

## MASTER

**CADE : computer aided design of experiments**  
**een programma voor proefopzetten en modelvorming**

Nagtegaal, R.

*Award date:*  
1987

[Link to publication](#)

### **Disclaimer**

This document contains a student thesis (bachelor's or master's), as authored by a student at Eindhoven University of Technology. Student theses are made available in the TU/e repository upon obtaining the required degree. The grade received is not published on the document as presented in the repository. The required complexity or quality of research of student theses may vary by program, and the required minimum study period may vary in duration.

### **General rights**

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain

CADE:

Computer Aided Design of Experiments

Een programma voor proefopzetten  
en modelvorming

Rob Nagtegaal

Rapport WFW 87.005

Verslag van het afstudeeronderzoek voor de  
studie tot werktuigbouwkundig ingenieur.

Februari 1987.

Technische Universiteit Eindhoven  
Vakgroep Fundamentele Werktuigbouwkunde

Hoogleraar : Prof. Dr. Ir. D.H. van Campen  
Coach : Ir. A.J.G. Schoofs

# INHOUDSOPGAVE

Voorwoord

Summary

Samenvatting

1. Inleiding en probleemstelling
  - 1.1 Iteratieve optimalisatie
  - 1.2 Modelvorming
  - 1.3 Statistische theorie van het proefopzetten
  - 1.4 Opdrachtformulering
  - 1.5 Testcase
  
2. Proefopzetten
  - 2.1 Fraktioneel faktoriële proefopzetten
  - 2.2 Optimal design theorie
    - 2.2.1 Optimaliserings-kriteria
      - 2.2.1.1 Interpretatie
      - 2.2.1.2 Definitie van de proefopzet
      - 2.2.1.3 Genormeerde criteria
    - 2.2.2 Equivalentie-theorema
    - 2.2.3 Optimaliserings-algorithmen
    - 2.2.4 Robuuste proefopzetten
      - 2.2.4.1 Toepassingsgebied
  - 2.3 Eindige-elementen-methode analyses
  - 2.4 ACED: Algorithms for the Construction of Experimental Designs
  - 2.5 Proefopzetten voor het gelijktijdig waarnemen van meerdere afhankelijke variabelen
    - 2.5.1 Definities
    - 2.5.2 Optimaliserings-kriteria
    - 2.5.3 Equivalentie-theorema
    - 2.5.4 D-optimale proefopzetten
    - 2.5.5 G-optimale proefopzetten
    - 2.5.6 V-optimale proefopzetten
    - 2.5.7 J-optimale proefopzetten
      - 2.5.7.1 Optimaliserings-algorithmen
      - 2.5.7.2 Gegeneraliseerde update-formules
    - 2.5.8 Branch & Bound-algorithme

3. Modelaanpassing, selectie van variabelen
  - 3.1 Gewogen kleinste kwadraten schattingen
  - 3.2 Centrering
  - 3.3 Selectie van variabelen
    - 3.3.1 Selectieprocedures
    - 3.3.2 Weging bij de selectieprocedures
  - 3.4 Iteratieve verfijning
  
4. CADE - een overzicht van de mogelijkheden
  - 4.1 Toepassingsgebied
  - 4.2 Modelinvoer
  - 4.3 Proefopzetten
    - 4.3.1 Werkwijze
    - 4.3.2 Optimaliserings-kriteria
    - 4.3.2 Optimaliserings-algorithmen
    - 4.3.4 Proefopzetten voor het gelijktijdig waarnemen van meerdere afhankelijke variabelen
    - 4.3.5 Lokaal optimum
    - 4.3.6 Herhaald selekteren van kandidaatpunten
    - 4.3.7 Uitbreidbaarheid van bestaande proefopzetten
    - 4.3.8 Beperking benodigde geheugenruimte
    - 4.3.9 Codering
    - 4.3.10 Fraktionele  $2^V$ -proefopzetten
  - 4.4 Modelaanpassing
    - 4.4.1 Automatische selectieprocedures
    - 4.4.2 Handmatige selectie
    - 4.4.3 Beschermdere regressievariabelen
    - 4.4.4 Nauwkeurige schattingen - iteratieve verfijning
    - 4.4.5 Partiële afgeleiden: iteratieve weegprocedure

- 5. Testresultaten
  - 5.0 Inleiding
  - 5.1 Vergelijking met "klassieke" methoden
  - 5.2 Uitbreiding naar het gelijktijdig waarnemen van meerdere afhankelijke variabelen.
    - 5.2.1 Approximate-algorithme
    - 5.2.2 Schaalgevoeligheid
    - 5.2.3 Excursie-algorithme
  - 5.3 Modelaanpassing
    - 5.3.1 Voorwaartse selectie
    - 5.3.2 Achterwaartse eliminatie
    - 5.3.3 Stapsgewijze regressie
    - 5.3.4 Iteratieve verfijning
    - 5.3.5 Partiële afgeleiden: iteratieve weeg-procedure

Conclusies en aanbevelingen

Appendices

- A. Fraktioneel faktoriële  $2^V$ -proefopzetten
- B. Gegeneraliseerde update-formules

Symbolenlijst

Literatuurlijst

## Voorwoord.

Het onderhavige verslag is het resultaat van toegepast onderzoek naar modelvorming en proefopzetten. Het onderzoek is verricht binnen de vakgroep Fundamentele Werktuigbouwkunde van de Technische Universiteit Eindhoven in het kader van het optimaliseren van constructies.

Ik wil op deze plaats Bert Schoofs danken voor de hulp en de vele goede adviezen die ik van hem heb ontvangen. De aangename en bovenal hartelijke samenwerking met hem is bijzonder inspirerend geweest.

Jos van Heck dank ik voor zijn belangstelling en goede raadgevingen.

Mijn dank gaat uit naar mijn vader, die het grootste deel van het, toch niet eenvoudige, typewerk heeft verricht, en naar mijn vrouw Ingrid, die er zo zorgvuldig de stofkam doorheen heeft gehaald.

Aan haar, Ingrid, ben ik bijzondere dank verschuldigd voor de steun die zij mij heeft gegeven en voor het feit dat zonder haar dit onderzoek niet zou hebben plaatsgevonden.

Rob Nagtegaal,

's-Hertogenbosch, 29 januari 1987.

CADE: Computer Aided Design of Experiments.

A program for the design and analysis of experiments.

Summary.

Nowadays many investigations in mechanical engineering require setting up complicated and expensive experiments. Recently the department of mechanical engineering began to take an interest in statistical methods for the planning of experiments. These methods appear to be very useful in the field of structural optimization, where they are used to plan experiments for building mathematical models of the mechanical behaviour of structures. The methods, used earlier in the department to reduce the size of experimental designs, i.e. latin squares, transformation to  $2^v$ -factorial designs, where  $v$  is the number of independent variables, require statistical expertise and have the disadvantage that only one dependent response variable may be considered.

Research has therefore been shifted towards the optimal design theory. Here it is required to choose a criterion for comparing experimental designs and an algorithm to optimize the criterion over the set of possible designs. The criteria are based on inferential properties of the postulated model, such as the variance of parameter estimations or response estimations.

Based on the optimal design theory a program called CADE has been developed. CADE consists of three modules:

- model input
- optimal design
- model building

It runs interactive by means of a library for interactive communication, COIN, which stands for COmmand INterpreter. All data, including all kinds of linear models, may be entered at the terminal, stored in a file or read from a

previously prepared file; user-supplied subroutines are not needed. It has facilities for session logging and command file processing.

For optimal design three algorithms and four criteria have been implemented:

- Excursion-algorithm
  - . D-optimality
  - . G-optimality
  - . V-optimality
  - . J-optimality
- Branch & Bound algorithm
  - . D-optimality
- Approximate-algorithm
  - . D-optimality
  - . V-optimality
  - . J-optimality

The excursion- and the branch & bound-algorithm generate exact designs, while the approximate-algorithm generates discrete designs. The algorithms and the criteria have been generalized to multiple respons variables.

For model building three automatic selection procedures are available:

- Forward selection
- Backward elimination
- Stepwise regression

Partial derivatives of the respons variables with respect to the independent variables may be handled using the iterative reweighting procedure. A manual selection of regressor variables is also implemented.



### Samenvatting.

Binnen de vakgroep wordt programmatuur ontwikkeld t.b.v. numerieke vormoptimalisatie van konstrukties.

Hierbij worden 2 wegen bewandeld:

1. integratie van eindige elementen methode en optimaliseringstechnieken, direkte iteratieve optimalisatie
2. toepassing van methodieken uit de theorie van het proefopzetten; zij kunnen als intermediair fungeren tussen elementenmethode en optimaliseringstechnieken.

#### Direkte iteratieve optimalisatie.

Voorbeelden van succesvolle integratie zijn de programma's DYNOPT (TUE) en OPTIMA (TNO). Deze programma's zijn instaat de partiële afgeleiden van de te optimaliseren eigenschap van de konstruktie (doel- of objektfunctie) naar de ontwerpvariabelen te benaderen door differentiequotiënten. Het gebruik van deze afgeleiden blijkt het optimaliseringsproces aanzienlijk te versnellen.

#### Nadelen.

Wanneer echter een startpunt (vorm van de konstruktie) wordt gekozen die ver aflight van het optimum van de doelfunctie, en deze doelfunctie kompleks van vorm is, dan is de kans op het vinden van het globale optimum klein. Het globale optimum zal dan alleen gevonden kunnen worden ten koste van zeer hoge rekentijden. In dit geval vormt het toepassen van technieken uit de theorie van het proefopzetten een goed alternatief.

#### Proefopzetten.

Uitgangspunt is hier een proefopzet, dat is een goed gekozen set van konstruktievarianten, waarvoor m.b.v. EEM-programmatuur de te optimaliseren eigenschap wordt berekend. M.b.v. regressieanalyse wordt vervolgens door de berekende waarden een interpolatiefunctie (meestal een polynoom) gefit.

Deze interpolatiefunctie vormt een benadering voor de onbekende doelfunctie en kan gebruikt worden als snelle-analyse-moduul in optimaliseringsprogrammatuur.

Ook bij deze werkwijze kan met voordeel gebruik gemaakt worden van de mogelijkheid partiële afgeleiden van de doelfunctie te berekenen. Te zamen met de berekende functiewaarden van de doelfunctie kunnen zij worden gebruikt om de parameters van de interpolatiefunctie te schatten. De interpolatiefunctie zal daartoe gedifferentieerd moeten worden naar de ontwerpvariabelen. De doelfunctie wordt zodoende benaderd door een "functiemodel" (de interpolatiefunctie) en een set "afgeleide-modellen". Bij de regressieanalyse worden de modellen onderling gekoppeld door de eis dat de overeenkomstige parameters gelijk behoren te zijn.

#### Reduktie methoden.

Teneinde de proefopzet zoveel mogelijk in omvang te beperken, zonder dat daardoor de interpolatiefunctie al te veel aan voorspellingskracht zal inboeten, zijn in het verleden binnen de vakgroep een aantal reductiemethoden uit de statistiek toegepast. We noemen: fraktioneel faktoriële proefopzetten, vierkantenmethoden en reductie naar  $2^v$ -proefopzetten, waarin met  $v$  het aantal ontwerpvariabelen wordt aangeduid. Deze methoden, met name de laatste 2, vereisen echter veel statistische vaardigheid. Het is veelal moeilijk hiermee op maat gesneden proefopzetten te genereren en onduidelijk is hoe de partiële afgeleiden hierbij betrokken kunnen worden.

#### Optimal design.

In de statistiek zijn echter andere methoden voorhanden die voor onze doeleinden geschikter lijken. Zij vinden hun oorsprong in de optimal design theorie. De optimaliteit van proefopzetten wordt hierin beoordeeld op grond van criteria die betrekking hebben op parameterschattingen of responschattingen (van de interpolatiefunctie). De algorithmen waarmee optimale en op maat gesneden proefopzetten kunnen

worden gegenereerd, vereisen het inzetten van de computer. Dat heeft het voordeel dat gebruikersvriendelijke programmatuur kan worden ontwikkeld.

ACED.

Door de vakgroep is het pakket ACED (Algorithms for the Construction of Experimental Designs) aangekocht. ACED is ontwikkeld door Welch over een reeks van jaren (1982 t/m 1985), en is op dit moment het meest geavanceerde programma dat op dit gebied beschikbaar is. Er kunnen met ACED evenwel alleen proefopzetten worden bepaald die optimaal zijn m.b.t. één interpolatiefunctie.

CADE.

In het voor deze afstudeeropdracht ontwikkelde programma CADE (Computer Aided Design of Experiments) zijn de algoritmen en criteria van ACED gegeneraliseerd. Met CADE kunnen proefopzetten worden gegenereerd die optimaal zijn m.b.t. meerdere interpolatiefuncties of, naar keuze, één interpolatiefunctie en zijn partiële afgeleiden.

CADE bevat 3 modules:

- modelinvoer
- proefopzetten
- regressieanalyse

Alle invoergegevens, inclusief lineaire modellen van iedere gewenste vorm, kunnen via de terminal worden ingevoerd, weggeschreven naar een file, of ingelezen worden van een eerder geprepareerde file. Gebruikersvriendelijkheid werd nagestreeft door

- menu-besturing
- commando-file-besturing
- overbodigheid van gebruikersroutines
- helptekst "on line" beschikbaar

T.b.v. het genereren van proefopzetten zijn 3 algoritmen, te weten:

- excursie-algorithme
- branch & bound-algorithme
- approximate-algorithme

en 4 criteria geïmplementeerd, te weten:

D-, V-, G- en J-optimaliteit

De moduul regressieanalyse bevat:

- automatische selectieprocedures
  - . stapsgewijze regressie
  - . voorwaartse selectie
  - . achterwaartse eliminatie
- handmatige selectie
- iteratieve weegprocedure t.b.v. partiële afgeleiden

#### Toepassingsgebieden.

CADE is universeel en bruikbaar bij zowel numerieke als fysische experimenten waar modelvorming een rol speelt. Toepassingsgebieden liggen er niet alleen in de vormoptimalisatie, maar bv. ook in de regeltechniek: proces- en robotbesturing, tribologie: spanningsverdeling in contactvlakken, materiaalonderzoek: eigenschappen van legeringen en composieten van variabele samenstelling. Het kan voorts een belangrijk hulpmiddel vormen bij de ontwikkeling en optimalisatie van produkten en processen. Daarnaast kan ook gedacht worden aan het gestructureerd opzetten van levensduurproeven. Langs deze weg zouden regressiemodellen van vermoeiingseigenschappen kunnen worden afgeleid, waarmee konstrukties geoptimaliseerd kunnen worden m.b.t. die eigenschappen.

#### Toepassingen: remtrommels en carillonklokken.

Voor DAF-Trucks zijn met CADE proefopzetten gegenereerd t.b.v. het optimaliseren van de buigstijfheid van remtrommels. Deze proefopzetten worden vergeleken met de proefopzet, bepaald door dr. ir. J. van Heck van DAF-Trucks. De DAF-proefopzet is gebaseerd op een transformatie naar  $2^V$ -proefopzetten. Becijferd is dat de kosten, verbonden aan het ontwerpen van

deze DAF-proefopzet, ca. f5000,- hoger zijn dan de kosten, verbonden aan het genereren van kwalitatief vergelijkbare proefopzetten met CADE. Hierin is bovendien nog niet verdiskonteerd de inspanning die noodzakelijk is om de, voor de DAF-proefopzet vereiste, statistische kennis en vaardigheid aan te kweken. CADE vereist die kennis en vaardigheid niet.

Als testcase voor het programma is aan het begin van de afstudeeropdracht gekozen voor de luid- of carillonklok. Het lag in de bedoeling regressiemodellen te ontwikkelen van de grondtoon en een 13-tal boventonen van de klok als functie van zijn vorm. De ontwikkeling van CADE is echter dermate omvangrijk gebleken dat nog geen afgeronde regressiemodellen kunnen worden gepresenteerd. Een eerste oriënterende proefopzet is al gemaakt en rond de jaarwisseling zijn 150 klokvarianten doorgerekend. De resultaten zullen moeten leiden tot een beter inzicht in de vorm van de regressiemodellen. Vervolgens zal een iteratief proces worden opgestart van

1. uitbreiding van de proefopzet
2. de extra klokvarianten doorrekenen
3. evaluatie van de regressiemodellen
4. aanpassing van de regressiemodellen.

De definitieve modelvorm, de behaalde kwaliteit van de modellen en de ervaringen die hierbij worden opgedaan, zullen naar verwachting in het proefschrift van ir. A.J.G. Schoofs worden opgenomen.

#### Besluit.

Het ligt in de bedoeling op dit afstudeerwerk en het proefschrift een publikatie te laten volgen.

## Hoofdstuk 1 Inleiding en probleemstelling.

Binnen de vakgroep wordt op basis van de eindige-elementen-methode (EEM) programmatuur ontwikkeld t.b.v. numerieke optimalisering van zowel statisch als dynamisch belaste constructies. Voordeel boven het bouwen en beproeven van prototypes is dat het optimaliseren geautomatiseerd kan worden. In combinatie met optimaliseringsalgorithmen en een meshgenerator kunnen automatisch wijzigingen in de richting van een optimale geometrie tot stand worden gebracht.

### 1.1 Iteratieve optimalisering.

De constructie wordt hierbij beschreven door een aantal variabelen die de eigenschappen, de topologie en de geometrie vastleggen. Een aantal variabelen krijgt een vaste waarde, de anderen zullen tijdens het optimaliseringsproces gevarieerd mogen worden: de ontwerpvariabelen. Iedere set van waarden voor de ontwerpvariabelen representeert een ontwerp van de constructie. In plaats van "waarde" zullen we ook wel spreken van "nivo", een term die in de theorie van het proefopzetten gangbaar is.

De te optimaliseren eigenschap van de constructie dient nader te worden gepreciseerd als een of andere functionele relatie met de ontwerpvariabelen: de doel-, objekt- of kostenfunctie. Aan de te optimaliseren doelfunctie worden vaak gelijkheids- en/of ongelijkheidsbeperkingen gesteld. In het algemeen zullen ook aan de ontwerpvariabelen begrenzingen gesteld worden.

Resultaat van het optimaliseringsproces is een set van waarden, een nivokombinatie, voor de ontwerpvariabelen, waarvoor de doelfunctie een optimum (meestal een minimum) bezit.

De optimalisatie geschiedt m.b.v. methoden uit de wiskundige programmering. Een aantal methoden vereisen het expliciet berekenen van eerste afgeleiden van de doelfunctie en de beperkingen naar de ontwerpvariabelen. In EEM-programma's blijken deze partiële afgeleiden goed benaderd te kunnen worden door differentiequotienten. Dit levert een grote besparing in de benodigde rekentijd op.

Aan deze iteratieve vorm van optimaliseren zijn echter een aantal nadelen verbonden:

1. Weinig EEM-programma's bezitten op dit moment optimaliseringsalgoritmen, en als ze die al bezitten, dan zijn ze meestal beperkt in de mogelijkheden.
2. Tot nu toe kunnen slechts enkele EEM-programma's zoals DYNOPT (TUE) en OPTIMA (TNO) partiële afgeleiden bepalen.
3. In de praktijk zijn de doelfuncties vaak sterk niet-lineair, zodat het globale optimum niet, of alleen ten koste van zeer hoge rekentijden kan worden gevonden. Men zal dan genoeg moeten nemen met een lokaal optimum.
4. Het rendement van de geïnvesteerde rekentijd is laag: het uiteindelijke resultaat is slechts één gegeven, het optimum van het beschouwde probleem. Tussentijdse resultaten worden bij deze werkwijze voor geen enkel ander doel benut en gaan verloren.

## 1.2 Modelvorming.

Bovenstaande nadelen worden grotendeels opgeheven wanneer de doelfunctie eerst wordt benaderd door een interpolatie- of benaderingsfunctie van eenvoudig hanteerbare vorm, bv. een polynoom.

Deze interpolatiefunctie bevat onbekende parameters die geschat zullen moeten worden aan de hand van een aantal EEM-analyses. Hiertoe wordt aan iedere ontwerpvariabele een aantal nivo's toegewezen, waarop de ontwerpvariabele ingesteld zal worden. Vervolgens dient een proefopzet opgesteld te worden. Dit is een programma dat voorschrijft voor welke instelkombinaties EEM-analyses moeten worden uitgevoerd. Aan de hand van de resultaten van de analyses worden de onbekende parameters van de interpolatiefunctie m.b.v. regressieanalyse geschat. Deze interpolatiefunctie zal in het vervolg ook vaak aangeduid worden met "regressiemodel", of kortweg "model".

Deze werkwijze biedt grote voordelen t.o.v. de boven beschreven iteratieve optimalisatie:

1. EEM-programma en optimaliseringsalgorithme kunnen nu gescheiden blijven. Optimaliseringsprogramma's zijn ruim voorhanden, goedkoop en daarbij vaak zeer uitgebreid in de mogelijkheden.
2. Evaluatie van het regressiemodel vergt veel minder rekentijd dan evaluatie van het elementenmodel (EEM-analyse). Dit kan bij dynamisch belaste konstrukties leiden tot een reductie met een faktor 10000.
3. Alle informatie uit de EEM-analyses wordt opgeslagen in het regressiemodel.
4. Met één en hetzelfde regressiemodel kunnen gelijksoortige optimaliseringsproblemen worden opgelost. Bij wijzigingen in de gelijkheids- en/of ongelijkheidsbeperkingen van de doelfunctie ontstaat een nieuw optimaliseringsprobleem. Voor dit nieuwe probleem kan van hetzelfde model gebruik gemaakt worden.
5. Het model levert inzicht op in het relatieve belang van de verschillende ontwerpvariabelen.



6. Het regressiemodel geeft een benadering van het verloop van de eigenschap, die het modelleert, als functie van de ontwerpvariabelen. Het model kan dus ook voor simulatiedoeleinden gebruikt worden. (Regelsystemen)
7. Een, uit het regressiemodel verkregen optimum kan als startwaarde fungeren voor de eerder genoemde iteratieve optimalisatie. Er kan efficiënt gezocht worden naar het globale optimum.

Aldus vormt het regressiemodel een snel en efficiënt rekenmodel in programmatuur t.b.v. optimalisatie en simulatie.

Het is hier bijzonder voordelig dat partiële afgeleiden van de doelfunctie ten koste van slechts weinig extra rekentijd verkregen kunnen worden. Wanneer die gebruikt worden bij het schatten van de parameters van het regressiemodel, dan zullen de partiële afgeleiden van het regressiemodel goede benaderingen vormen voor de partiële afgeleiden van de doelfunctie. Hierdoor mogen ook optimaliseringsalgorithmen, gebaseerd op gradiëntenmethoden worden toegepast.

Een tweede voordeel is dat extra gegevens beschikbaar komen voor het schatten van de parameters, zodat volstaan kan worden met een geringer aantal uit te voeren EEM-analyses.

### 1.3 Opdrachtformulering.

Een volledige proefopzet, dat is een schema waarin alle mogelijke instelcombinaties voorkomen, leidt bij vergroting van het aantal ontwerpvariabelen en het aantal instelnivo's per variabele al gauw tot een proefschema van onacceptabel grote omvang. Daarom zijn in de statistiek methoden ontwikkeld, waarmee de proefopzet in omvang ge-

reduceerd kan worden.

Dergelijke methoden leiden tot zgn. fraktionele proefopzetten, waarbij een geoptimaliseerde keuze wordt gemaakt uit het totaal van alle mogelijke instelkombinaties. Het bijzondere van deze methoden is dat van een fraktionele proefopzet kan worden aangegeven hoeveel informatieverlies optreedt, dwz. welke parameters wel, en welke niet te schatten zijn. Hiervan kan bij het ontwerpen van een fraktionele proefopzet gebruik gemaakt worden. In de praktijk zullen in veel gevallen niet alle parameters (van een volledig polynoommodel) significant zijn. Het proefschema wordt nu zó gekozen dat daarmee alleen diè parameters te schatten zullen zijn die, naar verwachting, significant zullen zijn. Door deze werkwijze kan de proefopzet in omvang beperkt blijven, zonder dat het regressiemodel veel aan voorspellingskracht zal inboeten.

Met een 3-tal methoden is binnen de vakgroep in het verleden enige ervaring opgedaan (v. Heck, 1983a, -b, 1984):

- fraktioneel faktoriële proefschema's
- vierkantenmethoden
- transformatie naar  $2^v$ -proefopzetten, met  $v$  het aantal ontwerpvariabelen

In handboeken zijn fraktioneel faktoriële proefopzetten te vinden voor zeer veel combinaties van het aantal variabelen en de instelnivo's. In extreme situaties is het desondanks soms moeilijk een geschikte proefopzet te vinden. Men kan dan kiezen voor de dichtstbijzijnde proefopzet.

Met de 2 andere methoden kunnen voor dergelijke situaties wat meer op maat gesneden proefopzetten worden bepaald. Ook deze methoden bezitten echter een aantal nadelen, waarvan de belangrijkste wel zijn dat het vinden van een optimale proefopzet statistische kennis vereist, arbeidsintensief is en daarom veel vaardigheid vergt. Bovendien zijn hun toepassingsmogelijkheden beperkt.

Ondanks deze nadelen bleken de methoden toch redelijk succesvol. Geleid door dit succes en vanwege het belang dat de statistische theorie van het proefopzetten kan bezitten voor veel onderzoeksprojecten binnen de vakgroep, werd besloten toegepast onderzoek op dit terrein te laten verrichten. Een eindstudieopdracht werd geformuleerd, waarbij het ontwikkelen van gebruikersvriendelijke programmatuur centraal staat.

In het bijzonder diende aandacht te worden besteed aan:

1. het genereren van optimale fraktionele proefopzetten
2. modelaanpassing: schatting van de modelparameters en selectie van de significante termen van het model
3. het gebruik van partiële afgeleiden bij 1. en 2.
4. het gebruik van andere dan polynoommodellen ter benadering van de fysische realiteit, zoals e-macht, sinus, cosinus, logaritmie etc.

#### 1.4 Testcase.

Als testcase werd gekozen voor de luid- of carillonklok. Met het te ontwikkelen programma zal een regressiemodel moeten worden gemaakt van de eigenfrequenties (grondtoon en boventonen) van de klok als functie van de vorm van de klok. Het experimenteergebied, dat is het gebied waarbinnen het regressiemodel zijn geldigheid bezit, zal zo groot moeten worden gekozen dat alle bekende klokvormen

- kleine-terts-klok,
- grote-terts-klok,
- Russische klok
- eventuele alternatieve klokvormen

binnen dit gebied zullen vallen.

Met dit regressiemodel zal de klokkengieter m.b.v. een microcomputer voor iedere gewenste set van tonen, binnen het ontwerpgebied van het model, met voldoende nauwkeurigheid de bijbehorende klokvorm moeten kunnen berekenen.

## Hoofdstuk 2      Proefopzetten.

In toenemende mate vereist onderzoek op het gebied van wetenschap en technologie omvangrijke en vooral kostbare experimenten. Het is dan ook zeer zinvol het opzetten van experimenten zó te plannen dat met een minimum aan inspanning een zo hoog mogelijk rendement uit de experimenten wordt behaald.

Dit stelt echter aan het plannen van de experimenten 2 tegenstrijdige eisen: enerzijds willen we, om de kosten te beperken, zo weinig mogelijk experimenten uitvoeren en anderzijds willen we zoveel mogelijk relevante informatie verzamelen over de effecten van de invloedsfactoren die betrokken zijn bij de experimenten.

2.1

### Fractionele factoriële proefopzetten.

Vanaf de jaren 20 zijn technieken ontwikkeld ten behoeve van het gestructureerd opzetten van experimenten op basis van methoden uit de statistiek. Bij deze technieken worden de invloedsgrootheden die bij de experimenten betrokken zijn "factoren" genoemd. Deze factoren worden onafhankelijk van elkaar verondersteld en zijn naar keuze op verschillende nivo's instelbaar. Het doel van de experimenten is het bepalen van het effect van deze factoren op één of meer afhankelijke grootheden. We spreken in dit verband van volledige factoriële proefopzetten wanneer de proefopzet alle mogelijke nivo-kombinaties bevat. Wanneer we ons beperken tot een deel van de volledige opzet, dan spreken we van fractionele factoriële proefopzetten. In dat laatste geval treedt informatieverlies op: bepaalde effecten zullen niet meer te schatten zijn.

Voor het creëren van fractionele factoriële proefopzetten worden de nivo-kombinaties van de volledige opzet in een aantal even grote blokken verdeeld. Zo'n blok

is dan een geschikte fractie voor een fractionele proefopzet. Het gevolg van blokvorming is echter dat bepaalde effecten verstrengeld raken met de blokeffecten. Dergelijke effecten zijn bij uitvoering van één of enkele blokken niet meer te schatten.

Wat geschat kan worden is slechts een lineaire combinatie van deze effecten. De methode voor het kiezen van de blokken is er nu op gericht voor deze verstrengelde effecten bij voorkeur diè hoge orde interacties tussen factoren te kiezen die van minder belang worden geacht. (Doornbos, 1984).

Wanneer alle factoren op 2 nivo's worden gevarieerd, z.g.n.  $2^V$ -proefopzetten, dan functioneren de methoden voor het bepalen van fraktionele proefopzetten goed. Generalisatie naar meer dan 2 nivo's blijkt echter enigszins problematisch. Fraktionele proefopzetten worden dan vaak via ad hoc procedures bepaald. Er bestaat echter de mogelijkheid van een transformatie naar  $2^V$ -proefopzetten (J.v.Heck, 1983). In de literatuur zijn uitgebreide tabellen voorhanden van fraktionele factoriële proefopzetten. (Cox, 1958; Cochran, Cox, 1950; Box, Hunter en Hunter, 1978).

In hoofdstuk 1 zijn al een aantal nadelen van deze methoden genoemd. Vanwege de beperkte mogelijkheden, de geringe flexibiliteit en de vereiste statistische vaardigheden lijken deze methoden voor onze doeleinden niet zo geschikt. Het is bovendien onduidelijk hoe partiële afgeleiden naar de ontwerpvariabelen (de factoren) betrokken kunnen worden bij het bepalen van fractionele factoriële proefopzetten. Bij de hierna te bespreken optimal design theorie is dat wel het geval.

Wel zijn er al computer-algorithmen ontwikkeld voor het ontwerpen van factoriële experimenten. Het programma DSIGN (Patterson, 1976) kan proefopzetten ge-

nereren voor factoren op ieder gewenst aantal nivo's en met een grote verscheidenheid aan blokstructuren, inclusief latijnse vierkanten. De ontwerpen worden hier echter alleen beoordeeld op grond van het verstrengingspatroon dat optreedt en niet op grond van b.v. parameter- of respons-schattingen zoals in de optimal design theorie.

Het in het kader van deze afstudeeropdracht ontwikkelde programma CADE biedt de gebruiker de mogelijkheid op basis van definiërende contrasten fractionele  $2^V$ -proefopzetten te genereren. De vereiste ontwerpgeneratoren kunnen worden gekozen uit de tabel in appendix A. Gebleken is dat deze methode ook goed voldoet wanneer partiële afgeleiden naar de ontwerpvariabelen beschikbaar zijn. Zo bleek het mogelijk te zijn voor het model van de grote-terts-klok de  $2^V$ -proefopzet te beperken tot  $1/8$  fractie zonder dat singulariteit optrad. (Maas, 1985). Maas rapporteerde singulariteit voor alle door hem onderzochte fractionele proefopzetten en voerde een volledige proefopzet uit. In hoeverre de hiermee te genereren fractionele proefopzetten optimaal zijn, wanneer de partiële afgeleiden worden meegenomen, is niet onderzocht.

## 2.2 Optimal design theorie.

Deze theorie vindt zijn oorsprong in een artikel van Smith (1918). Ruime belangstelling ontstond echter pas weer in de jaren na 1950. Ontwikkelingen kwamen met name tot stand door bijdragen van Kiefer en na 1970 ook door Fedorov.

De theorie werd vooral interessant door de opkomst van de computer. De statistiek levert hier de optimalisatie-kriteria op grond waarvan proefopzetten kunnen

worden beoordeeld. Het probleem van het vinden van een optimale proefopzet kan hierna worden opgelost m.b.v. optimaliseringstechnieken.

### 2.2.1 Optimaliserings-kriteria.

We zien ons gesteld voor het probleem  $n$ , niet noodzakelijkerwijs verschillende punten  $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_n$  te kiezen uit een gespecificeerde ontwerpruimte  $\mathcal{X}$ , bestaande uit  $r$  kandidaatpunten  $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_r$  ( $r > n$ ). Zo'n punt  $\underline{x}_i$  is hier de nivokombinatie waarop de ontwerpvariabelen kunnen worden ingesteld tijdens het  $i$ -de experiment. Resultaat is een waarneming  $y_i$ . Verondersteld wordt een lineair steekproefmodel van de vorm

$$y_i = \underline{f}'(\underline{x}_i)\underline{b} + e_i, \quad i=1, \dots, n$$

waarin  $\underline{f}$  een vector is met  $k$  functies in  $\mathcal{X}$  ( $k < n$ ),  $\underline{b}$  een vector met  $k$  onbekende, te schatten parameters en  $e_i$  de stochastische meetfout. Verondersteld wordt verder dat de fouten  $e_i$  ( $i=1, \dots, n$ ) normaal verdeeld zijn met gemiddelde nul en konstante variantie  $\sigma^2$ .

Het model kan in matrixvorm geschreven worden als

$$\underline{y} = X\underline{b} + \underline{e}, \text{ met}$$

$\underline{y}$  de vector met waarnemingen,  $X$  de ontwerpmatrix (een  $(n.k)$ -matrix met  $\underline{f}'(\underline{x}_i)$  als  $i$ -de rij),  $\underline{b}$  de vector met parameters en  $\underline{e}$  de vector met fouten.

Schattingen voor de parameters  $\underline{b}$  worden hier bepaald m.b.v. de kleinste kwadraten methode:

$$\hat{\underline{b}} = (X'X)^{-1}X'\underline{y}$$

Proefopzetten kunnen worden beoordeeld op grond van



- a. de variantie in de parameterschattingen

$$\text{var } \underline{\hat{b}} = \hat{\sigma}^2 (X'X)^{-1}$$

- b. de varianties in de responseschattingen in de punten  $\underline{x}_i$ ,  $i=1, \dots, r$

$$\text{var } (\hat{y}|\underline{x}_i) = \hat{\sigma}^2 \underline{f}'(\underline{x}_i) (X'X)^{-1} \underline{f}(\underline{x}_i)$$

In beide gevallen is de kwaliteit van de proefopzet een functie van de (k.k)-covariantiematrix  $\hat{\sigma}^2 (X'X)^{-1}$ . We zoeken dus diè proefopzet onder allè mogelijke n-punt proefopzetten die de covariantiematrix het "kleinst" maakt. Echter, omdat er geen unieke maat bestaat voor de kleinheid van een matrix, zijn verschillende functies geopperd die als maat zouden kunnen dienen. Dit heeft geleid tot de formulering van een aantal optimalisatie-kriteria, waarvan de belangrijkste zijn:

1. D-optimaliteit: een proefopzet heet D-optimaal als het de determinant van de covariantiematrix,  $\det \hat{\sigma}^2 (X'X)^{-1}$ , minimaliseert.
2. A-optimaliteit: een proefopzet heet A-optimaal als het het spoor van de covariantiematrix,  $\text{tr } \hat{\sigma}^2 (X'X)^{-1}$ , minimaliseert.
3. E-optimaliteit: een proefopzet heet E-optimaal als het de maximale eigenwaarde van  $\hat{\sigma}^2 (X'X)^{-1}$  minimaliseert.
4. G-optimaliteit: een proefopzet heet G-optimaal als het de maximale variantie in de responseschattingen,  $\max_{\underline{x}} \text{var}(\hat{y}|\underline{x})$ , minimaliseert.
5. V-optimaliteit: een proefopzet heet V-optimaal als het de variantie, gemiddeld over de kandidaatpunten,  $\frac{1}{r} \sum_{j=1}^r \text{var}(\hat{y}|\underline{x}_j)$ , minimaliseert.

2.2.1.1 Interpretatie.

Van het D- en het A-kriterium is een geometrische interpretatie mogelijk en illustratief.

Het betrouwbaarheidsinterval voor de parameters is

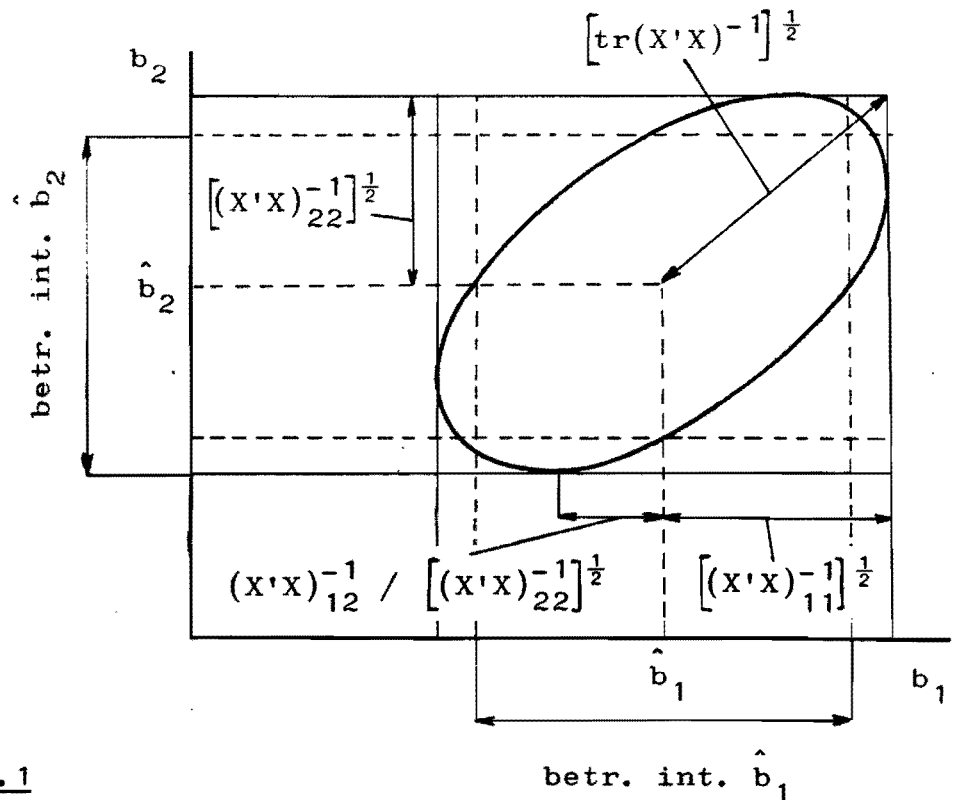
$$\hat{b}_i \pm t(\frac{1}{2}\alpha, n-k) [\hat{\sigma}^2 (X'X)^{-1}_{ii}]^{\frac{1}{2}}, \text{ waarin}$$

$\alpha$  het onbetrouwbaarheidsnivo,  $n-k$  het aantal vrijheidsgraden en  $t(\frac{1}{2}\alpha, n-k)$  een statistische grootheid met een Student-verdeling. In het algemeen zullen de parameters enigermate gekorreleerd zijn en dus een simultane kansverdeling bezitten. Het simultane betrouwbaarheidsgebied voor alle parameters wordt gegeven door

$$(\underline{b}-\hat{\underline{b}})'(X'X)(\underline{b}-\hat{\underline{b}}) \leq \text{functie}(\alpha, n-k, \hat{\sigma}^2),$$

Draper, Smith, 1981, 94-96.

De kontour van dit betrouwbaarheidsgebied is in het algemeen ellipsvormig. In figuur 2.1 is voor 2 parameters het betrouwbaarheidsgebied weergegeven.



Figuur 2.1

De inhoud van de betrouwbaarheidsellipsoïde is evenredig met  $(\det (X'X)^{-1})^{\frac{1}{2}}$ . Minimaliseren van  $\hat{\sigma}^2(X'X)^{-1}$  komt dus neer op het minimaliseren van de inhoud van het betrouwbaarheidsgebied. D-optimale proefopzetten zijn invariant m.b.t. transformaties in de ruimte van parameterschatters.

Bij het minimaliseren van  $\text{tr } \hat{\sigma}^2(X'X)^{-1}$  wordt in wezen de gemiddelde variantie  $\frac{1}{k} \cdot \text{tr } \hat{\sigma}^2(X'X)^{-1}$  in de parameterschatters geminimaliseerd (vandaar de letterkode A). In figuur 2.1 is te zien dat hierdoor de langste diagonaal van de omgeschreven rechthoek wordt geminimaliseerd (Fedorov, 1979). Een nadeel van dit criterium is dat A-optimale proefopzetten niet invariant zijn m.b.t. transformaties in de ruimte van parameterschatters.

De schattingen voor de parameters kunnen bepaald worden uit het stelsel normaalvergelijkingen:

$$X'(\underline{y} - X\underline{b}) = \underline{0}$$

De invloed van afrondfouten wordt hierbij bepaald door het konditiegetal van  $X'X$ . Dit konditiegetal is de verhouding tussen de maximale en de minimale eigenwaarde van  $X'X$ . Met het E-kriterium wordt beoogd de konditie van het stelsel normaalvergelijkingen te verbeteren via het maximaliseren van de minimale eigenwaarde van  $X'X$ . Een nadeel van dit criterium is dat het schaalgevoelig is (Kiefer, Wolfowitz, 1959).

Het doel van het G-kriterium is modellen te bepalen die nauwkeurige respons-schattingen in kleine gebieden opleveren. Het V-kriterium beoogt daarentegen een grote voorspelkracht over de gehele ontwerpruimte. Beide zijn kwadratische vormen die daarom invariant zijn m.b.t. basis-transformaties in de ontwerpruimte.

2.2.1.2 Definitie van de proefopzet.

Een proefopzet bestaande uit  $n$  punten  $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_n$ , niet noodzakelijkerwijs verschillend, kan worden vastgelegd met de kollektie variabelen:

$$\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_r ; n_1, \dots, n_r ; \sum_{j=1}^r n_j = n,$$

waarin  $n_j$  aangeeft het aantal waarnemingen dat in punt  $\underline{x}_j$  moet worden verricht.

Het is handig de proefopzet te normeren tot:

$$\underline{p} = (p_1, \dots, p_r)' ; \underline{x}_1, \dots, \underline{x}_r ; \sum_{j=1}^r p_j = 1 ; p_j = n_j/n$$

De maat  $p_j$  is te beschouwen als een weegfaktor of massa, aan  $\underline{x}_j$  toegekend, die aangeeft de fraktie van het totale aantal waarnemingen dat in  $\underline{x}_j$  moet worden verricht;  $p_j$  mag nul zijn.

We representeren een  $n$ -punt exakte proefopzet, met  $n_j$  herhalingen in  $\underline{x}_j$ , door een  $r$ -vector  $\underline{p}_n = (p_1, \dots, p_r)'$ ;  $p_j = n_j/n$ , met  $n_j$  een integer groter of gelijk aan nul.

Voor iedere  $p_j$  kan een ondergrens  $l_j$  en een bovengrens  $u_j$  worden gespecificeerd. Zij vormen de randvoorwaarden voor het aantal herhalingen in  $\underline{x}_j$ . Dus

$$l_j \leq p_j \leq u_j, \quad j=1, \dots, r, \quad 0 \leq l_j \leq u_j \leq 1$$

Als een bepaald punt  $\underline{x}_j$  maar één keer in de proefopzet mag voorkomen, stellen we voor dat punt

$$l_j = 0 \text{ en } u_j = 1/n$$

Als een punt  $\underline{x}_j$  tenminste één keer moet voorkomen, stellen we

$$l_j = 1/n \text{ en } u_j = 1$$

Zonder randvoorwaarden:

$$l_j = 0 \text{ en } u_j = 1$$

Als een bestaande proefopzet, waarbij in punt  $\underline{x}_j$  al  $n_j$  waarnemingen zijn verricht, moet worden uitgebreid met extra waarnemingen, dan worden de grenzen  $l_j$  en  $u_j$  voor de initiële proefopzet gesteld op

$$l_j = n_j/n \text{ en } u_j = 1$$

De proefopzet is slechts uitvoerbaar als alle  $n_j$  een integer waarde bezitten. We spreken dan wel van "exakte" proefopzetten, aangegeven met de index  $n$ ; we karakteriseren een exakte proefopzet met de vector  $\underline{p}_n$ .

