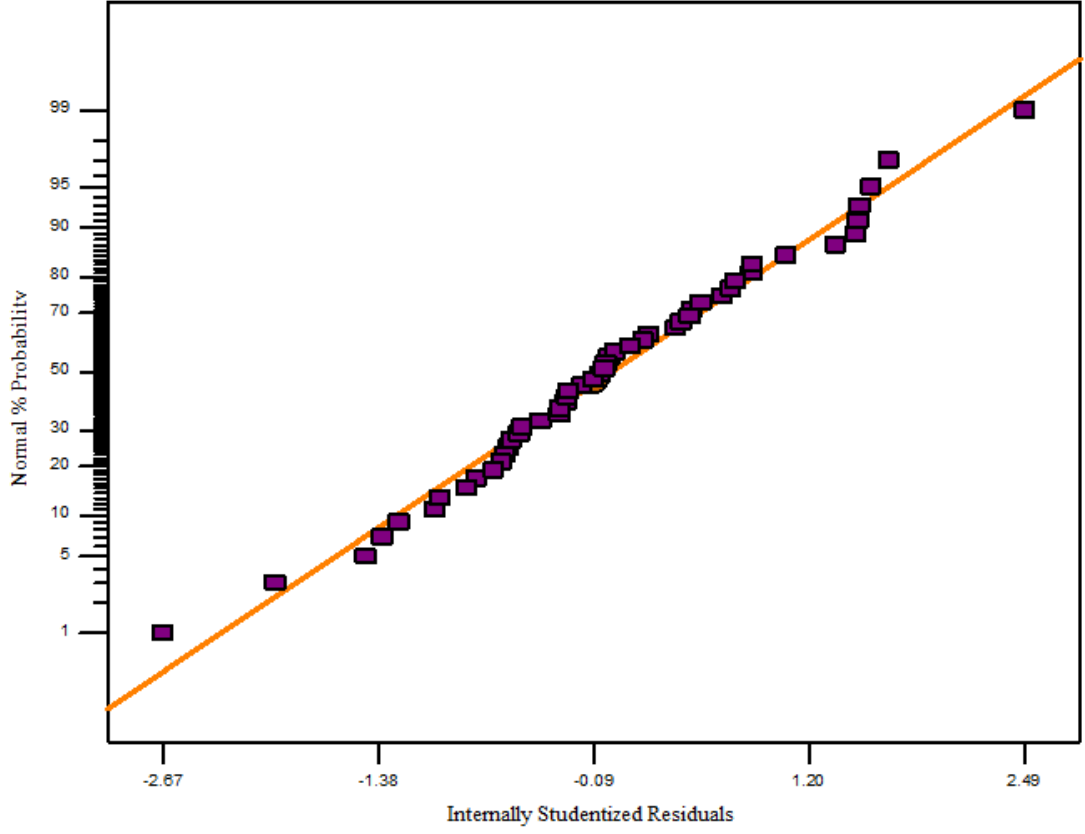
Şekil E.6 ln(dE) cevap değişkeni için hataların cevap tahminleri ile değişimi.



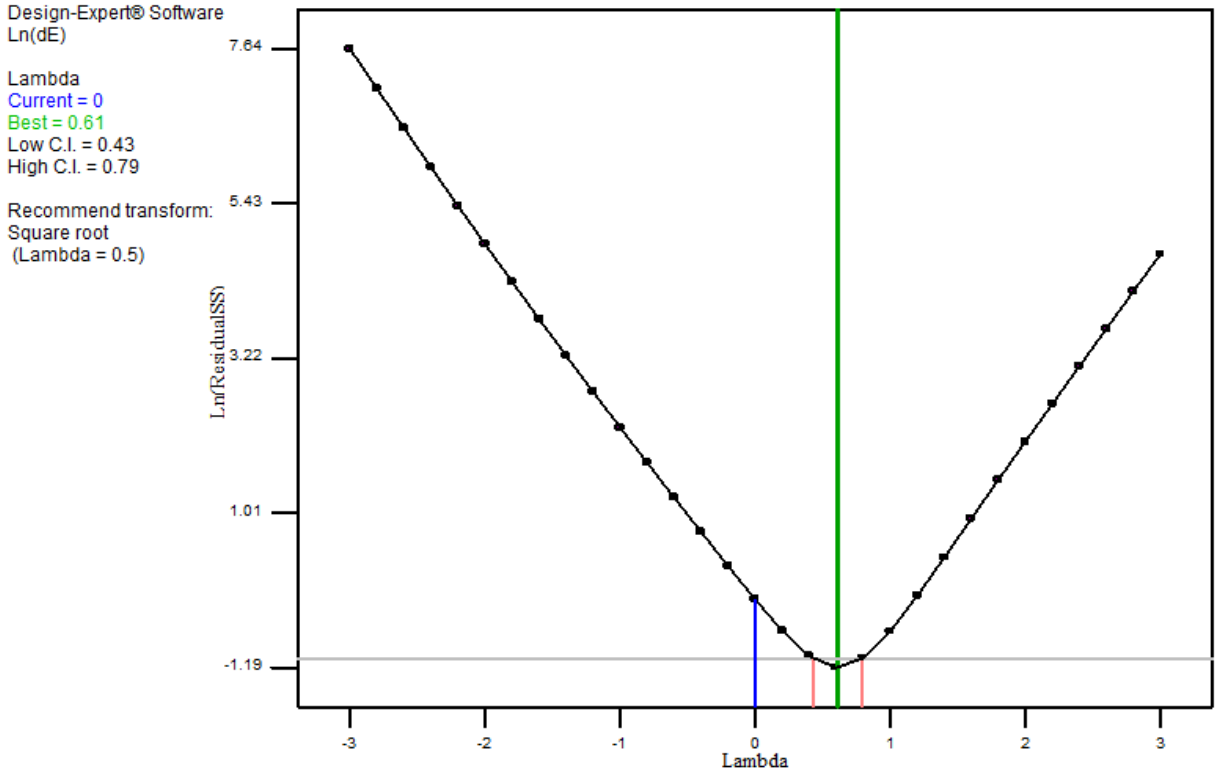
Şekil E.7 $\ln(dE)$ için artıkların deney sırasına göre değişimi.