Wanneer die beperking wordt losgelaten, dus als  $n_j$  reëel mag zijn, dan spreken we van diskrete proefopzetten, en laten de index  $n$  weg. Een diskrete proefopzet wordt aangeduid met de vector  $\underline{p}$ . ( $0 \leq p_j \leq 1$ ;  $j=1, \dots, r$ ).

Exakte proefopzetten bestaan uit  $n$ , niet noodzakelijkerwijs verschillende supportpunten. Voor diskrete proefopzetten blijkt het altijd mogelijk optimale proefopzetten te vinden met een aantal supportpunten  $\leq \frac{k}{2}(k+1) + 1$ . (Fedorov, 1972, pag. 68). Diskrete en exakte proefopzetten bestaan dus uit een eindig aantal punten. Van kontinue proefopzetten spreken we als het aantal supportpunten oneindig groot is. De weegfactoren gaan nu over in een continue weegfunctie  $p(\underline{x})$  in  $\chi$ , die voldoet aan:

$$\int_{\chi} p(\underline{x}) d\underline{x} ; p(\underline{x}) \geq 0 ; \underline{x} \in \chi$$

$p(\underline{x})$  wordt dan vaak beschouwd als een kansdichtheidsfunctie, gedefinieerd in  $\chi$ .

Wanneer in het vervolg van dit verslag de proefopzet zonder nadere aanduiding exakt of diskreet mag zijn, dan wordt de proefopzet in het algemeen aangeduid met de vector  $\underline{p}$ .

### 2.2.1.3 Genormeerde optimaliserings-kriteria.

De matrix  $X'X$  kan met deze definities genormeerd worden tot de informatiematrix:

$$M(\underline{p}) = \sum_{j=1}^r p_j \underline{f}(\underline{x}_j) \underline{f}'(\underline{x}_j),$$

of, voor continue proefopzetten tot:

$$M(\underline{p}) = \int_{\chi} p(\underline{x}) \underline{f}(\underline{x}) \underline{f}'(\underline{x}) d\underline{x}$$

Voor een exakte of diskrete proefopzet geldt de relatie

$$n.M(\underline{p}) = X'X$$

We formuleren de criteria voor exakte en diskrete proefopzetten. De criteria worden geschreven in termen van de inverse van  $M(\underline{p})$  door  $(X'X)^{-1}$  te vervangen door  $\frac{1}{n}.M^{-1}(\underline{p})$ . Het is handig de criteria te normeren voor  $\sigma^2/n$ . Hiermee ontstaan de volgende definities:

$$\begin{array}{l}
 \text{Een proefopzet } \underline{p}^* \text{ is} \\
 \left. \begin{array}{l}
 \text{D-optimaal als } \min_{\underline{p}} \det M^{-1}(\underline{p}) = \det M^{-1}(\underline{p}^*), \\
 \text{A-optimaal als } \min_{\underline{p}} \text{tr } M^{-1}(\underline{p}) = \text{tr } M^{-1}(\underline{p}^*), \\
 \text{E-optimaal als } \min_{\underline{p}} \max_i \lambda_i(\underline{p}) = \max_i \lambda_i(\underline{p}^*), \\
 \text{G-optimaal als } \min_{\underline{p}} \max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d(\underline{x}, \underline{p}) = \max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d(\underline{x}, \underline{p}^*), \\
 \text{V-optimaal als } \min_{\underline{p}} \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r d(\underline{x}_j, \underline{p}) = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r d(\underline{x}_j, \underline{p}^*),
 \end{array} \right\}
 \end{array}$$

waarin  $\lambda_i$  eigenwaarde is van  $M^{-1}$  en

$$d(\underline{x}, \underline{p}) = \underline{f}'(\underline{x})M^{-1}(\underline{p})\underline{f}(\underline{x})$$

de voor  $\sigma^2/n$  genormeerde variantie in de response-schatting in  $\underline{x}$ . In alle gevallen dient  $M(\underline{p}^*)$  regulier te zijn.

### 2.2.2 Equivalentie-theorema.

Op een enkel, eenvoudig geval na, bestaan er geen universeel optimale proefopzetten die tegelijkertijd alle criteria minimaliseren. Voor continue proefopzetten blijkt er echter een strikte relatie te bestaan tussen D- en G-optimale proefopzetten, vervat in het volgende equivalentie theorema:

De volgende uitspraken zijn equivalent:

- $$\left. \begin{array}{l}
 1. \underline{p}^* \text{ minimaliseert } \det M^{-1}(\underline{p}), \\
 2. \underline{p}^* \text{ minimaliseert } \max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d(\underline{x}, \underline{p}), \\
 3. \max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d(\underline{x}, \underline{p}^*) = k.
 \end{array} \right\}$$

De informatiematrices van alle proefopzetten die voldoen aan 1 t/m 3 vallen samen. Iedere lineaire combinatie van proefopzetten, die voldoen aan 1 t/m 3, voldoet aan 1 t/m 3.

(Kiefer, Wolfowitz, 1959, 1960; Fedorov, 1972, pag. 71).

Optimale continue proefopzetten zijn zowel D-optimaal als G-optimaal. Bij het konstrueren van optimale continue proefopzetten kan door elkaar gebruik gemaakt worden van de eigenschappen van zowel D- als G-optimale proefopzetten. Zo is het mogelijk D-optimale proefopzetten te genereren door de maximale variantie in de response-schattingen te minimaliseren. Als blijkt dat  $\max d(\underline{x}, \underline{p}) = k$ , dan is de D-optimale proefopzet ook G-optimaal.

Iedere informatiematrix  $M$  is symmetrisch en kan volledig worden beschreven door  $\frac{k}{2}(k+1)$  elementen. Iedere  $M$  kan zodoende gerepresenteerd worden door een vector van dimensie  $\frac{k}{2}(k+1)$ . Het blijkt mogelijk te zijn voor iedere diskrete proefopzet  $\tilde{\underline{p}}$  met meer dan  $\frac{k}{2}(k+1)+1$  supportpunten, een proefopzet  $\underline{p}$  te vinden met een aantal punten  $\leq \frac{k}{2}(k+1)+1$ , waarvoor  $\det M(\underline{p}) = \det M(\tilde{\underline{p}})$  (Fedorov, theorema 2.1.2). Het is dan mogelijk voor iedere continue proefopzet  $p(\underline{x})$  een diskrete proefopzet  $\underline{p}$  te vinden waarvoor  $\det M(\underline{p}) = \det M(p(\underline{x}))$ . Dit betekent dat het equivalentie theorema ook geldig is voor diskrete proefopzetten, onder de voorwaarde dat het algoritme ieder punt in  $\chi$  als supportpunt mag kiezen.

Voor exakte proefopzetten bestaat een dergelijk equivalentie theorema niet. In het algemeen zal dan  $\max d(\underline{x}, \underline{p}_n) > k$ . De verhouding  $k/\max d(\underline{x}, \underline{p}_n)$  geeft aan in hoeverre  $\underline{p}_n$  G-optimaal is.

### 2.2.3 Optimaliserings-algorithmen.

Ons hoofddoel is steeds het bepalen van optimale exakte proefopzetten. De meeste algorithmen beperken zich tot de selectie van punten uit een eindige set van kandidaatpunten. De onafhankelijke variabelen worden niet continue variabel gekozen.



De voornaamste reden voor deze beperking is gelegen in de vereenvoudiging van het selectie-proces. Een punt kiezen uit een continue ontwerpruimte betekent dat hiervoor een functie-optimaliserings-algorithme moet worden ingevoerd. Daarmee wordt het succes van het algorithme afhankelijk van de mate waarin het functie-optimaliserings-algorithme erin slaagt het beste punt te vinden.

De meest bekende optimaliserings-algorithmen kunnen worden onderverdeeld in de volgende kategoriën:

1. Het genereren en evalueren van alle mogelijke n-punt proefopzetten.
  2. Direkt maximaliseren van  $M(\underline{p}_n)$  m.b.v. technieken uit de mathematische programmering.
  3. Het bepalen van een optimale diskrete proefopzet en die vervolgens afronden tot een exakte proefopzet
  4. Uitwisselings-algorithmen.
- ad 1. Het genereren van alle mogelijke n-punt proefopzetten vergt uiteraard relatief veel rekentijd en is daarom alleen interessant voor kleine waarden van n.

Een variant hierop is een algorithme ontwikkeld door Welch (1982) dat een "branch" en "bound" strategie volgt. Hierbij wordt een soort boomstructuur van minimaliserings-problemen gekreëerd. Aan het uiteinde van iedere tak bevindt zich een minimaliserings-probleem waarvan de constraints slechts één n-punt proefopzet toelaten.

Niet alle proefopzetten worden daadwerkelijk gegenereerd en geëvalueerd. Het algorithme is in staat al in een vroeg stadium van het vertakkings-proces af te schatten of zich onder de toegelaten proefopzetten van een minimaliserings-probleem nog interessante proefopzetten bevinden. Zo ja, dan wordt het vertakkings-proces in deze richting ver-

volgd. Zo niet, dan wordt het proces vervolgd met een andere, nog niet afgewerkte tak van de boomstructuur.

Het algoritme vindt gegarandeerd de D-optimale proefopzet. De rekentijden zijn echter zeer hoog. Het maakt deel uit van het programma CADE en zal uitvoerig worden behandeld in paragraaf 2.5.8.

- ad 2. Maximaliseren van  $\det M(\underline{p}_n)$  m.b.v. technieken uit de mathematische programmering blijkt vanwege het complexe karakter van  $\det M(\underline{p}_n)$  niet zo succesvol.
- ad 3. Het afronden van een optimale diskrete proefopzet zou een goede benadering kunnen opleveren voor de optimale exakte proefopzet, mits  $n$  niet te dicht bij  $k$  wordt gekozen. Diskrete proefopzetten worden daarom ook wel "approximate designs" genoemd.

Eventueel zou zo'n afgeronde proefopzet kunnen fungeren als een goede initiële proefopzet voor de uitwisselings-algorithmen.

Algorithmen ter bepaling van optimale diskrete proefopzetten verschillen per criterium en voor ieder criterium zijn weer verscheidene algorithmen denkbaar. Ter illustratie wordt hier alleen het algoritme gegeven ter bepaling van D-optimale diskrete proefopzetten.

Als een punt  $\underline{x}_j$  met weegfactor  $\alpha$  wordt toegevoegd aan de proefopzet, of eruit verwijderd, dan geldt de update-formule:

$$\det M^{-1}(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = \det M^{-1}(\underline{p}) / (1 + \alpha d(\underline{x}_j, \underline{p}))$$

met  $\underline{\delta}_j$  de eenheidsvector in de richting  $\underline{x}_j$ . Voor een bewijs zij verwezen naar Dijkstra (1971).

Hierop kan het volgende uitwisselings-algoritme worden gebaseerd:

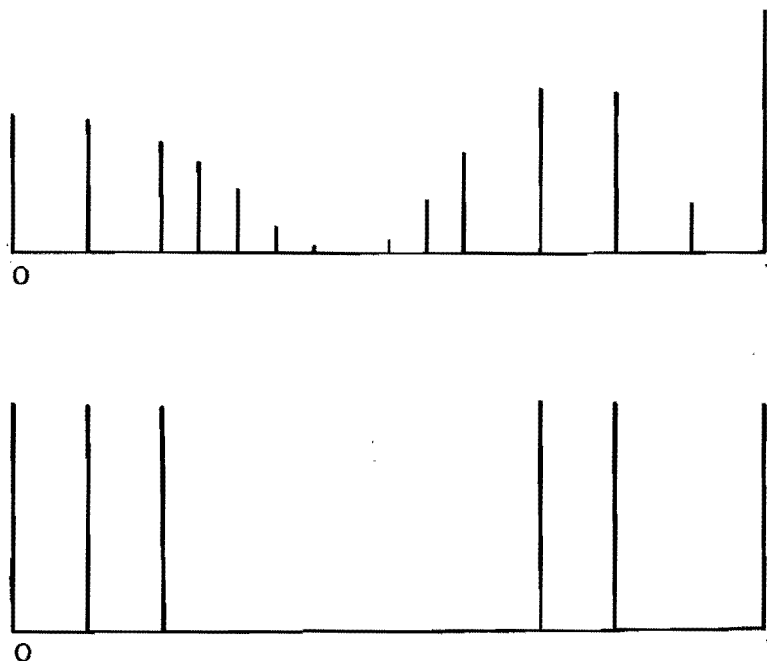
1. Kies een initiële proefopzet met reguliere  $M(\underline{p})$ ; neem b.v. ieder kandidaatpunt in de proefopzet op met weegfaktor  $1/r$ .
2. Bepaal punten  $\underline{x}_h$  en  $\underline{x}_i$  zodanig dat

$$d(\underline{x}_h, \underline{p}) = \max_{j: p_j < u_j} d(\underline{x}_j, \underline{p})$$

$$d(\underline{x}_i, \underline{p}) = \min_{j: l_j < p_j} d(\underline{x}_j, \underline{p})$$

3. Vorm de nieuwe proefopzet door  $\underline{x}_h$  toe te voegen en  $\underline{x}_i$  te verwijderen, beide met dezelfde weegfaktor  $\alpha$  :  $p_h := p_h + \alpha$  en  $p_i := p_i - \alpha$ . Daarbij wordt  $\alpha$  zo gekozen dat  $\det M^{-1}(\underline{p})$  maximaal afneemt en de randvoorwaarden  $u_h, l_i$  niet worden overschreden.

In figuur 2.2.3.1 is anschouwelijk gemaakt hoe een diskrete proefopzet kan worden afgerond tot een exakte proefopzet.



Figuur 2.2.3.1 Afronding van een diskrete proefopzet

ad 4. Er zijn verschillende uitwisselings-algorithmen ontwikkeld, waarvan de bekendsten zijn:

a. Het Fedorov-algorithme:

Gestart wordt met een initiële proefopzet bestaande uit  $n$  punten. Tijdens iedere optimalisatie-slag wordt gelijktijdig een punt  $\underline{x}_h$  aan de proefopzet toegevoegd en een punt  $\underline{x}_i$  uit de proefopzet verwijderd. Daarbij worden  $\underline{x}_h$  en  $\underline{x}_i$  zodanig gekozen dat hierdoor de afname in het criterium maximaal is.

Aldus wordt een serie  $n$ -punt proefopzetten gegenereerd met niet-stijgende waarden voor het criterium. Het algoritme vergt echter aanzienlijk meer rekentijd dan het volgende.

b. Mitchell's DETMAX-algorithme:

Gestart wordt weer met een initiële proefopzet bestaande uit  $n$  punten. Tijdens een optimalisatie-slag wordt dat punt  $\underline{x}_i$  aan de proefopzet toegevoegd dat een maximale afname in  $\det(M^{-1})$  tot gevolg heeft. Tijdens de volgende slag wordt dat punt  $\underline{x}_j$  uit de proefopzet verwijderd dat bij verwijdering aanleiding geeft tot de kleinste toename in  $\det(M^{-1})$ .

Als initiële proefopzet zou een opzet kunnen worden gekozen met meer of minder punten. Het algoritme zal dan eerst de initiële proefopzet moeten verkleinen of vergroten tot een  $n$ -punt proefopzet.

Als blijkt dat het algoritme alleen maar punten kan vinden waarvoor het criterium minder optimaal wordt, dan kunnen "excursies" worden ingelast in een poging uit dit lokale optimum te geraken. Het algoritme voegt daarbij een aantal punten toe aan de proefopzet en keert vervolgens weer terug naar een  $n$ -punt proefopzet.

De excursie is succesvol als blijkt dat het criterium van de nieuwe proefopzet optimaler is dan die van de oorspronkelijke proefopzet. De nieuwe proefopzet wordt dan als initiële proefopzet gekozen voor verdere optimalisatie. Als het criterium minder optimaal blijkt te zijn geworden, dan wordt de oorspronkelijke proefopzet weer gebruikt als uitgangspunt voor een excursie in een andere richting.

Omdat convergentie naar een D -optimale proefopzet niet gegarandeerd is, is het aanbevelenswaardig het algoritme een aantal keren op te starten, uitgaande van random uit de kandidatenlijst gekozen initiële proefopzetten. Het algoritme is ontwikkeld door Mitchell (1974a,b) en genereert tegen verhoudingsgewijs geringe rekenkosten goede proefopzetten.

In het programma CADE is het excursie-algoritme beschikbaar voor 4 optimalisatie-kriteria. Een optimale proefopzet wordt voor deze criteria steeds op de volgende wijze gegenereerd.

Laat  $c(\underline{p}_n)$  het optimalisatie-kriterium zijn.  $c(\underline{p}_n)$  kan worden geminimaliseerd door afwisselend

a. dat punt  $\underline{x}_j$  aan  $\underline{p}_n$  toe te voegen waarvoor

$$c(\underline{p}_n + n^{-1} \underline{\delta}_j) = \min_{j: p_j < u_j} c(\underline{p}_n + n^{-1} \underline{\delta}_j)$$

en vervolgens

b. dat punt  $\underline{x}_j$  uit  $\underline{p}_{n+1}$  te verwijderen waarvoor

$$c(\underline{p}_{n+1} - n^{-1} \underline{\delta}_j) = \min_{j: l_j > p_j} c(\underline{p}_{n+1} - n^{-1} \underline{\delta}_j),$$

met  $\underline{\delta}_j$  eenheidsvector in richting  $j$ .

2.2.4 Robuuste proefopzetten.

Proefopzetten heten "robuust" als die nog goede parameter- en respons-schattingen opleveren wanneer aan de veronderstellingen, op grond waarvan die proefopzetten werden bepaald, niet helemaal werd voldaan. Bij de eerder genoemde optimalisatie-kriteria wordt verondersteld dat de resultaten van de experimenten volledig kunnen worden beschreven door de volgende vergelijking:

$$\text{response} = \text{model} + \text{fout},$$

waarbij de fout een stochastisch karakter bezit en normaal verdeeld is, met gemiddelde nul en konstante variantie  $\sigma^2$ .

De praktijk is echter dat we eerst een model moeten specificeren. Op basis van dit model kan dan een optimale proefopzet worden bepaald. Pas nadat de experimenten zijn uitgevoerd, kan worden gecontroleerd of het geponeerde model de waarnemingsresultaten wel volledig beschrijft. Als vervolgens blijkt dat nog systematische afwijkingen overblijven, is het geponeerde model niet korrekt. We zeggen dan dat het geponeerde model niet exakt is.

Proefopzetten, die bepaald zijn m.b.v. de eerder genoemde criteria, blijken vrij sterk afhankelijk te zijn van het geponeerde model. De proefopzet levert wel goede schattingen op voor het geponeerde model, maar minder goede schattingen voor het exakte model, wanneer dat afwijkt van het geponeerde model.

Dit kan worden toegelicht aan de hand van een eenvoudig voorbeeld. Verondersteld wordt een lineair verband van de vorm  $\underline{y} = b_0 + b_1x$ . (In deze paragraaf wordt het geponeerde model, ter onderscheiding van het exakte model, aangeduid met  $\sim$ ).

Voor dit model is de variantie in de responseschatting in punt  $x_0$ :

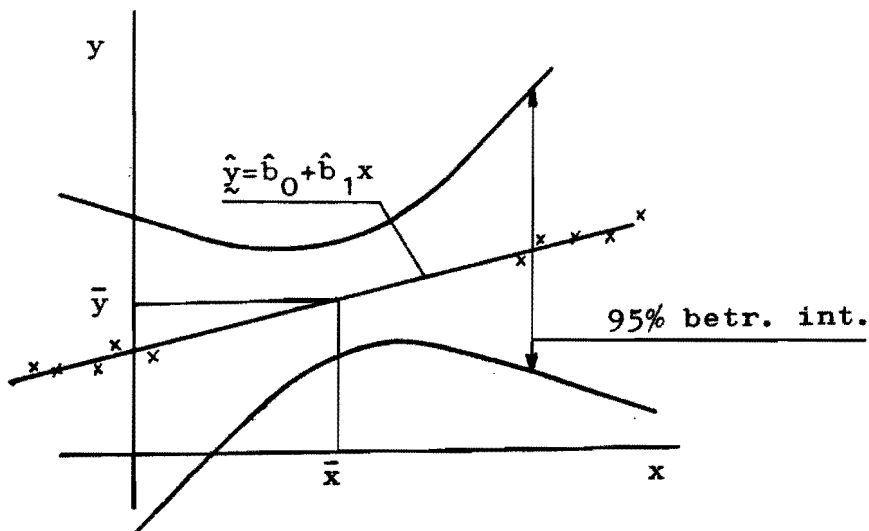
$$\text{var}(\hat{y}|x_0) = \text{var}(\bar{y} + \hat{b}_1(x_0 - \bar{x})) = \hat{\sigma}^2/n + \hat{\sigma}^2(x_0 - \bar{x})^2 / \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2,$$

en voor het betrouwbaarheidsinterval:

$$\hat{y}_0 \pm t(n-2, \frac{1}{2}\alpha) \cdot \hat{\sigma} \cdot [\text{var}(\hat{y}|x_0)]^{\frac{1}{2}}$$

Als bij het bepalen van een proefopzet voor dit model gebruik wordt gemaakt van het G -kriterium, d.w.z. minimaliseren van de maximale variantie in de responseschattingen, dan worden bij voorkeur punten geselecteerd in gebieden waar de variantie het grootst is, dus punten  $x_0$  die het verst verwijderd liggen van  $\bar{x}$ . Zie figuur 2.2.4.1.

Figuur 2.2.4.1 Proefopzet 1<sup>e</sup> graads model.



Omdat

$$\text{var } \hat{b}_1 = \hat{\sigma}^2 / \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2, \text{ en}$$

$$\text{var } \hat{b}_0 = \text{var } \bar{y} + \bar{x}^2 \text{var } \hat{b}_1$$

worden hierdoor ook de varianties in de parameterschattingen kleiner.

Hetzelfde geldt ook voor het D -kriterium. Als een punt  $x_0$  aan de proefopzet wordt toegevoegd, dan geldt de update-formule

$$\det M^{-1}(\underline{p}_{n+1}) = \det M^{-1}(\underline{p}_n) / (1+d(x_0, \underline{p}_n))$$

Om dit kriterium te minimaliseren, kiezen we dus bij voorkeur die punten  $x_0$  waar de variantie het grootst is.

Alle eerder vermelde criteria leveren voor dit model proefopzetten op die zich concentreren in de randgebieden van de ontwerpruimte.

Veronderstel nu dat het exakte model kwadratisch van vorm is, dus  $y=b_0+b_1x+b_2x^2$ . Het zal duidelijk zijn dat een proefopzet, die zich concentreert in de randgebieden, minder geschikt is voor het schatten van de parameters van dit kwadratisch model. Daartoe zullen nog extra waarnemingen in het middengebied moeten worden verricht.

Een optimalisatie-kriterium, waarbij ook rekening wordt gehouden met systematische variantie (bias), is de genormeerde gemiddelde restkwadratensom J.

Veronderstel dat er een, onbekende, exakte relatie  $\underline{g}(\underline{x})$  bestaat tussen de response  $y$  en de onafhankelijke variabelen  $\underline{x}$ . We trachten  $\underline{g}(\underline{x})$  in de ontwerpruimte lokaal te benaderen door  $\underline{y}=\underline{f}(\underline{x})$ , b.v. door een polynoom van bepaalde orde.



Noem  $e$  de stochastische afwijking en  $z$  de systematische afwijking. Het exakte model levert schattingen op met alleen stochastische afwijkingen:

$$\hat{y} = y + e,$$

zodat voor de verwachte waarde geldt:

$$E\hat{y} = y$$

Schattingen met het geponeerde model zullen i.h.a. systematische afwijkingen bezitten t.o.v. het exakte model:

$$\tilde{y} = \hat{y} + z$$

Voor de verwachte waarde geldt hier:

$$E\tilde{y} = y + z$$

De totale afwijking is dan

$$e + z = \tilde{y} - y$$

Het lijkt daarom zinvol te trachten de totale restkwadraten-  
tensom

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n (e_j + z_j)^2 &= \sum_{j=1}^n [\tilde{y}(x_j) - E\hat{y}(x_j)]^2 \\ &= \sum_{j=1}^n [\tilde{y}(x_j) - y(x_j)]^2 \end{aligned}$$

te minimaliseren.

Op grond hiervan formuleren we de voor  $\sigma^2/n$  genormeerde, verwachte restkwadraten-  
tensom, gemiddeld over  
alle kandidaatpunten:

$$J = \frac{n}{\sigma^2} \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r E \left[ \hat{y}(\underline{x}_j) - y(\underline{x}_j) \right]^2$$

Doordat we hier de verwachte waarde nemen van het kwadraat van de afwijkingen, is J te splitsen in een deel dat alleen betrekking heeft op de stochastische afwijkingen en een deel dat alleen betrekking heeft op de systematische afwijkingen:

$$\begin{aligned} E(\hat{y}-y)^2 &= E\hat{y}^2 - 2E\hat{y}y + y^2 \\ &= (E\hat{y})^2 - 2E\hat{y}y + y^2 + E\hat{y}^2 - (E\hat{y})^2 \\ &= (E\hat{y}-y)^2 + E\hat{y}^2 - (E\hat{y})^2 \\ &= (E\hat{y}-y)^2 + \text{var}(\hat{y}) \end{aligned}$$

Daarmee wordt:

$$\begin{aligned} J &= \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r d(\underline{x}_j, \underline{p}_n) + \frac{n}{\sigma^2} \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r \left[ E\hat{y}(\underline{x}_j) - y(\underline{x}_j) \right]^2 \\ &= V + B, \end{aligned}$$

met V: de gemiddelde genormeerde steekproefvariantie en B: de gemiddelde genormeerde systematische variantie.

We zien hieraan dat J niet zonder meer gebruikt kan worden als optimalisatie-kriterium: de biasterm hangt af van  $\sigma^2$  en het exakte model via  $y(\underline{x}_j)$ ,  $j=1, \dots, r$ . Voor  $\sigma$  zijn vooraf schattingen te bepalen, het exakte model is onbekend.

Welch(1983) heeft een methode ontwikkeld om met J robuuste proefopzetten te genereren. De methode komt uitgebreid aan de orde in 2.5.7. Op deze plaats volgt een korte beschrijving.

Vorm  $\underline{z} = (z_1, \dots, z_r)'$  de vector met modelafwijkingen. Noem  $z_{\max} = \max_j |z_j|$  de bovengrens voor de absolute afwijking. Bij het minimaliseren is het verstandig rekening te houden met de vector van de grootste modelafwijkingen, zodat het criterium wordt

$$J^*(\underline{p}_n) = V(\underline{p}_n) + \max_{\underline{z}} B(\underline{p}_n, \underline{z})$$

Het is te bewijzen dat B een niet-negatief-definiete vorm in  $\underline{z}$  is, convex is in  $\underline{z}$  en zijn maximum bereikt in een van de  $2^r$  extremen  $\underline{z}^{(m)} = (+z_{\max}, +z_{\max}, \dots, +z_{\max})'$  (Welch, 1983). Een handzame uitdrukking voor het criterium wordt verkregen door B te middelen over alle  $2^r$  extremen:

$$J^{**}(\underline{p}_n) = V(\underline{p}_n) + 2^{-r} \sum_{j=1}^{2^r} B(\underline{p}_n, \underline{z}_j^{(m)})$$

Deze uitdrukking kan dan worden herschreven tot

$$J^{**}(\underline{p}_n) = V(\underline{p}_n) + n z_{\max}^2 \sigma^{-2} B^{**}(\underline{p}_n), \text{ waarin}$$

$B^{**}(\underline{p}_n)$  alleen afhangt van de punten in de proefopzet, en dus een bekende uitdrukking is (zie paragraaf 2.5.7).

In  $J^{**}(\underline{p}_n)$  is  $z_{\max}/\sigma$  de enige onbekende. Om met dit criterium proefopzetten te kunnen bepalen, zal eerst een waarde voor deze faktor moeten worden gespecificeerd.

In principe is  $z_{\max}/\sigma$  altijd onbekend. Wel is het mogelijk een waarde hiervoor te vinden waarvoor  $J^{**}$  een robuuste proefopzet oplevert.

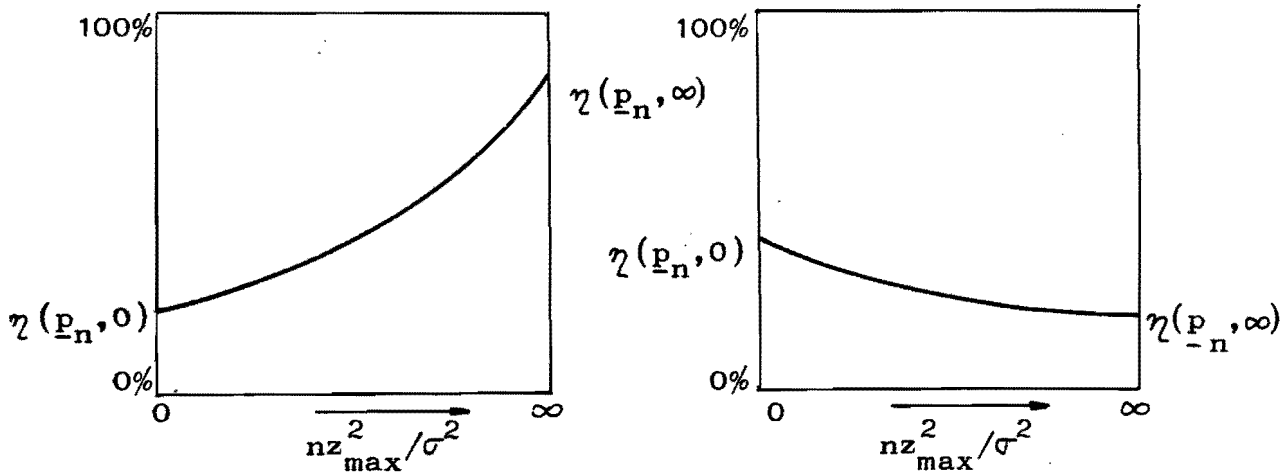
Daartoe definiëren we het rendement van een proefopzet  $\underline{p}_n$  t.o.v. de  $J^{**}$ -optimale proefopzet  $\underline{p}_n^*$ :

$$\eta(\underline{p}_n, n z_{\max}^2 / \sigma^2) = 100 J^{**}(\underline{p}_n^*) / J^{**}(\underline{p}_n)$$

$\eta$  is een functie van  $n \cdot z_{\max}^2 / \sigma^2$ . We zoeken nu dié proefopzet  $\underline{p}_n$  waarvoor het minimale rendement over het gehele gebied  $0 \leq n \cdot z_{\max}^2 / \sigma^2 \leq \infty$  hoog blijft. Een dergelijke proefopzet is dan robuust m.b.t. (ongevoelig voor veranderingen in)  $z_{\max} / \sigma$ .

Als  $n \cdot z_{\max}^2 / \sigma^2 = 0$  komt minimaliseren van  $J^{**}$  in feite neer op het minimaliseren van de steekproefvariantie  $V$ . Dit leidt tot de keuze van punten in gebieden waar de steekproefvariantie maximaal is. Als  $n \cdot z_{\max}^2 / \sigma^2 \rightarrow \infty$  betekent minimaliseren van  $J^{**}$  minimaliseren van de systematische variantie. Minimaliseren van de systematische variantie leidt tot uniform verdeelde proefopzetten: de punten zijn hierbij gelijkmatig verdeeld over de ontwerp-ruimte. Voor waarden van  $n \cdot z_{\max}^2 / \sigma^2$  tussen deze uitersten in, concentreert de proefopzet zich wat meer in gebieden met maximale variantie als de steekproefvariantieterm overheerst, of is wat gelijkmatiger verdeeld als de bias-term overheerst. Het is daarom niet mogelijk een proefopzet te vinden die zowel  $V$  als  $B^{**}$  tegelijkertijd minimaliseert.

Het blijkt dat  $\eta$  een minimum heeft uitsluitend in  $\eta(\underline{p}_n, 0)$  of in  $\eta(\underline{p}_n, \infty)$ ; daartussen is het verloop convex. Figuur 2.2.4.2 geeft het mogelijke verloop aan van  $\eta$  als functie van  $n \cdot z_{\max}^2 / \sigma^2$ .



Figuur 2.2.4.2 Rendement van  $\underline{p}_n$  als functie van  $n z_{\max}^2 / \sigma^2$ .

Bij het bepalen van een robuuste proefopzet behoeven dus alleen  $\eta(\underline{p}_n, 0)$  en  $\eta(\underline{p}_n, \infty)$  berekend te worden. Voor een zekere waarde van  $z_{\max}/\sigma$ , zeg  $q$ , kan een  $J^{**}$ -optimale proefopzet  $(\underline{p}_n^*)_q$  worden bepaald. Dan geldt

$$\eta((\underline{p}_n^*)_q, 0) = 100 \frac{V(\underline{p}_n^*)_0}{V(\underline{p}_n^*)_q}$$

(2.2.4.1)

en

$$\eta((\underline{p}_n^*)_q, \infty) = 100 \frac{B^{**}(\underline{p}_n^*)_\infty}{B^{**}(\underline{p}_n^*)_q}$$

We zoeken diè  $q$  waarvoor  $\eta((\underline{p}_n^*)_q, 0) \approx \eta((\underline{p}_n^*)_q, \infty)$ . Daartoe bepalen we voor  $q = 0, 5$  en  $10$   $J^{**}$ -optimale proefopzetten en berekenen met (2.2.4.1) de rendementen. (Voor  $q = z_{\max}/\sigma = 10$  is  $n \cdot z_{\max}^2/\sigma^2 = 100 \cdot n$  oneindig groot gedacht.)

Als voor  $q=5$  blijkt dat  $\eta((\underline{p}_n^*)_5, 0) < \eta((\underline{p}_n^*)_5, \infty)$ , dan bepalen we voor  $q=2.5$  een nieuwe optimale proefopzet. Als voor  $q=5$  blijkt dat  $\eta((\underline{p}_n^*)_5, 0) > \eta((\underline{p}_n^*)_5, \infty)$ , dan bepalen we voor  $q=7.5$  een nieuwe optimale proefopzet. Vervolgens evalueren we voor deze nieuwe waarde van  $q$  de beide rendementen en kiezen een nieuwe  $q$ .

Tabel 2.2.4.3 dient ter illustratie en is ontleend aan een voorbeeld uit Welch (1983).

$z_{\max}/\sigma$	$V(\underline{p}_n^*)$	$B^{**}(\underline{p}_n^*)$	$\eta(\underline{p}_n^*, 0)$	$\eta(\underline{p}_n^*, \infty)$
0	2.33	0.917	100.0	72.7
5	2.74	0.681	85.0	97.9
10	3.00	0.667	77.7	100.0

Tabel 2.2.4.3

Omdat hierin  $\eta((\underline{p}_n^*)_5, 0) < \eta((\underline{p}_n^*)_5, \infty)$  kiezen we  $q = 2.5$ .

We stoppen als

$$\left| \eta((\underline{p}_n^*)_q, 0) - \eta((\underline{p}_n^*)_q, \infty) \right| \leq \text{eps},$$

met eps b.v. 1%.

De  $J^{**}$ -optimale proefopzet  $(\underline{p}_n^*)_q$ , die hierbij behoort, bezit in het gehele gebied  $0 \leq n \cdot z_{\max}^2 \sigma^{-2} \leq \infty$  een rendement

$$\geq \min \left[ \eta((\underline{p}_n^*)_q, 0), \eta((\underline{p}_n^*)_q, \infty) \right]$$

In de praktijk blijkt deze procedure robuuste proefopzetten op te leveren met vaak een relatief hoog rendement ( 80% - 100% ).

2.2.4.1 Toepassingsgebied.

Omdat van te voren vrijwel nooit vaststaat of het geponeerde model exakt is, kan men in de verleiding komen steeds robuuste proefopzetten toe te passen. Dat is echter niet aanbevelenswaardig. Wanneer namelijk het geponeerde model toevalligerwijs ook het exakte is, of dat dicht nadert, dan kan een robuuste proefopzet slechtere parameter- en response-schattingen opleveren dan een proefopzet, bepaald m.b.v. een van de andere criteria.

Zo zal een robuuste proefopzet voor het 1<sup>e</sup> graads model uit het voorbeeld in paragraaf 2.2.4 een aantal punten rondom  $\bar{x}$  bevatten en overeenkomstig minder punten in de randgebieden dan een proefopzet bepaald met b.v. het G-kriterium. Voor de robuuste proefopzet wordt daardoor de uitdrukking  $\sum_1^n (x_i - \bar{x})^2$  kleiner, met als gevolg grotere varianties in de parameter- en response-schattingen voor het 1<sup>e</sup> graads model.

Robuuste proefopzetten zouden eigenlijk alleen moeten worden gebruikt wanneer twijfels bestaan over het geponeerde model, b.v. in die situaties waarin het te verwachten verband moeilijk of niet in te schatten is.

Een eerste keuze van het te verwachten verband zou gemaakt kunnen worden op grond van b.v. oriënterende metingen of wellicht op grond van een analyse. Het is vaak lonend daar relatief veel tijd en energie in te steken. Naarmate het gekozen model een betere benadering vormt voor het exakte, zal een G- of b.v. een D-optimale proefopzet betere schattingen voor de modelparameters opleveren. Hierin ligt het grote voordeel van het proefopzetten: van de informatie die vooraf wordt vergaard, of al aanwezig is, kan met vrucht gebruik worden gemaakt. Bovendien wordt de experimentator min of meer gedwongen zich vooraf een beeld te vormen van de mogelijke relaties tussen afhankelijke en onafhankelijke variabelen. Dat kan leiden tot een verantwoorde en zinvolle beperking in het

aantal variabelen, hetgeen de experimenten goedkoper en doelgerichter kan maken.

2.3

### Eindige Elementen Methode Analyses.

E.E.M.-pakketten bezitten op dit moment nog geen stochastiek; de analyseresultaten zijn deterministisch. Dat schept een onjuist beeld, immers, de materiaalgegevens zoals elasticiteitsmodulus, dichtheid e.d. en ook de maten van het elementenmodel zijn stochastisch en bezitten een kansverdeling. Het E.E.M.-programma behoort in feite die gegevens voor iedere analyse te kiezen uit de bijbehorende kansverdelingen. Het wordt dan mogelijk varianties in, en betrouwbaarheidsintervallen van, de analyseresultaten te bepalen. De analyses zullen dan een veel realistischer beeld scheppen en pas dan kan men met recht spreken van "numerieke" experimenten als volwaardige tegenhanger van fysische experimenten.

Wel zullen de resultaten door de keuze van de elementverdeling, het elementtype en het principe, waarop de E.E.M.-methode is gebaseerd, nog enige systematische afwijkingen vertonen. Door te werken met dimensieloze grootheden, b.v. met frequentieverhoudingen i.p.v. met de frequenties zelf, zullen die voor een groot deel geëlimineerd kunnen worden.

We hebben nu echter te maken met deterministische analyseresultaten. Op grond hiervan is de steekproefvariantie-term nul (via  $\sigma=0$ ), en bestaat er alleen systematische variantie. Minimaliseren van  $J^{**}$  levert dan "all bias" proefopzetten op:  $B^{**}$  bereikt zijn minimum voor  $\underline{p} = \underline{p}_{un}$ , de uniform verdeelde proefopzet. Daarbij zijn de punten equidistant verdeeld met gelijke weegfactoren. Voor het bepalen van een uniform verdeelde proefopzet hoeft geen model te worden gekozen en is ook geen programma nodig.



Het is echter wel degelijk mogelijk, op grond van b.v. oriënterende berekeningen of op grond van een analyse (formules van Roark), een realistische keuze van het model te maken. In dat geval kan de biasterm klein zijn t.o.v. de voor  $\sigma$  genormeerde steekproefvariantie-term  $V$  en lijkt het zinvoller, uitgaande van dit model,  $V$  te minimaliseren. Wanneer in dit geval een uniform verdeelde proefopzet zou worden gekozen, dan zullen de "varianties" in de schattingen groter uitvallen.

Hoewel  $\sigma = 0$  en over varianties niet gesproken mag worden, lijkt het toch nuttig ook bij deterministische E.E.M.-analyses de voor  $\sigma$  genormeerde uitdrukkingen van de optimalisatie-kriteria te minimaliseren, al was het maar om een zo goed mogelijk gekonditioneerd stelsel normaalvergelijkingen te creëren.

2.4

ACED: Algorithms for the Construction of Experimental Designs.

Voor het deel proefopzetten is het programma ACED aangekocht. ACED is ontwikkeld door W.J. Welch (1985). Het bevat een viertal criteria:

1. D-kriterium (determinant van de covariantiematrix),
2. V-kriterium (gemiddelde variantie),
3. G-kriterium (maximale variantie),
4. J-kriterium (gemiddelde restkwadratensom),

en een drietal algorithmen:

1. excursie-algorithme,  
het standaard algoritme en beschikbaar voor alle criteria,
2. branch & bound- algoritme,  
alleen beschikbaar voor het D-kriterium,
3. approximate-algorithme,  
beschikbaar voor alle criteria behalve het G-kriterium.

Met het excursie-algorithme en het branch & bound-algorithme kunnen optimale exakte proefopzetten worden bepaald. Met het approximate-algorithme kunnen diskrete proefopzetten worden bepaald.

Het bevat een beperkte modellenbibliotheek:

$1^e + 2^e$  orde lineaire polynoommodellen,

$1^e + 2^e$  orde lineaire mengselmodellen,

en de gebruiker kan d.m.v. een gebruikersroutine zijn eigen model invoeren. Ontdaan van alle in- en uitvoer vormt het nu de kern van het deel proefopzetten in CADE.

#### Mengselmodellen.

Mengselmodellen worden toegepast bij experimenten waarbij de ontwerpvariabelen relatieve waarden, percentages vormen. Voorwaarde is dat voor iedere nivo-kombinatie de nivo's moeten sommeren tot 1. Sommige van de ontwerpvariabelen kunnen onderworpen zijn aan onder- en/of bovengrenzen, terwijl ook procesgrootheden een rol mogen spelen (Galil en Kiefer, 1977 a,b; Welch, 1985).

CADE bevat geen mengselmodellen. In de werktuigbouwkunde zijn echter interessante toepassingsmogelijkheden voor dergelijke modellen te vinden. Te denken valt bijvoorbeeld aan onderzoek naar de sterkte en de stijfheid van legeringen en komposieten van variabele samenstelling, waarbij de temperatuur als procesgrootheid kan optreden.

2.5

Proefopzetten voor het gelijktijdig waarnemen van meerdere afhankelijke variabelen.

Het kan voorkomen dat we met een serie experimenten gelijktijdig meer dan één functioneel verband willen onderzoeken. Bij de experimenten zijn dan meerdere afhankelijke variabelen betrokken, die ieder een bepaald verband met de onafhankelijke variabelen bezitten. We gaan er vanuit dat de afhankelijke variabelen onderling onafhankelijk zijn.

We zouden voor iedere afhankelijke variabele afzonderlijk een serie experimenten kunnen uitvoeren. Uit oogpunt van kostenbesparing is het veel aantrekkelijker één serie experimenten uit te voeren voor alle afhankelijke variabelen. Er zal dan één proefopzet moeten worden bepaald, die optimaal is m.b.t. alle gespecificeerde modellen.

Ook de partiële afgeleiden uit de E.E.M.-analyses vallen hieronder: zij bezitten ieder een eigen model, dat te bepalen is door differentiëren van het functie-model. Dat er een bepaald verband bestaat tussen functie-model en afgeleide-model is voor het genereren van proefopzetten niet van belang.