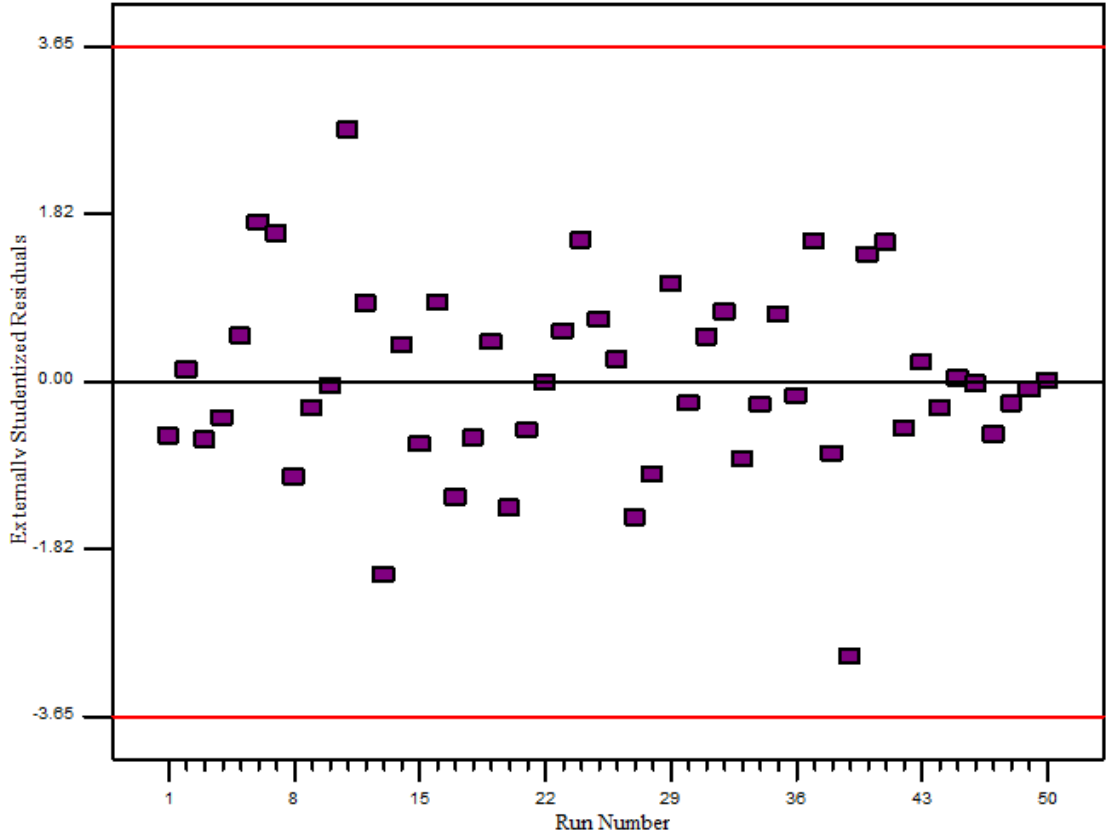
Şekil E.8 $\ln(dE)$ için ölçülen y değerlerinin kestirim değerleri ile karşılaştırılması.



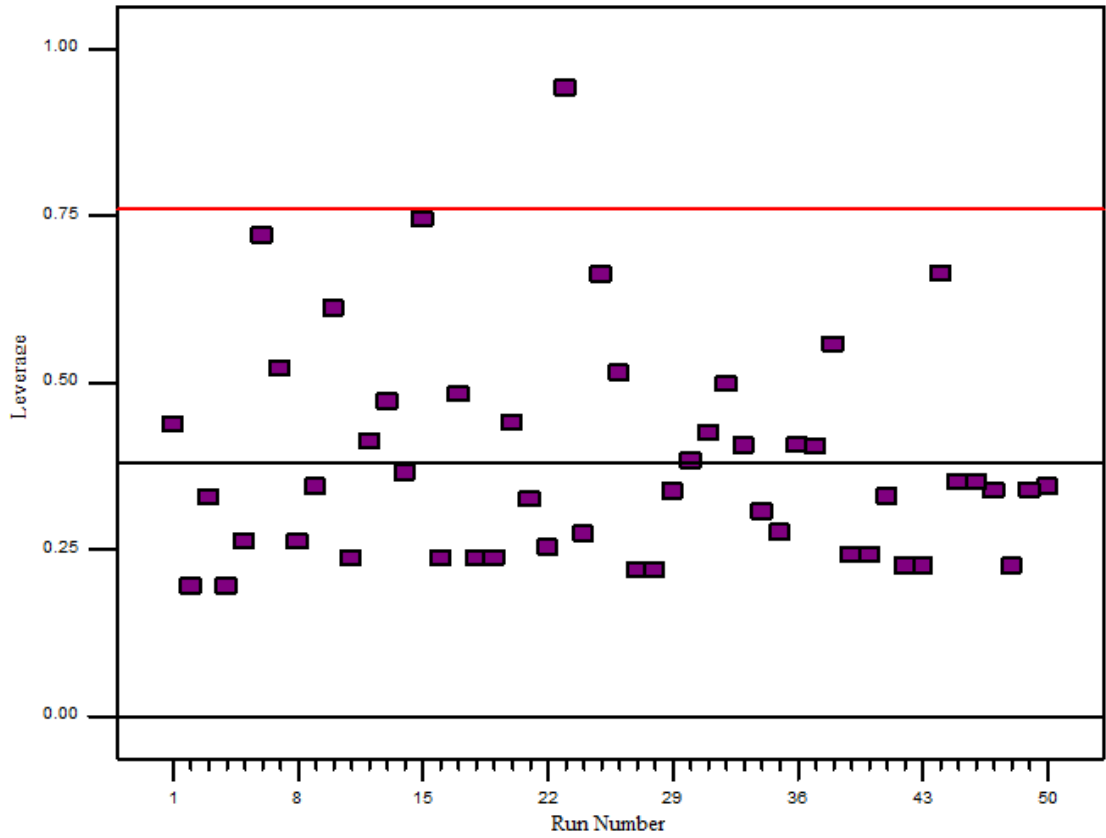
Şekil E.9 ln(dE) için artıkların normal dağılım grafiği.



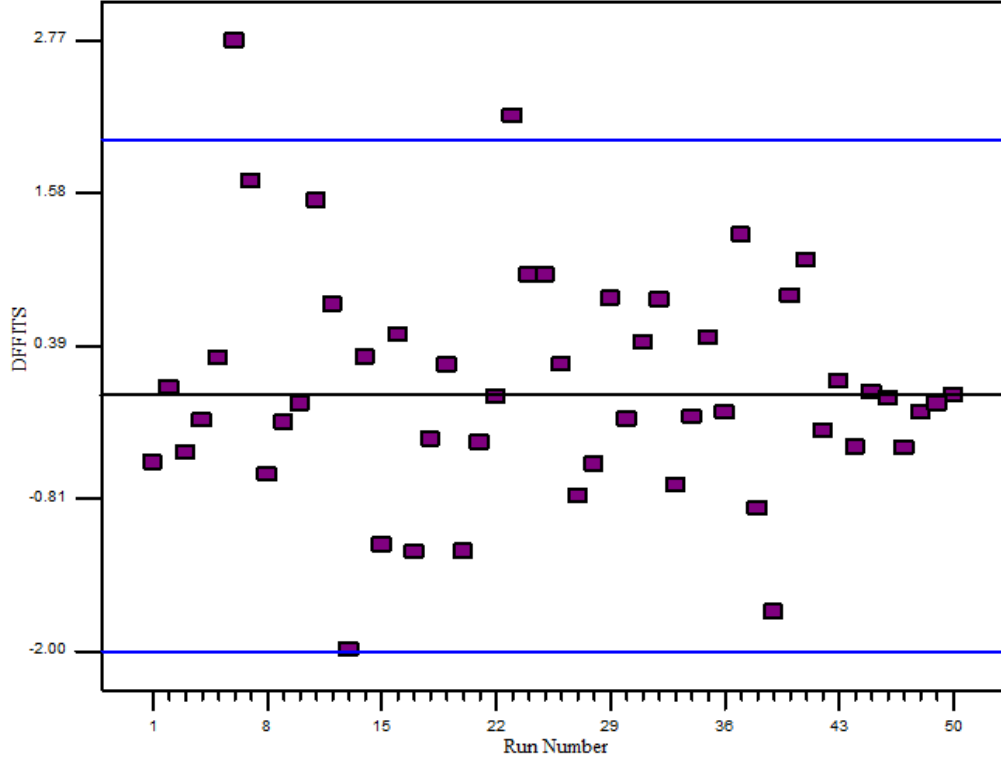
Şekil E.10 ln(dE) cevap değişkeni için Box-Cox dönüşüm grafiği.



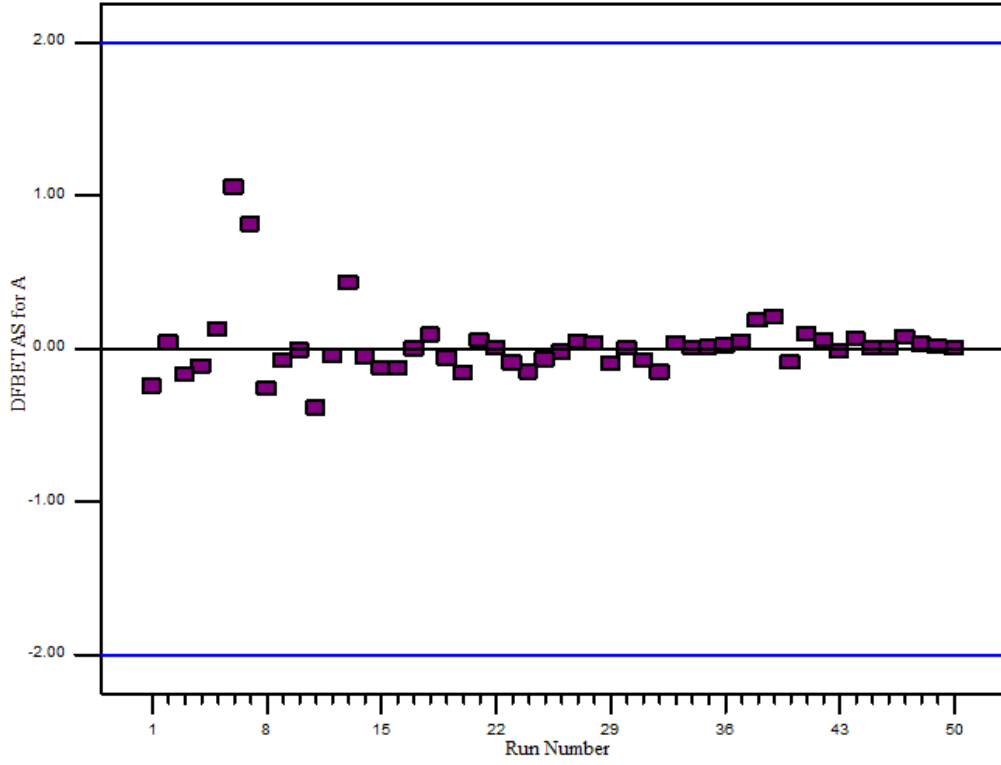
Şekil E.11 $\ln(dE)$ için harici Studentleştirilmiş artıkların deney sırasına bağlı değişim grafiği.



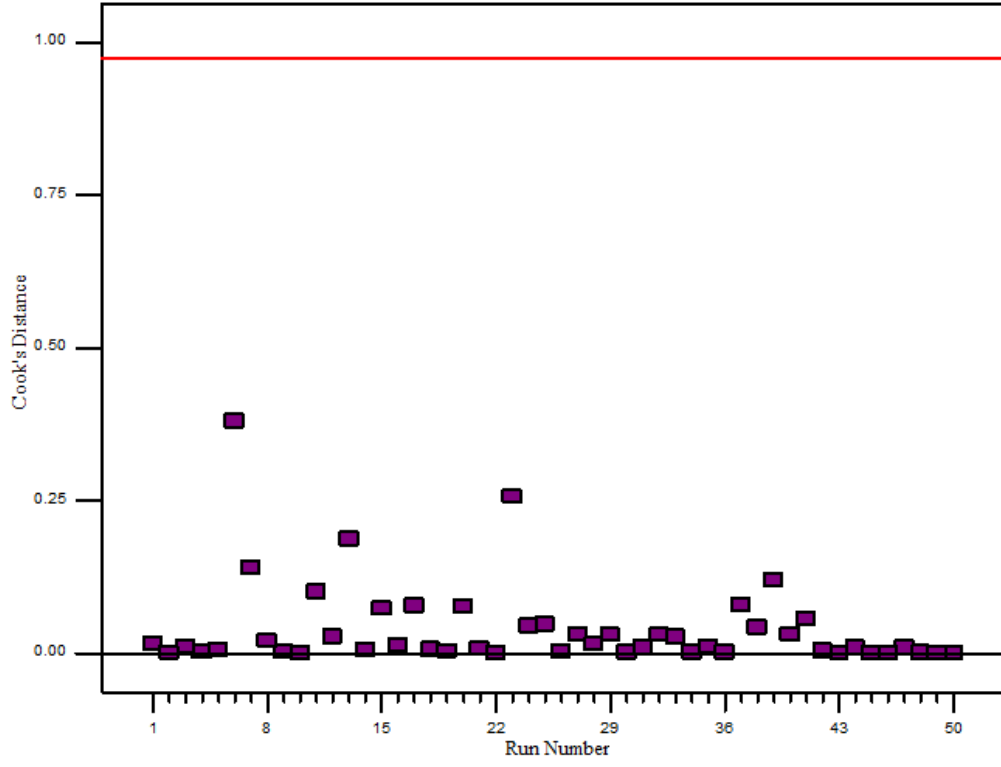
Şekil E.12 $\ln(dE)$ için kaldırâç değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafiği.



Şekil E.13 $\ln(dE)$ için DFFITS değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafiği.



Şekil E.14 $\ln(dE)$ cevabında pigment bileşeni için DFBETAS değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafiği.



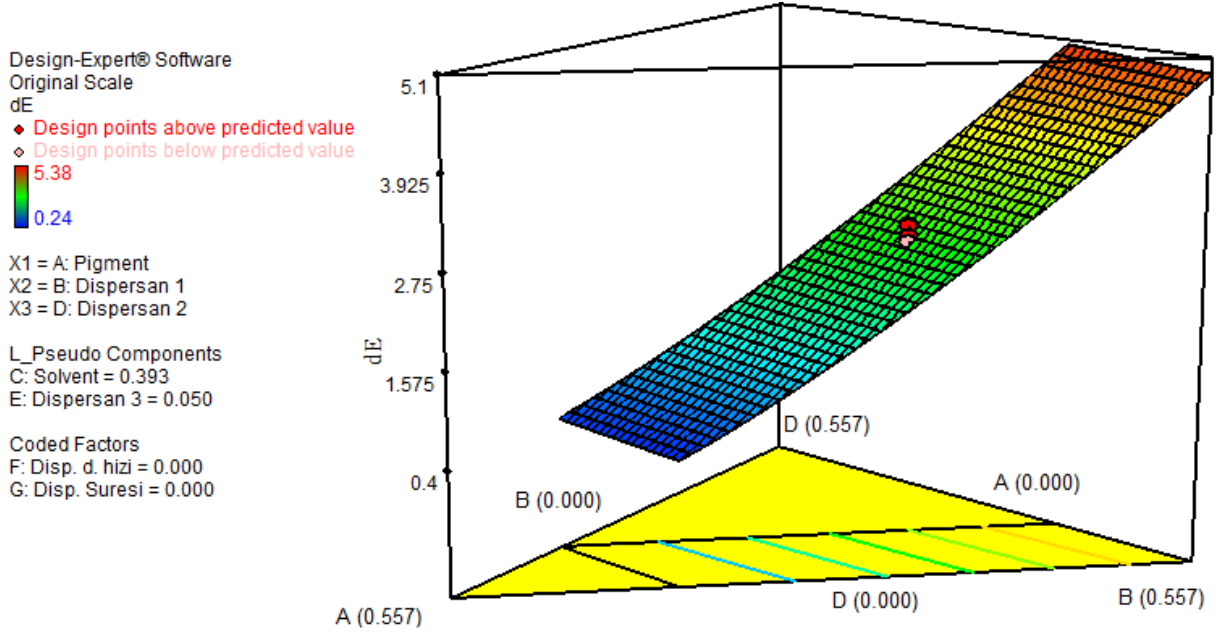
Şekil E.15 $\ln(dE)$ için Cook mesafesi değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafiği.