Ter illustratie twee eenvoudige voorbeelden van combinaties van modellen.

$$\begin{array}{l} \left\| \begin{array}{l} y_1 = b_0 + b_1x + b_2x^2 + 0 + 0 \\ y_2 = 0 + 0 + 0 + b_3 + b_4x \end{array} \right. \\ \\ \left\| \begin{array}{l} y_1 = b_0 + b_1x + b_2x^2 + 0 + 0 \\ \frac{dy_1}{dx} = 0 + b_1 + b_2 \cdot 2x + 0 + 0 \\ y_2 = 0 + 0 + 0 + b_3 + b_4x \\ \frac{dy_2}{dx} = 0 + 0 + 0 + 0 + b_4 \end{array} \right. \end{array}$$

In matrixvorm:

$$\underline{y} = F' \underline{b}$$

Uitgeschreven voor het eerste voorbeeld:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x & x^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix}$$

De algorithmen en de criteria van ACED zijn zò aangepast dat optimale proefopzetten voor meerdere functie-modellen en afgeleide-modellen kunnen worden gegenereerd. In het resterende deel van dit hoofdstuk worden de belangrijkste wijzigingen in de algorithmen en de criteria behandeld die hiervoor noodzakelijk zijn.

### 2.5.1 Definities.

Definieer  $v$  onafhankelijke variabelen  $x_1, \dots, x_v$  en  $m$  afhankelijke variabelen  $y_1, \dots, y_m$ , die onderling onafhankelijk verondersteld worden.

Een punt  $\underline{x} = (x_1, \dots, x_v)'$  is een punt in de ontwerp-ruimte  $\lambda$  waarvoor de  $m$  afhankelijke variabelen, verzameld in de vector  $\underline{v}(\underline{x}) = (y_1(\underline{x}), \dots, y_m(\underline{x}))'$ , uit een of ander experiment bepaald kunnen worden.

Laat  $k$  het aantal onbekende parameters zijn. Vorm de vector met parameters  $\underline{b} = (b_1, \dots, b_k)'$ .

Laat  $\underline{f}_i$  een  $k$ -vector zijn met modelfunkties voor de  $i$ -de afhankelijke variabele. Definieer de  $(k.m)$ -matrix

$$F(\underline{x}) = \begin{bmatrix} \underline{f}_1(\underline{x}) & \underline{f}_2(\underline{x}) & \dots & \underline{f}_m(\underline{x}) \end{bmatrix}$$

Het probleem is nu  $n$ , niet noodzakelijkerwijs verschillende punten  $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_n$  uit  $r$  kandidaatpunten te selecteren waar de waarnemingen  $\underline{v}(\underline{x}_1), \dots, \underline{v}(\underline{x}_n)$  zullen moeten worden verricht.

We veronderstellen het steekproefmodel:

$$\underline{v}(\underline{x}_i) = F'(\underline{x}_i)\underline{b} + \underline{e}_i, \quad i=1, \dots, n$$

met  $\underline{e}_i$  een  $m$ -vector met toevallige fouten, met gemiddelde nul en konstante varianties  $\sigma_1^2, \dots, \sigma_m^2$ .

Definieer:

$$X = \begin{bmatrix} F'(\underline{x}_1) \\ \cdot \\ \cdot \\ F'(\underline{x}_n) \end{bmatrix} \quad \underline{y} = \begin{bmatrix} \underline{v}(\underline{x}_1) \\ \cdot \\ \cdot \\ \underline{v}(\underline{x}_n) \end{bmatrix} \quad \underline{e} = \begin{bmatrix} \underline{e}_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \underline{e}_n \end{bmatrix}$$

Dan is  $\underline{y} = X\underline{b} + \underline{e}$  en volgen de schattingen voor de parameters uit  $\hat{\underline{b}} = (X'X)^{-1}X'\underline{y}$ . Voor de varianties in de parameterschattingen geldt:

$$\begin{aligned} \text{var } \hat{\underline{b}} &= \text{var} \left[ (X'X)^{-1}X'\underline{y} \right] \\ &= (X'X)^{-1}X' \cdot \text{var } \underline{y} \cdot X(X'X)^{-1}, \end{aligned}$$

met  $\text{var } \underline{y}$  een  $(nm, nm)$ -diagonaalmatrix met op de hoofddiagonaal de elementen  $\sigma_1^2, \dots, \sigma_m^2, \dots, \sigma_1^2, \dots, \sigma_m^2$ . Voor de variantie in de responschatting in punt  $\underline{x}_i$  geldt dan:

$$\begin{aligned} \text{var}(\hat{\underline{y}}|\underline{x}_i) &= \text{var} \left[ F'(\underline{x}_i)\hat{\underline{b}} \right] \\ &= F'(\underline{x}_i) \cdot \text{var } \hat{\underline{b}} \cdot F(\underline{x}_i) \end{aligned}$$

De varianties  $\sigma_1^2, \dots, \sigma_m^2$  zijn hier niet meer door normering te elimineren. Er zullen, voorafgaande aan het proefopzetten, schattingen voor  $\sigma_1^2, \dots, \sigma_m^2$  moeten worden bepaald.

Bij fysische experimenten zal dat geen probleem zijn, bij numerieke experimenten vormt dit nog wel een probleem. Een pleidooi voor het stochastisch maken van E.E.M.-pakketten lijkt daarom op zijn plaats.

We gaan er vanuit dat schattingen voor de varianties  $\sigma_1^2, \dots, \sigma_m^2$  voorhanden zijn en definiëren:

$$S = \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_1 & & \emptyset \\ & \cdot & \\ \emptyset & & \hat{\sigma}_m \end{bmatrix}$$

Noem

$$M(\underline{p}) = \sum_{i=1}^r p_i F(\underline{x}_i) S^{-1} S^{-1} F'(\underline{x}_i)$$

de informatiematrix. Dan kunnen de parameters geschat worden uit

$$\hat{\underline{b}} = M^{-1}(\underline{p}) \underline{t},$$

met

$$\underline{t} = \sum_{i=1}^r p_i F(\underline{x}_i) S^{-1} S^{-1} \underline{v}(\underline{x}_i)$$

De variantiematrix in de responschatting in punt  $\underline{x}_i$  is

$$\text{var}(\hat{y} | \underline{x}_i) = \frac{1}{n} \cdot F'(\underline{x}_i) M^{-1}(\underline{p}) F(\underline{x}_i)$$

of, genormeerd voor  $\frac{1}{n} \cdot S^2$ :

$$D(\underline{x}_i, \underline{p}) = S^{-1} F'(\underline{x}_i) M^{-1}(\underline{p}) F(\underline{x}_i) S^{-1}$$

De varianties in de parameterschatters:

$$\text{var } \hat{\underline{b}} = n \cdot M^{-1}(\underline{p})$$

Het is handig de matrix van gewogen modelfuncties in te voeren:

$$\begin{aligned} W(\underline{x}_i) &= F(\underline{x}_i) S^{-1} \\ &= \left[ \frac{1}{\sigma_1} \cdot f_1(\underline{x}_i) \quad \dots \quad \frac{1}{\sigma_m} \cdot f_m(\underline{x}_i) \right] \end{aligned}$$

Daarmee ontstaat:

$$M(\underline{p}) = \sum_{i=1}^r p_i W(\underline{x}_i) W'(\underline{x}_i)$$

en

$$D(\underline{x}_i, \underline{p}) = W'(\underline{x}_i) M^{-1}(\underline{p}) W(\underline{x}_i)$$

### 2.5.2 Optimalisatie-kriteria.

Omdat ook hier de nauwkeurigheid in de parameter- en responsschattingen volledig gekarakteriseerd wordt door de covariantiematrix  $M^{-1}$ , kunnen de optimalisatie-kriteria voor het één-dimensionale geval gegeneraliseerd worden.

$$\left\| \begin{array}{l} \text{Een proefopzet } \underline{p}^* \text{ is} \\ \text{D-optimaal als } \min_{\underline{p}} \det M^{-1}(\underline{p}) = \det M^{-1}(\underline{p}^*), \\ \text{A-optimaal als } \min_{\underline{p}} \text{tr } M^{-1}(\underline{p}) = \text{tr } M^{-1}(\underline{p}^*), \\ \text{E-optimaal als } \min_{\underline{p}} \max_i \lambda_i(\underline{p}) = \max_i \lambda_i(\underline{p}^*) \end{array} \right.$$

$$\left\| \begin{array}{l} \text{G-optimaal als } \min_{\underline{p}} \max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \text{tr } D(\underline{x}, \underline{p}) = \max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \text{tr } D(\underline{x}, \underline{p}^*), \\ \text{V-optimaal als } \min_{\underline{p}} \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r \text{tr } D(\underline{x}, \underline{p}) = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r \text{tr } D(\underline{x}, \underline{p}^*), \end{array} \right.$$

waarin  $\lambda_i$  eigenwaarde is van  $M^{-1}$ . In alle gevallen dient  $M(\underline{p}^*)$  regulier te zijn.

### 2.5.3 Equivalentie theorema.

Voor een optimale continue proefopzet  $p^*$  bestaat het volgende equivalentie theorema:

De volgende uitspraken zijn equivalent:

- $$\left\| \begin{array}{l} 1. p^* \text{ minimaliseert } \det M^{-1}(p), \\ 2. p^* \text{ minimaliseert } \max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \text{tr } D(\underline{x}, p), \\ 3. \max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \text{tr } D(\underline{x}, p^*) = k. \end{array} \right.$$

De informatiematrices van alle proefopzetten, die voldoen aan 1 t/m 3, vallen samen. Iedere lineaire combinatie van proefopzetten, die voldoen aan 1 t/m 3, voldoet aan 1 t/m 3.

(Fedorov, theorema 5.2.1)

Geheel analoog aan paragraaf 2.2.2 geldt het equivalentie theorema ook voor diskrete proefopzetten. Voor exakte proefopzetten bestaat een dergelijk equivalentie theorema niet.



2.5.4 D-optimale proefopzetten.

Bij dit criterium willen we een proefopzet  $\underline{p}$  bepalen die de determinant van de, voor  $\frac{1}{n}$  genormeerde covariantiematrix  $M^{-1}(\underline{p})$  minimaliseert.

Als aan een diskrete proefopzet  $\underline{p}$  een punt  $\underline{x}_j$  met een weegfaktor  $\alpha$  wordt toegevoegd (+ teken), of uit de proefopzet verwijderd (- teken), dan kan de nieuwe covariantiematrix worden berekend met de update-formule

$$M^{-1}(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = M^{-1}(\underline{p}) \quad (2.5.4.1)$$

$$- M^{-1}(\underline{p}) W(\underline{x}_j) \cdot \left( \pm \frac{1}{\alpha} I_m + D(\underline{x}_j, \underline{p}) \right)^{-1} \cdot W'(\underline{x}_j) M^{-1}(\underline{p})$$

waarin  $\underline{\delta}_j$  de eenheidsvector is, waarvan het j-de element de waarde 1 bezit en  $I_m$  de (m.m)-eenheidsmatrix.

(Appendix B, (1)).

Voor de determinant geldt de update-formule:

$$\det M^{-1}(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = \det M^{-1}(\underline{p}) / \det(I_m + \alpha D(\underline{x}_j, \underline{p}))$$

(Fedorov, pag. 100).

Op grond van het equivalentie-theorema kan  $\det M^{-1}(\underline{p})$  geminimaliseerd worden met het uitwisselings-algorithme, beschreven in paragraaf 2.2.3, pag. 2.14, waarin  $d(\underline{x}_j, \underline{p})$  vervangen moet worden door  $\text{tr } D(\underline{x}_j, \underline{p})$ . Er wordt gestopt zodra  $\max_j \text{tr } D(\underline{x}_j, \underline{p}) \approx k$ .

Omdat de selectie beperkt is tot een eindige set van r kandidaatpunten, is noch D-optimaliteit noch G-optimaliteit gegarandeerd: tussen de kandidaatpunten in kan  $\text{tr } D(\underline{x}, \underline{p}) > k$  zijn. Optimaliteit hangt af van de keuze van de kandidaatpunten en daarmee van de gebruiker. Hij zal kandidaatpunten moeten leggen in gebieden waar voor het geponeerde model de grootste varianties te verwachten

zijn. Dit is een nadeel van de beperking tot een eindige set van kandidaatpunten, waar als voordelen kortere reken-tijden en minder konvergentie-problemen tegenover staan.

Enige tijdwinst is te behalen wanneer de kandidaat-punten gerangschikt worden in de volgorde  $\underline{x}_{\langle 1 \rangle}, \dots, \underline{x}_{\langle r \rangle}$  zodanig dat

$$\text{tr } D(\underline{x}_{\langle 1 \rangle}, \underline{p}) \geq \dots \geq \text{tr } D(\underline{x}_{\langle r \rangle}, \underline{p})$$

Dan behoeven bij de selectieprocedure van  $\underline{x}_h$  en  $\underline{x}_i$  niet alle kandidaatpunten te worden betrokken.

Bij de selectie van punten voor exakte proefopzetten zouden wij ons kunnen laten leiden door het spoor van  $D$ . Voor exakte proefopzetten bestaat echter geen equivalentie theorema. Wel is het een procedure die veel minder reken-tijd vergt dan wanneer uitgegaan wordt van bovenstaande update-formule. Hierin moet  $\alpha$  dan vervangen worden door  $1/n$ .

Het uitwisselings-algorithme van Fedorov, beschreven in paragraaf 2.2.3, is vanwege de hoge rekentijden slechts toelaatbaar voor beperkte aantallen kandidaatpunten. We baseren ons daarom bij beide selectiekriteria op het DETMAX-excursie algorithme. Gebleken is dat dit algorithme voor betrekkelijk weinig rekentijd naar verhouding goede proefopzetten oplevert.

We beschouwen de volgende iteratieve procedure:

1. Kies een initiële proefopzet  $\underline{p}_n$ .
2. Voeg  $\underline{x}_h$  toe aan  $\underline{p}_n$  waarvoor

$$\det\left(I_m + \frac{1}{n}D(\underline{x}_h, \underline{p}_n)\right) = \max_{j: p_j < u_j} \det\left(I_m + \frac{1}{n}D(\underline{x}_j, \underline{p}_n)\right)$$

of

$$\text{tr } D(\underline{x}_{-h}, \underline{p}_n) = \max_{j: p_j < u_j} \text{tr } D(\underline{x}_j, \underline{p}_n)$$

3. Verwijder  $\underline{x}_{-i}$  uit de nieuw ontstane proefopzet  $\underline{p}_{n+1}$  waarvoor:

$$\det(I_m - \frac{1}{n} D(\underline{x}_{-i}, \underline{p}_{n+1})) = \max_{j: 1_j < p_j} \det(I_m - \frac{1}{n} D(\underline{x}_j, \underline{p}_{n+1}))$$

of

$$\text{tr } D(\underline{x}_{-i}, \underline{p}_{n+1}) = \min_{j: 1_j < p_j} \text{tr } D(\underline{x}_j, \underline{p}_{n+1})$$

Met het spoor als criterium is als alternatief ook een gelijktijdige uitwisseling van  $\underline{x}_{-h}$  en  $\underline{x}_{-i}$  mogelijk. We bepalen dan  $\underline{x}_{-h}$  en  $\underline{x}_{-i}$  zodanig dat:

$$\text{tr } D(\underline{x}_{-h}, \underline{p}_n) = \max_{j: p_j < u_j} \text{tr } D(\underline{x}_j, \underline{p}_n)$$

en

$$\text{tr } D(\underline{x}_{-i}, \underline{p}_n) = \min_{j: 1_j < p_j} \text{tr } D(\underline{x}_j, \underline{p}_n)$$

en voegen vervolgens  $\underline{x}_{-h}$  toe en verwijderen  $\underline{x}_{-i}$ .

Met de bovenbeschreven rangschikprocedure kan ook hier nog enige tijdwinst worden behaald.

2.5.5 G-optimale proefopzetten.

Op grond van het equivalentie-theorema zijn diskrete G-optimale en D-optimale proefopzetten identiek. De procedure, beschreven in de vorige paragraaf, levert dus diskrete proefopzetten op die zowel D- als G-optimaal zijn. Voor exakte proefopzetten wijken de procedures af.

Een G-optimale proefopzet wordt verkregen door het maximale spoor:

$$d_{\max}(\underline{p}_n) = \max_j \text{tr } D(\underline{x}_j, \underline{p}_n)$$

te minimaliseren.

Daartoe definiëren we de genormeerde covariantiematrix tussen  $\hat{v}(\underline{x}_i)$  en  $\hat{v}(\underline{x}_j)$ :

$$D(\underline{x}_i, \underline{x}_j, \underline{p}_n) = W'(\underline{x}_i) M^{-1}(\underline{p}_n) W(\underline{x}_j) \quad (2.5.5.1)$$

Gemakshalve wordt in het vervolg van deze paragraaf de index n in  $\underline{p}_n$  weggelaten.

Met (2.5.4.1) (neem  $\alpha=1/n$ ) en (2.5.5.1) wordt de genormeerde variantiematrix van  $\hat{v}(\underline{x}_i)$  na een verandering in  $\underline{x}_j$ :

$$D(\underline{x}_i, \underline{p} + n^{-1} \underline{\delta}_j) = D(\underline{x}_i, \underline{p}) \quad (2.5.5.2)$$

$$- D(\underline{x}_i, \underline{x}_j, \underline{p}) \cdot (+nI_m + D(\underline{x}_j, \underline{p}))^{-1} \cdot D(\underline{x}_j, \underline{x}_i, \underline{p})$$

Dan is

$$d_{\max}(\underline{p} + n^{-1} \underline{\delta}_{-j}) = \max_i \operatorname{tr} \{ D(\underline{x}_i, \underline{p}) - D(\underline{x}_i, \underline{x}_j, \underline{p}) \cdot (nI_m + D(\underline{x}_j, \underline{p}))^{-1} \cdot D(\underline{x}_j, \underline{x}_i, \underline{p}) \} \quad (2.5.5.3)$$

Als een punt aan de proefopzet moet worden toegevoegd (of eruit verwijderd), zal t.b.v. de selectie voor iedere  $\underline{x}_j$ , die niet (wel) deel uitmaakt van de proefopzet, (2.5.5.2) moeten worden berekend voor iedere  $i=1, \dots, r$ . Het is echter mogelijk bovengrenzen voor (2.5.5.3) aan te geven, waardoor de hoeveelheid rekenwerk beperkt kan worden.

a. Als  $\underline{x}_j$  wordt toegevoegd dan geldt:

$$\operatorname{tr} \{ D(\underline{x}_i, \underline{p}) - D(\underline{x}_i, \underline{x}_j, \underline{p}) [nI_m + D(\underline{x}_j, \underline{p})]^{-1} D(\underline{x}_j, \underline{x}_i, \underline{p}) \} \leq \operatorname{tr} D(\underline{x}_i, \underline{p})$$

bewijs:

$D$  is positief-semidefinit zodat

$$D(\underline{x}_i, \underline{x}_j, \underline{p}) D(\underline{x}_j, \underline{x}_i, \underline{p}) \geq 0$$

$A \geq 0$  wil zeggen dat  $\forall \underline{x}$  geldt  $\underline{x}' A \underline{x} \geq 0$ , b.v. ook voor  $\underline{x} = \underline{e}_j$ , zodat  $a_{jj} \geq 0$  en dus geldt dat ook  $\operatorname{tr} A \geq 0$ .

$$\text{Dus } \operatorname{tr} \{ D(\underline{x}_i, \underline{x}_j, \underline{p}) D(\underline{x}_j, \underline{x}_i, \underline{p}) \} \geq 0$$

b. Als  $\underline{x}_j$  wordt verwijderd dan geldt

$$\operatorname{tr} \{ D(\underline{x}_i, \underline{p}) + D(\underline{x}_i, \underline{x}_j, \underline{p}) [nI_m - D(\underline{x}_j, \underline{p})]^{-1} D(\underline{x}_j, \underline{x}_i, \underline{p}) \} \\ \leq n \cdot \operatorname{tr} \{ D(\underline{x}_i, \underline{p}) [nI_m - D(\underline{x}_j, \underline{p})]^{-1} \}$$

bewijs:

Vermenigvuldig met  $[nI_m - D(\underline{x}_j, \underline{p})]$  dan moet bewezen worden dat

$$\text{tr}\{D(\underline{x}_j, \underline{x}_i, \underline{p})D(\underline{x}_i, \underline{x}_j, \underline{p})\} \{ \text{tr}\{D(\underline{x}_i, \underline{p})D(\underline{x}_j, \underline{p})\} \}$$

of wel

$$D(\underline{x}_j, \underline{x}_i, \underline{p})D(\underline{x}_i, \underline{x}_j, \underline{p}) \leq D(\underline{x}_i, \underline{p})D(\underline{x}_j, \underline{p})$$

hetgeen altijd geldt.

Als de kandidaatpunten gerangschikt worden in de volgorde  $\underline{x}_{\langle 1 \rangle}, \dots, \underline{x}_{\langle r \rangle}$  zodanig dat,

$$\text{tr } D(\underline{x}_{\langle 1 \rangle}, \underline{p}) \geq \dots \geq \text{tr } D(\underline{x}_{\langle r \rangle}, \underline{p})$$

dan behoeven bij de selectie-procedure van  $\underline{x}_j$  niet alle kandidaatpunten te worden betrokken. De gevolgde selectie-procedure is dezelfde als die in ACED en wordt beschreven in Welch, 1984.

#### 2.5.6 V-optimale proefopzetten.

Proefopzetten heten V-optimaal wanneer die de gemiddelde variantie

$$d_{\text{ave}}(\underline{p}) = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \text{tr } D(\underline{x}_i, \underline{p})$$

minimaliseren.

Met (2.5.5.2) kan voor de gemiddelde variantie, na een verandering in  $\underline{x}_j$ , worden afgeleid:

$$\begin{aligned} d_{\text{ave}}(\underline{p} + \underline{n}^{-1} \underline{\delta}_j) &= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \text{tr } D(\underline{x}_i, \underline{p} + \underline{n}^{-1} \underline{\delta}_j) \\ &= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \text{tr } D(\underline{x}_i, \underline{p}) - \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \text{tr} \\ &\quad \left\{ D(\underline{x}_i, \underline{x}_j, \underline{p}) \cdot (\underline{n} \underline{I}_m + D(\underline{x}_j, \underline{p}))^{-1} \cdot D(\underline{x}_j, \underline{x}_i, \underline{p}) \right\} \end{aligned}$$

Het V-kriterium wordt uitgebreid behandeld in de volgende paragraaf, als onderdeel van het J-kriterium.

2.5.7 J-optimale proefopzetten.

Omdat de standaard-afwijkingen  $\sigma_1, \dots, \sigma_m$  voor de m modellen i.h.a. niet gelijk zullen zijn, kan J niet genormeerd worden voor S. Verondersteld wordt dat schattingen voor de standaard-afwijkingen voorhanden zijn.

Laat, in punt  $\underline{x}_j$ ,  $\underline{v}(\underline{x}_j)$  de response zijn van de exakte modellen  $G(\underline{x})$  en  $\hat{\underline{y}}(\underline{x}_j)$  de geschatte response van de geponeerde modellen  $F(\underline{x})$ .

De voor n genormeerde gemiddelde restkwadratensom J is dan te schrijven als

$$J = n \cdot \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r E\{(\hat{\underline{y}}(\underline{x}_j) - \underline{v}(\underline{x}_j))' (\hat{\underline{y}}(\underline{x}_j) - \underline{v}(\underline{x}_j))\}$$

J is te splitsen in een deel steekproefvariantie en een deel systematische variantie:

$$J = V + B$$

Definieer de vector met systematische afwijkingen

$$\underline{z} = \begin{bmatrix} E\hat{\underline{y}}(\underline{x}_1) - \underline{v}(\underline{x}_1) \\ \vdots \\ E\hat{\underline{y}}(\underline{x}_r) - \underline{v}(\underline{x}_r) \end{bmatrix}$$

Gevraagd wordt  $\underline{p}$  te bepalen zodanig dat

$$J^{**}(\underline{p}) = V(\underline{p}) + 2^{-rm} \sum_{j=1}^{2^{rm}} B(\underline{p}, \underline{z}_j^{(m)})$$

minimaal is.

Variatiekomponent van  $J^{**}$ .

$$\begin{aligned} V(\underline{p}) &= \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r \text{tr}(F'(\underline{x}_j)M^{-1}(\underline{p})F(\underline{x}_j)) \\ &= \text{tr}\left\{M^{-1}(\underline{p}) \cdot \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r F(\underline{x}_j)F'(\underline{x}_j)\right\} \end{aligned}$$

Definieer de uniform verdeelde proefopzet  $\underline{p}_{\text{un}} = (p_1, \dots, p_r)'$ , met  $p_j = 1/r$ ,  $j=1, \dots, r$ . Noem  $M^*(\underline{p}_{\text{un}})$  de informatiematrix zonder standaard-afwijkingen:

$$M^*(\underline{p}_{\text{un}}) = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r F(\underline{x}_j)F'(\underline{x}_j)$$

Daarmee wordt:

$$V(\underline{p}) = \text{tr}(M^{-1}(\underline{p})M^*(\underline{p}_{\text{un}}))$$

Biaskomponent van  $J^{**}$ .

$$W(\underline{x}_j) = F(\underline{x}_j)S^{-1}$$

$$M(\underline{p}) = \sum_{j=1}^r p_j W(\underline{x}_j)W'(\underline{x}_j)$$

Voer in de  $(rm, rm)$ -diagonaalmatrix  $P$ :

$$P = \text{diag}(\underbrace{p_1, \dots, p_1}_{m \text{ stuks}}, \dots, p_m, \dots, p_m)$$

Noem  $W = \begin{bmatrix} W'(\underline{x}_1) \\ \vdots \\ W'(\underline{x}_r) \end{bmatrix}$



Dan is  $M(\underline{p}) = W'PW$ .

Voor de schattingen van de parameters geldt:

$$\hat{\underline{b}} = M^{-1}(\underline{p})\underline{t},$$

met

$$\begin{aligned}\underline{t} &= \sum_{j=1}^r p_j F(\underline{x}_j) S^{-1} S^{-1} \underline{v}(\underline{x}_j) \\ &= \sum_{j=1}^r p_j W(\underline{x}_j) S^{-1} \underline{v}(\underline{x}_j)\end{aligned}$$

Voer in de (rm.rm)-diagonaalmatrix :

$$\tilde{S}^{-1} = \text{diag}(\hat{\sigma}_1^{-1}, \dots, \hat{\sigma}_m^{-1}, \dots, \hat{\sigma}_1^{-1}, \dots, \hat{\sigma}_m^{-1})$$

Dan is

$$\underline{t} = W'P\tilde{S}^{-1}\underline{y},$$

waarin

$$\underline{y} = \begin{bmatrix} \underline{v}(\underline{x}_1) \\ \vdots \\ \underline{v}(\underline{x}_r) \end{bmatrix}$$

Hiermee wordt

$$\hat{\underline{b}} = M^{-1}(\underline{p})W'P\tilde{S}^{-1}\underline{y}$$

Definieer

$$Q(\underline{p}) = M^{-1}(\underline{p})W'P\tilde{S}^{-1}$$

Dan is  $\hat{\underline{b}} = Q(\underline{p})\underline{y}$

Definieer:

$$X = \begin{bmatrix} F'(\underline{x}_1) \\ \vdots \\ F'(\underline{x}_r) \end{bmatrix}$$

Dan is

$$\hat{\underline{y}} = X\hat{\underline{b}} = XQ\underline{y}$$

en

$$E\hat{\underline{y}} = XQ \cdot E\underline{y} = XQ\underline{y}$$

Met

$$\underline{y} = X\underline{b} - \underline{z}$$

is

$$E\hat{\underline{y}} = XQX\underline{b} - XQ\underline{z} = X\underline{b} - XQ\underline{z}$$

want

$$QX = M^{-1}(\underline{p})W'P\tilde{S}^{-1}X = M^{-1}(\underline{p})W'PW = I_k$$

De biasterm wordt dan

$$\begin{aligned} B(\underline{p}, \underline{z}) &= n \cdot \frac{1}{r} \cdot (E\hat{\underline{y}} - \underline{y})' (E\hat{\underline{y}} - \underline{y}) \\ &= n \cdot \frac{1}{r} \cdot (X\underline{b} - XQ\underline{z} - X\underline{b} + \underline{z})' (X\underline{b} - XQ\underline{z} - X\underline{b} + \underline{z}) \\ &= n \cdot \frac{1}{r} \cdot \underline{z}' (I_{rm} - XQ)' (I_{rm} - XQ) \underline{z} \end{aligned}$$

Middelen over  $2^{rm}$  extremen, dan is

$$\sum_1^{2^{rm}} \underline{z}\underline{z}' = 2^{rm} \underline{z}_{\max}^2 I_{rm},$$

en wordt

$$2^{-rm} \cdot \sum_1^{2^{rm}} B(\underline{p}, \underline{z}) = \frac{n}{r} \cdot z_{\max}^2 \cdot \text{tr} \left\{ (XQ)' (XQ) - (XQ)' - (XQ) + I_{rm} \right\}$$

Omdat

$$\begin{aligned} \text{tr } XQ &= \text{tr}(XM^{-1}(\underline{p})W'P\tilde{S}^{-1}) = \text{tr}(M^{-1}(\underline{p})W'P\tilde{S}^{-1}X) \\ &= \text{tr}(M^{-1}(\underline{p})M(\underline{p})) = \text{tr } I_k = k \end{aligned}$$

volgt

$$2^{-rm} \cdot \sum_1^{2^{rm}} B(\underline{p}, \underline{z}) = nz_{\max}^2 \left\{ \text{tr}(QQ'M^*(\underline{p}_{\text{un}})) - 2k/r + m \right\}$$

Resumé:

Voor m afhankelijke variabelen is

$$J^{**}(\underline{p}) = V(\underline{p}) + nz_{\max}^2 B^{**}(\underline{p})$$

met

$$V(\underline{p}) = \text{tr}(M^{-1}(\underline{p})M^*(\underline{p}_{\text{un}}))$$

$$B^{**}(\underline{p}) = \text{tr}(QQ'M^*(\underline{p}_{\text{un}})) - 2k/r + m$$

Voor m=1 ontstaan de door Welch(1983) afgeleide uitdrukkingen.

### 2.5.7.1 Optimaliserings-algorithmen.

#### Diskrete proefopzetten.

Probleemstelling:

Minimaliseer  $J^{**}(\underline{p})$ , onder de voorwaarden:  
 $1_j \leq p_j \leq u_j$ ;  $p_j$  reëel;  $j=1, \dots, r$ ;  $\sum_1^r p_j = 1$ ;  $0 \leq 1_j \leq u_j \leq 1$

Tijdens iedere optimalisatie-slag worden 2 elementen van  $\underline{p}$  aangepast.

Algorithme:

1. Kies een initiële proefopzet  $\underline{p}^{(0)}$  die voldoet aan  $1_j \leq p_j \leq u_j$ ;  $\sum_1^r p_j = 1$ , en waarvan  $M(\underline{p}^{(0)})$  regulier is.

2. Bereken de  $r$  gradiënten (zie appendix B)

$$g_j(\underline{p}^{(0)}) = \left[ \frac{d}{d\alpha} J^{**}(\underline{p}^{(0)} + \alpha \underline{\delta}_j) \right]_{\alpha=0}, \quad j=1, \dots, r$$

van  $\underline{p}^{(0)}$  in de richting van de eenheidsvectoren  $\underline{\delta}_j$

3. Bepaal de indices  $h$  en  $i$  waarvoor

$$g_h(\underline{p}^{(0)}) = \min_j g_j(\underline{p}^{(0)}) \text{ over } j=1, \dots, r \text{ en } p_j < u_j$$

$$g_i(\underline{p}^{(0)}) = \max_j g_j(\underline{p}^{(0)}) \text{ over } j=1, \dots, r \text{ en } p_j > 1_j$$

4. Vorm de nieuwe proefopzet  $\underline{p}^{(1)} = \underline{p}^{(0)} + \alpha(\underline{\delta}_h - \underline{\delta}_i)$  en bepaal  $\alpha$  zodanig dat  $J^{**}(\underline{p}^{(1)})$  minimaal is, waarbij  $\alpha$  moet voldoen aan

$$0 \leq \alpha \leq \min(u_h - p_h^{(0)}, p_i^{(0)} - 1_i)$$

Steeds geldt  $J^{**}(\underline{p}^{(1)}) \leq J^{**}(\underline{p}^{(0)})$

5. Herhaal 2-4 door  $\underline{p}^{(0)}$  te vervangen door  $\underline{p}^{(1)}$  en ga door totdat

$$J^{**}(\underline{p}^{(s)}) \leq (1 + \text{eps}) J^{**}_{1b}(\underline{p}^{(s)}),$$

waarin  $\text{eps}$  b.v. 0.001 en  $J^{**}_{1b}$  een benaderde ondergrens is voor de limiet-waarde van  $J^{**}$  volgens

dergrens is voor de limiet-waarde van  $J^{**}$  volgens

$$J^{**}_{1b}(\underline{p}^{(s)}) = J^{**}(\underline{p}^{(s)}) + \min_{\underline{p}'} \sum_{j=1}^r p'_j \{V(\underline{p}^{(s)}) + \varepsilon_j(\underline{p}^{(s)})\}$$

met  $\underline{p}'$  een ontwerp dat voldoet aan

$$1_j \leq p'_j \leq u_j, \quad \sum_{j=1}^r p'_j = 1$$

Het blijkt dat het algorithm steeds convergeert naar eenzelfde optimale waarde voor  $J^{**}$ , ongeacht de keuze van de initiële proefopzet.

### Exakte proefopzetten.

Probleemstelling:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Minimaliseer } J^{**}(\underline{p}_n), \text{ onder de voorwaarden:} \\ 1_j \leq p_j \leq u_j; \quad p_j = n_j/n; \quad n_j \text{ een integer; } j=1, \dots, r \\ \sum_1^r p_j = 1; \quad 0 \leq 1_j \leq u_j \leq 1 \end{array} \right.$$

Omdat het algorithm kan konvergeren naar een lokaal optimum wordt het excursie-algorithm toegepast. Gestart wordt met een initiële proefopzet bestaande uit  $n$  random uit de kandidatenlijst gekozen punten. Via een serie excursies wordt geprobeerd de proefopzet te verbeteren. Als tijdens zo'n excursie op een bepaald moment de proefopzet bestaat uit b.v.  $\tilde{n}$  punten, dan wordt het punt  $\underline{x}_j$  zo gekozen dat

$$(\tilde{n}+1)n^{-1}V(\underline{p}_{\tilde{n}+n}^{-1}\underline{\zeta}_j) + n\underset{\max}{z}^2 B^{**}(\underline{p}_{\tilde{n}+n}^{-1}\underline{\zeta}_j)$$

minimaal is, waarbij  $V$  genormeerd wordt, omdat na de verandering geldt  $\sum p_j = (\tilde{n}+1)/n$

### 2.5.7.2

#### Gegeneraliseerde update-formules.

Als een proefopzet  $\underline{p}$  wordt vervangen door een

nieuwe proefopzet  $\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j$ , dan dienen de variantiekomponent, de biaskomponent en de gradiënten van de nieuwe proefopzet te worden berekend. Dat kan gebeuren door ze opnieuw uit te rekenen, of door update-formules te hanteren.

Het blijkt mogelijk update-formules af te leiden die een generalisatie vormen van de formules die Welch voor  $m=1$  afleidde. Appendix B bevat deze update-formules. De hoeveelheid rekenwerk die deze update-formules vergen is echter groot tot zeer groot. Door eerst de covariantie-matrix opnieuw te berekenen en die vervolgens te substitueren in de uitdrukkingen voor variantie, bias en gradiënten, kan het vereiste rekenwerk toch binnen redelijke grenzen worden gehouden.

De nieuwe covariantie-matrix kan i.p.v. met zijn update-formule ook worden berekend door de QR-decompositie van de ontwerpmatrix  $X$  te updaten met behulp van Givens-transformaties en vervolgens de nieuwe  $R$  te inverteren. Dat vergt minder rekentijd en blijkt in de praktijk goed te voldoen, ondanks het feit dat het elimineren van een rij van de ontwerpmatrix met Givens-transformaties potentieel instabiel is.

#### 2.5.8 Branch & bound algorithm.

Met dit algorithm kunnen D-optimale exakte proefopzetten worden gegenereerd (Welch, 1982).

Met  $n$  punten in de proefopzet en  $r$  kandidaatpunten is het mogelijk in totaal  $\binom{r+n-1}{n}$  proefopzetten te vormen (trekken met terugleggen). Een mogelijkheid om de D-optimale proefopzet te bepalen is eenvoudigweg alle  $\binom{r+n-1}{n}$  determinanten  $\det M(\underline{p}_n)$  met elkaar te vergelijken. De D-optimale proefopzet, zeg  $\underline{p}_n^*$ , bezit de grootste determinant. Naarmate  $n$  en  $r$  groter

worden, lopen de rekentijden hierbij sterk op.

Het branch & bound algoritme is een variant hierop. Het algoritme creëert een binaire vertakkingsstructuur van maximaliseringsproblemen. Daarbij wordt telkens een max. probleem, met constraints  $\underline{l}=(l_1, \dots, l_r)'$  en  $\underline{u}=(u_1, \dots, u_r)'$ , gepartitioneerd in 2 nieuwe. We kiezen daartoe een punt  $x_j$ , en verdelen het gebied, begrensd door  $l_j$ , en  $u_j$ , in tweeën.

Het blijkt mogelijk te zijn voor een max. probleem een bovengrens te bepalen voor  $\det M(\underline{p}_n^*)$ , met  $\underline{p}_n^*$  de voor dit max. probleem D -optimale proefopzet. Alle overige, door de constraints toegelaten proefopzetten, bezitten een kleinere determinant.

Stel  $D_{\max}$  de grootste, in een bepaalde fase bekende waarde voor de determinant en  $(\underline{p}_n)_{\max}$  de bijbehorende proefopzet, dus  $D_{\max} = \det M(\underline{p}_n)_{\max}$ . Als voor de bovengrens, zeg  $b(\underline{l}, \underline{u})$ , geldt  $b(\underline{l}, \underline{u}) < D_{\max}$ , dan hoeven deze toegelaten proefopzetten niet te worden gegenereerd en geëvalueerd.

### Vertakkingsprocedure.

Uitgangspunt is het volgende maximaliseringsprobleem:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{maximaliseer } \det M(\underline{p}_n) \text{ , onder de voorwaarden} \\ l_j \leq p_j \leq u_j, \quad p_j = n_j/n, \quad n_j \text{ een integer,} \\ 0 \leq l_j \leq u_j \leq 1 \quad (j=1, \dots, r) \quad \sum_1^r p_j = 1 \end{array} \right.$$

Tijdens een partitionering kunnen 2 situaties optreden.

Of

1. de constraints vormen een n-punt proefopzet; splitsing is dan niet meer mogelijk en het max. probleem is opgelost, òf
2. de constraints staan een splitsing toe. Daartoe

selektieren we een punt  $\underline{x}_{j'}$ , ( $1 \leq j' \leq r$ ) waarvan de constraints  $l_{j'}$  en  $u_{j'}$  een splitsing toelaten en kiezen een integer  $n_0$  zodanig dat

$$1 + l_{j',n} \leq n_0 \leq u_{j',n}$$

Hiermee zijn 2 nieuwe max. problemen te vormen: beide bezitten in de punten  $\underline{x}_j$ ,  $j=1, \dots, r$ ,  $j \neq j'$  dezelfde constraints; voor  $j'$  bezit het ene als constraints  $l_{j'}^{(1)} = l_{j'}$  en  $u_{j'}^{(1)} = (n_0 - 1)n^{-1}$  en het andere  $l_{j'}^{(2)} = n_0 n^{-1}$  en  $u_{j'}^{(2)} = u_{j'}$ ,

Beide max. problemen kunnen ieder weer gesplitst worden in 2 nieuwe max. problemen etc. Aldus ontstaat een binaire vertakkingsstructuur met aan de uiteinden de  $\binom{r+n-1}{n}$  n-punt proefopzetten.

#### 1e bovengrens

Noem  $n' = n \sum_{j=1}^r l_j$  het aantal punten aangewezen door  $\underline{l}$ . Een proefopzet  $\underline{p}_n$  bestaat dan uit de  $n'$  punten aangewezen door  $\underline{l}$  en  $(n - n')$  willekeurig gekozen, maar wel door  $\underline{u}$  toegelaten punten  $\underline{x}_i$  ( $i = n'+1, \dots, n$ ). Definieer

$$M(\underline{l}) = \sum_{j=1}^r l_j W(\underline{x}_j) W'(\underline{x}_j),$$

$$D(\underline{x}_j, \underline{l}) = W'(\underline{x}_j) M^{-1}(\underline{l}) W(\underline{x}_j),$$

$$F = \left[ W(\underline{x}_{n'+1}), \dots, W(\underline{x}_n) \right]$$

Dan is  $\det M(\underline{p}_n) = \det ( M(\underline{l}) + n^{-1} F F' )$ . Met Hadamard's ongelijkheid voor een positief-definiete (k.k)-matrix A:



$$\det A \leq \prod_{i=1}^k A_{ii}$$

en lemma 2.5.1, Fedorov, 1972, volgt

$$\begin{aligned} \det M(\underline{p}_n) &\leq \det(M(\underline{1})) \det\left\{\mathbb{I}_{m(n-n')} + n^{-1}F'M(\underline{1})F\right\} \\ &\leq \det(M(\underline{1})) \prod_{i=n'+1}^n \prod_{j=1}^m \left\{1 + n^{-1}D_{jj}(\underline{x}_i, \underline{1})\right\} \\ &\leq \det(M(\underline{1})) \left\{1 + n^{-1} \bar{d}(\underline{1})\right\}^{m(n-n')} \end{aligned}$$

$$\text{met } \bar{d}(\underline{1}) = \max_{\substack{j=1, \dots, m \\ i=1, \dots, r \\ l_i < u_i}} [D_{jj}(\underline{x}_i, \underline{1})]$$

De uitdrukking in het rechterlid is een bovengrens, zeg  $b_1(\underline{1}, \underline{u})$  voor de determinant van de D -optimale proefopzet. Als  $b_1(\underline{1}, \underline{u}) < D_{\max}$  wordt het partitioneringsproces voor het beschouwde maximaliseringsprobleem niet opgestart: alle n-punt proefopzetten die, uitgaande van dit max. probleem door partitionering kunnen worden gegenereerd, bezitten een kleinere determinant. Het algoritme stapt over op een ander max. probleem.

$b_1(\underline{1}, \underline{u})$  vergt weinig rekentijd, maar is een vrij grove schatting. Als  $b_1(\underline{1}, \underline{u}) \gg D_{\max}$  berekenen we daarom een 2e, fijnere bovengrens, die echter aanmerkelijk meer rekentijd vraagt.

### 2e bovengrens.

Voor het bovenstaande max. probleem laten we de eis vallen dat  $n_j$  een integer moet zijn. We zoeken nu voor dit nieuwe max. probleem zijn D-optimale, diskrete proefopzet  $\underline{p}^*$ .

Omdat  $\det M(\underline{p}^*) \geq \det M(\underline{p}_n^*)$ , met  $\underline{p}_n^*$  de D-optimale exakte proefopzet, is  $\det M(\underline{p}^*)$  een goede benadering voor de bovengrens, dus  $b_2(\underline{l}, \underline{u}) \approx \det M(\underline{p}^*)$ .

We bepalen  $\underline{p}^*$  door, uitgaande van een initiële proefopzet  $\underline{p}^{(0)}$ , die voldoet aan de constraints en waarvan  $M(\underline{p}^{(0)})$  regulier is, een serie proefopzettingen  $\underline{p}^{(s)}$ ,  $s=1, \dots$  te genereren, waarvoor telkens geldt:

$$\det M(\underline{p}^{(s)}) > \det M(\underline{p}^{(s-1)})$$

Paragraaf 2.5.4 beschrijft hoe zo'n serie kan worden genereerd.