Çizelge E.5 ln(dE) için teşhis/tanı ölçütleri için veri dökümü

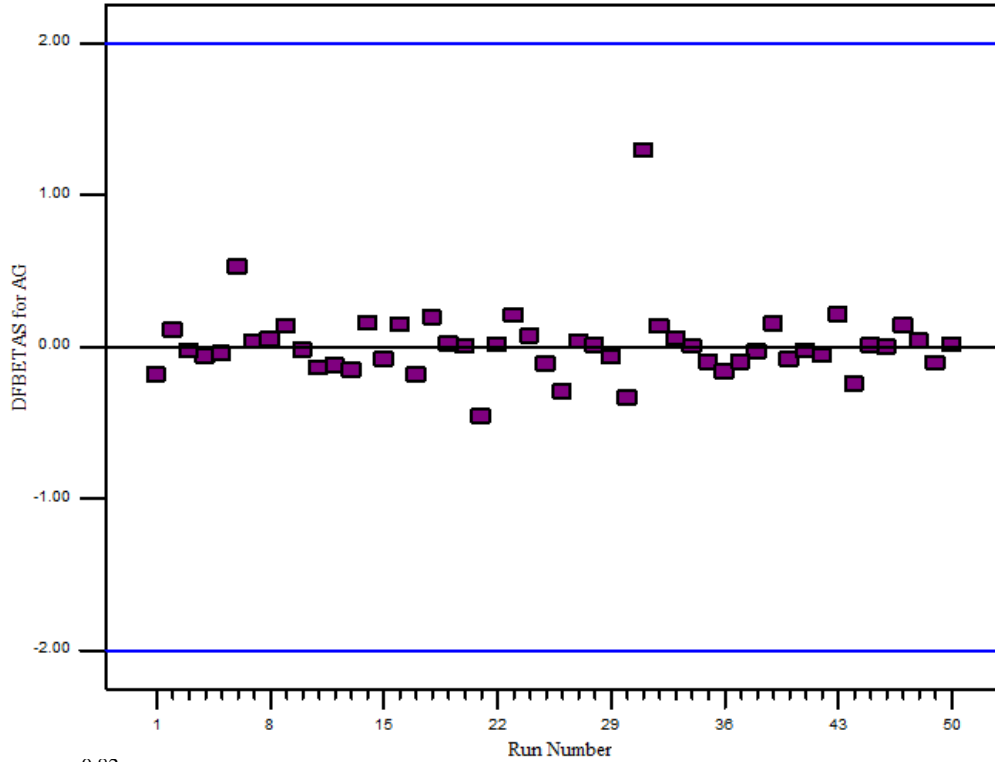
D.Sırası	Cevap Değerleri			Studentleştirilmiş Artık				Cook Mesafesi
	Ölçülen	Kestirilen	Artık	Kaldıraç	Dâhilî	Hâricî	DFFITs	
1	1.57	1.62	-0.05	0.44	-0.60	-0.60	-0.53	0.01
2	1.06	1.04	0.01	0.19	0.13	0.13	0.06	0.00
3	1.34	1.41	-0.06	0.33	-0.64	-0.64	-0.45	0.01
4	1.00	1.04	-0.04	0.19	-0.41	-0.40	-0.20	0.00
5	-0.60	-0.65	0.05	0.26	0.50	0.49	0.29	0.00
6	-0.69	-0.80	0.11	0.72	1.67	1.73	* 2.77	0.38
7	1.56	1.43	0.13	0.52	1.57	1.61	1.67	0.14
8	-0.76	-0.65	-0.11	0.26	-1.04	-1.04	-0.62	0.02
9	-0.92	-0.89	-0.03	0.34	-0.30	-0.29	-0.21	0.00
10	-1.14	-1.14	0.00	0.61	-0.06	-0.05	-0.07	0.00
11	-0.54	-0.80	0.26	0.24	2.49	2.73	1.52	0.10
12	1.57	1.50	0.08	0.41	0.85	0.85	0.71	0.03
13	-1.43	-1.25	-0.17	0.47	-2.00	-2.11	-1.99	0.19
14	-1.02	-1.06	0.04	0.36	0.40	0.39	0.30	0.00
15	1.52	1.56	-0.04	0.74	-0.69	-0.69	-1.17	0.07
16	1.10	1.01	0.09	0.24	0.86	0.86	0.48	0.01
17	1.40	1.51	-0.11	0.48	-1.26	-1.27	-1.22	0.08
18	-0.87	-0.80	-0.06	0.24	-0.62	-0.62	-0.34	0.01
19	1.05	1.01	0.04	0.24	0.43	0.42	0.24	0.00
20	-0.99	-0.87	-0.12	0.44	-1.36	-1.38	-1.22	0.08
21	1.53	1.59	-0.05	0.32	-0.54	-0.53	-0.37	0.01
22	1.03	1.03	0.00	0.25	-0.02	-0.02	-0.01	0.00
23	-0.80	-0.81	0.02	0.94 #	0.55	0.54	* 2.18	0.26
24	-0.45	-0.60	0.15	0.27	1.50	1.53	0.94	0.04
25	1.31	1.26	0.05	0.66	0.68	0.67	0.94	0.05
26	1.65	1.63	0.02	0.51	0.24	0.23	0.24	0.00
27	-0.87	-0.71	-0.15	0.22	-1.46	-1.49	-0.79	0.03
28	-0.82	-0.71	-0.11	0.22	-1.01	-1.01	-0.54	0.02
29	-0.76	-0.86	0.10	0.34	1.06	1.06	0.76	0.03
30	1.37	1.39	-0.02	0.38	-0.24	-0.24	-0.19	0.00
31	1.68	1.64	0.04	0.42	0.48	0.48	0.41	0.01
32	-1.27	-1.34	0.06	0.50	0.76	0.75	0.75	0.03
33	-1.05	-0.97	-0.08	0.41	-0.85	-0.85	-0.70	0.03
34	-0.84	-0.82	-0.03	0.31	-0.26	-0.25	-0.17	0.00
35	-1.02	-1.10	0.07	0.28	0.73	0.72	0.45	0.01
36	1.53	1.55	-0.02	0.41	-0.16	-0.16	-0.13	0.00
37	1.36	1.22	0.14	0.40	1.49	1.52	1.25	0.08
38	1.66	1.72	-0.06	0.56	-0.79	-0.79	-0.88	0.04
39	-1.24	-0.96	-0.28	0.24	-2.67	-3.00	-1.69	0.12
40	-0.82	-0.96	0.14	0.24	1.36	1.38	0.78	0.03
41	-0.49	-0.64	0.14	0.33	1.48	1.51	1.06	0.06
42	1.03	1.08	-0.05	0.22	-0.52	-0.51	-0.28	0.00
43	1.10	1.08	0.02	0.22	0.21	0.20	0.11	0.00
44	-0.80	-0.78	-0.02	0.66	-0.29	-0.29	-0.41	0.01
45	1.60	1.60	0.00	0.35	0.03	0.03	0.02	0.00
46	1.60	1.60	0.00	0.35	-0.03	-0.03	-0.02	0.00
47	1.60	1.66	-0.06	0.34	-0.58	-0.58	-0.41	0.01
48	1.05	1.08	-0.03	0.22	-0.25	-0.25	-0.13	0.00
49	1.65	1.66	-0.01	0.34	-0.09	-0.09	-0.07	0.00
50	-0.65	-0.65	0.00	0.34	0.00	0.00	0.00	0.00

*: Limiti aşan değerler; #: Kaldıraç değeri > 2x(ortalama kaldıraç değeri)

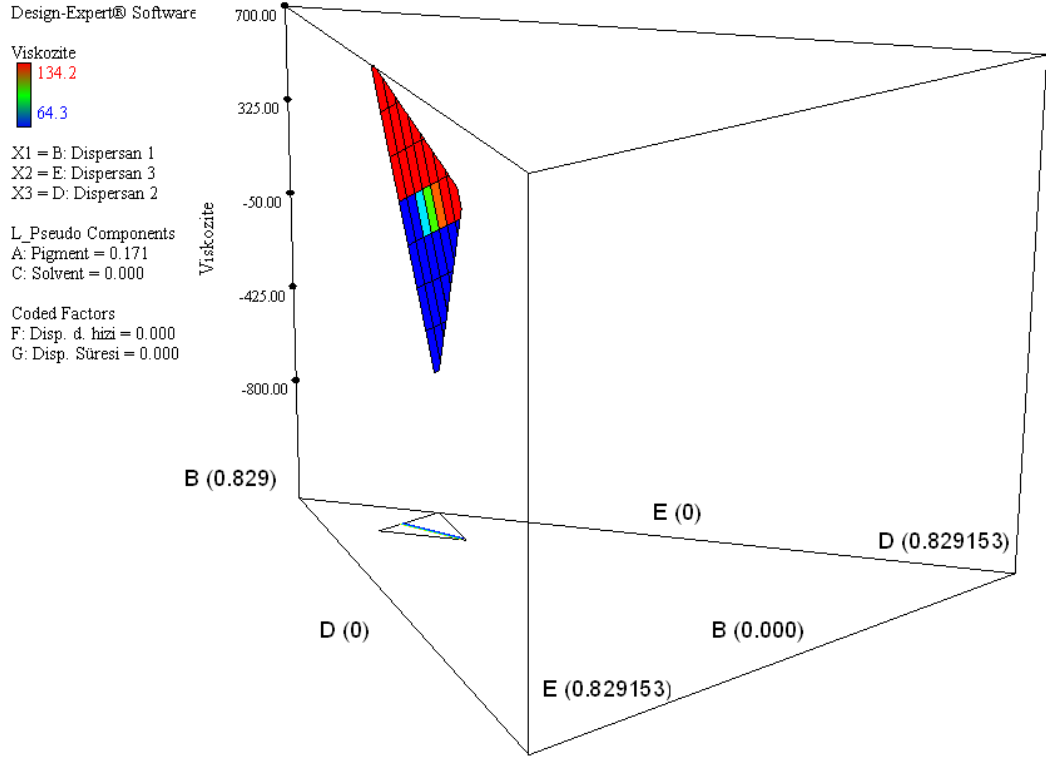
Ek-2: $dE^{0.82}$ ve viskozite için İlave Grafikler



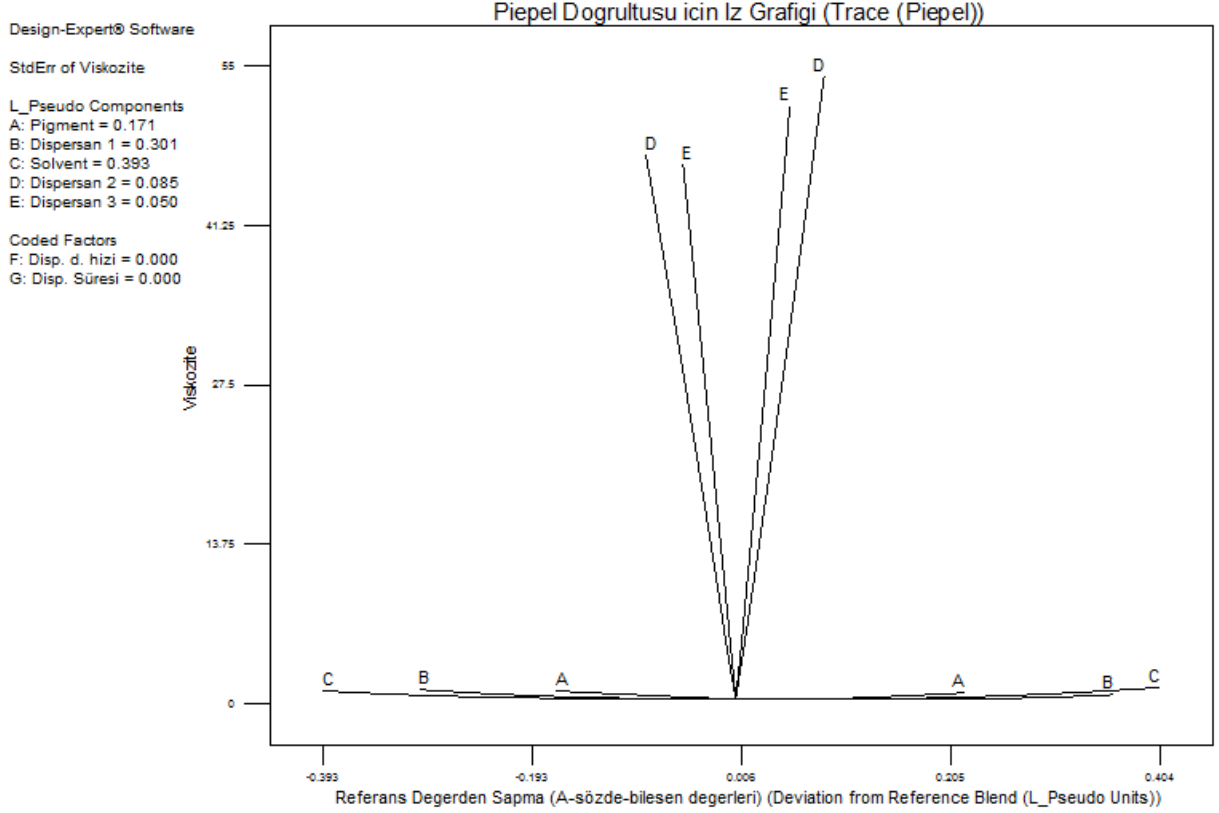
Şekil E.16 $dE^{0.82}$ için 3-boyutlu karışım grafiği. (B ve D bileşenleri için değişim aralığının darlığı dikkat çekicidir.)