Als  $\det M(\underline{p}^{(s)}) < D^*$  dan bepalen we, vòòr de volgende optimalisatie-slag  $s+1$ , eerst een bovengrens voor  $b_2(\underline{l}, \underline{u})$ . Er geldt (Welch, 1982):

$$b_2(\underline{l}, \underline{u}) < \det(M(\underline{p}^{(s)})) \cdot \exp(d_{\max} - k),$$

waarin

$$d_{\max} = \max_{\underline{p}'} \sum_{j=1}^r p'_j \operatorname{tr} D(\underline{x}_j, \underline{p}^{(s)})$$

en  $\underline{p}'$  gekozen volgens Welch, 1982, pag 44.

Als

$$\det(M(\underline{p}^{(s)})) \cdot \exp(d_{\max} - k) \geq D^*$$

wordt vervolgd met optimalisatie-slag  $s+1$ .

Als

$$\det(M(\underline{p}^{(s)})) \cdot \exp(d_{\max} - k) < D^*$$

dan geldt zeker dat  $b_2(\underline{l}, \underline{u}) < D^*$  en wordt verdere behandeling van het maximaliseringsprobleem gestaakt.

Hoofdstuk 3. Modelaanpassing, selectie van variabelen.

3.1

Gewogen kleinste kwadraten schattingen.

We willen het verband bepalen tussen een afhankelijke variabele  $y$  en  $v$  onafhankelijke variabelen  $x_1, \dots, x_v$ . We zullen veronderstellen dat het mogelijk is ook waarnemingen te bepalen van de partiële afgeleiden van  $y$  naar de onafhankelijke variabelen. De partiële afgeleiden worden beschouwd als afhankelijke variabelen. Hun modellen ontstaan door differentiëren van de modelfuncties van  $y$ . In totaal bestaan er dan  $m=v+1$  afhankelijke variabelen:

$$y, \frac{\partial y}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial y}{\partial x_v}$$

Als steekproefmodel wordt gekozen:

$$\underline{y}(\underline{x}_i) = F'(\underline{x}_i)\underline{b} + \underline{e}_i, \quad i=1, \dots, n \quad (3.1.1)$$

waarin

$n$  = het aantal waarnemingen per afhankelijke variabele,

$\underline{y}(\underline{x}_i)$  = een  $m$ -vector met waarnemingen in  $\underline{x}_i$ ,

$$= ( y(\underline{x}_i) \quad \frac{\partial y}{\partial x_1}(\underline{x}_i) \quad \dots \quad \frac{\partial y}{\partial x_v}(\underline{x}_i) )'$$

$\underline{e}_i$  = een  $m$ -vector met toevallige afwijkingen in  $\underline{x}_i$ ,

$$F(\underline{x}_i) = \left[ \begin{array}{c} f(\underline{x}_i) \quad \frac{\partial}{\partial x_1}(f(\underline{x}_i)) \quad \dots \quad \frac{\partial}{\partial x_v}(f(\underline{x}_i)) \end{array} \right]$$

$\underline{f}(\underline{x}_i)$  = de  $k$ -vector met modelfuncties,

$$= ( 1 \quad f_1(\underline{x}_i) \quad \dots \quad f_p(\underline{x}_i) )', \quad \text{met } p=k-1,$$

$\underline{b}$  = de  $k$ -vector met te schatten parameters

$$= ( b_0 \quad b_1 \quad \dots \quad b_p )'$$

Aangenomen wordt dat de elementen van  $\underline{e}_i$  ongekorreleerd zijn met verwachte waarde gelijk aan nul en bekende, konstante variantie  $\sigma_i^2$ . Bovendien wordt verondersteld dat  $\underline{e}_i$  en  $\underline{e}_j$  ongekorreleerd zijn als  $i \neq j$ .

$$E(\underline{e}_i) = 0; E(\underline{e}_i \underline{e}_i') = S^2 \text{ als } j=i; E(\underline{e}_i \underline{e}_j') = \emptyset \text{ als } j \neq i$$

waarin  $\emptyset$  de nulmatrix voorstelt en  
 $S = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_m)$  een (m.m) diagonaalmatrix.

Indien  $\sigma_1 = \sigma_2 = \dots = \sigma_m$  volgen schattingen voor  $\underline{b}$  uit

$$\hat{\underline{b}} = \left[ \sum_{i=1}^n F(\underline{x}_i) F'(\underline{x}_i) \right]^{-1} \sum_{i=1}^n F(\underline{x}_i) \underline{y}(\underline{x}_i)$$

Indien de varianties in de toevallige afwijkingen  $\sigma_i^2$ ,  $i=1, \dots, m$  ongelijk zijn, dienen de schattingen voor  $\underline{b}$  bepaald te worden na weging van (3.1.1): vòdrvermenigvuldiging van (3.1.1) met  $S^{-1} = \text{diag}(\sigma_1^{-1}, \dots, \sigma_m^{-1})$  levert

$$\underline{w}(\underline{x}_i) = W'(\underline{x}_i) \underline{b} + \underline{\eta}_i, \quad i=1, \dots, n \quad (3.1.2)$$

$$\text{waarin } \underline{w}(\underline{x}_i) = S^{-1} \underline{y}(\underline{x}_i), \quad W'(\underline{x}_i) = S^{-1} F'(\underline{x}_i) \text{ en } \underline{\eta}_i = S^{-1} \underline{e}_i$$

De toevallige afwijkingen  $\underline{\eta}_i$ ,  $i=1, \dots, n$  bezitten een verwachte waarde gelijk aan nul:

$$E(\underline{\eta}_i) = S^{-1} E(\underline{e}_i) = \underline{0},$$

de variantie-covariantiematrix van de toevallige afwijkingen wordt nu gelijk aan de eenheidsmatrix:

$$E(\underline{\eta}_i \underline{\eta}_i') = E(S^{-1} \underline{e}_i \underline{e}_i' S^{-1}) = S^{-1} E(\underline{e}_i \underline{e}_i') S^{-1} = S^{-1} S S^{-1} = I$$

Schattingen voor  $\underline{b}$  kunnen bepaald worden m.b.v. de kleinste kwadraten methode toegepast op (3.1.2):

$$\hat{\underline{b}}_{-w} = \left[ \sum_{i=1}^n W(\underline{x}_i) W'(\underline{x}_i) \right]^{-1} \sum_{i=1}^n W(\underline{x}_i) \underline{w}(\underline{x}_i) \quad (3.1.3)$$

Deze, gewogen schattingen zijn zuivere schattingen voor  $\underline{b}$  omdat

$$\begin{aligned} E(\hat{\underline{b}}_{-w}) &= \left[ \sum_{i=1}^n W(\underline{x}_i) W'(\underline{x}_i) \right]^{-1} \sum_{i=1}^n W(\underline{x}_i) E \underline{w}(\underline{x}_i) \\ &= \left[ \sum_{i=1}^n W(\underline{x}_i) W'(\underline{x}_i) \right]^{-1} \sum_{i=1}^n W(\underline{x}_i) W'(\underline{x}_i) \cdot \underline{b} = \underline{b} \end{aligned}$$

Voor de variantie-covariantiematrix van deze gewogen schattingen ontstaat

$$\begin{aligned} \text{var } \hat{\underline{b}}_{-w} &= E(\hat{\underline{b}}_{-w} - \underline{b})(\hat{\underline{b}}_{-w} - \underline{b})' \\ &= n \cdot M^{-1} \sum_{i=1}^n W(\underline{x}_i) \cdot E(\underline{\eta}_i \underline{\eta}_i') \cdot W'(\underline{x}_i) \cdot n \cdot M^{-1} = n \cdot M^{-1} \end{aligned}$$

waarin M de (gewogen) informatiematrix:

$$M = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n W(\underline{x}_i) W'(\underline{x}_i)$$

Ongewogen schattingen voor  $\underline{b}$ , rechtstreeks uit (3.1.1) bepaald:

$$\hat{\underline{b}}_0 = \left[ \sum_{i=1}^n F(\underline{x}_i) F'(\underline{x}_i) \right]^{-1} \sum_{i=1}^n F(\underline{x}_i) \underline{y}(\underline{x}_i)$$

zijn wel zuiver, dat is,  $E(\hat{\underline{b}}_0) = \underline{b}$ , voor de variantie-covariantiematrix van  $\hat{\underline{b}}_0$  ontstaat echter:

$$\text{var } \hat{\underline{b}}_0 = \left[ \sum_{i=1}^n F(\underline{x}_i) F'(\underline{x}_i) \right]^{-1} \sum_{i=1}^n F(\underline{x}_i) S^2 F'(\underline{x}_i) \cdot \left[ \sum_{i=1}^n F(\underline{x}_i) F'(\underline{x}_i) \right]^{-1}$$

Als geldt  $S = I$ , dan is  $\text{var } \hat{\underline{b}}_0 = \text{var } \hat{\underline{b}}_w$ . Als echter  $S \neq I$  dan is  $\text{var } \hat{\underline{b}}_0 > \text{var } \hat{\underline{b}}_w$  d.w.z.  $\text{var } \hat{\underline{b}}_0 - \text{var } \hat{\underline{b}}_w$  is een positief-definiëte matrix. De gewogen kleinste kwadrate schattingen voor  $\underline{b}$  leveren dus schattingen op met een kleinere variantie.

3.2

### Centrering.

Stel  $z_i = f_i(\underline{x})$ , dan wordt het regressiemodel:

$$y = b_0 + b_1 z_1 + \dots + b_p z_p + e,$$

en de partiële afgeleiden:

$$\frac{\partial y}{\partial x_i} = 0 + b_1 \frac{\partial z_1}{\partial x_i} + \dots + b_p \frac{\partial z_p}{\partial x_i} + e, \quad i=1, \dots, v$$

Definieer de gemiddelden:

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n y(\underline{x}_l)$$

$$\bar{z}_i = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n f_i(\underline{x}_l)$$

$$\frac{\partial \bar{z}_i}{\partial x_j} = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} (f_i(\underline{x}_l))$$

Dan is het regressiemodel te schrijven als:

$$y - \bar{y} = \sum_{j=1}^p b_j (z_j - \bar{z}_j) + e$$

en de partiële afgeleiden:

$$\frac{\partial y}{\partial x_i} - \frac{\bar{\partial y}}{\bar{\partial x}_i} = \sum_{j=1}^p b_j \left( \frac{\partial z_j}{\partial x_i} - \frac{\bar{\partial z}_j}{\bar{\partial x}_i} \right) + e, \quad i=1, \dots, v$$

Bij centrering worden dus dezelfde parameters geschat.

Na het schatten van  $b_1, \dots, b_p$  volgt  $b_0$  uit:

$$\hat{b}_0 = \bar{y} - \sum_{j=1}^p \hat{b}_j \bar{z}_j$$

Het voordeel van centreren is dat het stelsel normaalvergelijkingen, waaruit de schattingen worden opgelost, beter gekonditioneerd is.

Centrering is hier standaard omdat bij de selectie van de regressievariabelen  $z_1, \dots, z_p$  de veegprocedure van Efroymsen wordt gebruikt. Deze procedure maakt gebruik van de korrelatiematrix, dat is de matrix die de korrelaties tussen de regressievariabelen aangeeft en werkt dus met ge-centreerde regressievariabelen en waarnemingen.

### 3.3 Selektie van variabelen.

Voor selektie van regressievariabelen is een aantal redenen aan te voeren:

1. We willen het model graag zo klein mogelijk houden.
2. Omdat vooraf niet goed bekend is welke variabelen van invloed zijn, worden vaak zoveel mogelijk variabelen meegenomen "om vooral niets te missen". Niet-signifikante variabelen verklaren echter weinig of niets maar vergroten wel de steekproefvariantie in de schattingen (het aantal vrijheidsgraden is kleiner dan nodig). Het kan nuttig zijn ook die variabelen uit het model te verwijderen die nog enigszins significant zijn. De steekproefvariantie kan hierdoor sterker afnemen via vergroting van het aantal vrijheidsgraden dan de systematische variantie toeneemt, zodat per saldo de totale variantie afneemt.

#### 3.3.1 Selektieprocedures.

Het programma CADE maakt gebruik van de veegprocedure van Efroymsen(1960). Het is een stapsgewijze regressieprocedure die in het programma uitgebreid is met een achterwaartse eliminatieprocedure en een voorwaartse selektieprocedure. Voor een beschrijving van deze procedures wil ik volstaan met een verwijzing naar Doornbos(1984) en Draper & Smith(1981).



3.3.2 Weging bij de selektieprocedures.

In paragraaf 3.1 is verondersteld dat  $S = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_m)$  bekend is. In dat geval kunnen de selektieprocedures worden toegepast op (3.1.2). Indien  $S$  onbekend is, kunnen schattingen voor  $S$  en  $\underline{b}$  worden verkregen m.b.v. de volgende iteratieve procedure:

Stap 1: Bereken initiële kleinste kwadraten schattingen voor model (3.1.1) volgens

$$\hat{\underline{b}}_0 = \left[ \sum_{i=1}^n F(\underline{x}_i) F'(\underline{x}_i) \right]^{-1} \sum_{i=1}^n F(\underline{x}_i) y(\underline{x}_i)$$

Stap 2: Bereken initiële schattingen voor de varianties in de toevallige afwijkingen van het ongewogen model (3.1.1) volgens

$$\hat{\sigma}_{j_0}^2 = \frac{1}{n-k} \sum_{i=1}^n \left[ y_j(\underline{x}_i) - \hat{y}_{j_0}(\underline{x}_i) \right]^2, \quad j=1, \dots, m$$

$$\text{met } \hat{y}_{j_0}(\underline{x}_i) = \underline{f}'(\underline{x}_i) \hat{\underline{b}}_0, \quad i=1, \dots, n$$

$$\text{en vorm } \hat{S}_0 = \text{diag}(\hat{\sigma}_{1_0}, \dots, \hat{\sigma}_{m_0})$$

Stap 3: Voòrvermenigvuldiging van (3.1.1) met  $\hat{S}_0^{-1}$  levert

$$\underline{w}_1(\underline{x}_i) = W_1'(\underline{x}_i) \underline{b} + \underline{\eta}_1(\underline{x}_i), \quad i=1, \dots, n \quad (3.3.2.1)$$

Stap 4: Bereken kleinste kwadraten schattingen voor (3.3.2.1) volgens

$$\hat{\underline{b}}_1 = \left[ \sum_{i=1}^n W(\underline{x}_i) W'(\underline{x}_i) \right]^{-1} \sum_{i=1}^n W(\underline{x}_i) \underline{w}_1(\underline{x}_i)$$

Voor  $\hat{\underline{b}}_1$  zal dan gelden:  $\text{var } \hat{\underline{b}}_1 < \text{var } \hat{\underline{b}}_0$ .

**Stap 5:** Bereken nieuwe schattingen voor de varianties in de toevallige afwijkingen van het ongewogen model (3.1.1) volgens

$$\hat{\sigma}_{j_1}^2 = \frac{1}{n-k} \sum_{i=1}^n \left[ y_j(\underline{x}_i) - \hat{y}_{j_1}(\underline{x}_i) \right]^2,$$

$$\text{met } \hat{y}_{j_1}(\underline{x}_i) = \underline{f}'_j(\underline{x}_i) \hat{\underline{b}}_1, \quad i=1, \dots, n$$

voor  $j=1, \dots, m$  en vorm

$$\hat{S}_1 = \text{diag}(\hat{\sigma}_{1_1}, \dots, \hat{\sigma}_{m_1})$$

Herhaal de stappen 3 t/m 5 met  $\hat{S}_1$  i.p.v.  $\hat{S}_0$ , vervolgens met  $\hat{S}_2$  i.p.v.  $\hat{S}_1$  enzovoort, tot dat

$$\|\hat{\underline{b}}_i - \hat{\underline{b}}_{i-1}\| < \text{eps} \|\hat{\underline{b}}_i\|, \text{ waarin}$$

eps de relatieve machineprecisie voorstelt.

Deze iteratieve procedure maakt het mogelijk voor de parameterschatting in de stappen 1 en 4 gebruik te maken van bovengenoemde selectieprocedures.

3.4

Iteratieve verfijning.

De parameters worden bij de methode van Efroymsen geschat met gebruikmaking van de korrelatiematrix, de genormaliseerde versie van  $X'X$ . Hierbij treedt kwadratering van het konditiegetal op. Ten behoeve van een nauwkeurige schatting van de significante parameters worden die na afloop van de selectieprocedures opnieuw geschat, maar nu via een QR-dekompositie van  $[X;y]$  m.b.v. Givens-transformaties.

De QR-dekompositie levert een rechtsbovenmatrix  $R$  op zodanig dat  $X'X = R'R$  en een vector  $\underline{c}$  zodanig dat  $R\hat{\underline{b}} = \underline{c}$ .  $\hat{\underline{b}}$  kan hieruit eenvoudig worden opgelost door terugsubstitutie. De schattingen  $\hat{\underline{b}}$  kunnen nog verder verbeterd worden m.b.v. een iteratieve verfijningsprocedure (Seber, 1977).

Er geldt  $\underline{e} = \underline{y} - X\hat{\underline{b}}$  en  $X'\underline{e} = \underline{0}$ , dus

$$\begin{bmatrix} I_{mn} & X \\ X' & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \underline{e} \\ \hat{\underline{b}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{y} \\ \underline{0} \end{bmatrix}, \text{ ofwel}$$

$$A \cdot \underline{v} = \underline{u}$$

Omdat  $X'X = R'R$  is  $A$  te schrijven als:

$$A = \begin{bmatrix} I_{nm} & 0 \\ X' & R' \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I_{nm} & X \\ 0 & -R \end{bmatrix} = L \cdot U$$

Stel  $\hat{\underline{b}}(0) = \hat{\underline{b}}$ ,  $\underline{e}(0) = \underline{e}$  en  $\underline{v}(0) = \begin{bmatrix} \underline{e}(0) \\ \hat{\underline{b}}(0) \end{bmatrix}$

Bij het oplossen van  $\hat{\underline{b}}$  uit  $R\hat{\underline{b}} = \underline{c}$  kunnen afrondfouten optreden. In dat geval is:

$$A \underline{v}^{(0)} \neq \underline{u}$$

Dus

$$\underline{h}^{(0)} = \underline{u} - A \underline{v}^{(0)} \neq \underline{0}$$

Voor een betere benadering  $\underline{v}^{(1)}$  zou moeten gelden:

$$A \underline{v}^{(1)} = \underline{u},$$

dus

$$A(\underline{v}^{(1)} - \underline{v}^{(0)}) = A \underline{d}^{(0)} = \underline{h}^{(0)}$$

Hieruit is  $\underline{d}^{(0)}$  oplosbaar en vormt

$$\underline{v}^{(1)} = \underline{v}^{(0)} + \underline{d}^{(0)}$$

een betere benadering. Omdat  $\underline{d}^{(0)}$  een benadering is, kan het proces herhaald worden. Een voordeel is dat steeds dezelfde R gebruikt kan worden.

Zo ontstaat de volgende iteratieve procedure:

1. Bereken  $\underline{h}^{(i)} = \underline{u} - A \underline{v}^{(i)}$
2. Los op  $\underline{d}^{(i)}$  uit  $A \underline{d}^{(i)} = \underline{h}^{(i)}$  via  $L \underline{w}^{(i)} = \underline{h}^{(i)}$  en  $U \underline{d}^{(i)} = \underline{w}^{(i)}$
3. Bereken  $\underline{v}^{(i+1)} = \underline{v}^{(i)} + \underline{d}^{(i)}$
4. Herhaal 1-3 totdat aan de kondities

$$i. \quad \|\Delta \underline{b}^{(i)}\| \geq 0.125 \|\Delta \underline{b}^{(i-1)}\| \quad \text{of} \quad \|\Delta \underline{b}^{(i)}\| \leq \eta \|\underline{b}^{(1)}\|$$

$$ii. \quad \|\Delta \underline{e}^{(i)}\| \geq 0.125 \|\Delta \underline{e}^{(i-1)}\| \quad \text{of} \quad \|\Delta \underline{e}^{(i)}\| \leq \eta \|\underline{e}^{(1)}\|$$

gelijktijdig wordt voldaan.

Hierin is  $\eta$  de relatieve machine-nauwkeurigheid.

Als na afloop

$$\|\Delta \underline{b}^{(i)}\| > 2\eta \|\underline{b}^{(1)}\| \quad \text{èn} \quad \|\Delta \underline{e}^{(i)}\| > 2\eta \|\underline{e}^{(1)}\|$$

dan is de ontwerpmatrix X te slecht gekonditioneerd.

(Zie ook Björck (1967) ).

Hoofdstuk 4 CADE - een overzicht van de mogelijkheden.

CADE bevat 3 programmaonderdelen:

1. Modelinvoer
2. Proefopzetten
3. Modelaanpassing

Gebruikersvriendelijkheid is nagestreefd door:

1. Menu-besturing
2. Commando-file-besturing
3. Log-file van een sessie
4. Data-file voor opslag van gegevens
5. Ontbreken van gebruikersroutines

4.1 Toepassingsgebied.

CADE is geschikt voor elk soort experiment, fysisch of numeriek, waarbij modelvorming een rol speelt.

4.2 Modelinvoer.

Uitgebreide faciliteiten voor de invoer van:

1. Polynoommodellen
2. Lineaire modellen, bestaande uit
  - cyclometrische funkties
  - arcus funkties
  - algebraïsche funkties zoals log, ln, e-macht, wortel, hyperbool, machten, etc.

4.3 Proefopzetten.

4.3.1 Werkwijze.

1. Definieer de ontwerpvariabelen.
2. Baken het gebied af waarbinnen de ontwerpvariabelen gevarieerd mogen worden: de ontwerpruimte.

3. Kies aantal en waarden voor de nivo's waarop de ontwerpvariabelen ingesteld mogen worden.
4. Vorm hiermee een aantal instelkombinaties: de kandidaatpunten (diskretisatie van de ontwerpruimte), bv. een volledige proefopzet. Uit deze lijst van kandidaatpunten zal het programma er een aantal kiezen: de proefopzet.
5. Specificeer een regressiemodel.
6. Geef de gewenste grootte van de proefopzet op.
7. Kies een algoritme en een criterium.

De criteria zijn zó gekozen dat de optimalisatie een minimaliseringsprobleem vormt. Het programma vormt een initiële proefopzet van random uit de kandidatenlijst gekozen punten. Vervolgens wordt door het algoritme afwisselend:

- a. dát punt in de proefopzet opgenomen, waarvoor de grootste reductie van het criterium wordt verkregen, en
- b. dát punt uit de proefopzet verwijderd dat bij verwijdering aanleiding geeft tot de kleinste toename van het criterium.

Aldus wordt een proefopzet gegenereerd waarvoor het criterium m.b.t. het gespecificeerde model een minimale waarde bezit.

De keuze van het model is hier van groot belang. Hoe beter het gekozen model de (later te bepalen) waarnemingen verklaart, hoe beter de proefopzet en hoe groter de voorspelkracht van het regressiemodel.

Het model zou gekozen kunnen worden op grond van:

- a. oriënterende metingen, berekeningen of
- b. een analyse na schematisering van het probleem.

#### 4.3.2 Optimaliserings-kriteria.

Beschikbaar zijn het

1. D-kriterium.

Een proefopzet heet D-optimaal als de determinant van de covariantiematrix minimaal is.

Gebruikte codering in het programma: DO

2. G-kriterium.

Een proefopzet heet G-optimaal als de maximale steekproefvariantie van de respons-schattingen in de kandidaatpunten minimaal is.

Gebruikte codering in het programma: MV

3. V-kriterium.

Een proefopzet heet V-optimaal als de gemiddelde steekproefvariantie van de respons-schattingen in de kandidaatpunten minimaal is.

Gebruikte codering in het programma: AV

4. J-kriterium.

Een proefopzet heet J-optimaal als de gemiddelde som van steekproefvariantie en systematische variantie ( de restkwadraten-som ) van de respons-schattingen in de kandidaatpunten minimaal is.

Gebruikte codering in het programma: AM

#### 4.3.3 Optimaliserings-algorithmen.

Beschikbaar zijn het

1. Excursie-algorithme.

Te gebruiken in combinatie met het D-, G-, V- of J-kriterium.

Genereert exakte proefopzetten.



2. Branch & Bound-algorithme.

Te gebruiken in combinatie met het D-kriterium.

Genereert exakte proefopzetten.

3. Approximate-algorithme.

Te gebruiken in combinatie met het D-, V- of J-kriterium.

Genereert diskrete proefopzetten.

4. Null-algorithme.

Dit algorithme biedt de gebruiker de mogelijkheid van een door hem gespecificeerde proefopzet een aantal karakteristieke eigenschappen te bepalen.

Gebruikte codering in het programma: NU

Als karakteristieke eigenschappen worden berekend:

a. Van de covariantiematrix:

- de determinant: DO-waarde
- de maximale eigenwaarde
- het konditiegetal
- de korrelatie-koëfficiënten-matrix  
( afhankelijkheid tussen parameterschattingen )

b. De gemiddelde steekproefvariantie: AV-waarde

c. De maximale steekproefvariantie: MV-waarde

d. De gemiddelde totale variantie: AM-waarde

e. De steekproefvariantie in alle kandidaatpunten.

f. De korrelatie-koëfficiënten-matrix van de informatiematrix ( afhankelijkheid tussen de kolommen van de ontwerpmatrix )

4.3.4 Keuze van criterium en algoritme.

De keuze van het kriterium is afhankelijk van:

1. het gebruiksdoel van het model
2. de mate van zekerheid die men bezit over het te kiezen model
3. de grootte van het optimaliseringsprobleem, d.w.z. van de grootte van proefopzet en kandidatenlijst, en van het al of niet gebruiken van meerdere modellen dan wel partiële afgeleiden

ad1. Het regressiemodel kan voor 2 verschillende doeleinden worden gebruikt:

- a. Onderzoek naar het relatieve belang van de termen van het model ( parameterstudies ). Nauwkeurige parameterschattingen worden verkregen met het D-kriterium. Voordeel van dit criterium is de zeer korte rekentijd t.o.v. de overige criteria.
- b. Het doen van voorspellingen van waarnemingen. Nauwkeurige responschattingen worden verkregen met het G- en het V-kriterium.  
Het V-kriterium kan worden toegepast wanneer veel voorspellingen moeten worden gedaan. Gemiddeld wordt een goede voorspelkracht in de gehele ontwerpruimte verkregen. Lokaal kan echter een grotere afwijking in de voorspelling optreden dan bij toepassing van het G-kriterium.  
Het G-kriterium wordt toegepast wanneer zo klein mogelijke afwijkingen in de voorspellingen wenselijk zijn. De gemiddelde voorspelkracht in de ontwerpruimte zal echter i.h.a. groter zijn dan bij toepassing van het V-kriterium.

- ad2. Als een grote mate van onzekerheid bestaat over het te kiezen model, dan kan het J-kriterium worden gebruikt. Hiermee worden robuuste proefopzetten gegenereerd, die betrekkelijk ongevoelig zijn voor model-misspecificaties.
- ad3. De grootte van het optimaliseringsprobleem kan de keuze voor een bepaald criterium beïnvloeden. Naarmate het probleem groter is, nemen uiteraard de rekestijden toe. Voor middelgrote problemen verhouden de rekestijden van D-, G-, V- en J-kriterium zich ruwweg als 1:2:3:5. Voor grote problemen, of bij het gebruik van meerdere funktiemodellen of partiële afgeleiden worden de verschillen al snel groter. Bij zeer grote problemen geeft alleen nog het D-kriterium aanvaardbare rekestijden.

De keuze van het algorithme hangt af van:

1. het gewenste soort proefopzet: exakt of diskreet
  2. de grootte van het optimaliseringsprobleem en de beschikbare rekestijd
  3. het beschikbare criterium
- ad1. Het Excursie-alg. en het Branch & Bound-alg. genereren exakte proefopzetten. Dit zijn in de praktijk uitvoerbare proefopzetten, waarvoor het aantal herhalingen van instelkombinaties in de proefopzet altijd een geheel getal is.
- Het Approximate-alg. genereert diskrete proefopzetten, die niet praktisch uitvoerbaar zijn doordat het aantal herhalingen van instelkombinaties in de proefopzet een reëel getal kan zijn, bv. 1.754. De met dit alg. gegenereerde diskrete proefopzetten zijn i.h.a. optimaler dan exakte proefopzetten doordat voor exakte proefopzetten de extra beperking geldt van een geheel aantal herhalingen. Diskrete

proefopzetten vormen daarom wel interessant vergelijkingsmateriaal: ze geven aan wat maximaal haalbaar is met het Excursie- en het Branch & Bound-alg. Het Approximate-alg. biedt daardoor tevens de mogelijkheid de kwaliteit van de keuze van de kandidaatpunten te beoordelen.

ad2. Het Excursie-alg genereert niet altijd globaal optimale proefopzetten. Het vindt echter altijd wel kwalitatief redelijk tot goede proefopzetten tegen aantrekkelijk lage rekenkosten. Het Branch & Bound-alg. vindt gegarandeerd globaal optimale proefopzetten en genereert een serie proefopzetten dicht tegen het optimale aan. Aan dit alg. zijn echter zeer hoge tot extreem hoge rekenkosten verbonden. Voor dit alg. is dan ook alleen het D-kriterium beschikbaar.

ad3. Zie paragraaf 4.3.3.

#### 4.3.5 Proefopzetten voor het gelijktijdig waarnemen van meerdere afhankelijke variabelen.

Er kunnen meerdere funktiemodellen, eventueel aangevuld met hun partiële-afgeleide-modellen, worden gespecificeerd. Voor polynoommodellen kan het programma de afgeleide-modellen zelf genereren.

#### 4.3.6 Lokaal optimum.

Het Excursie-alg. kan convergeren naar een lokaal optimum. Twee voorzieningen zijn hiervoor getroffen:

1. Het alg. genereert automatisch een serie optimale proefopzetten, uitgaande van random uit de kandidatenlijst gekozen initiële proefopzetten.

De gebruiker kan opgeven:

- de seriegrootte
- de onder- en bovengrens voor het aantal instelkombinaties in de initiële proefopzetten; het alg. kiest telkens random het aantal instelkombinaties tussen beide grenzen in.

2. Het algoritme bezit de mogelijkheid via "excursies" uit een lokaal optimum weg te komen.

De gebruiker kan uit deze serie de, naar zijn smaak beste proefopzet kiezen.

#### 4.3.7 Herhaald selekteren van kandidaatpunten.

Het Excursie- en het Branch & Bound-alg. kunnen, indien de gebruiker dat wenst, kandidaatpunten herhaald selekteren als blijkt dat daardoor de grootste reductie in het criterium wordt bereikt. Een instelcombinatie kan zo meerdere keren in de uiteindelijke proefopzet voorkomen. Deze optie is echter alleen zinvol bij experimenten met een stochastisch karakter.

#### 4.3.8 Uitbreidbaarheid van bestaande proefopzetten.

Kandidaatpunten kunnen tot "beschermd" punten worden verklaard. Dergelijke instelcombinaties worden in de initiële proefopzet opgenomen, en er niet meer uit verwijderd. Dit biedt de mogelijkheid het model via de procedure van figuur 4.5.1. langs iteratieve weg te vervolmaken.

#### 4.3.9 Beperking benodigde geheugenruimte.

Bij grote proefopzetten kan de ontwerpmatrix een groot beslag leggen op de beschikbare diskruimte. Voor de, bij het proefopzetten en de modelaanpassing vereiste QR-decompositie van de ontwerpmatrix wordt gebruikt

gemaakt van Givens-transformaties. Daarbij wordt de ontwerpmatrix rij voor rij verwerkt. De ontwerpmatrix behoeft dus niet volledig te worden opgeslagen, zoals bij Householder-transformaties. De gebruiker kan het maximale aantal rijen van de ontwerpmatrix dat mag worden opgeslagen kleiner kiezen dan het aantal waarnemingen voorschrijft. Uiteraard neemt hierdoor de benodigde reken-tijd toe.

4.3.10  $p^q$ -proefopzetten.

Met het programma kunnen volledige  $p^q$ -proefopzetten worden gegenereerd. ( $p, q > 1$ ).

4.3.11  $a^b \dots y^z$ -proefopzetten.

Met het programma kunnen volledige proefopzetten worden gegenereerd, waarbij het aantal instelnivo's per variabele mag verschillen.

4.3.12 Fraktionele  $2^n$ -proefopzetten.

Op basis van definiërende contrasten kunnen fraktionele  $2^n$ -proefopzetten worden gegenereerd. De vereiste ontwerpgeneratoren kunnen gekozen worden uit de tabellen in appendix A.

Een volledige of een fraktionele proefopzet kan gebruikt worden als kandidatenlijst.

4.3.13 Verloting van proefschema's.

Onbekende, storende factoren, bv. slijtage van een proefstand, verloop van een productieproces, kunnen invloed hebben op de waarnemingen. Bij toepassing van een geordend proefschema kan het voorkomen dat instelfactor en storende factor gelijk oplopen in nivo. Beide

faktoren heten dan "verstrengeld" te zijn, wat betekent dat uit de waarnemingen geen onderscheid meer gemaakt kan worden tussen het effect van beide factoren. Geschat wordt dan de som of het verschil van beide effecten. Ten einde dit te kunnen vermijden, is het verloten van het proefschema als optie in het programma opgenomen. De volgorde in het proefschema wordt dan volledig willekeurig.

#### 4.4            Modelaanpassing.

##### 4.4.1        Automatische selectieprocedures.

Gekozen kan worden uit 3 automatische selectieprocedures:

- stapsgewijze regressie
- voorwaartse selectie
- achterwaartse eliminatie

De procedures zijn gebaseerd op de veegprocedures van Efroymsen.

Na afloop van de selectie wordt de gebruiker in de gelegenheid gesteld correcties aan te brengen op het gevonden model: hij kan regressie-variabelen aan het model toevoegen of eruit verwijderen.

##### 4.4.2        Handmatige selectie.

De gebruiker kan ook zelf selekteur zijn en het model volledig handmatige aanpassen, d.w.z. zelf de regressie-variabelen selekteren en/of elimineren. Na iedere selectie of eliminatie wordt de kwaliteit van het model gemeld.

#### 4.4.3 Beschermd regressie-variabelen.

Regressie-variabelen kunnen tot "beschermd" variabelen worden verklaard. Deze optie is alleen beschikbaar bij de automatische selectieprocedures. Dergelijke variabelen worden voorafgaande aan de selectie aan het model toegevoegd en blijven permanent in het model.

#### 4.4.4 Nauwkeurige schattingen, iteratieve verfijning.

De veegprocedure van Efroymsen werkt met de kruisproduktenmatrix, dat is het matrixprodukt van de ontwerpmatrix met zichzelf. De parameters worden bij deze methode uit de normaalvergelijkingen opgelost met gebruikmaking van deze kruisproduktenmatrix. De invloed van afrondfouten wordt hierbij bepaald door het konditiegetal van de normaalvergelijkingen en die is het kwadraat van het konditiegetal van de ontwerpmatrix.

Bij slecht gekonditioneerde problemen kan dat aanleiding geven tot grote fouten in de schattingen van de parameters. De methode van Efroymsen wordt hier daarom alleen als selectieprocedure gebruikt. Na afloop worden de parameters rechtstreeks m.b.v. Givenstransformaties uit een QR-dekompositie van de ontwerpmatrix bepaald.

Een iteratieve verfijningsprocedure berekent hieruit vervolgens betere schattingen. Vooropgesteld dat de schattingen uit de QR-dekompositie tenminste enkele goede cijfers bezitten, dan zullen de schattingen convergeren naar de "exakte".

#### 4.4.5 Gewogen selectieprocedures.

Wanneer naast functiewaarden ook partiële afgeleiden als waarnemingen beschikbaar zijn, dan zullen i.h.a. hun standaardafwijkingen niet gelijk zijn. In dat geval



dient een gewogen kleinste kwadraten methode toegepast te worden, ten einde parameterschattingen met minimale variantie te verkrijgen. Indien de gebruiker de beschikking heeft over (schattingen voor) deze standaardafwijkingen, dan kan hij die ingeven. De selectieprocedures passen dan weging toe.

#### 4.4.6 Iteratieve weegprocedure.

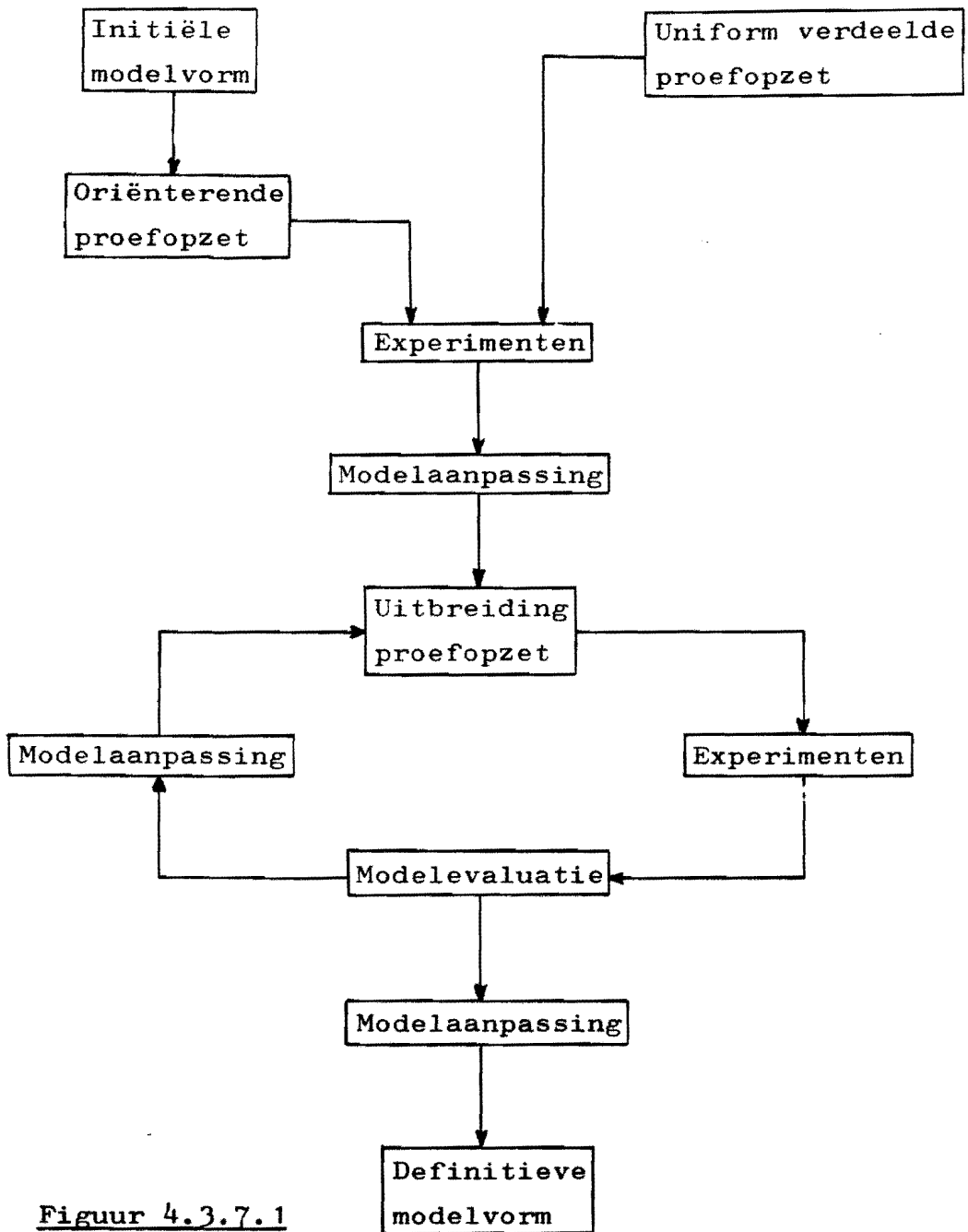
Wanneer geen schattingen voor de standaardafwijkingen beschikbaar zijn (zoals bij numerieke experimenten) dan kan voor een iteratieve weegprocedure worden gekozen. Hierbij kan van alle bovenstaande selectieprocedures gebruik gemaakt worden.

Het programma berekent ongewogen schattingen voor de parameters en bepaalt daarmee vervolgens initiële schattingen voor de standaardafwijkingen. De reciproke waarden van deze schattingen voor de standaardafwijkingen worden gebruikt als weegfactoren waarmee opnieuw, maar nu gewogen parameterschattingen worden bepaald. Deze parameterschattingen resulteren in betere schattingen voor de standaardafwijkingen etc. etc. Konvergentie treedt gewoonlijk op na enkele iteratieslagen.

#### 4.5 Ontwikkeling van het regressiemodel.

In het algemeen is de werkelijke funktionele relatie tussen de te optimaliseren eigenschap en de ontwerpvariabelen onbekend. In dit geval kan men trachten langs iteratieve weg in een aantal slagen het regressiemodel te verbeteren. De faciliteiten van CADE bieden de gebruiker de mogelijkheid het model volgens procedure van figuur 4.5.1 te vervolmaken.

Gestart kan worden met een kleine, uniform verdeelde proefopzet; hierbij worden de instelkombinaties equi-



Figuur 4.3.7.1

distant verdeeld gekozen. Als alternatief kan ook gestart worden met een initiële modelvorm, op grond waarvan het programma een eerste, oriënterende proefopzet kan genereren uit een kandidatenlijst (bv. een uniform verdeelde set instelcombinaties). De experimenten worden uitgevoerd overeenkomstig de proefopzet. Vervolgens

wordt aan de hand van de waarnemingsresultaten het model aangepast: niet-signifikante termen worden uit het model verwijderd en/of extra termen aan het model toegevoegd.

Daarna kan een iteratieve procedure ter verbetering van de modelvorm en de parameterschattingen worden opgestart. De oriënterende of uniform verdeelde proefopzet wordt uitgebreid met extra instelkombinaties. Bij stochastische experimenten mogen onder deze extra combinaties herhalingen van oude combinaties voorkomen; bij deterministische experimenten zullen dit nieuwe moeten zijn. We genereren daartoe een aantal extra kandidaatpunten of hanteren de oude set kandidaatpunten. De punten in de oude proefopzet worden tot "beschermd" punten verklaard. Vervolgens worden aan de oude proefopzet m.b.v. een algoritme en een criterium extra instelkombinaties toegevoegd, op basis van het oude model. Voor de extra instelkombinaties worden experimenten uitgevoerd. De waarnemingen die daaruit volgen worden vergeleken met de voorspellingen die het model geeft voor dezelfde instelkombinaties: modevaluatie. Voorspelt het model onvoldoende, dan worden de nieuwe waarnemingen gevoegd bij de ouden en aan de hand van al deze waarnemingen het model eventueel gewijzigd en aangepast. Vervolgens wordt op basis van het nieuwe model de bestaande proefopzet weer uitgebreid, de extra experimenten uitgevoerd en het nieuwe model geëvalueerd.

Deze iteratieve procedure wordt net zo lang herhaald totdat het model de extra waarnemingen bevredigend voorspelt, bv. met een onnauwkeurigheid van enkele procenten. De extra waarnemingen worden tot slot gebruikt om de schattingen voor de parameters te verbeteren en de procedure wordt beëindigd.

Bij de uitbreiding van de proefopzet hoeft niet telkens voor hetzelfde criterium te worden gekozen.

Een alternatief is bv. achtereenvolgens minimaliseren van:

1. de determinant van de covariantiematrix
2. de maximale variantie
3. de gemiddelde variantie

Ook het aantal instelkombinaties dat toegevoegd moet worden, hoeft niet steeds even groot te worden gekozen. Met toenemend aantal iteratieslagen wordt het model beter en is het verstandig het aantal extra combinaties kleiner te kiezen.