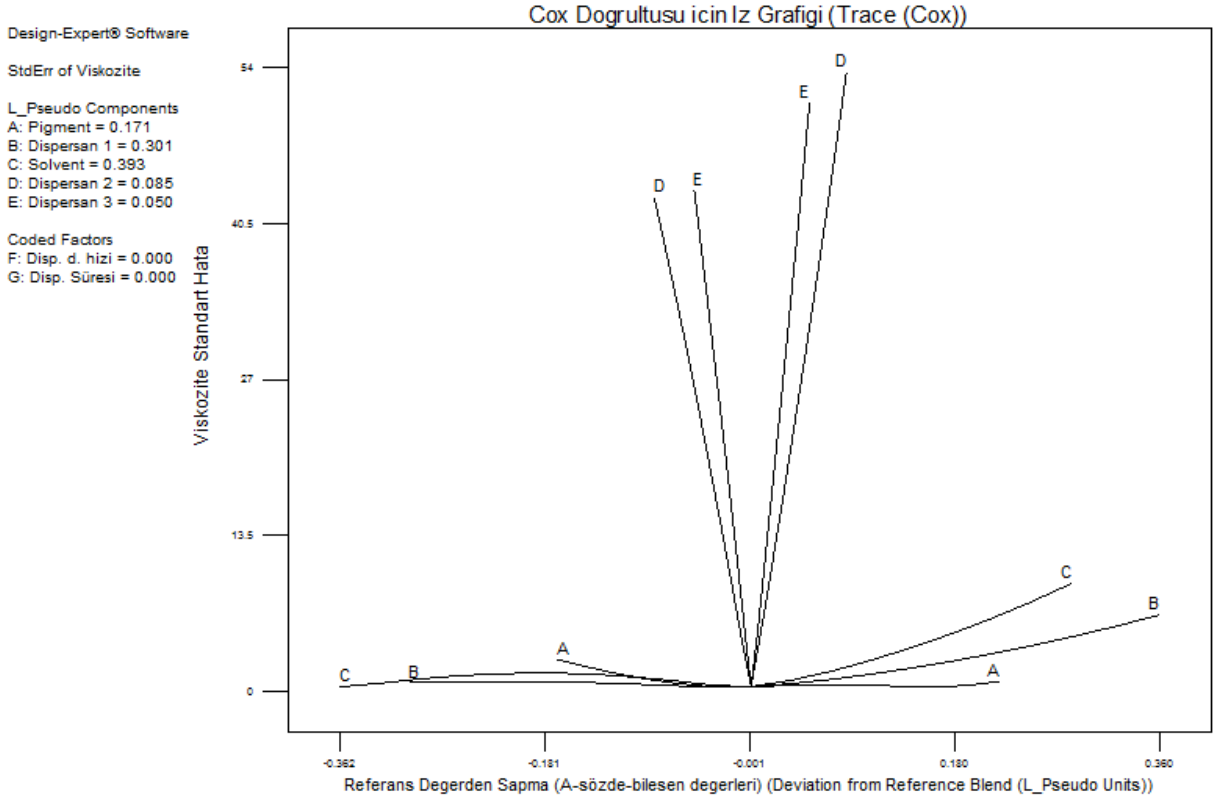
Şekil E.17 $dE^{0.82}$ cevabında AG terimi için DFBETAS değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafiği.



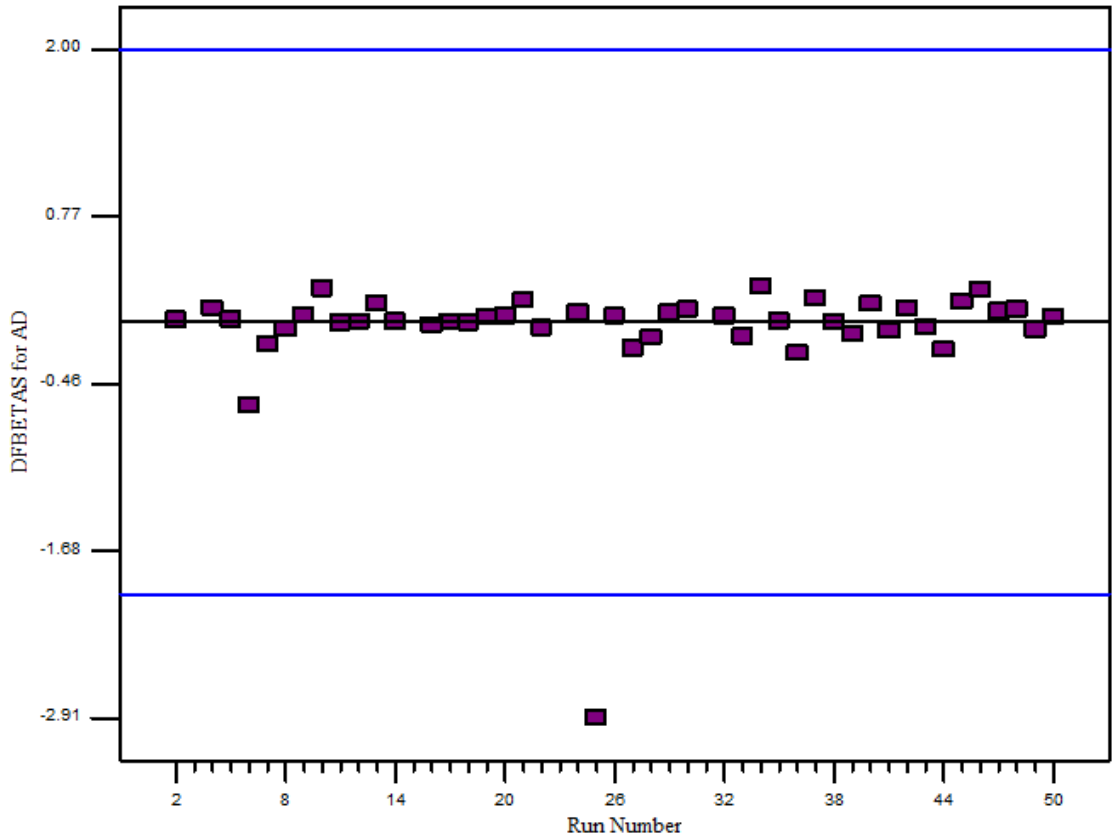
Şekil E.18 Viskozite için 3-boyutlu karışım grafiği (viskozite değerlerinin büyüklüğü dikkat çekicidir).



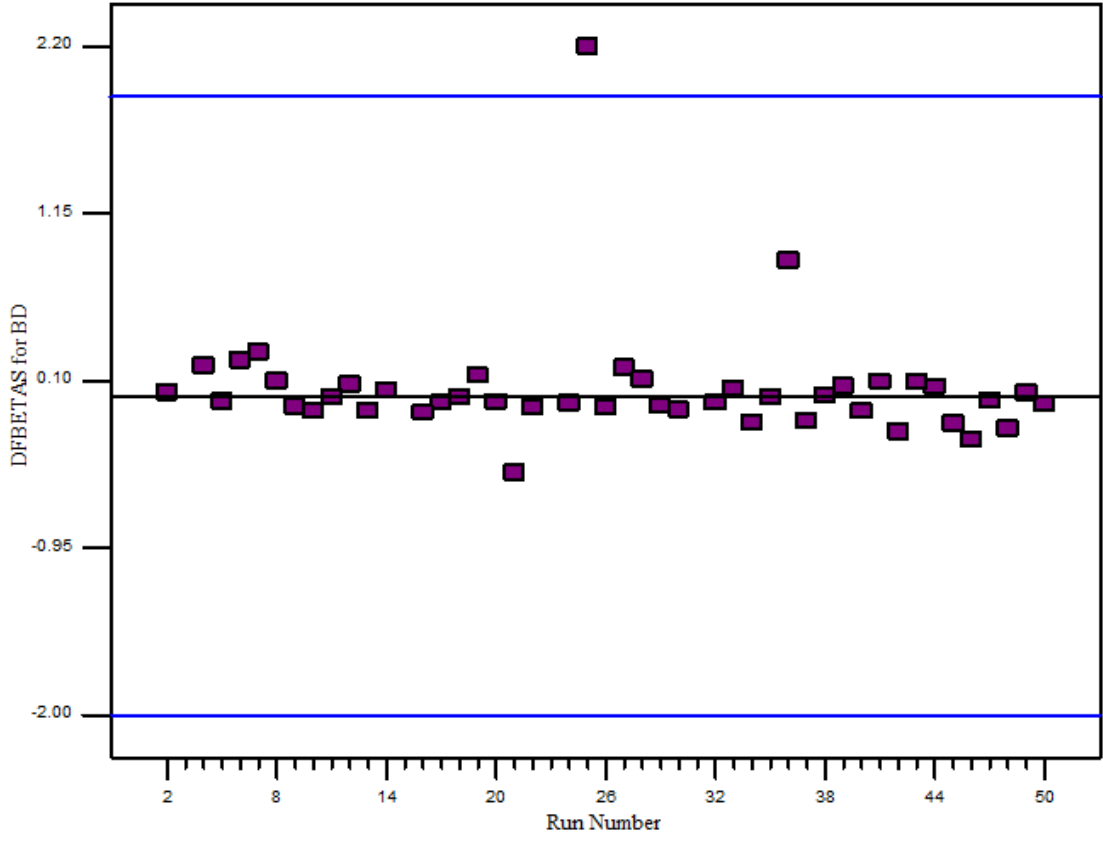
Şekil E.19 Viskozite için Piepel doğrultulu standart hatanın iz grafiği.