Bij deterministische E.E.M.-analyses zijn vooraf geen schattingen voor de standaardafwijkingen van de verschillende afhankelijke variabelen bekend. Hebben we te maken met slechts één afhankelijke variabele, dan kunnen de optimalisatie-kriteria genormeerd worden voor de standaard-afwijking, bij meerdere afhankelijke variabelen is dit niet meer mogelijk. In dat geval kan echter bij de iteratieve procedure met vrucht gebruik gemaakt worden van de mogelijkheid, voorafgaande aan het proefopzetten, standaard-afwijkingen in te voeren.

Ten behoeve van de eerste, oriënterende proefopzet worden de standaard-afwijkingen gelijk aan 1 gesteld. De modelaanpassing levert voor het functie-model en de afgeleide-modellen "standaard-afwijkingen" op. Zij worden bepaald door per model de restkwadratensom te delen door het aantal vrijheidsgraden en vervolgens daarvan de wortel te nemen. Zo'n "standaard-afwijking" geeft dan aan hoe goed een model kon worden aangepast aan de waarnemingsresultaten. Met deze standaard-afwijkingen als invoer bij de uitbreiding van de proefopzet kan aan ieder van de modellen een gewichtsfactor worden toegekend. Naarmate de standaard-afwijking groter is, wordt een model

in de nieuwe proefopzet zwaarder meegewogen en zal de voorspelkracht van het model naar verhouding sterker toenemen. Het resultaat van de iteratieve procedure is dat de standaard-afwijkingen (de mate van onaangepastheid) van de modellen niet alleen afnemen, maar ook meer en meer aan elkaar gelijk worden. Aldus worden modellen gekreëerd met dezelfde voorspelkracht.

Dit betekent dat, wanneer deze iteratieve procedure wordt toegepast, het niet meer noodzakelijk is van te voren schattingen voor de standaard-afwijkingen te bepalen. De schattingen zijn alleen van voordeel bij de eerste oriënterende proefopzet en kunnen zo het benodigde aantal iteratie-slagen verkleinen.

CADE:

Computer Aided Design of Experiments

Testresultaten

Rob Nagtegaal

Rapport WFW 87.005

## INHOUDSOPGAVE

- 5. Testresultaten
  - 5.0 Inleiding
  - 5.1 Vergelijking met "klassieke" methoden
  - 5.2 Uitbreiding naar het gelijktijdig waarnemen van meerdere afhankelijke responsvariabelen
    - 5.2.1 Approximate-algorithme
    - 5.2.2 Schaalgevoeligheid
    - 5.2.3 Excursie-algorithme
  - 5.3 Modelaanpassing
    - 5.3.1 Voorwaartse selectie
    - 5.3.2 Achterwaartse eliminatie
    - 5.3.3 Stapsgewijze regressie
    - 5.3.4 Iteratieve verfijning
    - 5.3.5 Partiële afgeleiden: iteratieve weeg-procedure

## Hoofdstuk 5 Testresultaten.

5.0

### Inleiding.

CADE is geschreven in Fortran 77 en geïmplementeerd op een Apollo D3000 werkstation.\* CADE bevat op dit moment ca. 21000 regels programmatekst, waarvan ca. 4000 regels afkomstig van ACED.

In tegenstelling tot wat in de ACED-handleiding wordt beweerd, verloopt de implementatie van ACED op verschillende computersystemen niet probleemloos. Op de VAX draait ACED na 2 kleine veranderingen goed, op de Prime daarentegen volgen bij compilatie talrijke foutmeldingen en dienen veel wijzigingen in het COMMON BLOCK te worden aangebracht. Op de Apollo werkt het branch & bound-algorithme niet goed. Het algorithme komt in een loop terecht en convergeert niet. De oorzaak daarvan heb ik niet kunnen achterhalen. Aan de implementatie van dit algorithme heb ik een lage prioriteit toegekend en wel om de volgende redenen.

1. Het algorithme is alleen beschikbaar in combinatie met het D-kriterium. Dit kriterium zal minder vaak gebruikt worden dan de overige criteria: men is i.h.a. vaker geïnteresseerd in goede respons-schattingen dan in goede parameterschattingen.
2. Omdat het van alle criteria de kortste rekentijden vergt, is het D-kriterium te verkiezen boven de overige wanneer het aantal kandidaatpunten en de proefopzet zeer groot is. Voor dergelijke situaties is het branch & bound-algorithme echter volkomen ongeschikt, zeker als daarbij bovendien nog meerdere modellen betrokken zijn.
3. Het algorithme vindt gegarandeerd de globaal optimale proefopzet. Het kan dus interessant vergelijkingsmateriaal opleveren bij het testen van de generalisatie van het D-kriterium. Echter, de generalisatie is hier betrekkelijk eenvoudig en beschreven in Fedorov (1972).

\* Een VAX-versie is inmiddels beschikbaar gekomen.

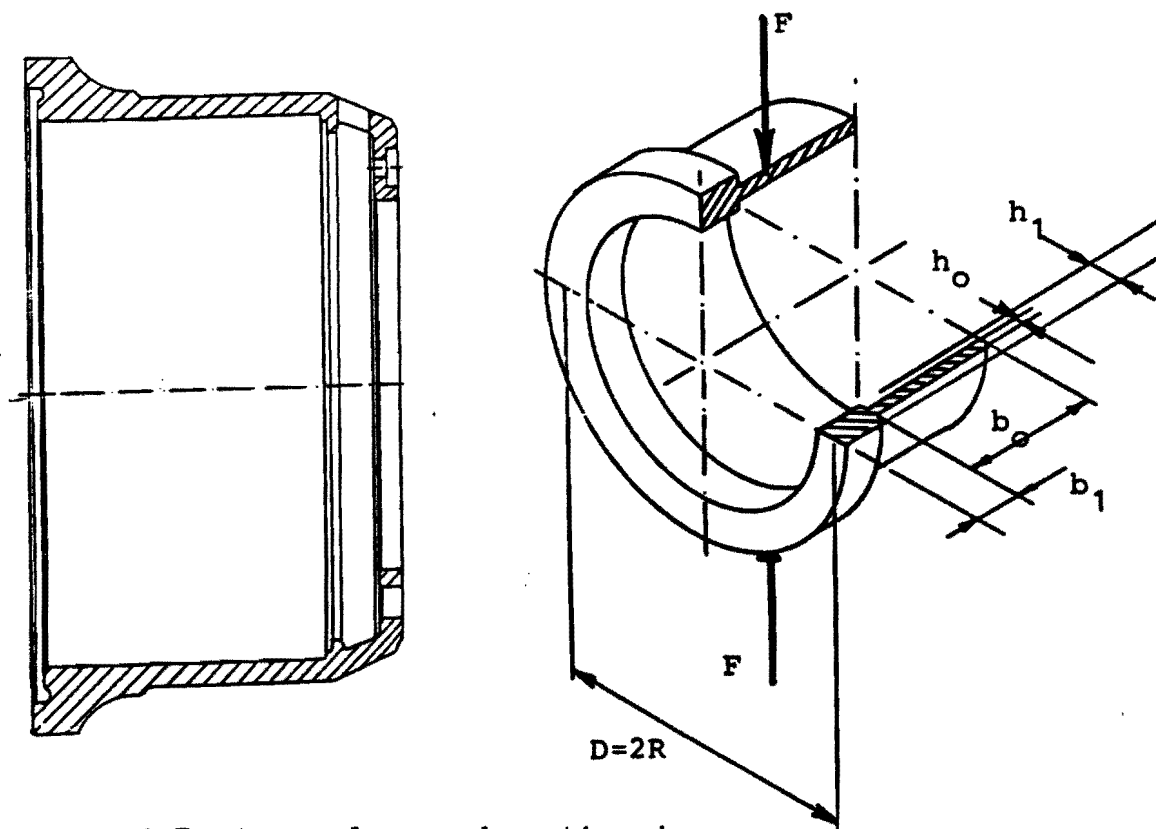


5.1

Vergelijking met "klassieke" methoden.

Binnen de vakgroep is in het verleden ervaring opgedaan met een tweetal reductiemethoden ter bepaling van fraktionele proefopzetten: vierkantenmethode en transformatie naar  $2^V$ -proefopzetten. Gebleken is daarbij dat de vierkantenmethode vooral bij modellen met veel interactie-termen tot minder goede proefopzetten leidt dan een transformatie naar  $2^V$ -proefopzetten. (v. Heck, 1983a en 1983b)

In deze paragraaf wordt de kwaliteit van CADE-proefopzetten vergeleken met deze laatste werkwijze aan de hand van een recente toepassing bij de afdeling Toegepaste Research van DAF-Trucks. Daar is de methode van optimalisatie m.b.v. modelvorming en E.E.M.-analyses toegepast bij het optimaliseren van de buigstijfheid van remtrommels ten einde hinderlijke remtrillingen zoveel mogelijk te beperken.



Figuur 5.1 Remtrommel en schematisering.

Via een transformatie naar een  $2^V$ -proefopzet is een fraktionele proefopzet bepaald, waarvan met CADE de eigenschappen zijn berekend en weergegeven op blz. 5.4. Zeer opvallend aan de DAF-proefopzet is het geringe aantal korrelaties tussen de parameterschatters dat groter is dan nul.

Met het excursie-algorithme zijn, in combinatie met de 4 geïmplementeerde criteria, proefopzetten gegenereerd. De resultaten staan weergegeven op de blz. 5.5 t/m 5.7.

In het programma is als codering van de criteria de codering van ACED aangehouden:

- DO: minimaliseren van de determinant van de covariantiematrix (D-opt.)
- MV: minimaliseren van de maximale variantie (G-opt.)
- AV: minimaliseren van de gemiddelde variantie (V-opt.)
- AM: minimaliseren van de gemiddelde restkwadratensom (J-opt.)

Deze codering zal ook in het vervolg van dit hoofdstuk worden gebruikt.

N.B. Met de faktor RATIO bij het AM-kriterium is de eerder vermelde faktor  $z_{\max}/\sigma$  bedoeld.

#### Konklusies:

1. Met CADE worden proefopzetten gegenereerd die alleen optimaal zijn m.b.t. het gebruikte criterium.
2. De maximale waarde voor de korrelatie tussen de parameterschatters en het aantal korrelaties dat groter is dan nul nemen af in de volgorde DO-MV-AV-AM.
3. De DAF-proefopzet lijkt optimaal te zijn m.b.t. het AV-kriterium. De maximale eigenwaarde en het spoor van de covariantiematrix bezitten een minimale waarde. De DAF-proefopzet zou daarom ook E- en A-optimaal genoemd kunnen worden.

Eigenschappen van de DAF-proefopzet:

INPUT SUMMARY					
ALGORITHM	NU	CANDIDATES	128	MODELTYPE	P
CRITERION	DO	OBSERVATIONS	32	PARAMETERS	22
		PROTECTED	32	VARIABLES	5
		REPLICATIONS	NO	DEPENDENT	1
				DERIVATIVES	0
				ORTH. POL.	YES

DESIGN PROPERTIES									
DESIGN REF	ITERA TIONS	DET**((1/22) COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM VARIANCE	AVERAGE VARIANCE	MAX E-VAL COVAR. MATRIX	TRACE COVAR. MATRIX	:CORRELATION: AVER AGE ZERO	NON ZERO	
1	0	0.273E+00	0.357E+02	0.230E+02	0.131E+01	0.948E+01	0.45	0.45	1

ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE

DESIGN POINTS															
DESIGN REF	2	3	5	8	25	28	30	31	41	44	46	47	50	51	
1	53	56	74	75	77	80	81	84	86	87	97	100	102	103	
	122	123	125	128											

CPU-TIME FOR THIS JOB : 0.279E+01 SECONDS.

CORRELATIONS BETWEEN PARAMETER ESTIMATORS																						
DESIGN REF	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12										
1	1.0																					
2	0.0	1.0																				
3	0.0	0.0	1.0																			
4	0.0	0.0	0.0	1.0																		
5	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0																	
6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0																
7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0															
8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0														
9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0													
10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0												
11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0											
12	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0										
13	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0									
14	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0								
15	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0							
16	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0						
17	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0					
18	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0				
19	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0			
20	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0		
21	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	
22	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0

MAXIMUM : 0.447  
 AVERAGE OVER NONZERO COEFF. : 0.447  
 PERCENTAGE NONZERO : 0.9  
 DETERMINANT : 0.640E+00

DO

INPUT SUMMARY							
CANDIDATES	128	VARIABLES	5	MODEL	P	PARAMETERS	22
ALGORITHM	EX	CRITERION	DO	OBS	32	PROTECTED	0
REPLICATIONS	NO	DERIVATIVES	NO			ORTH. POL.	YES
LIMIT A	32	B	32				

DESIGN PROPERTIES										
DESIGN REF	ITERA TIONS	DET**(1/22) COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM VARIANCE	AVERAGE VARIANCE	MAX E-VAL COVAR MATRIX	TRACE COVAR MATRIX	!CORRELATION! MAX	AVER AGE	XNON ZERO	
1	290	0.259E+00	0.374E+02	0.251E+02	0.242E+01	0.109E+02	0.50	0.07	74	
2	150	0.256E+00	0.334E+02	0.248E+02	0.211E+01	0.108E+02	0.50	0.15	23	
3	198	0.255E+00	0.370E+02	0.246E+02	0.218E+01	0.109E+02	0.50	0.09	42	
4	110	0.259E+00	0.347E+02	0.251E+02	0.254E+01	0.109E+02	0.50	0.07	76	
5	102	0.258E+00	0.340E+02	0.252E+02	0.249E+01	0.111E+02	0.50	0.07	86	
6	142	0.261E+00	0.387E+02	0.256E+02	0.270E+01	0.115E+02	0.50	0.08	92	
7	262	0.258E+00	0.357E+02	0.249E+02	0.241E+01	0.109E+02	0.50	0.08	71	
8	92	0.257E+00	0.331E+02	0.244E+02	0.233E+01	0.105E+02	0.50	0.06	81	
9	244	0.259E+00	0.380E+02	0.251E+02	0.262E+01	0.111E+02	0.50	0.07	81	
10	132	0.259E+00	0.348E+02	0.249E+02	0.228E+01	0.108E+02	0.50	0.07	75	

ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE

MV

INPUT SUMMARY							
CANDIDATES	128	VARIABLES	5	MODEL	P	PARAMETERS	22
ALGORITHM	EX	CRITERION	MV	OBS	32	PROTECTED	0
REPLICATIONS	NO	DERIVATIVES	NO			ORTH. POL.	YES
LIMIT A	32	B	32				

DESIGN PROPERTIES										
DESIGN REF	ITERA TIONS	DET**(1/22) COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM VARIANCE	AVERAGE VARIANCE	MAX E-VAL COVAR MATRIX	TRACE COVAR MATRIX	!CORRELATION! MAX	AVER AGE	XNON ZERO	
1	230	0.259E+00	0.337E+02	0.245E+02	0.247E+01	0.108E+02	0.44	0.07	90	
2	160	0.261E+00	0.334E+02	0.250E+02	0.211E+01	0.108E+02	0.44	0.08	82	
3	110	0.264E+00	0.356E+02	0.258E+02	0.275E+01	0.114E+02	0.44	0.08	87	
4	344	0.260E+00	0.324E+02	0.244E+02	0.191E+01	0.105E+02	0.38	0.08	74	
5	352	0.261E+00	0.336E+02	0.247E+02	0.210E+01	0.108E+02	0.38	0.07	80	
6	216	0.260E+00	0.335E+02	0.244E+02	0.230E+01	0.104E+02	0.50	0.06	83	
7	122	0.261E+00	0.345E+02	0.247E+02	0.229E+01	0.109E+02	0.38	0.07	89	
8	132	0.265E+00	0.371E+02	0.267E+02	0.327E+01	0.123E+02	0.50	0.08	87	
9	192	0.260E+00	0.338E+02	0.249E+02	0.255E+01	0.110E+02	0.44	0.07	84	
10	146	0.262E+00	0.351E+02	0.249E+02	0.259E+01	0.110E+02	0.44	0.07	91	

ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE

AV

INPUT SUMMARY							
CANDIDATES	128	VARIABLES	5	MODEL	P	PARAMETERS	22
ALGORITHM	EX	CRITERION	AV	OBS	32	PROTECTED	0
REPLICATIONS	NO	DERIVATIVES	NO			ORTH. POL.	YES
LIMIT A	32	B	32				

DESIGN PROPERTIES										
DESIGN REF	ITERA TIONS	DET**(1/22) COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM VARIANCE	AVERAGE VARIANCE	MAX E-VAL COVAR MATRIX	TRACE COVAR MATRIX	!CORRELATION! MAX	AVER AGE	XNON ZERO	
1	118	0.270E+00	0.433E+02	0.231E+02	0.133E+01	0.961E+01	0.27	0.06	75	
2	152	0.267E+00	0.418E+02	0.234E+02	0.156E+01	0.985E+01	0.23	0.06	85	
3	124	0.263E+00	0.353E+02	0.231E+02	0.180E+01	0.100E+02	0.38	0.06	84	
4	88	0.265E+00	0.378E+02	0.237E+02	0.188E+01	0.101E+02	0.38	0.06	88	
5	162	0.265E+00	0.392E+02	0.232E+02	0.195E+01	0.100E+02	0.31	0.06	82	
6	182	0.265E+00	0.392E+02	0.231E+02	0.192E+01	0.998E+01	0.31	0.07	77	
7	202	0.264E+00	0.355E+02	0.233E+02	0.209E+01	0.104E+02	0.38	0.07	75	
8	174	0.265E+00	0.436E+02	0.239E+02	0.211E+01	0.104E+02	0.31	0.07	90	
9	128	0.264E+00	0.428E+02	0.240E+02	0.190E+01	0.105E+02	0.38	0.07	92	
10	144	0.264E+00	0.386E+02	0.235E+02	0.159E+01	0.979E+01	0.31	0.06	93	

ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE

AM

INPUT SUMMARY									
ALGORITHM	EX	RATIO	0.000	CANDIDATES	128	MODELTYPE	P		
CRITERION	AM			OBSERVATIONS	32	PARAMETERS	22		
				PROTECTED	0	VARIABLES	5		
				REPLICATIONS	NO	DEPENDENT	1		
				LOWER LIMIT	40	DERIVATIVES	0		
				UPPER LIMIT	50	ORTH. POL.	YES		

DESIGN PROPERTIES									
DESIGN ITERA REF TIONS		DET**(1/22)		AVERAGE VARIANCE	UNSCALED AVERAGE SQ BIAS	AVERAGE MSE	[CORRELATION]		
		COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM VARIANCE				AVER MAX	AGE ZERO	MON ZERO
1	92	0.266E+00	0.428E+02	0.238E+02	0.140E+01	0.238E+02	0.35	0.10	52
2	173	0.266E+00	0.386E+02	0.229E+02	0.137E+01	0.229E+02	0.27	0.10	24
3	165	0.265E+00	0.419E+02	0.236E+02	0.139E+01	0.236E+02	0.35	0.10	52
4	116	0.268E+00	0.403E+02	0.231E+02	0.138E+01	0.231E+02	0.29	0.09	37
5	125	0.266E+00	0.425E+02	0.240E+02	0.141E+01	0.240E+02	0.36	0.11	45

ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE

INPUT SUMMARY									
ALGORITHM	EX	RATIO	10.000	CANDIDATES	128	MODELTYPE	P		
CRITERION	AM			OBSERVATIONS	32	PARAMETERS	22		
				PROTECTED	0	VARIABLES	5		
				REPLICATIONS	NO	DEPENDENT	1		
				LOWER LIMIT	40	DERIVATIVES	0		
				UPPER LIMIT	50	ORTH. POL.	YES		

DESIGN PROPERTIES									
DESIGN ITERA REF TIONS		DET**(1/22)		AVERAGE VARIANCE	UNSCALED AVERAGE SQ BIAS	AVERAGE MSE	[CORRELATION]		
		COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM VARIANCE				AVER MAX	AGE ZERO	MON ZERO
1	160	0.262E+00	0.351E+02	0.235E+02	0.139E+01	0.447E+04	0.29	0.10	45
2	260	0.263E+00	0.365E+02	0.232E+02	0.138E+01	0.444E+04	0.42	0.10	35
3	180	0.263E+00	0.364E+02	0.234E+02	0.139E+01	0.446E+04	0.30	0.10	46
4	123	0.270E+00	0.421E+02	0.233E+02	0.138E+01	0.445E+04	0.28	0.08	47
5	180	0.263E+00	0.406E+02	0.233E+02	0.138E+01	0.445E+04	0.35	0.10	42

ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE

INPUT SUMMARY									
ALGORITHM	EX	RATIO	5.000	CANDIDATES	128	MODELTYPE	P		
CRITERION	AM			OBSERVATIONS	32	PARAMETERS	22		
				PROTECTED	0	VARIABLES	5		
				REPLICATIONS	NO	DEPENDENT	1		
				LOWER LIMIT	40	DERIVATIVES	0		
				UPPER LIMIT	50	ORTH. POL.	YES		

DESIGN PROPERTIES									
DESIGN ITERA REF TIONS		DET**(1/22)		AVERAGE VARIANCE	UNSCALED AVERAGE SQ BIAS	AVERAGE MSE	[CORRELATION]		
		COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM VARIANCE				AVER MAX	AGE ZERO	MON ZERO
1	148	0.266E+00	0.376E+02	0.229E+02	0.137E+01	0.112E+04	0.25	0.09	36
2	148	0.270E+00	0.405E+02	0.228E+02	0.137E+01	0.112E+04	0.23	0.09	18
3	221	0.268E+00	0.389E+02	0.237E+02	0.140E+01	0.114E+04	0.26	0.10	47
4	235	0.267E+00	0.400E+02	0.232E+02	0.138E+01	0.113E+04	0.28	0.10	32
5	118	0.270E+00	0.417E+02	0.239E+02	0.140E+01	0.115E+04	0.25	0.10	51

ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE

-----  
 DESIGN POINTS  
 -----

DESIGN REF	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	
1	3	8	10	18	21	25	28	30	31	39	43	44	46	51									
	56	58	65	68	70	71	90	91	93	96	106	107	109	112									
	113	116	118	119																			
2	2	8	9	15	19	21	28	30	35	37	44	46	50	56									
	57	63	74	75	80	81	84	86	87	97	100	102	103	109									
	119	122	123	128																			
3	8	10	11	13	24	28	30	31	33	36	38	39	53	58									
	59	66	67	69	73	81	86	87	90	102	106	111	112	116									
	119	123	125	128																			
4	1	7	11	14	16	19	22	26	38	42	45	49	52	55									
	59	64	68	70	71	73	88	90	91	93	98	99	104	108									
	117	121	126	127																			
5	2	5	11	17	22	23	28	29	40	44	46	47	52	55									
	58	59	68	71	75	77	80	83	86	90	99	102	106	114									
	117	121	127	128																			

DESIGN 2 HAS AN EFFICIENCY OF 100.52%

CPU-TIME FOR THIS JOB : 0.836E+03 SECONDS.

-----  
 CORRELATIONS BETWEEN PARAMETER ESTIMATORS  
 -----

DESIGN REF	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	
1	1.0																						
2	0.0	1.0																					
3	-0.1	-0.1	1.0																				
4	0.0	0.0	0.1	1.0																			
5	0.1	0.1	0.0	0.1	1.0																		
6	0.1	0.1	0.0	0.1	0.1	1.0																	
7	0.0	0.0	-0.1	0.0	0.0	0.0	1.0																
8	-0.1	-0.1	0.0	-0.1	-0.1	0.0	0.0	1.0															
9	0.1	0.1	0.0	0.1	0.1	0.0	0.0	0.0	1.0														
10	0.0	0.0	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0													
11	0.0	0.0	-0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0												
12	0.0	0.0	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0											
13	0.0	0.0	0.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0										
14	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0									
15	0.0	0.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0								
16	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0							
17	0.0	0.0	0.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0						
18	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0					
19	0.0	0.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0				
20	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0			
21	-0.1	-0.1	0.1	-0.1	-0.1	-0.1	0.0	0.1	-0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0		
22	0.0	0.0	0.1	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12											
13	1.0																						
14	0.0	1.0																					
15	0.0	0.0	1.0																				
16	0.0	0.0	0.0	1.0																			
17	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0																		
18	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0																	
19	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0																
20	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0															
21	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0														
22	0.1	-0.1	0.1	-0.1	0.1	-0.1	0.1	-0.1	0.0	1.0													
	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22													

MAXIMUM : 0.231  
 AVERAGE OVER NONZERO COEFF. : 0.087  
 PERCENTAGE NONZERO : 18.2  
 DETERMINANT : 0.555E+00

ANDERE EIGENSCHAPPEN:

-----  
 INPUT SUMMARY  
 -----

ALGORITHM	NU	CANDIDATES	128	MODELTYPE	P
CRITERION	00	OBSERVATIONS	32	PARAMETERS	22
		PROTECTED	32	VARIABLES	5
		REPLICATIONS	NO	DEPENDENT	1
				DERIVATIVES	0
				ORTH. POL.	YES

-----  
 DESIGN PROPERTIES  
 -----

DESIGN REF	ITERA TIONS	DET**(1/22) COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM VARIANCE	AVERAGE VARIANCE	MAX E-VAL COVAR. MATRIX	TRACE COVAR. MATRIX	[CORRELATION] AVER AGE ZERO
1	0	0.270E+00	0.405E+02	0.228E+02	0.132E+01	0.939E+01	0.23 0.09 18

ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE

4. Met het AM-kriterium blijkt het mogelijk een robuuste proefopzet te vinden met een gering aantal korrelaties groter dan nul: 18%. De maximale korrelatie is hier kleiner dan bij de DAF-proefopzet: 0.231 tegen 0.447. Van zijn eigenschappen is alleen de maximale variantie groter dan die van de DAF-proefopzet. Het rendement is zeer hoog: 100%.
5. Met beide methoden kunnen kwalitatief vergelijkbare proefopzetten worden verkregen. Er bestaat echter een zeer groot verschil in de benodigde inspanning. Dr.ir. J. van Heck (1986) heeft een klein vergelijkend onderzoek verricht naar beide methoden. De onderstaande tabel, overgenomen uit het rapport, geeft een indruk van dit verschil in inspanning. Geschat is dat de kosten, verbonden aan het ontwerpen van de DAF-proefopzet, ca. f5000,- hoger zijn dan de kosten verbonden aan het genereren van kwalitatief vergelijkbare proefopzetten met CADE.

TABEL 2 VERGELIJKING TUSSEN BENODIGDE INSPANNING	. CADE PROEFOPZET TABEL D2	DAF PROEFOPZET RAPPORT 54860/86-216 (TABEL D5)
Benodigde rekestijd	≈ 60 sec. (APOLLO)	328*21 CPU sec ≈ 7000 CPU sec (VAX)
Benodigde tijd om invoer te prepareren	≈ 15 min.	≈ 2 uur
Benodigde tijd om optimaal meetpro- gramma te vinden (terminal+onder- zoeker)	≈ 60 sec.	328*5 min ≈ 27 uur

De tabel geeft bovendien een vertekend beeld van de werkelijk benodigde inspanning. Het ontwerpen van de DAF-proefopzet vereist veel statistische kennis en vaardigheid. In de tabel is de inspanning die nodig is om die aan te kweken niet verdiskonteerd. CADE vereist die kennis en vaardigheid niet.



5.2 Uitbreiding naar het gelijktijdig waarnemen van meerdere afhankelijke responsvariabelen.

5.2.1 Approximate-algorithme.

Fedorov (hoofdstuk 5) geeft 2 voorbeelden van D-optimale diskrete proefopzetten. Van de overige criteria is in de literatuur geen vergelijkingsmateriaal gevonden.

Het door Fedorov gebruikte algoritme verschilt van het in CADE geïmplementeerde algoritme voor D-optimale diskrete proefopzetten. (Zie ook paragraaf 2.5.4) Bij het Fedorov-algoritme mag ieder punt in  $X$  worden gekozen. Uitgaande van een initiële proefopzet, wordt bij iedere optimalisatie-slag een punt  $\underline{x}$  met weegfactor  $\alpha$  aan de proefopzet toegevoegd waarvoor  $\text{tr } D(\underline{x}, \epsilon)$  maximaal is. De weegfactoren van de overige punten in de proefopzet worden vermenigvuldigd met  $(1-\alpha)$ . De weegfactoren van al deze punten (zowel de goede als de slechte) nemen dus procentsgewijs evenveel af. De faktor  $\alpha$  wordt berekend volgens één van de drie in paragraaf 2.5.4 vermelde methoden. Welke van deze drie bij de voorbeelden is gebruikt, wordt niet vermeld.

Bij CADE is de keuze van  $\underline{x}$  beperkt tot een eindige set van kandidaatpunten. Tijdens optimalisatie-slag  $s$  worden 2 punten  $\underline{x}_h$  en  $\underline{x}_i$  geselecteerd waarvoor  $\text{tr } D(\underline{x}_h, \underline{p})$  maximaal is en  $\text{tr } D(\underline{x}_i, \underline{p})$  minimaal is. Een nieuwe proefopzet wordt bepaald volgens

$$\underline{p}^{(s+1)} = \underline{p}^{(s)} + \alpha(\underline{\delta}_h - \underline{\delta}_i)$$

De faktor  $\alpha$  wordt bepaald uit

$$\alpha = \min(\det M^{-1}(\underline{p}^{(s+1)}), u_h - p_h^{(s)}, p_i^{(s)} - l_i)$$

Voorbeeld 1.

$$\begin{aligned} y_1 &= b_1 + b_2 \cdot x + b_3 \cdot x^2 \\ y_2 &= b_4 \cdot x + b_5 \cdot x^3 + b_6 \cdot x^4 \end{aligned} \quad 0 \leq x \leq 1$$

$y_1$  en  $y_2$  worden ongekorreleerd verondersteld. Verder wordt aangenomen dat de varianties in de stochastische meetfouten konstant zijn en gelijk aan  $\sigma^2$ . Dus  $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma^2$ .

Als kandidaatpunten zijn gekozen:

CANDIDATE LIST - 21 POINTS

CANDIDATE	VAR 1
1	0.00
2	0.05
3	0.10
4	0.15
5	0.20
6	0.25
7	0.30
8	0.35
9	0.40
10	0.45
11	0.50
12	0.55
13	0.60
14	0.65
15	0.70
16	0.75
17	0.80
18	0.85
19	0.90
20	0.95
21	1.00

Het aantal te verrichten waarnemingen wordt gesteld op 9.

Uitgaande van een initiële proefopzet, waarbij alle kandidaatpunten met gelijke weegfaktor  $1/21$  in de proefopzet zijn opgenomen, ontstaat met het D0-kriterium de volgende proefopzet:

-----									
INPUT SUMMARY									
-----									
ALGORITHM	AP			CANDIDATES	21	MODELTYPE	G		
CRITERION	DO			OBSERVATIONS	9	PARAMETERS	6		
				PROTECTED	0	VARIABLES	1		
				REPLICATIONS	YES	DEPENDENT	2		
						DERIVATIVES	0		
-----									
DESIGN PROPERTIES									
-----									
DESIGN ITERA	REF TIONS	DET**(./ 6)	COVARIANCE	TRACE OF	MAXIMUM	AVERAGE	MAX E-VAL	TRACE	[CORRELATION]
			MATRIX	TRACE OF	TRACE OF	TRACE OF	COVAR.	COVAR.	AVER NON
			VARIANCES	VARIANCES	VARIANCES	MATRIX	MATRIX	MATRIX	AGE ZERO
1	64	0.199E+02	0.600E+01	0.536E+01	0.391E+04	0.415E+04	0.99	0.85	40
ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE									
-----									
DESIGN POINTS									
-----									
DESIGN	REF	CANDIDATE(REPLICATION)							
	1	1( 1.43)	8( 0.79)	9( 1.80)	16( 1.50)	17( 0.64)	21( 2.85)		
-----									

Figuur 5.2.1.1 D-optimale diskrete proefopzet.

Deze proefopzet, omgezet naar weegfactoren,

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1=0.00; x_2=0.35; x_3=0.40; x_4=0.75; x_5=0.80; x_6=1.00 \\ p_1=0.16; p_2=0.09; p_3=0.20; p_4=0.16; p_5=0.07; p_6=0.32 \end{array} \right\}$$

komt goed overeen met wat Fedorov vond:

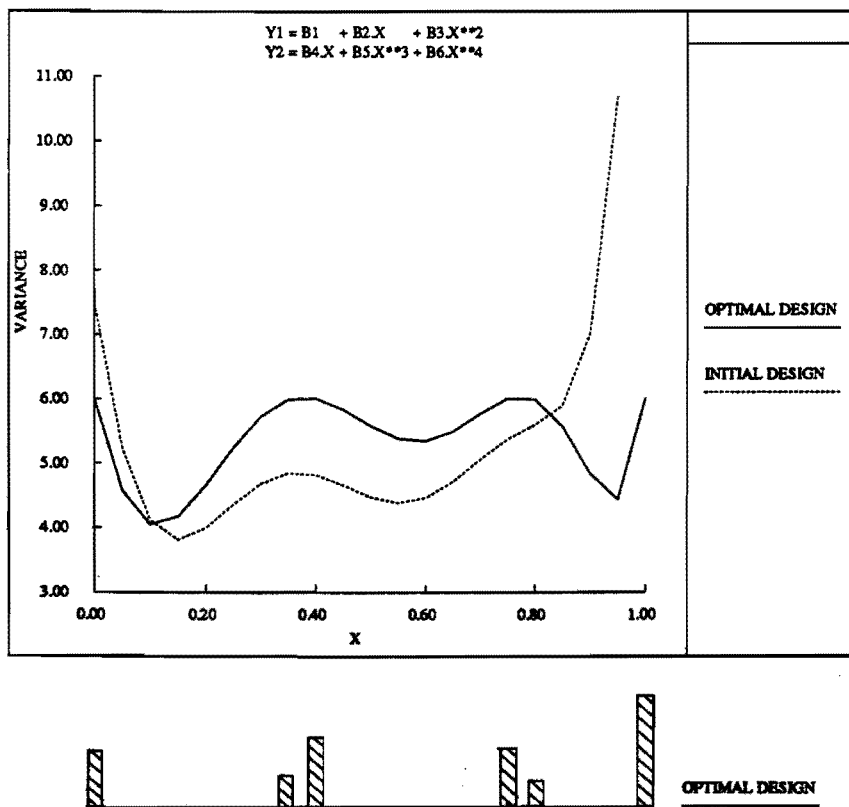
$$\left\{ \begin{array}{l} x_1=0.00; x_2=0.38; x_3=0.76; x_4=1.00 \\ p_1=0.16; p_2=0.28; p_3=0.23; p_4=0.33 \end{array} \right\}$$

Uit figuur 5.2.1.1 blijkt dat de maximale som van de varianties in de kandidaatpunten:

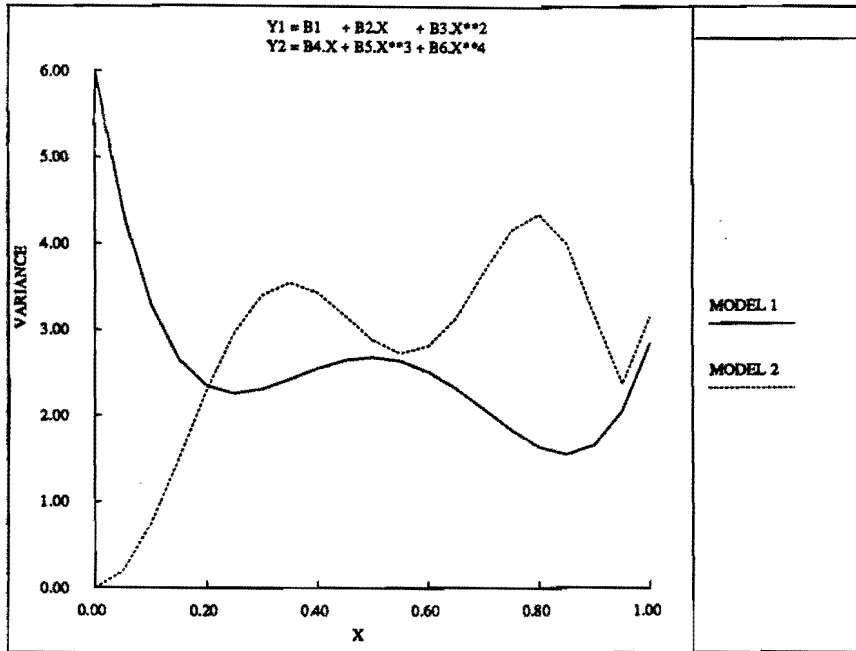
$$\max_{j=1, \dots, 21} \text{tr } D(x_j, \underline{p}^*) = 6,$$

en dus gelijk is aan het totale aantal parameters, zoals

het equivalentie-theorema stelt. Figuur 5.2.1.2 geeft de som van de varianties,  $\text{tr } D(x_j, \underline{p})$ ,  $j=1, \dots, 21$ , voor de initiële en de optimale proefopzet in de kandidaatpunten. Daaronder is de optimale proefopzet grafisch uitgezet. De hoogten van de gearceerde balken representeren de fracties van het totale aantal te verrichten waarnemingen,  $p_j$ ,  $j=1, \dots, 21$ , in de kandidaatpunten. We zien dat de optimale proefopzet zich concentreert in gebieden waar de som van de varianties maximaal is. In figuur 5.2.1.3 is te zien dat de beide modellen in dezelfde orde van grootte bijdragen aan de som, wat wenselijk is.



Figuur 5.2.1.2 De som van de varianties,  $\text{tr } D(x_j, \underline{p})$ ,  $j=1, \dots, 21$ , voor de initiële en de D-optimale diskrete proefopzet; daaronder is de optimale proefopzet grafisch weergegeven.



Figuur 5.2.1.3 De bijdrage van het model voor  $y_1$  en van het model voor  $y_2$  aan de som van de varianties in de responschattingen.

INPUT SUMMARY													
ALGORITHM	AP	CANDIDATES	21	MODELTYPE	G								
CRITERION	AV	OBSERVATIONS	9	PARAMETERS	6								
		PROTECTED	0	VARIABLES	1								
		REPLICATIONS	YES	DEPENDENT	2								
				DERIVATIVES	0								
DESIGN PROPERTIES													
DESIGN ITERATIONS	84	DET**(1/6) COVARIANCE MATRIX	0.209E+02	MAXIMUM TRACE OF VARIANCES	0.984E+01	AVERAGE TRACE OF VARIANCES	0.496E+01	MAX E-VAL COVAR. MATRIX	0.330E+04	TRACE COVAR. MATRIX	0.353E+04	CORRELATION  AVERAGE MAX AGE ZERO	0.99 0.85 40
ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE													
DESIGN POINTS													
DESIGN REF	CANDIDATE(REPLICATION)												
1	1( 1.45)	8( 0.51)	9( 2.82)	16( 1.12)	17( 1.47)	21( 1.63)							

Figuur 5.2.1.4 V-optimale diskrete proefopzet.

Met het AV-kriterium is een V-optimale diskrete proefopzet gegenereerd. Zie figuur 5.2.1.4. Het gemiddelde van de som van de varianties,

$$\frac{1}{21} \sum_{j=1}^{21} \text{tr } D(x_j, \underline{p}^*),$$

is bij deze proefopzet inderdaad kleiner dan bij de D-optimale diskrete proefopzet van figuur 5.2.1.1. Dit is echter sterk ten koste gegaan van de maximale som.

Van het AM-kriterium, in combinatie met het approximate-algorithme, kunnen geen resultaten worden getoond. De gradiënten ter bepaling van een "steepest descent" richting blijken bij meerdere responsvariabelen instabiel te zijn.

Voorbeeld 2.

$$y_1 = b_1 + b_2 \cdot x + b_3 \cdot x^2$$

$$y_2 = b_1 \cdot x + b_2 \cdot x^3 + b_3 \cdot x^4 \quad 0 \leq x \leq 1$$

We gaan uit van dezelfde modellen en dezelfde veronderstellingen als in voorbeeld 1. De responsvariabelen  $y_1$  en  $y_2$  zijn nu echter afhankelijk van dezelfde parameters. De kandidaatpunten worden gekozen overeenkomstig voorbeeld 1 en het aantal te verrichten waarnemingen is weer 9.

Uitgaande van een initiële proefopzet, waarbij alle kandidaatpunten met gelijke weegfaktor  $1/21$  in de proefopzet zijn opgenomen, ontstaat met het D0-kriterium de volgende proefopzet:

```

-----
                                INPUT SUMMARY
-----
ALGORITHM      AP          CANDIDATES  21  MODELTYPE   G
CRITERION      DO          OBSERVATIONS 9  PARAMETERS  3
                                   PROTECTED    0  VARIABLES   1
                                   REPLICATIONS YES  DEPENDENT   2
                                                DERIVATIVES 0
-----
                                DESIGN PROPERTIES
-----
          DET**(1/3)  MAXIMUM  AVERAGE MAX E-VAL  TRACE |CORRELATION|
DESIGN ITERA COVARIANCE TRACE OF TRACE OF COVAR. COVAR.  AVER %NON
REF TIONS     MATRIX VARIANCES VARIANCES MATRIX MATRIX MAX AGE ZERO
-----
      1   39  0.576E+01 0.300E+01 0.241E+01 0.136E+03 0.140E+03 0.97 0.69 100
-----
ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE
-----
                                DESIGN POINTS
-----
DESIGN
REF  CANDIDATE(REPLICATION)
-----
      1   1( 2.82)  11( 0.43)  12( 2.60)  13( 0.15)  21( 3.00)
-----

```

Figuur 5.2.1.5 D-optimale diskrete proefopzet.

Deze proefopzet, omgezet naar weegfactoren,

$$x_1=0.00; x_2=0.50; x_3=0.55; x_4=0.60; x_5=1.00$$

$$p_1=0.31; p_2=0.05; p_3=0.29; p_4=0.02; p_5=1/3$$

verschilt enigszins van de proefopzet die Fedorov rapporteert:

$$x_1=0.00; x_2=0.54; x_3=1.00$$

$$p_1=1/3; p_2=1/3; p_3=1/3$$

Met CADE zijn de eigenschappen van de proefopzet van Fedorov berekend en weergegeven in figuur 5.2.1.6.

```

CANDIDATE LIST - 3 POINTS
-----
CANDIDATE VAR 1
  1      0.000
  2      0.540
  3      1.000
-----

                        INPUT SUMMARY
-----
ALGORITHM      NU      CANDIDATES      3      MODELTYPE      G
CRITERION      DO      OBSERVATIONS    3      PARAMETERS      3
                PROTECTED    3      VARIABLES       1
                REPLICATIONS NO  DERIVATIVES     2
                                DERIVATIVES     0
-----

                        DESIGN PROPERTIES
-----
                DET**(1/ 3)  MAXIMUM  AVERAGE MAX E-VAL  TRACE |CORRELATION|
DESIGN ITERA  COVARIANCE TRACE OF TRACE OF  COVAR.  AVER \NON
REF TIONS    MATRIX VARIANCES VARIANCES  MATRIX  COVAR.  MAX AGE ZERO
-----
  1  0  0.576E+01 0.316E+01 0.300E+01 0.138E+03 0.142E+03 0.97 0.67 100
ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE
-----

                        DESIGN POINTS
-----
DESIGN
REF
-----
  1  1  2  3

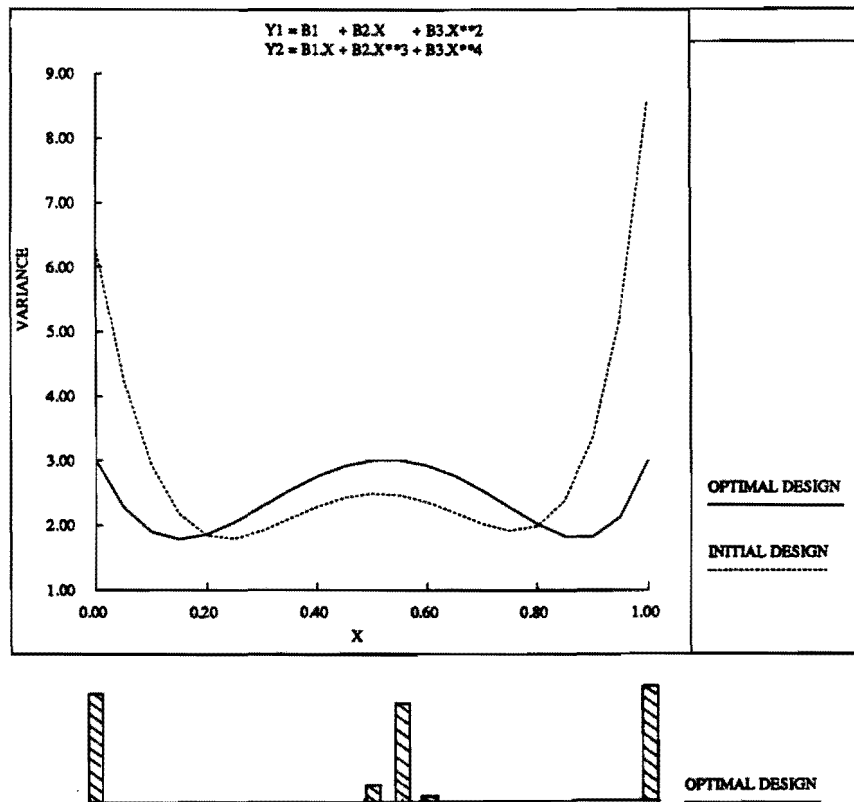
```

Figuur 5.2.1.6. Eigenschappen van de proefopzet van Fedorov.