Şekil E.20 Viskozite için Cox doğrultulu standart hatanın iz grafiği.



Şekil E.21 Viskozite cevabında AD terimi için DFBETAS değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafiği.



Şekil E.22 Viskozite cevabında BD terimi için DFBETAS değerlerinin deney sırasına bağlı değişim grafiği.

Çizelge E.6 dE^{0.82} için teşhis/tanı ölçütleri için veri dökümü.

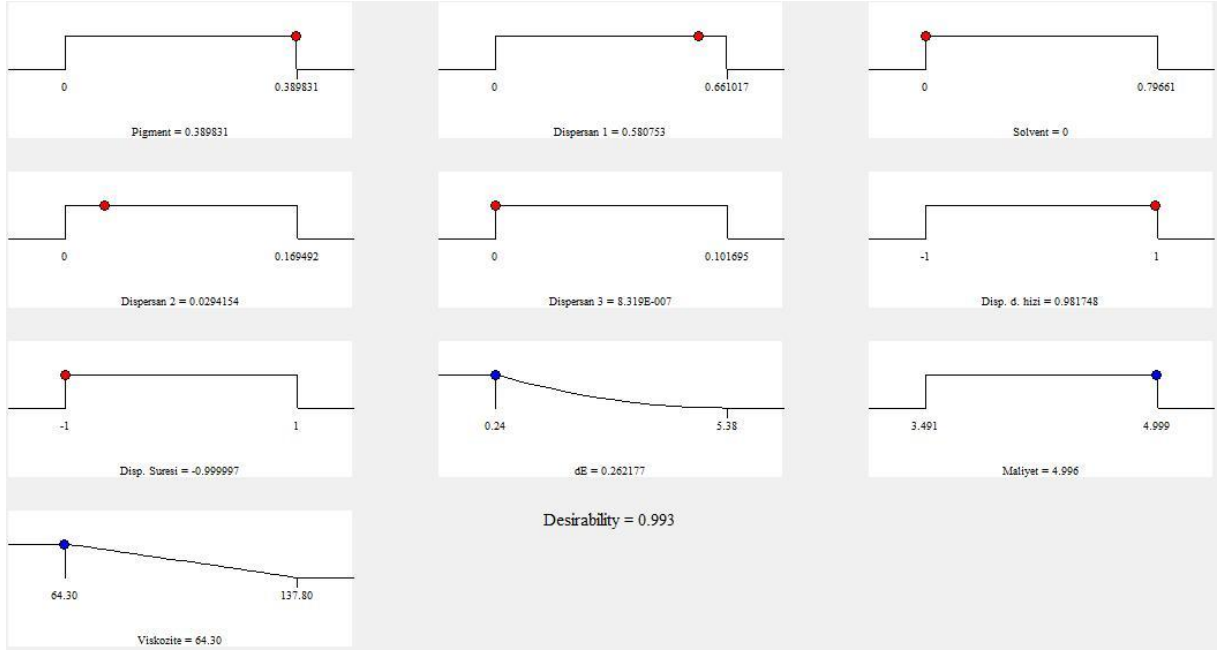
D.Sırası	Cevap Değerleri			Studentleştirilmiş Artık				Cook Mesafesi
	Ölçülen	Kestirilen	Artık	Kaldıraç	Dâhilî	Hâricî	DFFITs	
1	3.62	3.64	-0.03	0.54	-0.57	-0.56	-0.61	0.02
2	2.38	2.31	0.07	0.12	1.12	1.12	0.42	0.01
3	3.01	3.02	-0.02	0.14	-0.26	-0.25	-0.10	0.00
4	2.27	2.31	-0.04	0.12	-0.66	-0.66	-0.25	0.00
5	0.61	0.58	0.04	0.23	0.64	0.63	0.35	0.01
6	0.57	0.49	0.08	0.52	1.73	1.80	1.87	0.17
7	3.59	3.60	-0.01	0.60	-0.22	-0.22	-0.26	0.00
8	0.54	0.58	-0.04	0.23	-0.65	-0.65	-0.36	0.01
9	0.47	0.51	-0.04	0.57	-0.82	-0.82	-0.95	0.05
10	0.39	0.41	-0.02	0.56	-0.47	-0.46	-0.53	0.01
11	0.64	0.58	0.06	0.27	1.14	1.15	0.71	0.03
12	3.63	3.64	-0.01	0.72	-0.17	-0.17	-0.28	0.00
13	0.31	0.36	-0.05	0.36	-0.94	-0.94	-0.71	0.03
14	0.43	0.49	-0.05	0.48	-1.11	-1.12	-1.08	0.06
15	3.48	3.41	0.06	0.31	1.17	1.18	0.79	0.03
16	2.45	2.35	0.10	0.12	1.63	1.68	0.62	0.02
17	3.15	3.20	-0.05	0.71	-1.30	-1.32	* -2.09	0.22
18	0.49	0.58	-0.08	0.27	-1.52	-1.56	-0.96	0.05
19	2.37	2.35	0.01	0.12	0.20	0.20	0.07	0.00
20	0.44	0.44	0.00	0.43	-0.04	-0.04	-0.03	0.00
21	3.51	3.57	-0.06	0.37	-1.14	-1.14	-0.87	0.04
22	2.32	2.31	0.01	0.12	0.16	0.16	0.06	0.00
23	0.52	0.42	0.10	0.33	1.95	2.05	1.44	0.10
24	0.69	0.73	-0.04	0.39	-0.72	-0.71	-0.58	0.02
25	2.92	2.96	-0.05	0.48	-0.97	-0.97	-0.94	0.05
26	3.87	3.81	0.06	0.63	1.49	1.52	1.98	0.20
27	0.49	0.52	-0.03	0.23	-0.44	-0.43	-0.24	0.00
28	0.51	0.52	-0.01	0.23	-0.11	-0.11	-0.06	0.00
29	0.54	0.47	0.07	0.33	1.26	1.28	0.90	0.04
30	3.08	3.15	-0.07	0.39	-1.32	-1.34	-1.07	0.06
31	3.97	3.95	0.03	0.84 #	1.06	1.06	* 2.44	0.31
32	0.35	0.30	0.05	0.37	1.01	1.01	0.78	0.03
33	0.42	0.45	-0.03	0.47	-0.62	-0.62	-0.59	0.02
34	0.50	0.50	0.00	0.32	-0.02	-0.02	-0.01	0.00
35	0.43	0.40	0.03	0.54	0.69	0.68	0.74	0.03
36	3.52	3.54	-0.02	0.62	-0.47	-0.46	-0.59	0.02
37	3.05	3.07	-0.03	0.40	-0.55	-0.54	-0.44	0.01
38	3.89	3.88	0.01	0.53	0.15	0.15	0.15	0.00
39	0.36	0.46	-0.09	0.28	-1.68	-1.74	-1.08	0.06
40	0.51	0.46	0.05	0.28	0.97	0.97	0.60	0.02
41	0.67	0.74	-0.07	0.49	-1.53	-1.57	-1.53	0.12
42	2.32	2.35	-0.03	0.13	-0.55	-0.54	-0.21	0.00
43	2.47	2.35	0.12	0.13	1.89	1.98	0.77	0.03
44	0.52	0.56	-0.04	0.66	-0.97	-0.97	-1.34	0.09
45	3.72	3.71	0.01	0.36	0.24	0.24	0.18	0.00
46	3.71	3.71	-0.01	0.36	-0.11	-0.11	-0.08	0.00
47	3.72	3.80	-0.08	0.35	-1.55	-1.59	-1.18	0.07
48	2.37	2.35	0.02	0.13	0.34	0.34	0.13	0.00
49	3.86	3.80	0.07	0.35	1.24	1.25	0.93	0.04
50	0.58	0.57	0.02	0.41	0.31	0.31	0.26	0.00