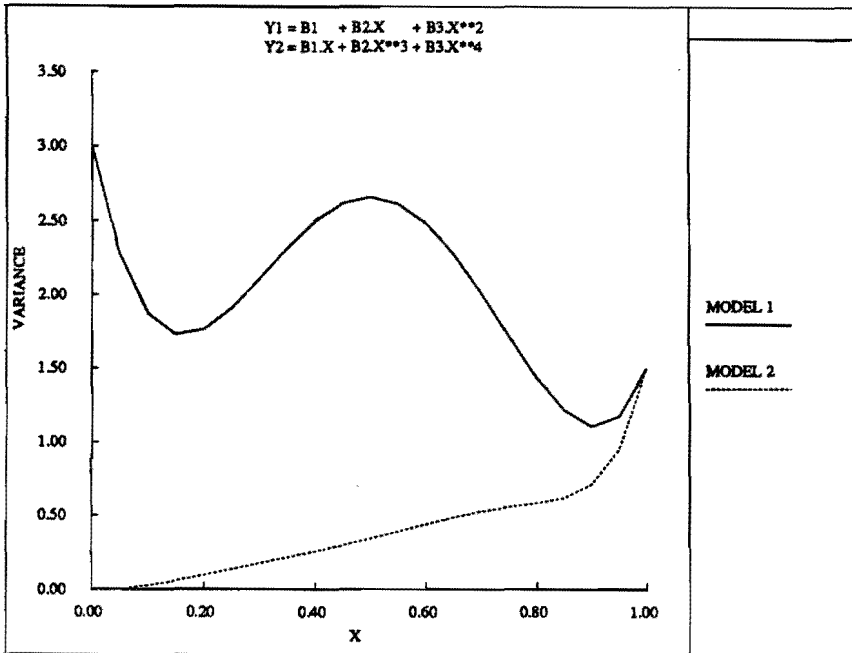
De proefopzet blijkt wel D-optimaal, maar niet G-optimaal te zijn: het maximum van het spoor is groter dan 3. Het is zeer waarschijnlijk dat om de een of andere reden abusievelijk een onjuiste proefopzet werd vermeld. Fedorov vond echter wel de optimale proefopzet want de erbij gegeven



grafiek van het spoor komt zeer goed overeen met die van de CADE-proefopzet (figuur 5.2.1.7.), terwijl de grafiek van het spoor voor de vermelde proefopzet hier duidelijk van afwijkt. Met CADE wordt deze proefopzet gevonden door het excursie-algorithme in combinatie met het DO-kriterium. De proefopzet kan eigenlijk niet optimaal zijn. We zullen dit verklaren.

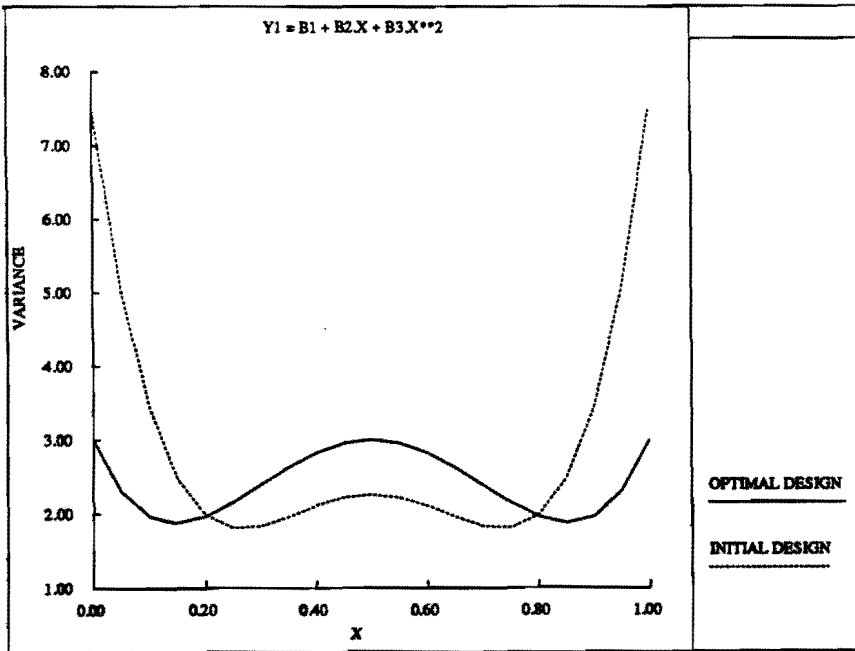


Figuur 5.2.1.7. Het spoor van de variantie-covariantie matrix van de respons-schattingen in de kandidaatpunten,  $\text{tr } D(x_j, \underline{p})$ ,  $j=1, \dots, 21$ , van de initiële proefopzet  $\underline{p}_{un}$  en de D-optimale diskrete proefopzet  $\underline{p}^*$ . Daaronder de grafische representatie van  $\underline{p}^*$



Figuur 5.2.1.8.

De bijdrage van het model voor  $y_1$  en van het model voor  $y_2$  aan  $\text{tr } D(x_j, \underline{p}^*)$ ,  $j=1, \dots, 21$ .



Figuur 5.2.1.9.

$\text{Tr } D(x_j, \underline{p}_{\text{un}})$  en  $\text{tr } D(x_j, \underline{p}^*)$ ,  $j=1, \dots, 21$  van het model voor  $y_1$ .



De optimale CADE-proefopzet voor dit voorbeeld en zijn grafiek van het spoor (figuur 5.2.1.7.) lijken veel op die van het 2<sup>e</sup> graads model van  $y_1$  alleen (figuur 5.2.1.9.). Aan figuur 5.2.1.8. is te zien dat de bijdrage van het model voor  $y_2$  aan het spoor aanzienlijk kleiner is dan de bijdrage van het model voor  $y_1$ . Het model van  $y_1$  speelt hier kennelijk een dominante rol. De reden hiervan is dat in het gebied  $0 \leq x \leq 1$  iedere term van  $y_1$  groter is dan de overeenkomstige term van  $y_2$ , dus  $b_1 > b_1 x$ ,  $b_2 x > b_2 x^3$  en  $b_3 x^2 > b_3 x^4$ . Als het experimenteergebied veel kleiner wordt gekozen, b.v.  $0 \leq x \leq 0.01$ , dan zal de invloed van het model voor  $y_2$  verwaarloosbaar klein zijn. De optimale proefopzet voor dit voorbeeld zal dan identiek zijn aan die van het model voor  $y_1$  alleen, nl.

$$x_1=0.00; \quad x_2=0.50; \quad x_3=1.00$$

$$p_1=1/3; \quad p_2=1/3; \quad p_3=1/3$$

Als het gebied zeer groot wordt gekozen, b.v.  $0 \leq x \leq 100$ , dan zal daarentegen de invloed van het model voor  $y_1$  verwaarloosbaar klein zijn. In het gebied  $0 \leq x \leq 1.0$  is de invloed van het model voor  $y_2$  echter nog aanwezig (zie figuur 5.2.1.8), zodat een proefopzet met fracties  $p_j=1/3$ ,  $j=1,2,3$ , niet optimaal kan zijn. In de volgende paragraaf zal deze schaalgevoeligheid uitgebreid aan de orde komen.

Met het AV-kriterium is een V-optimale diskrete proefopzet gegenereerd:

----- INPUT SUMMARY -----										
ALGORITHM	AP			CANDIDATES	21	MODELTYPE	G			
CRITERION	AV			OBSERVATIONS	9	PARAMETERS	3			
				PROTECTED	0	VARIABLES	1			
				REPLICATIONS	YES	DEPENDENT	2			
						DERIVATIVES	0			
----- DESIGN PROPERTIES -----										
		DET**(1/3)				MAX E-VAL	TRACE	CORRELATION		
DESIGN ITERA		COVARIANCE	MAXIMUM	AVERAGE		COVAR.	COVAR.	AVER \NON		
REF TIONS		MATRIX	VARIANCE	VARIANCE		MATRIX	MATRIX	MAX AGE ZERO		
1	23	0.602E+01	0.417E+01	0.220E+01		0.122E+03	0.126E+03	0.96	0.74	100
ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE										
----- DESIGN POINTS -----										
DESIGN										
REF		CANDIDATE	(REPLICATION)							
1		1( 2.28)	11( 1.29)	12( 3.27)		21( 2.16)				

Figur 5.2.1.10. V-optimale diskrete proefopzet.

5.2.2 Schaalgevoeligheid.

Aan voorbeeld 2 is te zien dat schaalgevoeligheid optreedt zodra de responsvariabelen afhankelijk zijn van dezelfde parameters. We zullen de schaalgevoeligheid illustreren door het experimenteergebied op te schalen met een faktor 100 en kiezen de volgende kandidaatpunten:

CANDIDATE LIST - 21 POINTS

CANDIDATE	VAR 1
1	0.00
2	5.00
3	10.00
4	15.00
5	20.00
6	25.00
7	30.00
8	35.00
9	40.00
10	45.00
11	50.00
12	55.00
13	60.00
14	65.00
15	70.00
16	75.00
17	80.00
18	85.00
19	90.00
20	95.00
21	100.00

Voor het voorbeeld 1 wordt de D-optimale diskrete proefopzet in dit nieuwe gebied:

INPUT SUMMARY							
ALGORITHM	AP	CANDIDATES	21	MODELTYPE	G		
CRITERION	DO	OBSERVATIONS	9	PARAMETERS	6		
		PROTECTED	0	VARIABLES	1		
		REPLICATIONS	YES	DEPENDENT	2		
				DERIVATIVES	0		
DESIGN PROPERTIES							
DESIGN REF	ITERA TIONS	DET**(1/ 6) COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM VARIANCE	AVERAGE VARIANCE	MAX E-VAL COVAR. MATRIX	TRACE COVAR. MATRIX	CORRELATION  AVER ANON MAX AGE ZERO
1	64	0.923E-06	0.600E+01	0.536E+01	0.601E+01	0.602E+01	0.99 0.85 40
ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE							
DESIGN POINTS							
DESIGN REF	CANDIDATE(REPLICATION)						
1	1( 1.43)	8( 0.79)	9( 1.80)	16( 1.50)	17( 0.64)	21( 2.85)	

Figuur 5.2.2.1. D-optimale diskrete proefopzet voor voorbeeld 1; experimenteergebied:  $0 \leq x \leq 100$ .

Vergelijking met de proefopzet in figuur 5.2.1.1 leert dat hier geen schaalgevoeligheid optreedt.

Voor voorbeeld 2 wordt de D-optimale diskrete proefopzet:

INPUT SUMMARY									
ALGORITHM	AP	CANDIDATES	21	MODELTYPE	G				
CRITERION	DO	OBSERVATIONS	9	PARAMETERS	3				
		PROTECTED	0	VARIABLES	1				
		REPLICATIONS	YES	DEPENDENT	2				
				DERIVATIVES	0				

DESIGN PROPERTIES									
DESIGN REF	ITERATIONS	DET**(1/3) COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM VARIANCE	AVERAGE VARIANCE	MAX E-VAL COVAR. MATRIX	TRACE COVAR. MATRIX	CORRELATION  AVERAGE MAX	NON ZERO	
1	23	0.788E-09	0.300E+01	0.222E+01	0.631E-02	0.631E-02	0.99	0.91	100

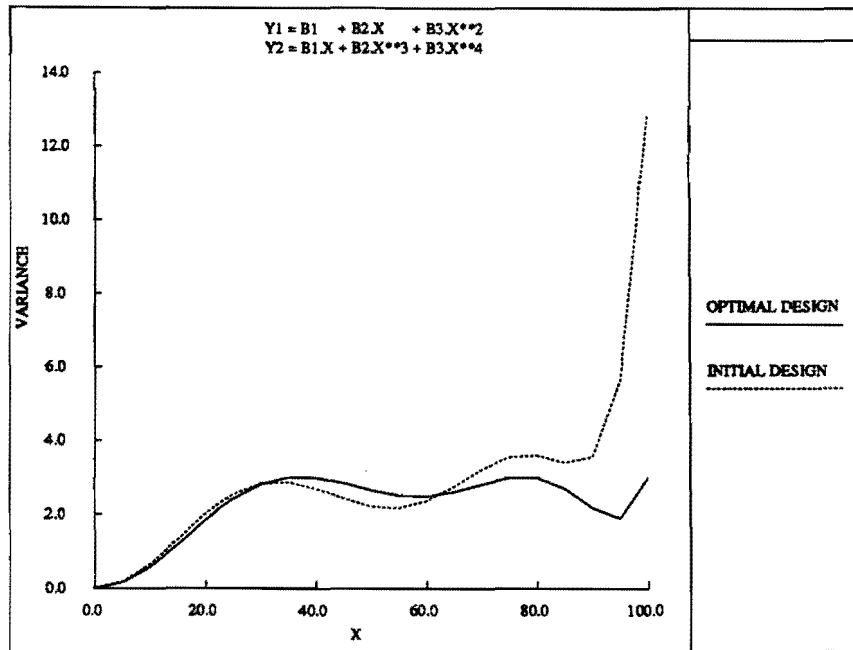
ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE

DESIGN POINTS					
DESIGN REF	CANDIDATE(REPLICATION)				
1	8 ( 2.57)	9 ( 0.41)	16 ( 0.49)	17 ( 2.53)	21 ( 3.00)

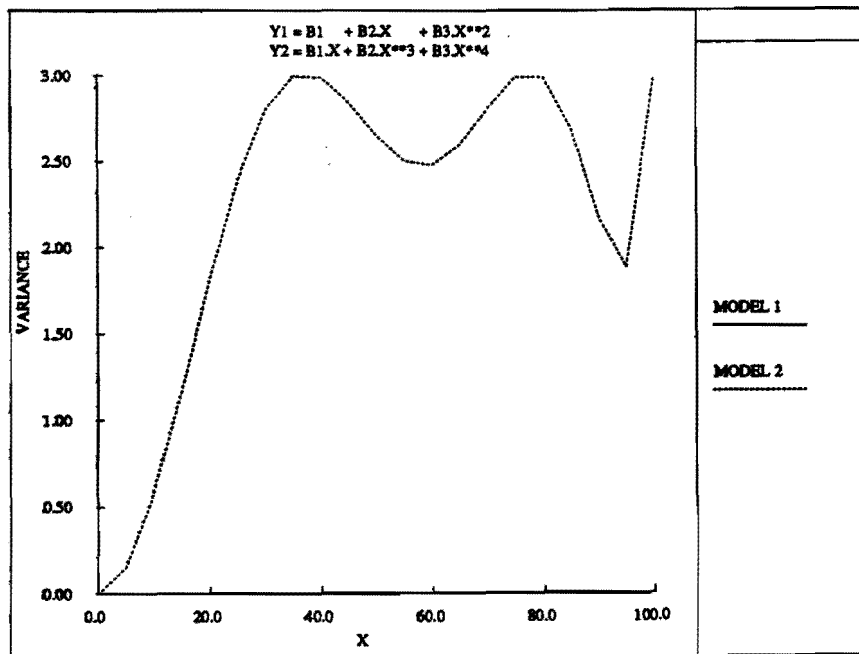
Figuur 5.2.2.2. D-optimale diskrete proefopzet voor voorbeeld 2; experimenteergebied:  $0 \leq x \leq 100$ .

Deze proefopzet is vrijwel gelijk aan de optimale proefopzet van het model voor  $y_2$  alleen, figuur 5.2.2.5. De bijdrage van het model voor  $y_1$  aan  $\text{tr } D(x_j, \underline{p}^*)$ ,  $j=1, \dots, 21$ , is verwaarloosbaar klein (een faktor 1000 kleiner) t.o.v. de bijdrage van het model voor  $y_2$ , zie figuur 5.2.2.4. De grafieken van  $\text{tr } D(x_j, \underline{p})$ ,  $j=1, \dots, 21$ , zijn voor beide proefopzetten identiek: vergelijk figuur 5.2.2.3. met figuur 5.2.2.6.



Figuur 5.2.2.3.

$\text{tr } D(x_j, \underline{p}_{un})$  en  
 $\text{tr } D(x_j, \underline{p}^*)$ ,  $j=1, \dots, 21$   
voor voorbeeld 2 in  
het gebied  $0 \leq x \leq 100$   
met grafische repre-  
sentatie van  $\underline{p}^*$ .

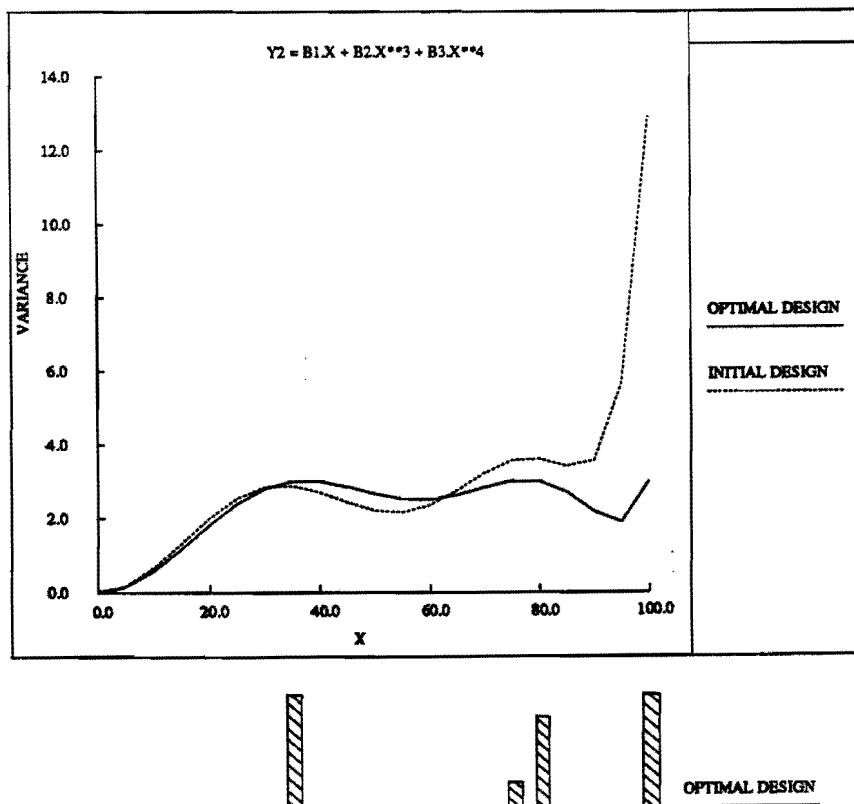


Figuur 5.2.2.4.

De bijdrage van het  
model voor  $y_1$  en van  
het model voor  $y_2$  aan  
 $\text{tr } D(x_j, \underline{p}^*)$ ,  $j=1, \dots, 21$

INPUT SUMMARY									
ALGORITHM	AP	CANDIDATES	21	MODELTYPE	G				
CRITERION	DO	OBSERVATIONS	9	PARAMETERS	3				
		PROTECTED	0	VARIABLES	1				
		REPLICATIONS	YES	DEPENDENT	1				
				DERIVATIVES	0				
DESIGN PROPERTIES									
		DET**(1/ 3)		MAX E-VAL	TRACE	CORRELATION			
DESIGN ITERA	COVARIANCE	MAXIMUM	AVERAGE	COVAR.	COVAR.	AVER %NON			
REF TIONS	MATRIX	VARIANCE	VARIANCE	MATRIX	MATRIX	MAX AGE ZERO			
1	212	0.789E-09	0.300E+01	0.222E+01	0.630E-02	0.630E-02	0.99	0.91	100
ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE									
DESIGN POINTS									
DESIGN									
REF	CANDIDATE(REPLICATION)								
1	8( 2.99)	16( 0.64)	17( 2.38)	21( 3.00)					

Figuur 5.2.2.5. D-optimale diskrete proefopzet voor het model voor  $y_2$ .



Figuur 5.2.2.6.  
De variantie in de respons-schatting van het model voor  $y_2$ .



Schaalgevoeligheid bij partiële afgeleiden  
als responsvariabelen.

Schaalgevoeligheid treedt ook op wanneer zich onder de responsvariabelen ook partiële afgeleiden naar de onafhankelijke variabelen bevinden. We zullen dit illustreren aan de hand van een 2<sup>e</sup> graads polynoom:

$$y = b_1 + b_2x + b_3x^2$$
$$dy/dx = 0 + b_2 + 2b_3x$$

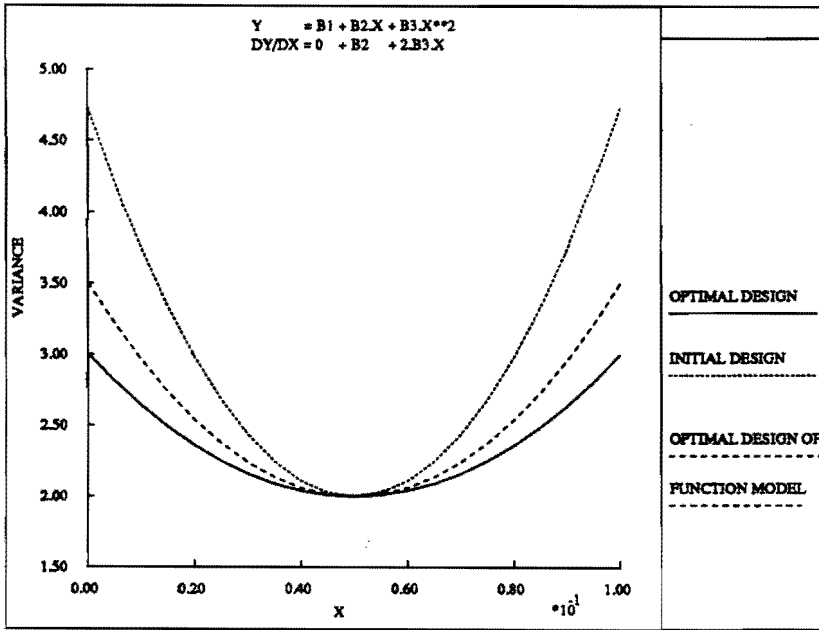
Als experimenteergebied wordt achtereenvolgens gekozen:  $0 \leq x \leq 0.1$ ,  $0 \leq x \leq 1.0$  en  $0 \leq x \leq 100$ , waarin telkens 21 equidistant verdeelde kandidaatpunten worden gedefinieerd. Onder dezelfde veronderstellingen als bij de voorbeelden 1 en 2 werden D-optimale diskrete proefopzetten bepaald. In de gebieden  $0 \leq x \leq 0.1$  en  $0 \leq x \leq 1.0$  ontstonden als optimale proefopzetten:

$$\begin{array}{l|l} x_1=0.0; x_2=0.1 & x_1=0.0; x_2=1.0 \\ p_1=\frac{1}{2}; p_2=\frac{1}{2} & p_1=\frac{1}{2}; p_2=\frac{1}{2} \end{array}$$

die gelijk zijn aan de D-optimale diskrete proefopzet voor een 1<sup>e</sup> graads polynoom (zie figuur 5.2.2.9). In het gebied  $0 \leq x \leq 100$  blijkt de invloed van het afgeleide-model verwaarloosbaar te zijn en is de optimale proefopzet gelijk aan die van het 2<sup>e</sup> graads functie-model:

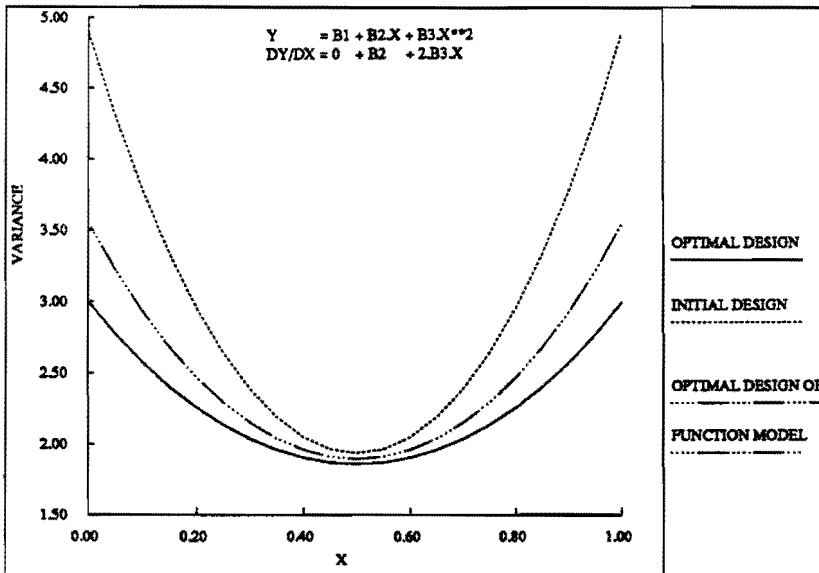
$$x_1=0.0; x_2=50; x_3=100$$
$$p_1=1/3; p_2=1/3; p_3=1/3$$

De figuren 5.2.2.7a,b en c geven de grafieken weer van  $\text{tr } D(x_j, \underline{p}_{un})$  en  $\text{tr } D(x_j, \underline{p}^*)$ ,  $j=1, \dots, 21$  in de experi-



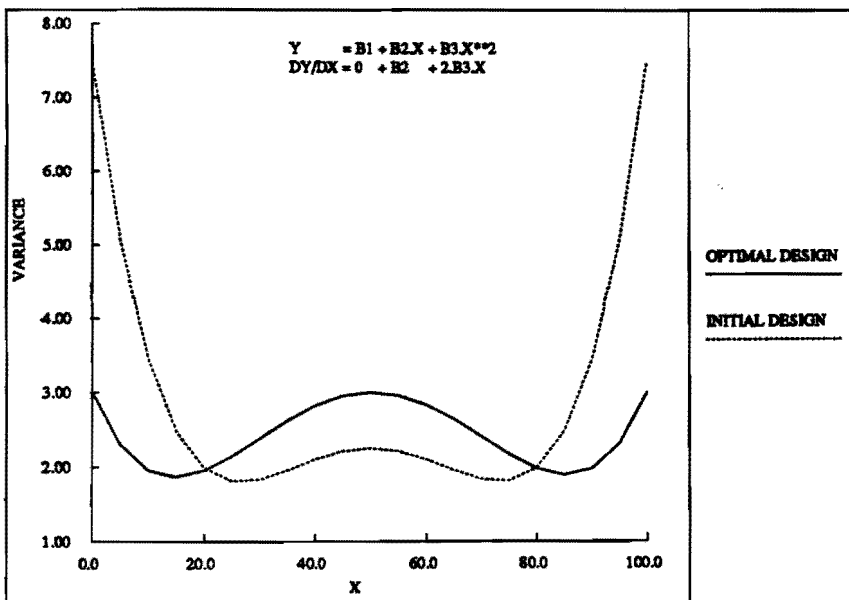
Figuur 5.2.2.7a.

$Tr D(x_j, \underline{p}_{un})$ ,  $tr D(x_j, \underline{p}^*)$   
 en  $tr D(x_j, \underline{p}^*)$ ,  $j=1, \dots, 21$   
 waarin  $\underline{p}_{un}$  de uniform  
 verdeelde proefopzet,  $\underline{p}^*$   
 de D-optimale diskrete  
 proefopzet voor het funk-  
 tie-model en afgeleide-  
 model,  $\underline{p}_{kw}^*$  de D-optimale  
 diskrete proefopzet voor  
 het functie-model;  
 experimenteergebied:  
 $0 \leq x \leq 0.1$ .



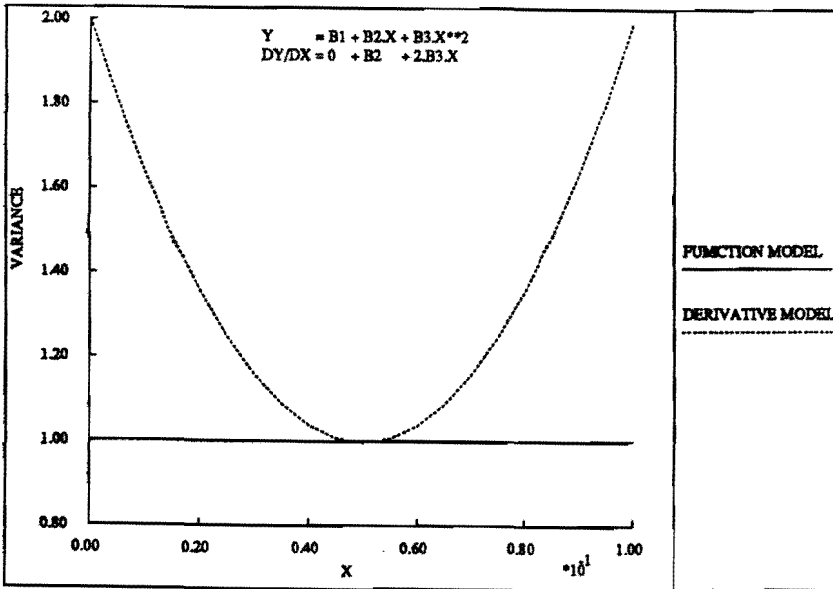
Figuur 5.2.2.7b.

Idem.  
 Experimenteergebied:  
 $0 \leq x \leq 1$ .



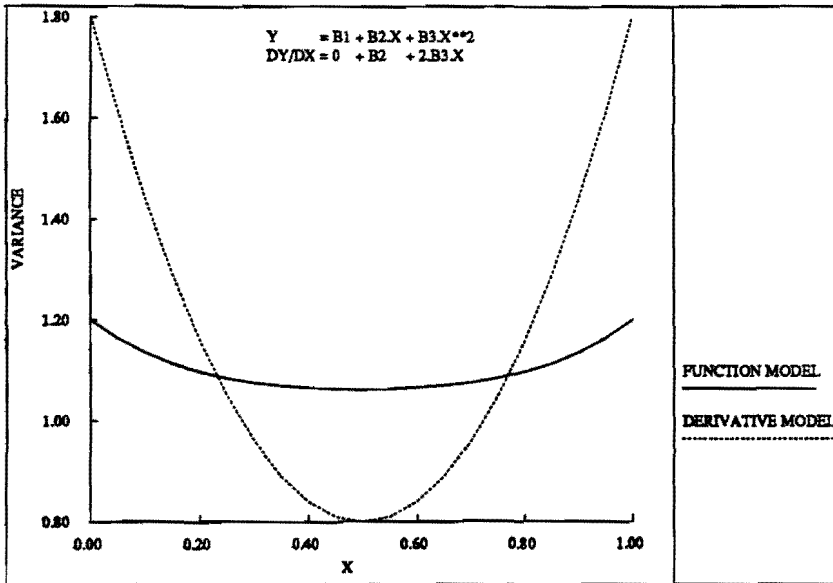
Figuur 5.2.2.7c.

Idem.  
 Experimenteergebied:  
 $0 \leq x \leq 100$ .



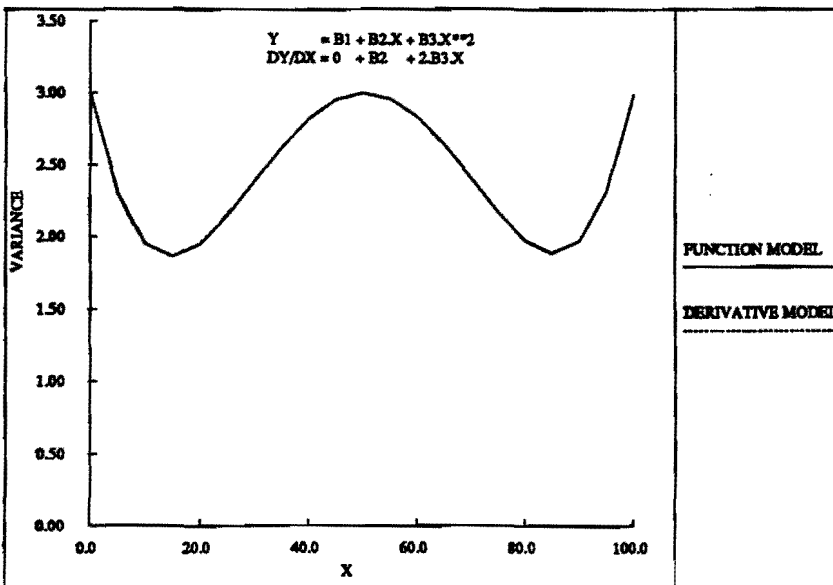
Figuur 5.2.2.8a.

De bijdrage van het functie-model en van het afgeleide-model aan  $\text{tr } D(x_j, \underline{p}^*)$ ,  $j=1, \dots, 21$ .  
Experimenteergebied:  
 $0 \leq x \leq 0.1$



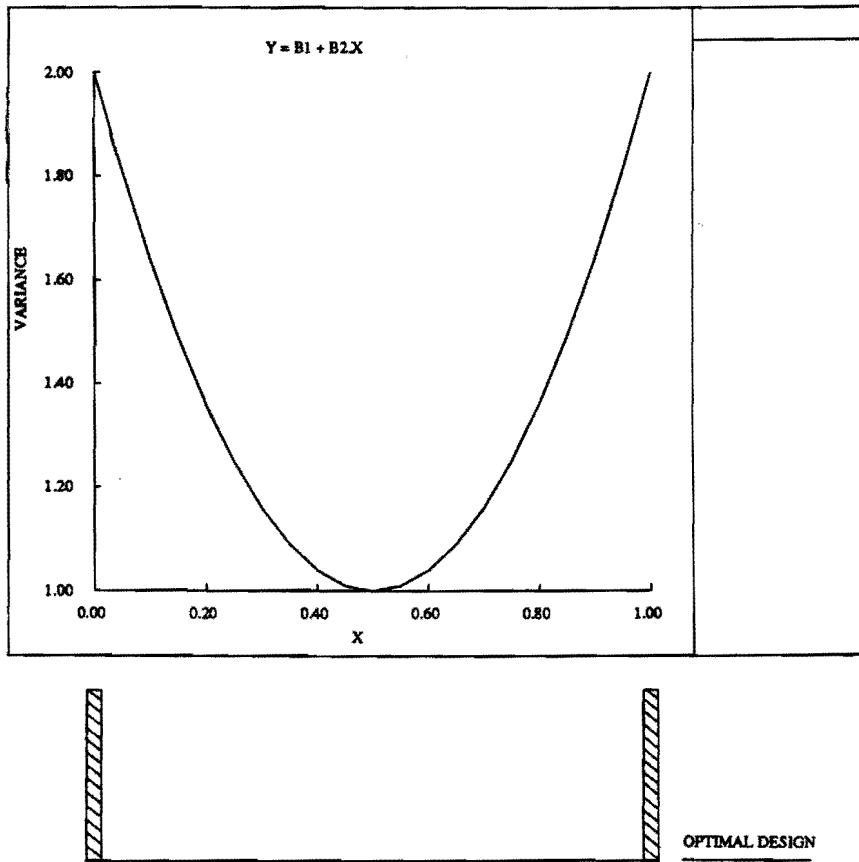
Figuur 5.2.2.8b.

Idem.  
Experimenteergebied:  
 $0 \leq x \leq 1$



Figuur 5.2.2.8c.

Idem.  
Experimenteergebied:  
 $0 \leq x \leq 100$



Figuur 5.2.2.9. De variantie in de responschatting in de kandidaatpunten voor de D-optimale diskrete proefopzet  $\underline{p}^*$  van een 1<sup>e</sup> graads polynoom; daaronder de grafische weergave van  $\underline{p}^*$ .

menteergebieden. In de figuren 5.2.2.7a en b zijn bovendien de grafieken van  $\text{tr } D(x_j, \underline{p}_{kw}^*)$ ,  $j=1, \dots, 21$  aangegeven voor het geval dat t.b.v. het schatten van de parameters partiële afgeleiden worden gebruikt, maar als proefopzet de optimale proefopzet  $\underline{p}_{kw}^*$  van het functie-model wordt toegepast. Uiteraard is

$$\text{tr } D(x_j, \underline{p}_{kw}^*) \geq \text{tr } D(x, \underline{p}^*), \quad j=1, \dots, 21.$$

Als

$$\text{tr } D(x_j, \underline{p}_{kw}^*) \cong \text{tr } D(x_j, \underline{p}^*), \quad j=1, \dots, 21$$

is  $\underline{p}_{kw}^* \cong \underline{p}^*$  en is de invloed van het afgeleide-model verwaarloosbaar. Het is dan niet meer zinvol partiële afgeleiden te gebruiken t.b.v. het schatten van de parameters. Dit is hier het geval in het gebied  $0 \leq x \leq 100$ . In de gebieden  $0 \leq x \leq 0.1$  en  $0 \leq x \leq 1$  is het zinvol partiële afgeleiden te betrekken bij het proefopzetten en het schatten van de parameters doordat de gemiddelde som van de varianties in de respons-schattingen over de beschouwde gebieden,

$$\frac{1}{21} \sum_{j=1}^{21} \text{tr } D(x_j, \underline{p}^*),$$

kleiner wordt:

- in  $0 \leq x \leq 0.1$  ontstaat als gemiddelde 2.37,
- in  $0 \leq x \leq 1$  ontstaat als gemiddelde 2.27, terwijl
- in  $0 \leq x \leq 100$  ontstaat als gemiddelde 2.44.

De figuren 5.2.2.8a, b en c geven de bijdrage van het functie-model en de bijdrage van het afgeleide-model aan  $\text{tr } D(x_j, \underline{p}^*)$ ,  $j=1, \dots, 21$  weer. In het gebied  $0 \leq x \leq 0.1$  is de variantie in de respons-schattingen van het functie-model vrijwel konstant t.g.v. de konstante term  $b_1$ . In het gebied  $0 \leq x \leq 1$  zijn de 1<sup>e</sup> en 2<sup>e</sup> graads term in het functie-model niet meer verwaarloosbaar t.o.v. hun overeenkomstige term in het afgeleide-model. In het gebied  $0 \leq x \leq 100$  is de bijdrage van het afgeleide-model verwaarloosbaar klein geworden.

5.2.3 Excursie-algorithme.

Omdat in de literatuur geen vergelijkingsmateriaal voorhanden is, zullen de resultaten worden vergeleken met de diskrete proefopzetten uit de vorige paragraaf.

De tabellen 5.2.3.1 en 5.2.3.2 geven de resultaten weer van het DO-, AV-, MV- en het AM-kriterium voor de modelkombinaties van de voorbeelden 1 en 2.

Teneinde een betere vergelijking met het AP-algoritme mogelijk te maken, werd herhaald opnemen van kandidaatpunten in de proefopzet toegestaan.

De figuren 5.2.3.3a t/m d geven de gevonden optimale exakte proefopzetten weer, te zamen met de optimale diskrete proefopzetten uit de vorige paragraaf.

Konklusies:

- Alle criteria convergeren naar een optimum.
- Elk criterium levert proefopzetten op die alleen optimaal zijn m.b.t. het eigen criterium. Zo levert bijvoorbeeld het MV-kriterium geen proefopzetten op met een lagere gemiddelde variantie dan het AV-kriterium.
- Er treden concentraties van punten op, waardoor de proefopzetten meer op de diskrete proefopzetten gelijken. Dit maakt ze optimaler dan wanneer geen herhalingen werden toegestaan.
- Het AM-kriterium levert robuuste proefopzetten op met zeer hoge rendementen; 98.2% en 97.9% voor resp. voorbeeld 1 en 2. Het niet optreden van herhalingen maakt de proefopzetten robuuster (meer uniform verdeeld) maar dat is wel ten koste gegaan van de optimaliteit van de overige criteria. Zo is de waarde voor het MV-kriterium voor voorbeeld 1 zelfs meer dan verdubbeld. Indien men dus enigs-

zins zeker is van het geponeerde model dan is een robuuste proefopzet niet aanbevelenswaardig.

- De exakte proefopzetten verschillen niet veel van de diskrete proefopzetten.

In de figuren 5.2.3.4a t/m d zijn de exakte proefopzetten gerangschikt naar modelkombinaties.

**Konklusies:**

- De verschillende criteria blijken per model combinatie proefopzetten op te leveren die slechts weinig verschillen van elkaar.
- Schaalgevoeligheid treedt op bij alle criteria (zie figuur 5.2.3.4d).
- De robuuste proefopzetten voor de beide modelkombinaties vallen niet uit de toon bij vergelijking met de overige proefopzetten. Hieruit kan gekonkludeerd worden dat het AM-kriterium ook voor modelkombinaties goed werkt.

Tabel 5.2.3.1: resultaten van het excursie-  
algorithme voor voorbeeld 1.

-----									
INPUT SUMMARY									
-----									
ALGORITHM	EX				CANDIDATES	21	MODELTYPE	G	
CRITERION	DO				OBSERVATIONS	9	PARAMETERS	6	
					PROTECTED	0	VARIABLES	1	
					REPLICATIONS	YES	DEPENDENT	2	
					UPPER LIMIT	15	DERIVATIVES	0	
					LOWER LIMIT	10			
-----									
DESIGN PROPERTIES									
-----									
DESIGN ITERA	REF TIONS	DET**(1/ 6)	MAXIMUM	AVERAGE	MAX E-VAL	TRACE	CORRELATION		
		COVARIANCE	TRACE OF	TRACE OF	COVAR.	COVAR.	AVER	NON	
		MATRIX	VARIANCES	VARIANCES	MATRIX	MATRIX	AGE	ZERO	
-----									
1	103	0.201E+02	0.839E+01	0.548E+01	0.368E+04	0.395E+04	0.99	0.87	40
2	107	0.201E+02	0.824E+01	0.546E+01	0.370E+04	0.397E+04	0.99	0.87	40
3	132	0.201E+02	0.824E+01	0.546E+01	0.370E+04	0.397E+04	0.99	0.87	40
4	89	0.201E+02	0.850E+01	0.548E+01	0.386E+04	0.413E+04	0.99	0.87	40
5	107	0.201E+02	0.835E+01	0.546E+01	0.388E+04	0.415E+04	0.99	0.88	40
ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE									
-----									
INPUT SUMMARY									
-----									
ALGORITHM	EX				CANDIDATES	21	MODELTYPE	G	
CRITERION	AV				OBSERVATIONS	9	PARAMETERS	6	
					PROTECTED	0	VARIABLES	1	
					REPLICATIONS	YES	DEPENDENT	2	
					UPPER LIMIT	15	DERIVATIVES	0	
					LOWER LIMIT	10			
-----									
DESIGN PROPERTIES									
-----									
DESIGN ITERA	REF TIONS	DET**(1/ 6)	MAXIMUM	AVERAGE	MAX E-VAL	TRACE	CORRELATION		
		COVARIANCE	TRACE OF	TRACE OF	COVAR.	COVAR.	AVER	NON	
		MATRIX	VARIANCES	VARIANCES	MATRIX	MATRIX	AGE	ZERO	
-----									
1	54	0.207E+02	0.826E+01	0.513E+01	0.317E+04	0.344E+04	0.99	0.87	40
2	94	0.207E+02	0.836E+01	0.510E+01	0.302E+04	0.330E+04	0.99	0.87	40
3	82	0.207E+02	0.826E+01	0.513E+01	0.317E+04	0.344E+04	0.99	0.87	40
4	94	0.207E+02	0.836E+01	0.511E+01	0.315E+04	0.342E+04	0.99	0.87	40
5	73	0.207E+02	0.828E+01	0.512E+01	0.321E+04	0.348E+04	0.99	0.87	40
ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE									



-----  
INPUT SUMMARY  
-----

ALGORITHM	EX	CANDIDATES	21	MODELTYPE	G
CRITERION	MV	OBSERVATIONS	9	PARAMETERS	6
		PROTECTED	0	VARIABLES	1
		REPLICATIONS	YES	DEPENDENT	2
		UPPER LIMIT	15	DERIVATIVES	0
		LOWER LIMIT	10		

-----

-----  
DESIGN PROPERTIES  
-----

DESIGN REF	ITERA TIONS	DET**(1/ 6) COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM TRACE OF VARIANCES	AVERAGE TRACE OF VARIANCES	MAX E-VAL COVAR. MATRIX	TRACE COVAR. MATRIX	CORRELATION  AVER %NON MAX AGE ZERO
1	114	0.206E+02	0.660E+01	0.568E+01	0.422E+04	0.449E+04	0.99 0.87 40
2	137	0.207E+02	0.666E+01	0.577E+01	0.378E+04	0.407E+04	0.99 0.86 40
3	91	0.207E+02	0.669E+01	0.575E+01	0.379E+04	0.409E+04	0.99 0.86 40
4	92	0.208E+02	0.678E+01	0.581E+01	0.377E+04	0.406E+04	0.99 0.86 40
5	106	0.207E+02	0.666E+01	0.577E+01	0.378E+04	0.407E+04	0.99 0.86 40

ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE

-----  
INPUT SUMMARY  
-----

ALGORITHM	EX	RATIO	0.625	CANDIDATES	21	MODELTYPE	G
CRITERION	AM			OBSERVATIONS	9	PARAMETERS	6
				PROTECTED	0	VARIABLES	1
				REPLICATIONS	NO	DEPENDENT	2
				UPPER LIMIT	15	DERIVATIVES	0
				LOWER LIMIT	10		

-----

-----  
DESIGN PROPERTIES  
-----

DESIGN REF	ITERA TIONS	DET**(1/ 6) COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM TRACE OF VARIANCES	AVERAGE TRACE OF VARIANCES	UNSCALED AVERAGE SQ BIAS	AVERAGE MSE	CORRELATION  AVER %NON MAX AGE ZERO
1	91	0.233E+02	0.142E+02	0.537E+01	0.277E+01	0.151E+02	0.99 0.87 40
2	89	0.236E+02	0.154E+02	0.539E+01	0.282E+01	0.153E+02	0.99 0.87 40
3	154	0.301E+02	0.176E+02	0.810E+01	0.159E+02	0.641E+02	1.00 0.91 40
4	95	0.236E+02	0.154E+02	0.539E+01	0.282E+01	0.153E+02	0.99 0.87 40
5	149	0.246E+02	0.158E+02	0.566E+01	0.461E+01	0.219E+02	0.99 0.88 40
6	91	0.236E+02	0.154E+02	0.539E+01	0.282E+01	0.153E+02	0.99 0.87 40
7	97	0.236E+02	0.154E+02	0.539E+01	0.282E+01	0.153E+02	0.99 0.87 40
8	150	0.543E+02	0.373E+03	0.363E+02	0.496E+02	0.211E+03	0.99 0.87 40
9	98	0.236E+02	0.154E+02	0.539E+01	0.282E+01	0.153E+02	0.99 0.87 40
10	85	0.237E+02	0.154E+02	0.541E+01	0.280E+01	0.153E+02	0.99 0.87 40

ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE

-----  
DESIGN POINTS  
-----

DESIGN REF	1	7	8	9	14	16	17	18	21
1	1	7	8	9	14	16	17	18	21
2	1	6	7	8	9	15	16	17	21
3	3	4	5	6	9	10	11	14	21
4	1	6	7	8	9	15	16	17	21
5	1	5	6	10	11	12	15	17	21
6	1	6	7	8	9	15	16	17	21
7	1	6	7	8	9	15	16	17	21
8	1	4	5	7	10	11	13	15	17
9	1	6	7	8	9	15	16	17	21
10	1	5	7	8	9	15	16	17	21

DESIGN 1 HAS AN EFFICIENCY OF 97.85%

Tabel 5.2.3.2: resultaten van het excursie-  
algorithme voor voorbeeld 2.

-----									
INPUT SUMMARY									
-----									
ALGORITHM	EX			CANDIDATES	21	MODELTYPE	G		
CRITERION	DO			OBSERVATIONS	9	PARAMETERS	3		
				PROTECTED	0	VARIABLES	1		
				REPLICATIONS	YES	DEPENDENT	2		
				UPPER LIMIT	15	DERIVATIVES	0		
				LOWER LIMIT	10				
-----									
DESIGN PROPERTIES									
-----									
DESIGN REF	ITERA TIONS	DET**(1/ 3) COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM TRACE OF VARIANCES	AVERAGE TRACE OF VARIANCES	MAX E-VAL COVAR. MATRIX	TRACE COVAR. MATRIX	[CORRELATION] AVER %NON MAX AGE ZERO		
1	56	0.576E+01	0.316E+01	0.247E+01	0.138E+03	0.142E+03	0.97	0.67	100
2	58	0.576E+01	0.316E+01	0.247E+01	0.138E+03	0.142E+03	0.97	0.67	100
3	58	0.576E+01	0.316E+01	0.247E+01	0.138E+03	0.142E+03	0.97	0.67	100
4	57	0.576E+01	0.316E+01	0.247E+01	0.138E+03	0.142E+03	0.97	0.67	100
5	57	0.576E+01	0.316E+01	0.247E+01	0.138E+03	0.142E+03	0.97	0.67	100
ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE									
-----									
INPUT SUMMARY									
-----									
ALGORITHM	EX			CANDIDATES	21	MODELTYPE	G		
CRITERION	AV			OBSERVATIONS	9	PARAMETERS	3		
				PROTECTED	0	VARIABLES	1		
				REPLICATIONS	YES	DEPENDENT	2		
				UPPER LIMIT	15	DERIVATIVES	0		
				LOWER LIMIT	10				
-----									
DESIGN PROPERTIES									
-----									
DESIGN REF	ITERA TIONS	DET**(1/ 3) COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM TRACE OF VARIANCES	AVERAGE TRACE OF VARIANCES	MAX E-VAL COVAR. MATRIX	TRACE COVAR. MATRIX	[CORRELATION] AVER %NON MAX AGE ZERO		
1	69	0.620E+01	0.450E+01	0.222E+01	0.123E+03	0.128E+03	0.96	0.76	100
2	84	0.620E+01	0.450E+01	0.222E+01	0.123E+03	0.128E+03	0.96	0.76	100
3	63	0.620E+01	0.450E+01	0.222E+01	0.123E+03	0.128E+03	0.96	0.76	100
4	67	0.620E+01	0.450E+01	0.222E+01	0.123E+03	0.128E+03	0.96	0.76	100
5	76	0.620E+01	0.450E+01	0.222E+01	0.123E+03	0.128E+03	0.96	0.76	100
ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE									

-----  
INPUT SUMMARY  
-----

ALGORITHM	EX	CANDIDATES	21	MODELTYPE	G
CRITERION	MV	OBSERVATIONS	9	PARAMETERS	3
		PROTECTED	0	VARIABLES	1
		REPLICATIONS	YES	DEPENDENT	2
		UPPER LIMIT	15	DERIVATIVES	0
		LOWER LIMIT	10		

-----

-----  
DESIGN PROPERTIES  
-----

DESIGN ITERA REF TIONS	DET**(1/ 3) COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM TRACE OF VARIANCES	AVERAGE TRACE OF VARIANCES	MAX E-VAL COVAR. MATRIX	TRACE COVAR. MATRIX	CORRELATION  AVER %NON AGE ZERO
1 63	0.592E+01	0.315E+01	0.248E+01	0.148E+03	0.152E+03	0.97 0.71 100
2 64	0.592E+01	0.315E+01	0.248E+01	0.148E+03	0.152E+03	0.97 0.71 100
3 72	0.592E+01	0.315E+01	0.248E+01	0.148E+03	0.152E+03	0.97 0.71 100
4 67	0.592E+01	0.315E+01	0.248E+01	0.148E+03	0.152E+03	0.97 0.71 100
5 71	0.592E+01	0.315E+01	0.248E+01	0.148E+03	0.152E+03	0.97 0.71 100

ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE

-----  
INPUT SUMMARY  
-----

ALGORITHM	EX	RATIO	0.508	CANDIDATES	21	MODELTYPE	G
CRITERION	AM			OBSERVATIONS	9	PARAMETERS	3
				PROTECTED	0	VARIABLES	1
				REPLICATIONS	NO	DEPENDENT	2
				UPPER LIMIT	15	DERIVATIVES	0
				LOWER LIMIT	10		

-----

-----  
DESIGN PROPERTIES  
-----

DESIGN ITERA REF TIONS	DET**(1/ 3) COVARIANCE MATRIX	MAXIMUM TRACE OF VARIANCES	AVERAGE TRACE OF VARIANCES	UNSCALED AVERAGE SQ BIAS	AVERAGE MSE	CORRELATION  AVER %NON AGE ZERO
1 83	0.153E+02	0.807E+02	0.111E+02	0.510E+01	0.230E+02	0.97 0.73 100
2 156	0.214E+02	0.214E+03	0.287E+02	0.961E+01	0.510E+02	0.96 0.75 100
3 97	0.693E+01	0.541E+01	0.240E+01	0.208E+01	0.723E+01	0.96 0.79 100
4 92	0.764E+01	0.874E+01	0.271E+01	0.201E+01	0.738E+01	0.95 0.78 100
5 151	0.868E+01	0.831E+01	0.301E+01	0.226E+01	0.825E+01	0.97 0.85 100

ALL PROPERTIES NORMALIZED FOR NUMBER OF OBSERVATIONS AND ERROR VARIANCE

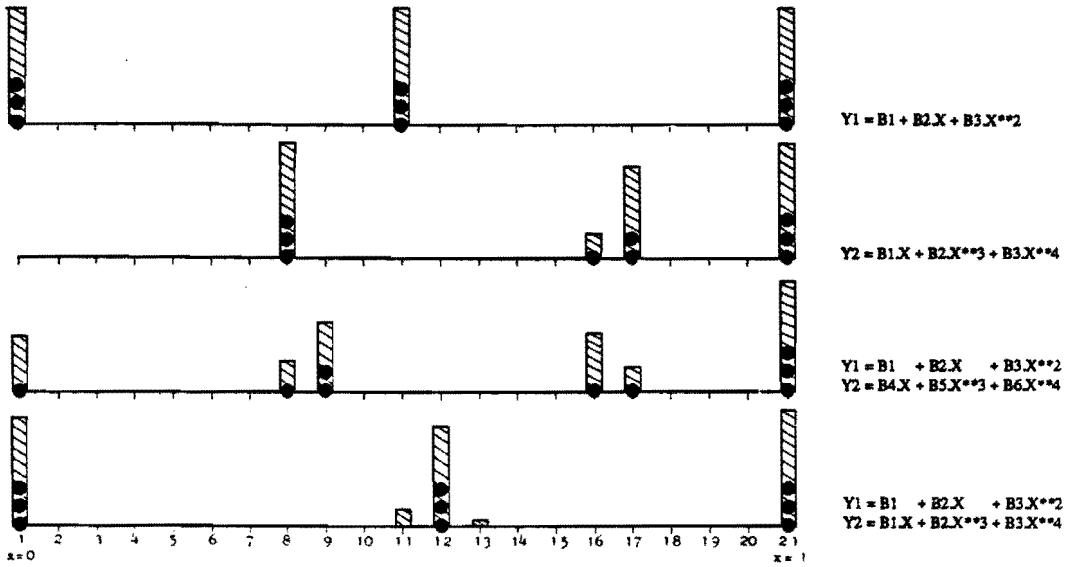
-----  
DESIGN POINTS  
-----

DESIGN REF	1	2	3	8	10	12	13	15	16
1	1	2	3	8	10	12	13	15	16
2	1	2	4	6	9	10	11	13	14
3	1	2	9	10	11	12	13	20	21
4	1	2	3	8	10	11	12	14	21
5	1	4	5	6	7	8	14	15	21

DESIGN 3 HAS AN EFFICIENCY OF 98.20%

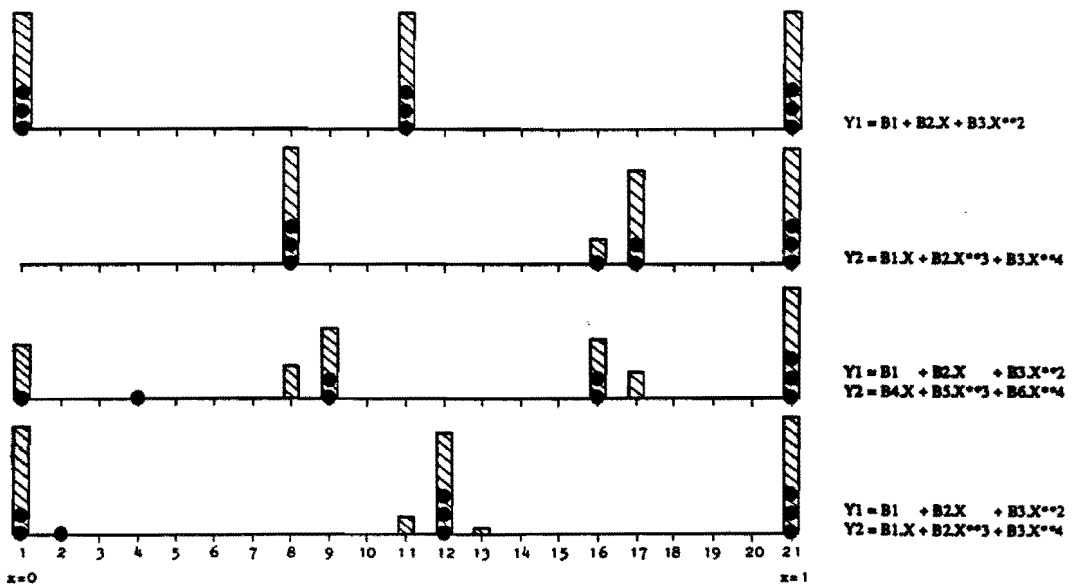
Figuur 5.2.3.3a.

D-optimale diskrete (▨) en exakte (●) proefopzetten (D0).



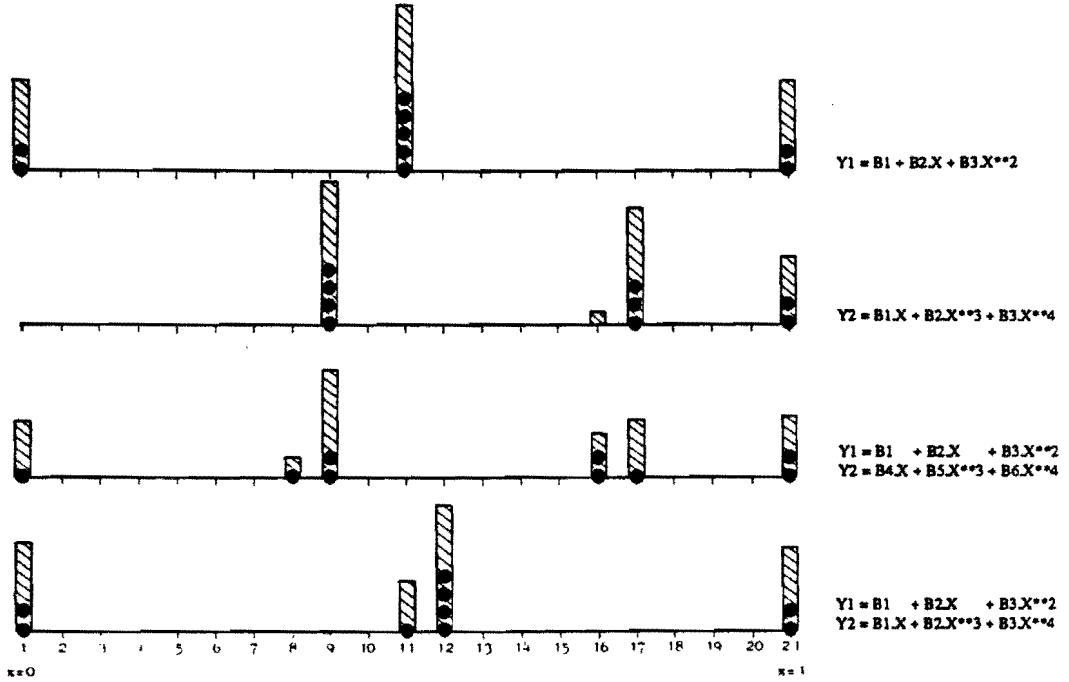
Figuur 5.2.3.3b.

G-optimale diskrete en exakte proefopzetten (MV).



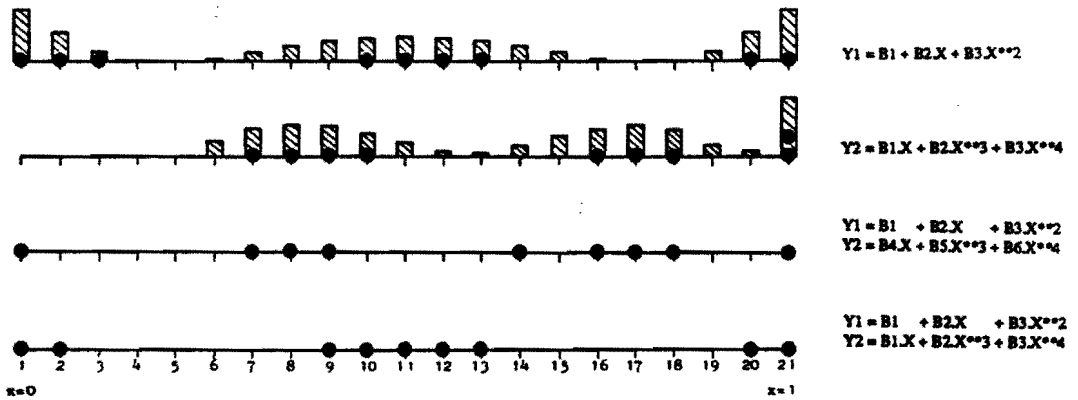
Figuur 5.2.3.3c.

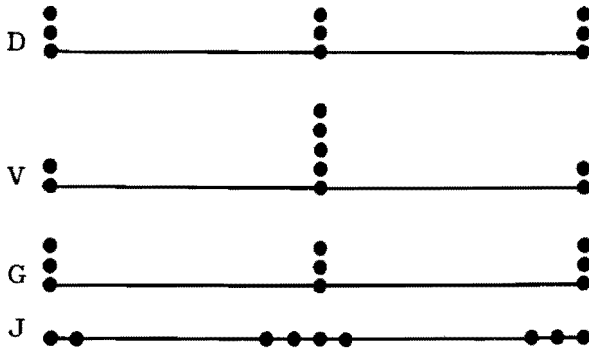
V-optimale diskrete en exakte proefopzettingen (AV).



Figuur 5.2.3.3d.

J-optimale diskrete en exakte proefopzettingen (AM).

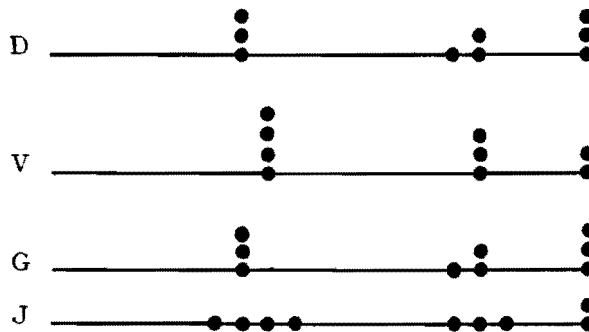




Figuur 5.2.3.4a.

Optimale exakte proefopzetten  
voor model:

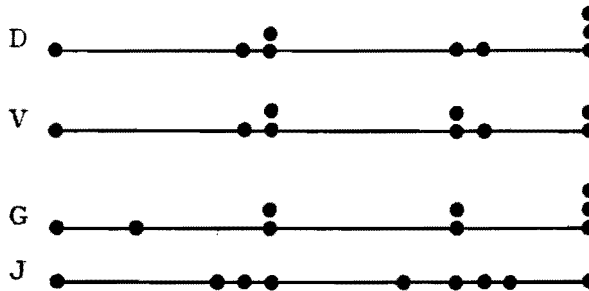
$$y_1 = b_1 + b_2x + b_3x^2$$



Figuur 5.2.3.4b.

Optimale exakte proefopzetten  
voor model:

$$y_2 = b_1x + b_2x^3 + b_3x^4$$

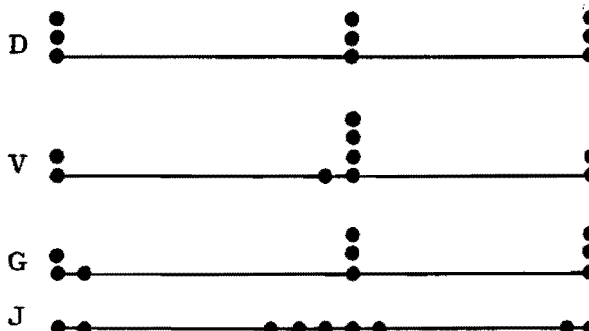


Figuur 5.2.3.4c.

Optimale exakte proefopzetten  
voor modelkombinatie:

$$y_1 = b_1 + b_2x + b_3x^2$$

$$y_2 = b_4x + b_5x^3 + b_6x^4$$



Figuur 5.2.3.4d.

Optimale exakte proefopzetten  
voor modelkombinatie:

$$y_1 = b_1 + b_2x + b_3x^2$$

$$y_2 = b_1x + b_2x^3 + b_3x^4$$

5.3

Modelaanpassing.

Als testcase is gekozen voor de Hald-data, waarvan de gegevens hieronder vermeld staan.

- **Example 7.1** Hald [1952]\* presents data concerning the heat evolved in calories per gram of cement ( $y$ ) as a function of the amount of each of four ingredients in the mix: tricalcium aluminate ( $x_1$ ), tricalcium silicate ( $x_2$ ), tetracalcium aluminato ferrite ( $x_3$ ) and dicalcium silicate ( $x_4$ ).

Observation.					
$i$	$y_i$	$x_{i1}$	$x_{i2}$	$x_{i3}$	$x_{i4}$
1	78.5	7	26	6	60
2	74.3	1	29	15	52
3	104.3	11	56	8	20
4	87.6	11	31	8	47
5	95.9	7	52	6	33
6	109.2	11	55	9	22
7	102.7	3	71	17	6
8	72.5	1	31	22	44
9	93.1	2	54	18	22
10	115.9	21	47	4	26
11	83.8	1	40	23	34
12	113.3	11	66	9	12
13	109.4	10	68	8	12

Montgomery & Peck (1982) hebben hierop m.b.v. het SAS-pakket voorwaartse selectie, achterwaartse eliminatie en stapsgewijze regressie toegepast. De resultaten, behaald met CADE, worden hiermee vergeleken en blijken overeen te stemmen.

5.3.1

Voorwaartse selectie.

```

-----
                          FORWARD SELECTION PROCEDURE
-----
                          INPUT SUMMARY
-----
SELECTION  FORM  F TO ENTER  1.50  MODELTYPE  P  PARAMETER  5
REF. NR.   1    F TO REMOVE 0.00  VARIABLES  4  PROTECTED  0
                               CONF. LEVEL 0.95  DERIVATIVES 0  OBSERVATIONS 13
-----
COMPUTATION BASED ON CORRELATION MATRIX OF INDEPENDENT VARIABLES.
-----
STEP      VARIABLE  NO  F-LEVEL  RESIDUAL SUM  RESIDUAL  R-SQUARED
                OF SQUARES  MEAN SQUARE
-----
  1  ENTERING:    4  22.80  0.88387E+03  0.80352E+02  0.67454
  2  ENTERING:    1  108.22  0.74762E+02  0.74762E+01  0.97247
  3  ENTERING:    2   5.03  0.47973E+02  0.53303E+01  0.98234
-----
NO OTHER VARIABLES MET THE SIGNIFICANCE LEVEL FOR ENTRY INTO THE MODEL.
AFTER DECOMPOSING      :      5.03  0.47973E+02  0.53303E+01  0.98234
IMPROVEMENT OF PARAMETERS BY ITERATIVE REFINEMENT AFTER 2 STEP(S).
ITERATIVE REFINEMENT:      5.03  0.47973E+02  0.53303E+01  0.98234
-----
                          ANALYSIS OF VARIANCE
-----
SOURCE OF  SUM OF  DEGR OF  MEAN SQUARE  F-LEVEL  MULTIPL  STAND ERROR
VARIATION  SQUARES  FREEDOM  F-LEVEL  CORRELA  OF ESTIMA
-----
REGRESSION 0.26678E+04      3  0.88926E+03  166.832  0.99113  0.23087E+01
RESIDUAL   0.47973E+02      9  0.53303E+01
TOTAL     0.27158E+04     12
-----
                          ESTIMATIONS OF PARAMETERS
-----
PARAMETERS      REGRESSION  HALF CONF
                  COEFFICIENT  INTERVAL  F-LEVEL
-----
INTERCEPT      0.71648E+02
MAIN EFFECTS:
VARIABLE  POWER  PARAMETER
-----
  1      1      1      0.14519E+01  0.26467E+00  154.008
  2      1      2      0.41611E+00  0.41988E+00   5.026
  4      1      4     -0.23654E+00  0.39200E+00   1.863
-----
CPU-TIME FOR THIS JOB IN SECONDS :      0.356 .
-----
OBSERVATION  OBSERVED VALUE  PREDICTED VALUE  RESIDUAL
-----
  1      0.785000E+02  0.784383E+02  0.616850E-01
  2      0.743000E+02  0.728673E+02  0.143267E+01
  3      0.104300E+03  0.106191E+03 -0.189096E+01
  4      0.876000E+02  0.894016E+02 -0.180164E+01
  5      0.959000E+02  0.956438E+02  0.256247E+00
  6      0.109200E+03  0.105302E+03  0.389822E+01
  7      0.102700E+03  0.104129E+03 -0.142868E+01
  8      0.725000E+02  0.755919E+02 -0.309188E+01
  9      0.931000E+02  0.918182E+02  0.128177E+01
 10      0.115900E+03  0.115546E+03  0.353883E+00
 11      0.838000E+02  0.817023E+02  0.209773E+01
 12      0.113300E+03  0.112244E+03  0.105562E+01
 13      0.109400E+03  0.111625E+03 -0.222467E+01
-----
SUM OF RESIDUALS: 0.284217E-13

```



FORWARD SELECTION PROCEDURE FOR DEPENDENT VARIABLE Y

STEP 1 VARIABLE X4 ENTERED R SQUARE = 0.67454196  
C(P) = 130.73063349

	DF	SUM OF SQUARES	MEAN SQUARE	F	PROB>F
REGRESSION	1	1831.89616002	1831.89616002	22.80	0.0006
ERROR	11	663.86691890	60.35153790		
TOTAL	12	2715.76307692			

	B VALUE	STD ERROR	TYPE II SS	F	PROB>F
INTERCEPT	117.56793116				
X4	-0.73016181	0.15459600	1831.89616002	22.80	0.0006

STEP 2 VARIABLE X1 ENTERED R SQUARE = 0.97247105  
C(P) = 5.49505082

	DF	SUM OF SQUARES	MEAN SQUARE	F	PROB>F
REGRESSION	2	2641.00096477	1320.50048238	176.63	0.0001
ERROR	10	74.76211216	7.47621122		
TOTAL	12	2715.76307692			

	B VALUE	STD ERROR	TYPE II SS	F	PROB>F
INTERCEPT	103.09736164				
X1	1.43995826	0.13041664	809.10460474	106.22	0.0001
X4	-0.61395363	0.04664455	1190.92463664	159.30	0.0001

STEP 3 VARIABLE X2 ENTERED R SQUARE = 0.98233545  
C(P) = 3.01823347

	DF	SUM OF SQUARES	MEAN SQUARE	F	PROB>F
REGRESSION	3	2667.79034752	889.26344917	166.83	0.0001
ERROR	9	47.97272940	5.33030327		
TOTAL	12	2715.76307692			

	B VALUE	STD ERROR	TYPE II SS	F	PROB>F
INTERCEPT	71.64630697				
X1	1.45193796	0.11699759	820.90740153	154.01	0.0001
X2	0.41610976	0.18561049	26.78938276	5.03	0.0517
X4	-0.23654022	0.17328779	9.93175376	1.86	0.2054

NO OTHER VARIABLES MET THE 0.1000 SIGNIFICANCE LEVEL FOR ENTRY INTO THE MODEL.

Figure 7.8 Computer output (SAS) of forward selection applied to Hald's cement data.

5.3.2

Achterwaartse eliminatie.

-----  
 BACKWARD ELIMINATION PROCEDURE  
 -----

-----  
 INPUT SUMMARY  
 -----

SELECTION	BACKW	F TO ENTER	0.00	MODELTYPE	P	PARAMETER	5
REF. NR.	2	F TO REMOVE	1.50	VARIABLES	4	PROTECTED	0
		CONF.LEVEL	0.95	DERIVATIVES	0	OBSERVATIONS	13

-----  
 COMPUTATION BASED ON CORRELATION MATRIX OF INDEPENDENT VARIABLES.  
 -----

STEP	VARIABLE	NO	F-LEVEL	RESIDUAL SUM OF SQUARES	RESIDUAL MEAN SQUARE	R-SQUARED
1	ENTERING:	4	22.80	0.88387E+03	0.80352E+02	0.67454
2	ENTERING:	1	108.22	0.74762E+02	0.74762E+01	0.97247
3	ENTERING:	2	5.03	0.47973E+02	0.53303E+01	0.98234
4	ENTERING:	3	0.02	0.47864E+02	0.59830E+01	0.98238
5	REMOVING:	3	0.02	0.47973E+02	0.53303E+01	0.98234

NO OTHER VARIABLES IN THE MODEL ARE BELOW THE SIGNIFICANCE LEVEL FOR REMOVING.

AFTER DECOMPOSING : 0.02 0.47973E+02 0.53303E+01 0.98234

IMPROVEMENT OF PARAMETERS BY ITERATIVE REFINEMENT AFTER 2 STEP(S).  
 ITERATIVE REFINEMENT: 0.02 0.47973E+02 0.53303E+01 0.98234

-----  
 ANALYSIS OF VARIANCE  
 -----

SOURCE OF VARIATION	SUM OF SQUARES	DEGR OF FREEDOM	MEAN SQUARE	F-LEVEL	MULTIPL CORRELA	STAND ERROR OF ESTIMA
REGRESSION	0.26678E+04	3	0.88926E+03	166.832	0.99113	0.23087E+01
RESIDUAL	0.47973E+02	9	0.53303E+01			
TOTAL	0.27158E+04	12				

-----  
 ESTIMATIONS OF PARAMETERS  
 -----

PARAMETERS	REGRESSION COEFFICIENT	HALF CONF INTERVAL	F-LEVEL
INTERCEPT	0.71648E+02		
MAIN EFFECTS:			
VARIABLE POWER PARAMETER			
1 1 1	0.14519E+01	0.26467E+00	154.008
2 1 2	0.41611E+00	0.41988E+00	5.026
4 1 4	-0.23654E+00	0.39200E+00	1.863

CPU-TIME FOR THIS JOB IN SECONDS : 0.371 .

BACKWARD ELIMINATION PROCEDURE FOR DEPENDENT VARIABLE Y

STEP 0 ALL VARIABLES ENTERED R SQUARE = 0.90233502  
C(P) = 5.00000000

	DF	SUM OF SQUARES	MEAN SQUARE	F	PROB>F
REGRESSION	4	2667.89943757	666.97465939	111.46	0.0001
ERROR	8	47.86303935	5.98295492		
TOTAL	12	2715.76307692			

	B VALUE	STD ERROR	TYPE III SS	F	PROB>F
INTERCEPT	62.40536930				
X1	1.55110265	0.74470967	25.95091136	4.34	0.0708
X2	0.51016758	0.72378000	2.97247824	0.50	0.5009
X3	0.10190940	0.75470905	0.10909005	0.02	0.8959
X4	-0.14406103	0.70905200	0.24097472	0.04	0.8441

STEP 1 VARIABLE X3 REMOVED R SQUARE = 0.90233545  
C(P) = 3.01623347

	DF	SUM OF SQUARES	MEAN SQUARE	F	PROB>F
REGRESSION	3	2667.79034752	889.26344917	166.83	0.0001
ERROR	9	47.97272940	5.33030327		
TOTAL	12	2715.76307692			

	B VALUE	STD ERROR	TYPE III SS	F	PROB>F
INTERCEPT	71.04630697				
X1	1.45193796	0.11099759	620.90740153	154.01	0.0001
X2	0.41610976	0.16561049	26.76936276	5.03	0.0517
X4	-0.23654022	0.17326779	9.95175370	1.66	0.2054

STEP 2 VARIABLE X4 REMOVED R SQUARE = 0.97667637  
C(P) = 2.67824160

	DF	SUM OF SQUARES	MEAN SQUARE	F	PROB>F
REGRESSION	2	2657.85859375	1328.92929687	229.50	0.0001
ERROR	10	57.90448310	5.79044832		
TOTAL	12	2715.76307692			

	B VALUE	STD ERROR	TYPE III SS	F	PROB>F
INTERCEPT	52.57734668				
X1	1.46630574	0.12130092	648.43160034	146.52	0.0001
X2	0.66225049	0.04585472	1207.76226562	206.56	0.0001

ALL VARIABLES IN THE MODEL ARE SIGNIFICANT AT THE 0.1000 LEVEL.

Figure 7.9 Computer output (SAS) of backward elimination applied to Hald's cement data.

5.3.3

Stapsgewijze regressie.

```

-----
STEPWISE REGRESSION PROCEDURE
-----
INPUT SUMMARY
-----
SELECTION STEPW F TO ENTER 3.00 MODELTYPE P PARAMETER 5
REF. NR. 3 F TO REMOVE 2.50 VARIABLES 4 PROTECTED 0
CONF.LEVEL 0.95 DERIVATIVES 0 OBSERVATIONS 13
-----
COMPUTATION BASED ON CORRELATION MATRIX OF INDEPENDENT VARIABLES.
-----
STEP VARIABLE NO F-LEVEL RESIDUAL SUM RESIDUAL
OF SQUARES MEAN SQUARE R-SQUARED
-----
1 ENTERING: 4 22.80 0.88387E+03 0.80352E+02 0.67454
2 ENTERING: 1 108.22 0.74762E+02 0.74762E+01 0.97247
3 ENTERING: 2 5.03 0.47973E+02 0.53303E+01 0.98234
4 REMOVING: 4 1.86 0.57904E+02 0.57904E+01 0.97868
-----
NO OTHER VARIABLES MET THE SIGNIFICANCE LEVEL FOR ENTRY INTO THE MODEL.
AFTER DECOMPOSING : 1.86 0.57904E+02 0.57904E+01 0.97868
IMPROVEMENT OF PARAMETERS BY ITERATIVE REFINEMENT AFTER 2 STEP(S).
ITERATIVE REFINEMENT: 1.86 0.57904E+02 0.57904E+01 0.97868
-----
ANALYSIS OF VARIANCE
-----
SOURCE OF SUM OF DEGR OF MULTIPL STAND ERROR
VARIATION SQUARES FREEDOM MEAN SQUARE F-LEVEL CORRELA OF ESTIMA
-----
REGRESSION 0.26579E+04 2 0.13289E+04 229.504 0.98928 0.24063E+01
RESIDUAL 0.57904E+02 10 0.57904E+01
TOTAL 0.27158E+04 12
-----
ESTIMATIONS OF PARAMETERS
-----
PARAMETERS REGRESSION HALF CONF
COEFFICIENT INTERVAL F-LEVEL
-----
INTERCEPT 0.52577E+02
MAIN EFFECTS:
VARIABLE POWER PARAMETER
1 1 1 0.14683E+01 0.27028E+00 146.523
2 1 2 0.66225E+00 0.10217E+00 208.582
-----
CPU-TIME FOR THIS JOB IN SECONDS : 0.327 .
-----
OBSERVATION OBSERVED VALUE PREDICTED VALUE RESIDUAL
-----
1 0.785000E+02 0.800740E+02 -0.157400E+01
2 0.743000E+02 0.732509E+02 0.104908E+01
3 0.104300E+03 0.105815E+03 -0.151474E+01
4 0.876000E+02 0.892585E+02 -0.165848E+01
5 0.959000E+02 0.972925E+02 -0.139251E+01
6 0.109200E+03 0.105152E+03 0.404751E+01
7 0.102700E+03 0.104002E+03 -0.130205E+01
8 0.725000E+02 0.745754E+02 -0.207542E+01
9 0.931000E+02 0.912755E+02 0.182451E+01
10 0.115900E+03 0.114538E+03 0.136246E+01
11 0.838000E+02 0.805357E+02 0.326433E+01
12 0.113300E+03 0.112437E+03 0.862758E+00
13 0.109400E+03 0.112293E+03 -0.289344E+01
-----
SUM OF RESIDUALS: -0.710543E-13

```

STEPWISE REGRESSION PROCEDURE FOR DEPENDENT VARIABLE Y

STEP 1 VARIABLE X4 ENTERED R SQUARE = 0.67454196  
C(P) = 138.73083349

	DF	SUM OF SQUARES	MEAN SQUARE	F	PROB>F
REGRESSION	1	1831.89616002	1831.89616002	22.80	0.0006
ERROR	11	863.86691690	80.35153790		
TOTAL	12	2715.76307692			

	B VALUE	STD ERROR	TYPE II SS	F	PROB>F
INTERCEPT	117.56793116				
X4	-0.73816181	0.15459600	1831.89616002	22.80	0.0006

STEP 2 VARIABLE X1 ENTERED R SQUARE = 0.97247105  
C(P) = 5.49585062

	DF	SUM OF SQUARES	MEAN SQUARE	F	PROB>F
REGRESSION	2	2641.00096477	1320.50048238	176.63	0.0001
ERROR	10	74.76211216	7.47621122		
TOTAL	12	2715.76307692			

	B VALUE	STD ERROR	TYPE II SS	F	PROB>F
INTERCEPT	103.09738164				
X1	1.43995828	0.13641664	809.10460474	108.22	0.0001
X4	-0.61395363	0.04664455	1190.92463664	159.30	0.0001

STEP 3 VARIABLE X2 ENTERED R SQUARE = 0.98233545  
C(P) = 3.01823347

	DF	SUM OF SQUARES	MEAN SQUARE	F	PROB>F
REGRESSION	3	2667.79034752	889.26344917	166.63	0.0001
ERROR	9	47.97272940	5.33030327		
TOTAL	12	2715.76307692			

	B VALUE	STD ERROR	TYPE II SS	F	PROB>F
INTERCEPT	71.64630697				
X1	1.45193796	0.11699759	820.90740153	154.01	0.0001
X2	0.41610976	0.18561049	26.76938276	5.03	0.0517
X4	-0.23654022	0.17328779	9.93175314	1.66	0.2054

STEP 4 VARIABLE X4 REMOVED R SQUARE = 0.97867837  
C(P) = 2.67824160

	DF	SUM OF SQUARES	MEAN SQUARE	F	PROB>F
REGRESSION	2	2657.85859375	1328.92929687	229.50	0.0001
ERROR	10	57.90448316	5.79044832		
TOTAL	12	2715.76307692			

	B VALUE	STD ERROR	TYPE II SS	F	PROB>F
INTERCEPT	52.57734866				
X1	1.46830574	0.12130092	846.43166034	146.52	0.0001
X2	0.66225049	0.04585472	1207.76226562	208.58	0.0001

NO OTHER VARIABLES MET THE 0.1000 SIGNIFICANCE LEVEL FOR ENTRY INTO THE MODEL.

Figure 7.10 Continued

5.3.4

Iteratieve verfijning.

De som van de residuen behoort gelijk aan nul te zijn.

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) = \sum_{i=1}^n e_i = 0$$

Afrondfouten kunnen de som beïnvloeden. Met de variabelen 1, 2 en 4 in het model ontstaat na de veegprocedure:

OBSERVATION	OBSERVED VALUE	PREDICTED VALUE	RESIDUAL
1	0.7850000000E+02	0.7843831480E+02	0.6168520372E-01
2	0.7430000000E+02	0.7286733749E+02	0.1432665562E+01
3	0.1043000000E+03	0.1061909673E+03	-0.1890964209E+01
4	0.8760000000E+02	0.8940163766E+02	-0.1801639188E+01
5	0.9590000000E+02	0.9564375422E+02	0.2562473031E+00
6	0.1092000000E+03	0.1053017772E+03	0.3898219790E+01
7	0.1027000000E+03	0.1041286726E+03	-0.1428675658E+01
8	0.7250000000E+02	0.7559187825E+02	-0.3091878245E+01
9	0.9310000000E+02	0.9181822552E+02	0.1281772955E+01
10	0.1159000000E+03	0.1155461186E+03	0.3538829661E+00
11	0.8380000000E+02	0.8170226846E+02	0.2097734587E+01
12	0.1133000000E+03	0.1122443864E+03	0.1055616614E+01
13	0.1094000000E+03	0.1116246681E+03	-0.2224666549E+01

SUM OF RESIDUALS: 0.113035E-05

Na het opnieuw schatten van de parameters m.b.v. Givens-transformaties ontstaat een veel kleinere som van residuen:

OBSERVATION	OBSERVED VALUE	PREDICTED VALUE	RESIDUAL
1	0.7850000000E+02	0.7843831504E+02	0.6168495618E-01
2	0.7430000000E+02	0.7286733752E+02	0.1432665531E+01
3	0.1043000000E+03	0.1061909674E+03	-0.1890964388E+01
4	0.8760000000E+02	0.8940163804E+02	-0.1801639565E+01
5	0.9590000000E+02	0.9564375427E+02	0.2562472539E+00
6	0.1092000000E+03	0.1053017773E+03	0.3898219611E+01
7	0.1027000000E+03	0.1041286726E+03	-0.1428675689E+01
8	0.7250000000E+02	0.7559187828E+02	-0.3091878276E+01
9	0.9310000000E+02	0.9181822535E+02	0.1281773122E+01
10	0.1159000000E+03	0.1155461183E+03	0.3538831829E+00
11	0.8380000000E+02	0.8170226810E+02	0.2097734953E+01
12	0.1133000000E+03	0.1122443868E+03	0.1055616237E+01
13	0.1094000000E+03	0.1116246685E+03	-0.2224666927E+01

SUM OF RESIDUALS: -0.142109E-13

De iteratieve verfijningsprocedure kan daar niets meer aan verbeteren:

OBSERVATION	OBSERVED VALUE	PREDICTED VALUE	RESIDUAL
1	0.7850000000E+02	0.7843831504E+02	0.6168495618E-01
2	0.7430000000E+02	0.7286733752E+02	0.1432665531E+01
3	0.1043000000E+03	0.1061909674E+03	-0.1890964388E+01
4	0.8760000000E+02	0.8940163804E+02	-0.1801639565E+01
5	0.9590000000E+02	0.9564375427E+02	0.2562472539E+00
6	0.1092000000E+03	0.1053017773E+03	0.3898219611E+01
7	0.1027000000E+03	0.1041286726E+03	-0.1428675689E+01
8	0.7250000000E+02	0.7559187828E+02	-0.3091878276E+01
9	0.9310000000E+02	0.9181822535E+02	0.1281773122E+01
10	0.1159000000E+03	0.1155461183E+03	0.3538831829E+00
11	0.8380000000E+02	0.8170226810E+02	0.2097734953E+01
12	0.1133000000E+03	0.1122443868E+03	0.1055616237E+01
13	0.1094000000E+03	0.1116246685E+03	-0.2224666927E+01

SUM OF RESIDUALS: 0.284217E-13

Konvergentie-snelheid.