*: Limiti aşan değerler; #: Kaldıraç değeri > 2x(ortalama kaldıraç değeri)

Çizelge E.7 Viskozite için teşhis/tanı ölçütleri için veri dökümü.

D.Sırası	Cevap Değerleri			Studentleştirilmiş Artık				
	Ölçülen	Kestirilen	Artık	Kaldıraç	Dâhilî	Hâricî	DFFITs	Cook Mesafesi
2	82,7	82,92	-0,22	0,24	-0,21	-0,21	-0,12	0,00
4	81,3	82,92	-1,62	0,24	-1,57	-1,62	-0,92	0,05
5	108,4	108,96	-0,56	0,34	-0,58	-0,58	-0,41	0,01
6	108,3	109,27	-0,97	0,71	-1,52	-1,56	* -2,46	0,34
7	64,3	63,11	1,19	0,52	1,45	1,48	1,53	0,13
8	110,8	108,96	1,84	0,34	1,91	2,01	1,45	0,11
9	117,9	118,27	-0,37	0,30	-0,37	-0,36	-0,24	0,00
10	132,8	132,10	0,70	0,53	0,86	0,85	0,90	0,05
11	105,4	105,75	-0,35	0,30	-0,36	-0,35	-0,23	0,00
12	65,9	65,69	0,21	0,54	0,26	0,25	0,27	0,00
13	109	108,60	0,40	0,49	0,48	0,47	0,47	0,01
14	117,8	117,03	0,77	0,35	0,81	0,80	0,59	0,02
16	83,8	83,16	0,64	0,24	0,62	0,62	0,34	0,01
17	93,6	93,88	-0,28	0,64	-0,39	-0,39	-0,51	0,02
18	105,5	105,75	-0,25	0,30	-0,26	-0,25	-0,17	0,00
19	82,3	83,16	-0,86	0,24	-0,83	-0,82	-0,46	0,01
20	99,4	99,68	-0,28	0,33	-0,29	-0,28	-0,20	0,00
21	66,8	68,04	-1,24	0,40	-1,36	-1,38	-1,14	0,07
22	84,7	84,22	0,48	0,27	0,48	0,47	0,28	0,00
24	107,4	107,73	-0,33	0,38	-0,36	-0,35	-0,28	0,00
25	67,8	68,50	-0,70	0,86 #	-1,57	-1,61	* -3,99	0,89
26	65,9	66,93	-1,03	0,54	-1,28	-1,29	-1,40	0,11
27	105,8	104,29	1,51	0,28	1,50	1,54	0,96	0,05
28	105,2	104,29	0,91	0,28	0,91	0,90	0,56	0,02
29	119,2	119,56	-0,36	0,32	-0,37	-0,37	-0,25	0,00
30	97,9	97,14	0,76	0,39	0,82	0,82	0,66	0,03
32	109	108,88	0,12	0,50	0,14	0,14	0,14	0,00
33	100,8	99,96	0,84	0,34	0,87	0,87	0,62	0,02
34	100,5	103,51	-3,01	0,36	-3,18	** -3,90	* -2,92	0,33
35	117,4	117,32	0,08	0,30	0,09	0,08	0,05	0,00
36	70,1	68,55	1,55	0,59	2,04	2,17	* 2,61	0,35
37	95,5	94,68	0,82	0,38	0,88	0,88	0,69	0,03
38	68,1	68,12	-0,02	0,44	-0,02	-0,02	-0,02	0,00
39	119,8	118,79	1,01	0,24	0,98	0,98	0,54	0,02
40	117,4	118,79	-1,39	0,24	-1,34	-1,36	-0,75	0,03
41	102,1	101,44	0,66	0,33	0,68	0,67	0,47	0,01
42	84,5	83,44	1,06	0,21	1,00	1,00	0,52	0,02
43	83	83,44	-0,44	0,21	-0,42	-0,42	-0,22	0,00
44	134,2	134,87	-0,67	0,54	-0,83	-0,83	-0,90	0,05
45	87,1	87,61	-0,51	0,37	-0,54	-0,54	-0,41	0,01
46	86,8	87,61	-0,81	0,37	-0,86	-0,86	-0,66	0,03
47	66,1	65,60	0,50	0,34	0,52	0,51	0,36	0,01
48	84,4	83,44	0,96	0,21	0,91	0,91	0,47	0,01
49	65,2	65,60	-0,40	0,34	-0,42	-0,41	-0,29	0,01
50	101,1	101,44	-0,34	0,33	-0,35	-0,34	-0,24	0,00

*: Limiti aşan değerler; #: Kaldıraç değeri > 2x(ortalama kaldıraç değeri)



Şekil E.23 KSDT çalışmasının sayısal optimizasyonunda 1. çözüm noktası için tüm değişkenlerin rampa grafikleri. (dE cevap değişkenindeki eğrisellik dikkat çekicidir.)

ÖZGEÇMİŞ

Gündüz GÜZEL 23 Haziran 1979 doğumludur. 2003 yılında İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü kimya mühendisliği bölümünden mezun olmuştur. Bu tarihten itibaren Kalekim Kimyevi Maddeler San. ve Tic. A.Ş.'de çeşitli görevlerde bulunmuştur. Burada, son olarak, Altı Sigma proje liderliği (Karkuşak) yapmıştır.

2007 yılında Institut National Polytechnique – ENSIACET (Toulouse – Fransa)'te proses mühendisliği alanında araştırma mastırı (Master Recherche) yapmıştır.

Kasım 2008 tarihinde Århus Üniversitesi – Danimarka'da biyoteknoloji alanında mühendislik doktorasına başlamıştır.