De konvergentie-snelheid kan beoordeeld worden op grond van opeenvolgende waarden voor

$$\|\Delta e^{(i)}\| \quad \text{en} \quad \|\Delta b^{(i)}\|, \quad i=1,2,\dots$$

Onderstaande tabellen zijn bepaald voor  $\eta=10^{-12}$  en voor  $\eta=10^{-20}$  met de variabelen 1, 2 en 4 in het model opgenomen. We zien hier snelle, kwadratische konvergentie.

```
ITERATIVE REFINEMENT : ETA= 1.0D-12
||e||=      0.6926234E+01
||b||=      0.1528798E+01
STEP=      1
||delta-e||= 0.7864629E-06
||delta-b||= 0.8359474E-07
STEP=      2
||delta-e||= 0.5492038E-13
||delta-b||= 0.6012235E-14
IMPROVEMENT OF PARAMETERS BY ITERATIVE REFINEMENT AFTER  2 STEP(S).
```

```
ITERATIVE REFINEMENT: ETA= 1.0D-20
||e||=      0.6926234E+01
||b||=      0.1528798E+01
STEP=      1
||delta-e||= 0.7864629E-06
||delta-b||= 0.8359474E-07
STEP=      2
||delta-e||= 0.5492038E-13
||delta-b||= 0.6012235E-14
STEP=      3
||delta-e||= 0.2738804E-15
||delta-b||= 0.3024867E-16
STEP=      4
||delta-e||= 0.2738804E-15
||delta-b||= 0.3024867E-16
DESIGNMATRIX TOO ILL CONDITIONED FOR ITERATIVE REFINEMENT.
```

5.3.5 Partiële afgeleiden: iteratieve weegprocedure.

De iteratieve weegprocedure werd getest aan de hand van het volgende model:

$$Y = 0.9 + 3.2 X_1 + 1.1 X_1^2 + 2.5 X_2 + 0.8 X_2^2 + 4.2 X_1 X_2 + 5.1 X_2 X_3$$

$$\frac{dY}{dX_1} = 3.2 + 2.2 X_1 + 4.2 X_2$$

$$\frac{dY}{dX_2} = 2.5 + 4.2 X_1 + 5.1 X_3$$

$$\frac{dY}{dX_3} = 1.6 X_2 + 5.1 X_2$$

Gekozen werd voor een volledige  $3^3$ -proefopzet. Aan ieder van de 3 variabelen  $x_1$ ,  $x_2$  en  $x_3$  werden de nivo's -1, 0 en 1 toegekend.

M.b.v. de NAG random number generator GØ5DDF zijn waarnemingen gegenereerd voor de funktiewaarden en partiële afgeleiden. Voor de standaardafwijkingen werden gekozen:

$$\sigma_y = 1/2$$

$$\sigma_{dy/dx_1} = 1$$

$$\sigma_{dy/dx_2} = 3/2$$

$$\sigma_{dy/dx_3} = 2$$

De weegfactoren zijn dan de reciproke waarden van deze standaardafwijkingen. Tabel 5.3.5.1 geeft de resultaten na de eerste iteratieslag weer van de voorwaartse selectieprocedure, toegepast op het model:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_1^2 + b_3 x_2 + b_4 x_2^2 + b_5 x_3 + b_6 x_3^2 + b_7 x_1 x_2 + b_8 x_1 x_3 + b_9 x_2 x_3$$



Tabel 5.3.5.1

ANALYSIS OF VARIANCE						
SOURCE OF VARIATION	SUM OF SQUARES	DEGR OF FREEDOM	MEAN SQUARE	F-LEVEL	MULTIPL CORRELA	STAND ERROR OF ESTIMA
REGRESSION	0.25454E+04	8	0.31818E+03	219.382	0.97294	0.12043E+01
RESIDUAL	0.14358E+03	99	0.14503E+01	-		
TOTAL	0.26890E+04	107				

ESTIMATIONS OF PARAMETERS						
PARAMETERS			REGRESSION COEFFICIENT	HALF CONF INTERVAL	F-LEVEL	
INTERCEPT			0.64972E+00			
MAIN EFFECTS:						
VARIABLE	POWER	REGRESSOR				
1	1	1	0.33237E+01	0.35622E+00	342.746	
1	2	2	0.11435E+01	0.27057E+00	70.325	
2	1	3	0.24577E+01	0.35622E+00	187.414	
2	2	4	0.24676E+00	0.27057E+00	3.275	
3	2	6	0.63574E+00	0.27057E+00	21.736	
INTERACTION						
		REGRESSOR				
1		7	0.41477E+01	0.34491E+00	569.363	
2		8	0.24611E+00	0.34491E+00	2.005	
3		9	0.51456E+01	0.34491E+00	876.286	

Na 5 iteratieslagen werd een aanmerkelijk beter regressie-model gevonden:

Tabel 5.3.5.2

WEIGHTED ANALYSIS OF VARIANCE						
SOURCE OF VARIATION	SUM OF SQUARES	DEGR OF FREEDOM	MEAN SQUARE	F-LEVEL	MULTIPL CORRELA	STAND ERROR OF ESTIMA
REGRESSION	0.51620E+04	7	0.73743E+03	945.347	0.99253	0.88321E+00
RESIDUAL	0.78006E+02	100	0.78006E+00			
TOTAL	0.52400E+04	107				

ESTIMATIONS OF PARAMETERS						
PARAMETERS			REGRESSION COEFFICIENT	HALF CONF INTERVAL	F-LEVEL	
INTERCEPT			0.60379E+00			
MAIN EFFECTS:						
VARIABLE	POWER	REGRESSOR				
1	1	1	0.33237E+01	0.16469E+00	1603.120	
1	2	2	0.12303E+01	0.18394E+00	176.102	
2	1	3	0.24577E+01	0.16973E+00	825.299	
2	2	4	0.19260E+00	0.20496E+00	3.475	
3	2	6	0.67199E+00	0.25719E+00	26.870	
INTERACTION						
		REGRESSOR				
1		7	0.41458E+01	0.18873E+00	1899.323	
3		9	0.51253E+01	0.20218E+00	2529.649	

MODEL	WEIGHTS	( USED )
1	2.242	( 2 )
2	0.917	( 1 )
3	0.772	( 0.6667 )
4	0.475	( 0.5 )

$R^2$  is hier van 97.3% toegenomen tot 99.3%. De betrouwbaarheidsintervallen van de parameterschattingen zijn veel kleiner geworden, voor een parameter is die zelfs meer dan gehalveerd.

Conclusies en aanbevelingen.

De optimal design theorie vormt een uitstekend alternatief voor de klassieke methoden ter bepaling van fraktionele proefopzetten, zoals die in het verleden in de vakgroep zijn toegepast.

- Het biedt de mogelijkheid de computer in te schakelen, waardoor gebruikersvriendelijke programmatuur kan worden ontwikkeld, hetgeen sterk kostenbesparend werkt.
- De grootte van de proefopzet en het aantal nivo's per onafhankelijke variabele is hier niet aan restricties onderworpen. Bestaande proefopzetten zijn eenvoudig uit te breiden.
- De optimaliserings-kriteria zijn toegesneden op het gebruiksdoel van het model.
- Er is geen specialistische kennis en statistische vaardigheid vereist.
- Het bepalen van proefopzetten voor het gelijktijdig waarnemen van meerdere afhankelijke variabelen behoort tot de mogelijkheden.
- Robuuste proefopzetten houden rekening met systematische afwijkingen.

Het branch & bound algoritme zal nog getest moeten worden.

Het J-kriterium in combinatie met het approximate algoritme werkt bij meerdere afhankelijke variabelen nog niet naar behoren: de gradiënten ter bepaling van een "steepest descent" richting blijken instabiel te zijn.

De selectieprocedures t.b.v. de modelaanpassing werken goed. De iteratieve verfijningsprocedure vertoont snelle, kwadratisch convergentie.

De mogelijkheid bij E.E.M.-analyses partiële afgeleiden te berekenen, is van groot nut:

- de partiële afgeleiden van het model krijgen beteke-

nis en mogen b.v. gebruikt worden in optimaliserings-algorithmen, gebaseerd op gradiëntenmethoden, - het minimum aantal nivo's, voorgeschreven door de graad van de variabele in het model, kan kleiner worden gekozen, waardoor het aantal E.E.M.-analyses sterk gereduceerd kan worden.

Omdat de waarnemingen van de funktiewaarden en de waarden voor de partiële afgeleiden nogal in grootte kunnen verschillen, is de invoering van schaling te overwegen.

Bij één afhankelijke variabele kunnen de optimaliseringskriteria genormeerd worden voor de standaard afwijking. In het geval dat bij het experiment meerdere afhankelijke variabelen betrokken zijn, zullen, voorafgaande aan het bepalen van proefopzetten, schattingen voor de standaard afwijkingen moeten worden bepaald. Tenzij de iteratieve procedure van 4.3.7 wordt toegepast, is het noodzakelijk stochastiek in E.E.M.-programmatuur in te voeren.

Centrering is bij de modelaanpassing standaard. Bij het proefopzetten verbeterd centrering de konditie, de rekentijden lopen dan wel sterk op: telkens als een kandidaatpunt aan de proefopzet wordt toegevoegd, of eruit verwijderd, moet opnieuw gecentreerd worden. Centrering is geen noodzaak omdat het de proefopzet niet beïnvloedt.

Appendix A:  $2^V$ -proefopzetten.

Alle factoren op 2 nivo's: hoog of laag.

Twee alternatieve notaties:

1. Variabelen A,B,C en D.

Nivokombinatie ab betekent: A hoog, B hoog, C laag,  
D laag.

2. Variabelen 1,2,3 en 4.

Nivokombinatie ++-- betekent: 1 hoog, 2 hoog, 3 laag,  
4 laag.

Voorbeeld:  $2^{4-1}$ -fractionele factoriële proefopzet.

Gevraagd wordt een  $\frac{1}{2}$  fractie van een volledige opzet in de vier variabelen 1,2,3 en 4.

Veronderstel dat de interactie 123 verwaarloosbaar is. Dan kunnen de nivo's voor variabele 4 gegenereerd worden met de generator 123, dat is het produkt van de nivo's van 1,2 en 3. We stellen dan  $4=123$ .

experiment	ontwerpmatrix			
	1	2	3	$4=123$
1	-	-	-	-
2	+	-	-	+
3	-	+	-	+
4	+	+	-	-
5	-	-	+	+
6	+	-	+	-
7	-	+	+	-
8	+	+	+	+

Bij dit experiment is 4 verstrengeld met de interactie 123. Wat geschat wordt is de som van de effecten van 4 en 123. Het definiërende contrast van deze fractie noteren we als  $I=1234$ ; het definiërend contrast van de andere fractie is  $I=-1234$ .

Het programma is gebaseerd op notatie 2. De gebruiker wordt gevraagd op te geven:

- het aantal fracties
- het aantal generatoren
- per generator: - het aantal variabelen
  - de nummers van de variabelen
- de nivo's van de variabelen.

Het programma genereert vervolgens de bijbehorende ontwerpmatrix.

In de literatuur zijn uitgebreide tabellen voorhanden met fractionele factoriële proefopzetten. De eerstvolgende twee tabellen geven slechts een kleine selectie uit de veelheid van mogelijke fractionele  $2^v$ -proefopzetten. De daaropvolgende tabel geeft aan waar fractionele  $2^v$ -proefopzetten in de literatuur te vinden zijn.

Number of variables	Number of Runs	Degree of Replication	Type of Design	Method of Introducing "new" factors	Blocking	Method of Introducing Blocks
5	16	$\frac{1}{2}$	$2^{5-1}_V$	$\pm 5 = 1234$	Not Available	
6†	32	$\frac{1}{2}$	$2^{6-1}_V$	$\pm 6 = 12345$	Two blocks of sixteen runs	$B_1 = 123$
7†	64	$\frac{1}{2}$	$2^{7-1}_V$	$\pm 7 = 123456$	Eight blocks of eight runs	$B_1 = 1357$ $B_2 = 1256$ $B_3 = 1234$
8	64	$\frac{1}{2}$	$2^{8-2}_V$	$\pm 7 = 1234$ $\pm 8 = 1256$	Four blocks of sixteen runs	$B_1 = 135$ $B_2 = 348$
9*†	128	$\frac{1}{2}$	$2^{9-2}_V$	$\pm 9 = 14578$ $\pm 10 = 24678$	Eight blocks of sixteen runs	$B_1 = 149$ $B_2 = 1210$ $B_3 = 8910$
10	128	$\frac{1}{2}$	$2^{10-2}_V$	$\pm 8 = 1237$ $\pm 9 = 2345$ $\pm 10 = 1346$	Eight blocks of sixteen runs	$B_1 = 149$ $B_2 = 1210$ $B_3 = 8910$
11	128	$\frac{1}{4}$	$2^{11-4}_V$	$\pm 8 = 1237$ $\pm 9 = 2345$ $\pm 10 = 1346$ $\pm 11 = 1234567$	Eight blocks of sixteen runs	$B_1 = 149$ $B_2 = 1210$ $B_3 = 8910$

G. E. P. BOX AND J. S. HUNTER

Summary of Resolution V designs and their blocks. (All main effects and two-factor interactions clear of one another.)

\*The nine factors in this design are 1, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10. In the text this design is derived from the  $2^{11-4}$  and, as is there explained, it is convenient to drop factors 3 and 11.

† The designs for 6, 7 and 9 variables are of resolution VI, VII and VI respectively before blocking.

Bron: Box, G.E.P & Hunter, J.S. " The  $2^{k-p}$  Fractional Factorial Designs, Part I." Biometrics, Vol 3, no 3, 1961, 311- 351.

SOME FRACTIONAL FACTORIAL DESIGNS FOR THE 2<sup>n</sup> SYSTEM

Fraction	Number of Factors	Number of Experimental Units	Defining Contrasts	Alias of a Main Effect	Alias of a Two-Factor Interaction
1/2	3	4	<i>ABC</i>	2 f int.*	Main effect
.	4	8	<i>ABCD</i>	3 f int.	2 f int.
	5	16	<i>ABCDE</i>	4 f int.	3 f int.
	:	:	:	:	:
1/4	5	8	<i>ABC, ADE</i> ( <i>BCDE</i> )	One or two 2 f ints.	Main effect or 2 f int.
	6	16	<i>ABCF, ADEF</i> ( <i>BCDE</i> )	3 f ints.	One or two 2 f ints.
	7	32	<i>ABCDE, CDFG,</i> <i>ABEFG</i>	3 and 4 f ints.	Mostly 3 f ints. Some 2 f ints.
	8	64	<i>ABCDE, ABFGH</i> ( <i>CDEFGH</i> )	4 f ints.	3 f ints.
1/8	6	8	<i>ADE, BCE, ACF</i> (and products)	2 f ints.	Main effects or 2 f ints.
	7	16	<i>ABCD, CDEF, ACEG</i> (and products)	3 f ints.	2 f ints.
	8	32	<i>ABCD, ABEF, ACFGH</i> (and products)	3 f ints. or higher	Some 2 f ints. Some 3 f ints.
	9	64	<i>ABCD, ABEFG,</i> <i>ACEHJ</i> (and products)	3 f ints. or higher	Mostly 3 f ints. Some 2 f ints.
	10	128	<i>ABCDG, ABEFH,</i> <i>AGHJK</i> (and products)	4 f ints.	3 f ints. and higher
1/16	8	16	<i>ABCD, CDEF,</i> <i>ACEG, EFGH</i> (and products)	3 f ints.	2 f ints.
	9	32	<i>ABCD, ABEF,</i> <i>BCEG, ACEHJ</i> (and products)	3 f ints.	Some 2 f ints. Some 3 f ints.
	10	64	<i>ADHJ, BEGK,</i> <i>ABCGH, ABFJK</i> (and products)	3 f ints.	Some 2 f ints. Some 3 f ints.
1/32	10	32	<i>ABCD, CDEF, EFGH,</i> <i>GHJK, ACEGJ</i> (and products)	3 f ints.	2 f ints.

\* This is an abbreviation for two-factor interaction. The plural form, 2 f ints., is used when one contrast has two or more aliases that are two-factor interactions.

Bron: Cox (1958)



15.11  
15.112

[see also p. 735]

**15.11 Finding list of factorial patterns**

The following abbreviations are used in the list below:

- Latin sq. = Latin square
- Graeco-L. sq. = Graeco-Latin square
- ortho. sq. = complete set of orthogonal Latin squares
- ortho. cubes = complete set of orthogonal Latin cubes
- ortho. part'n = orthogonal partition of a Latin square
- ortho. mtx. = orthogonal matrix: see Paley 1939, Plackett & Burman 1946
- i o j = i-factor interactions clear of j-factor interactions
- sat. = saturated: the number of blocks, plus the number of estimable main effects, equals the total number of trials
- part. = partial confounding

( ) round brackets indicate blocking for two-way control of heterogeneity

— underscoring indicates factors applied to split plots

For further information, consult section 15.10 above.

**15.112 Factorial patterns of the  $2^a$  system**

1. $2^3$ in 4	} $2^2$ in 2.2 $2^3$ in 1.4 Latin sq.	1 c 1	Kitagawa & Mitome 1953(II.1)
			Kempthorne 1947(263), Davies 1954(484)
			Cayley 1890(136), 1897(56), Kitagawa & Mitome 1953(I.1)
2. $2^4$ in 8	} $2^3$ in 2.4 $2^4$ in 1.8 4.2 in 2.4	1 c 2	Kitagawa & Mitome 1953(II.2), Davies 1954(427), Cochran & Cox 1950(186, 208), 1957(215, 234)
			Kempthorne 1947(263), Davies 1954(484), Cochran & Cox 1957(261, 276), Taguchi 1959(135/3)
			Binet et al. 1955(35)
3. $2^5$ in 8	} $2^3$ in 4.2 $2^5$ in 1.8 4.2 <sup>3</sup> in 1.8	1 c 1	Kitagawa & Mitome 1953(II.2)
			Kempthorne 1947(263), Davies 1954(484), Cochran & Cox 1957(261, 277)
			Taguchi 1959(136/4)
4. $2^5$ in 16	$2^4$ in 2.8	1 c 2	Cochran & Cox 1950(186, 208), 1957(215, 234), Kitagawa & Mitome 1953(II.4, II.6), Davies 1954(429), Vianelli 1959(403)

5. $2^5$ in 16	} $2^5$ in 1.16 $4^2$ in 2.8 4.2 <sup>2</sup> in 2.8	2 c 2	Kempthorne 1947(263), Kitagawa & Mitome 1953(III.1), Davies 1954 (485), Cochran & Cox 1957(259, 261, 277), N.B.S. 1957(5)
			Kitagawa & Mitome 1953(II.56), Binet et al. 1955(35)
			Li 1944(461), Cochran & Cox 1950 (186, 216), 1957(215, 242), Kitagawa & Mitome 1953(II.101), Vianelli 1959(406)
6. $2^6$ in 8	} $2^6$ in 1.8 $2^4$ in 4.4 $2^5$ in 2.8 $2^6$ in 1.16 $2^2$ in 2.(4.2) $4^2$ in 4.4 4.2 <sup>2</sup> in 4.4 Latin square	1 c 1	Davies 1954(485), Cochran & Cox 1957(261, 276)
			Cochran & Cox 1950(186, 209), 1957 (215, 236), Kitagawa & Mitome 1953(II.4, II.7), Davies 1954 (428), Vianelli 1959(403)
			Cochran & Cox 1957(261, 277), N.B.S. 1957(5)
7. $2^6$ in 16	} $2^6$ in 1.16 $2^2$ in 2.(4.2) $4^2$ in 4.4 4.2 <sup>2</sup> in 4.4 Latin square	1 c 2	Kempthorne 1947(263), Davies 1954 (486), Cochran & Cox 1957(261, 278), N.B.S. 1957(18)
			Cochran & Cox 1950(256), 1957(332), Kitagawa & Mitome 1953(V.8)
			Li 1944(462), Cochran & Cox 1950 (186, 215), 1957(215, 241), Kitagawa & Mitome 1953(II.58), Binet et al. 1955(35), Vianelli 1959(405)
8. $2^6$ in 32	} $2^5$ in 2.16 $2^6$ in 1.32	2 c 3	Li 1944(459)
			Cayley 1890(136), 1897(56), Euler 1923(299, 301), Fisher & Yates 1938-57(T.XV), Cochran & Cox 1950(119), 1957(145), Kitagawa & Mitome 1953(I.1), Czechowski et al. 1957(100), Vianelli 1959(398)
			Davies 1954(430)
			Brownlee et al. 1948(T.2), Kitagawa & Mitome 1953(III.1), Cochran & Cox 1957(259, 261, 277), N.B.S. 1957(6)

15.112 [see also p. 735]

9.  $2^6$  in 32  $\left\{ \begin{array}{l} 4.2^3 \text{ in } 2.16 \\ 4^2.2 \text{ in } 2.16 \end{array} \right.$  Kitagawa & Mitome 1953(II.106)  
Li 1944(466),  
Kitagawa & Mitome 1953(II.105)

10.  $2^7$  in 8  $\left\{ \begin{array}{l} 2^7 \text{ in } 1.8 \\ \text{ortho. mtr.} \end{array} \right.$  sat. Davies 1954(485),  
Cochran & Cox 1957(261, 280)  
sat. Plackett & Burman 1946(323),  
Taguchi 1959(133/1), 1960(177/2)

11.  $2^7$  in 16  $\left\{ \begin{array}{l} 2^3 \text{ in } 1.(4.4) \\ 2^4 \text{ in } 8.2 \\ 2^5 \text{ in } 4.4 \\ 2^6 \text{ in } 2.8 \\ 2^7 \text{ in } 1.16 \\ 2^4.2^2.2 \text{ in } 4.2.2 \\ \text{ortho. part'n} \\ 2^5 \text{ in } 4.8 \\ 2^6 \text{ in } 2.16 \\ 2^7 \text{ in } 1.32 \\ 4.2^3 \text{ in } 4.8 \\ 4.2^4 \text{ in } 2.16 \\ 4^2.2 \text{ in } 4.8 \end{array} \right.$  Kitagawa & Mitome 1953(V.1)  
Kitagawa & Mitome 1953(II.4, II.6)  
Cochran & Cox 1957(261, 277),  
N.B.S. 1957(5)  
Cochran & Cox 1957(261, 278),  
N.B.S. 1957(18)  
1 c 2 Davies 1954(486), Cochran & Cox  
1957(261, 281), N.B.S. 1957(30)  
Taguchi 1959(163/31)  
(split-split-plot)  
Kitagawa & Mitome 1953(I.22)  
1 c 2 Kempthorne 1947(265), Cochran &  
Cox 1950(186, 209), 1957(215,  
235), Kitagawa & Mitome 1953  
(II.9, II.14), Davies 1954(429),  
Vianelli 1959(403)  
2 c 3 Cochran & Cox 1957(259, 261, 279),  
N.B.S. 1957(7)  
1 c 2 Kempthorne 1947(263), Brownlee et  
al. 1948(T.2), Cochran & Cox  
1957(261, 282), N.B.S. 1957(19)  
Li 1944(468),  
Kitagawa & Mitome 1953(II.104)  
2 c 2 Cochran & Cox 1957(270, 292)  
Li 1944(464),  
Kitagawa & Mitome 1953(II.125)

12.  $2^7$  in 32  $\left\{ \begin{array}{l} 2^7 \text{ in } 1.64 \\ 2^7 \text{ in } 1.64 \end{array} \right.$  3 c 3 Brownlee et al. 1948(T.3),  
Kitagawa & Mitome 1953(III.1),  
Cochran & Cox 1957(259, 261,  
284), N.B.S. 1957(7)

13.  $2^7$  in 64  $\left\{ \begin{array}{l} 2^7 \text{ in } 1.64 \end{array} \right.$  3 c 3 Brownlee et al. 1948(T.3),  
Kitagawa & Mitome 1953(III.1),  
Cochran & Cox 1957(259, 261,  
284), N.B.S. 1957(7)

14.  $2^8$  in 16  $\left\{ \begin{array}{l} 2^6 \text{ in } 4.4 \\ 2^7 \text{ in } 2.8 \\ 2^8 \text{ in } 1.16 \\ \text{Graeco-Latin sq.} \\ \text{ortho. partition} \\ 2^3 \text{ in } 1.(8.4) \\ 2^3 \text{ in } 2.(4.4) \\ 2^5 \text{ in } 8.4 \\ 2^6 \text{ in } 4.8 \\ 2^7 \text{ in } 2.16 \\ 2^8 \text{ in } 1.32 \\ 4.2^2 \text{ in } (4.4).2 \\ 4.2^4 \text{ in } 4.8 \end{array} \right.$  1 c 2 Cochran & Cox 1957(261, 278),  
N.B.S. 1957(18)  
Cochran & Cox 1957(261, 281),  
N.B.S. 1957(30)  
1 c 2 Brownlee et al. 1948(270), Davies  
1954(486), Cochran & Cox 1957  
(261, 285), N.B.S. 1957(41)  
Euler 1923(347, 348, 448),  
Cochran & Cox 1950(120), 1957  
(146), Vianelli 1959(400)  
Kitagawa & Mitome 1953(I.22)  
Yates 1937(32)  
Yates 1937(32), Cochran & Cox  
1950(252), 1957(328),  
Vianelli 1959(407)  
Kitagawa & Mitome 1953(II.9,  
II.17), Davies 1954(428)  
Kempthorne 1947(266), Brownlee et  
al. 1948(T.2), Kitagawa &  
Mitome 1953(III.3, III.4),  
Cochran & Cox 1957(261, 279),  
N.B.S. 1957(6)  
Cochran & Cox 1957(261, 282),  
N.B.S. 1957(20)  
1 c 2 Kempthorne 1947(266), Brownlee et  
al. 1948(T.2), Cochran & Cox  
1957(261, 286), N.B.S. 1957(30)  
Kitagawa & Mitome 1953(IV.2)  
Brownlee et al. 1948(275),  
Cochran & Cox 1957(276, 292)  
1 c 2 Cochran & Cox 1950(186, 209),  
1957(215, 234), Kitagawa &  
Mitome 1953(II.21, II.22),  
Davies 1954(430),  
Vianelli 1959(403)  
2 c 4 Cochran & Cox 1957(259, 261, 284),  
N.B.S. 1957(7)

15.  $2^8$  in 32  $\left\{ \begin{array}{l} 2^6 \text{ in } 4.16 \\ 2^7 \text{ in } 2.32 \end{array} \right.$  1 c 2 Cochran & Cox 1950(186, 209),  
1957(215, 234), Kitagawa &  
Mitome 1953(II.21, II.22),  
Davies 1954(430),  
Vianelli 1959(403)  
2 c 4 Cochran & Cox 1957(259, 261, 284),  
N.B.S. 1957(7)

16.  $2^8$  in 64  $\left\{ \begin{array}{l} 2^6 \text{ in } 4.16 \\ 2^7 \text{ in } 2.32 \end{array} \right.$  1 c 2 Cochran & Cox 1950(186, 209),  
1957(215, 234), Kitagawa &  
Mitome 1953(II.21, II.22),  
Davies 1954(430),  
Vianelli 1959(403)  
2 c 4 Cochran & Cox 1957(259, 261, 284),  
N.B.S. 1957(7)

[see also p. 725]

15.112			
17. $2^8$ in 64	$2^6$ in 1.64	2 c 2	Brownlee et al. 1948(T.3), Kitagawa & Mitome 1953(III.10), Cochran & Cox 1957(259, 261, 288), N.B.S. 1957(20)
	$4^3$ in 4.16		Kitagawa & Mitome 1953(II.6A), Binet et al. 1955(42)
18. $2^8$ in 128	$2^6$ in 1.128	3 c 4	Cochran & Cox 1957(259, 261, 288), N.B.S. 1957(5)
	$2^5$ in 1.(4.4)		N.B.S. 1957(5), Taguchi 1959(141/9)
19. $2^9$ in 16	$2^6$ in 8.2		N.B.S. 1957(18)
	$2^7$ in 4.4		Cochran & Cox 1957(261, 260), N.B.S. 1957(30)
	$2^6$ in 2.8		Cochran & Cox 1957(261, 265), N.B.S. 1957(42)
	$2^6$ in 8.4		Brownlee et al. 1948(T.2), Cochran & Cox 1957(261, 279), N.B.S. 1957(6)
	$2^7$ in 4.8		Brownlee et al. 1948(T.2), Cochran & Cox 1957(261, 282), N.B.S. 1957(19)
20. $2^9$ in 32	$2^6$ in 2.16		Cochran & Cox 1957(261, 285), N.B.S. 1957(31)
	$2^9$ in 1.32	1 c 2	Brownlee et al. 1948(T.2), N.B.S. 1957(42)
	$4.2^3$ in (4.4).2		Kitagawa & Mitome 1953(IV.3)
	$2^6$ in 8.8		Cochran & Cox 1950(186, 211), Kitagawa & Mitome 1953(II.22), Davies 1954(429), Vianelli 1959(404)
21. $2^9$ in 64	$2^7$ in 4.16	2 c 4	Brownlee et al. 1948(T.3), Cochran & Cox 1957(259, 261, 284), N.B.S. 1957(8)
	$2^6$ in 2.32	2 c 2	Cochran & Cox 1957(259, 261, 286), N.B.S. 1957(22)
	$2^9$ in 1.64	1 c 2	Brownlee et al. 1948(T.3), N.B.S. 1957(32)

			15.112
	$2^3.2$ in 2.(8.4)		Cochran & Cox 1950(257), 1957(333), Kitagawa & Mitome 1953(V.8), Vianelli 1959(409)
	$2^3.2^2$ in [2.2].(4.4)		Cochran & Cox 1950(258), 1957(334), Kitagawa & Mitome 1953(V.13), Vianelli 1959(409)
22. $2^9$ in 64	$4^3$ in 8.8		Kitagawa & Mitome 1953(II.62)
	$4.2^3$ in 4.(8.2)		Yates 1937(79), Kitagawa & Mitome 1953(V.10)
	$4.2^3$ in (4.4).4		Kitagawa & Mitome 1953(IV.3)
	$4^2.2^3$ in 4.16	2 c 2	Brownlee et al. 1948(275)
	8.4 in 4.(8.2)		Yates 1937(79)
	Latin square		Euler 1923(343), Fisher & Yates 1938-57(T.XV), Cochran & Cox 1950(119), 1957(145), Kitagawa & Mitome 1953(I.16), Czechowski et al. 1957(100), Vianelli 1959(400)
	$2^7$ in 4.32		Kitagawa & Mitome 1953(II.24)
23. $2^5$ in 128	$2^8$ in 2.64	3 c 4	Cochran & Cox 1957(259, 261, 289), N.B.S. 1957(12)
	$2^9$ in 1.128	2 c 3	Brownlee et al. 1948(274), N.B.S. 1957(22)
24. $2^9$ in 256	$2^9$ in 1.256	4 c 4	N.B.S. 1957(12)
	$2^6$ in 1.(4.4)		N.B.S. 1957(18)
	$2^6$ in 1.(8.2)		N.B.S. 1957(18)
25. $2^7$ in 16	$2^8$ in 4.4		Brownlee et al. 1948(290), Cochran & Cox 1957(261, 285), N.B.S. 1957(41)
	orthogonal squares		Fisher & Yates 1938-57 (T.XVI), Bose & Nair 1941 (381)*, Kitagawa & Mitome 1953(I.18), Czechowski et al. 1957(100), Vianelli 1959(400)

\*In symbolic form

15.112			[see also p. 735]	
26.	$2^{10}$	in 16	orthogonal matrix	Taguchi 1960(221/46)
27.	$2^{10}$	in 32	$2^7$ in 8.4	Brownlee et al. 1948(T.2), Cochran & Cox 1957(261, 281), N.B.S. 1957(19)
			$2^6$ in 4.8	Brownlee et al. 1948(T.2), Cochran & Cox 1957(261, 286), N.B.S. 1957(31)
			$2^9$ in 2.16	N.B.S. 1957(43)
			$2^{10}$ in 1.32	1 c 2 Brownlee et al. 1948(T.2), N.B.S. 1957(52)
28.	$2^{10}$	in 64	$2^4$ in 1.(8.8)	Cochran & Cox 1950(252), 1957(326), Kitagawa & Mitome 1953(V.2), Vianelli 1959(407)
			$2^6$ in 16.4	Davies 1954(428)
			$2^7$ in 8.8	2 c 4 Brownlee et al. 1948(T.3), Kitagawa & Mitome 1953 (III.3, III.7), Cochran & Cox 1957(259, 261, 284), N.B.S. 1957(8)
			$2^8$ in 4.16	2 c 2 Brownlee et al. 1948(T.3), Kitagawa & Mitome 1953 (III.12), Cochran & Cox 1957(259, 261, 287), N.B.S. 1957(21)
			$2^9$ in 2.32	N.B.S. 1957(33)
			$2^{10}$ in 1.64	1 c 2 Brownlee et al. 1948(T.3), N.B.S. 1957(43)
			$2^4.2$ in 2.(8.4)	Cochran & Cox 1950(258), 1957(334), Kitagawa & Mitome 1953(V.9), Vianelli 1959(409)
			$2^4.2^2$ in [2.2].(4.4)	Cochran & Cox 1950(258), 1957(334), Kitagawa & Mitome 1953(V.14), Vianelli 1959(409)
			$4^3$ in 16.4	Kitagawa & Mitome 1953 (II.65)
			$4.2^2$ in 1.(8.8)	Cochran & Cox 1950(256), 1957(332)

				15.112
29.	$2^{10}$	in 64	Latin cube	Kishen 1949(41)
30.	$2^{10}$	in 128	$2^7$ in 8.16	Kitagawa & Mitome 1953(II.24), Davies 1954(430)
			$2^8$ in 4.32	3 c 4 Cochran & Cox 1957(259, 261, 289), N.B.S. 1957(11)
			$2^9$ in 2.64	2 c 3 K.B.S. 1957(24)
31.	$2^{10}$	in 255	$2^{10}$ in 1.128	2 c 2 Kempthorne 1947(264), Brownlee et al. 1948(274), N.B.S. 1957(34)
			$2^8$ in 4.64	Kitagawa & Mitome 1953(II.16)
			$2^9$ in 2.128	4 c 4 N.B.S. 1957(17)
			$2^{10}$ in 1.256	2 c 3 N.B.S. 1957(25)
32.	$2^{11}$	in 12	ortho. matrix	sat. Plackett & Burman 1946(323), Taguchi 1960(177/2)
33.	$2^{11}$	in 16	$2^7$ in 1.(4.4)	K.B.S. 1957(30)
			$2^6$ in 1.(8.4)	Brownlee et al. 1948(T.2), N.B.S. 1957(6)
34.	$2^{11}$	in 32	$2^8$ in 8.4	Brownlee et al. 1948(T.2), Cochran & Cox 1957(261, 286), N.B.S. 1957(30)
			$2^9$ in 4.8	Brownlee et al. 1948(T.2), N.B.S. 1957(42)
			$2^{10}$ in 2.16	K.B.S. 1957(53)
			$2^{11}$ in 1.32	K.B.S. 1957(58)
			$2^5$ in 1.(8.8)	Yates 1937(35), Cochran & Cox 1950(253), 1957(339), Kitagawa & Mitome 1953(V.2), Vianelli 1959(407)
35.	$2^{11}$	in 64	$2^7$ in 16.4	Brownlee et al. 1948(T.3), Cochran & Cox 1957(261, 283), N.B.S. 1957(7)
			$2^8$ in 8.8	Brownlee et al. 1948(T.3), Cochran & Cox 1957(251, 287), N.B.S. 1957(21)
			$2^9$ in 4.16	Brownlee et al. 1948(T.3), N.B.S. 1957(33)
			$2^{10}$ in 2.32	K.B.S. 1957(44)

Appendix B

Gegeneraliseerde update-formules.

We voeren de volgende verkorte notaties in:

$$A = M^{-1}(\underline{p})M^*(\underline{p}_{un})M^{-1}(\underline{p})$$

$$B = QQ'$$

$$C = \frac{1}{2}(H+H')$$

$$H = QQ'M^*(\underline{p}_{un})M^{-1}(\underline{p})$$

$$Q = M^{-1}(\underline{p})W'P\tilde{S}^{-1}$$

$$A_{ij} = W'(\underline{x}_i)AW(\underline{x}_j)$$

$$A_{.j} = AW(\underline{x}_j)$$

$$a_{ij} = \underline{f}'(\underline{x}_i)A\underline{f}(\underline{x}_j)$$

$$a_{.j} = A\underline{f}(\underline{x}_j)$$

$$D_{ij} = W'(\underline{x}_i)M^{-1}(\underline{p})W(\underline{x}_j)$$

$$D_{.j} = M^{-1}(\underline{p})W(\underline{x}_j)$$

$$G_j = (\alpha^{-1}I_m + D_{jj})$$

$$\gamma_j = (\alpha^{-1} + d_{jj})$$

Voor de kwadratische vormen van de matrices B en C worden dezelfde notaties gehanteerd.

De gevonden update-formules zullen telkens worden vergeleken met de resultaten die Welch (1983) vond voor  $m=1$ .

Covariantiematrix.

$$M(p+\alpha\underline{\delta}_j) = M(p) + \alpha M(\underline{\delta}_j)$$

$$M(\underline{\delta}_j) = W(\underline{x}_j)W'(\underline{x}_j)$$

$$\begin{aligned} M^{-1}(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) &= (M(\underline{p}) + \alpha M(\underline{\delta}_j))^{-1} \\ &= (I_k + \alpha M^{-1}(\underline{p})M(\underline{\delta}_j))^{-1} M^{-1}(\underline{p}) \end{aligned}$$

Lemma 2.6.1, Fedorov, 1972:

Zij A een (p.q)-matrix en B een (q.p)-matrix,  
dan geldt:

$$(I_p + AB)^{-1} = I_p - A(I_q + BA)^{-1}B$$

Daarmee ontstaat:

$$M^{-1}(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = M^{-1}(\underline{p}) - D_{.j} G_j^{-1} D'_{.j} \quad (1)$$

Variantie.

$$V(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = \text{tr}\{M^{-1}(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j)M^*(\underline{p}_{un})\}$$

Met (1) ontstaat:

$$V(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = V(\underline{p}) - \text{tr}\{A_{jj} G_j^{-1}\}$$

Welch vond voor  $m=1$ :

$$V(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = V(\underline{p}) - a_{jj}/\gamma_j$$

Bias.

$$B^{**}(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = \text{tr}\{Q(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j)Q'(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j)M^*(\underline{p}_{un})\} - 2k/r + m$$

met

$$Q(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = M^{-1}(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j)W'(\underline{p} + \alpha \sum_{i=1}^m \delta_{j-1+i} \cdot \delta_{j-1+i})\check{S}^{-1}$$

en (1) ontstaat

$$B^{**}(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = B^{**}(\underline{p}) - 2 \operatorname{tr} \{ C_{jj} G_j^{-1} \} + \\ + \operatorname{tr} \{ (I_m (1 + 2p_j \alpha^{-1}) + B_{jj}) G_j^{-1} A_{jj} G_j^{-1} \}$$

Welch vond voor  $m=1$ :

$$B^{**}(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = B^{**}(\underline{p}) - 2c_{jj} \gamma_j^{-1} + \\ + (1 + 2p_j \alpha^{-1} + b_{jj}) \gamma_j^{-2} a_{jj}$$

Gradiënten.

$$\frac{d}{d\alpha} V(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = \frac{V(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) - V(\underline{p})}{\alpha - 0} = -\operatorname{tr} A_{jj}$$

$$\frac{d}{d\alpha} B^{**}(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = -2 \operatorname{tr} C_{jj} + 2p_j \operatorname{tr} A_{jj}$$

Daarmee ontstaat:

$$\varepsilon_j(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = \frac{d}{d\alpha} J^{**}(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = \\ = -\operatorname{tr} A_{jj} + 2nz_{\max}^2 (p_j \operatorname{tr} A_{jj} - \operatorname{tr} C_{jj})$$

Welch vond voor  $m=1$ :

$$\varepsilon_j(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = -a_{jj} + 2nz_{\max}^2 \sigma^{-2} (p_j a_{jj} - c_{jj})$$

Updateformules voor de matrices A, B en C:

$$A(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = A(\underline{p}) - \underbrace{(D_{.j} G_j^{-1} A'_{.j} + (\dots)')}_{\text{id.}} + D_{.j} G_j^{-1} A_{jj} G_j^{-1} D'_{.j}$$

$$B(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = B(\underline{p}) - (D_{.j} G_j^{-1} B'_{.j} + (\dots)') + \\ + D_{.j} G_j^{-1} \Psi_j G_j^{-1} D'_{.j} ,$$

$$\text{met } \Psi_j = [B_{jj} + (1 + 2 p_j \alpha^{-1}) I_m]$$

$$C(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j) = C(\underline{p}) - (D_{.j} G_j^{-1} C'_{.j} + (\dots)') + \\ + D_{.j} G_j^{-1} C_{jj} G_j^{-1} D'_{.j} + \\ - \frac{1}{2} (B_{.j} G_j^{-1} A'_{.j} + (\dots)') + \\ + \frac{1}{2} (D_{.j} G_j^{-1} \Psi_j G_j^{-1} A'_{.j} + (\dots)') + \\ - \frac{1}{2} (B_{.j} G_j^{-1} A_{jj} G_j^{-1} D'_{.j} + (\dots)') + \\ - \frac{1}{2} (D_{.j} G_j^{-1} \Psi_j G_j^{-1} A_{jj} G_j^{-1} D'_{.j} + (\dots)')$$

Voor  $m=1$  vond Welch gelijksoortige uitdrukkingen.

Bij continue proefopzetten worden telkens 2 elementen van  $\underline{p}$  gewijzigd, zodat  $\underline{p}$  overgaat in  $\underline{p} + \alpha(\underline{\delta}_h - \underline{\delta}_i)$ .

Als extra afkortingen worden ingevoerd:

$$\tilde{W}_{hi} = [W(\underline{x}_h) \mid W(\underline{x}_i)]$$

$$\tilde{A}_{hi} = \begin{bmatrix} A_{hh} & A_{hi} \\ \hline A_{ih} & A_{ii} \end{bmatrix} , \text{symmetrisch, met } A_{ih} = A'_{hi}$$

$$\bar{A}_{hi} = \begin{bmatrix} a_{hh} & a_{hi} \\ \hline a_{hi} & a_{ii} \end{bmatrix} , \text{symmetrisch}$$



$$\tilde{B}_{hi} = \left[ \begin{array}{c|c} (1 + 2p_h \alpha^{-1})I_m + B_{hh} & B_{hi} \\ \hline B_{ih} & (1 - 2p_i \alpha^{-1})I_m + B_{ii} \end{array} \right],$$

symmetrisch, met  $B_{ih} = B'_{hi}$

$$\bar{B}_{hi} = \left[ \begin{array}{c|c} 1 + 2p_h \alpha^{-1} + b_{hh} & b_{hi} \\ \hline b_{hi} & 1 - 2p_i \alpha^{-1} + b_{ii} \end{array} \right], \text{ symmetrisch}$$

$$\tilde{C}_{hi} = \left[ \begin{array}{c|c} C_{hh} & C_{hi} \\ \hline C_{ih} & C_{ii} \end{array} \right], \text{ symmetrisch, met } C_{ih} = C'_{hi}$$

$$\bar{C}_{hi} = \left[ \begin{array}{c|c} c_{hh} & c_{hi} \\ \hline c_{hi} & c_{ii} \end{array} \right], \text{ symmetrisch}$$

$$\tilde{G}_{hi} = \left[ \begin{array}{c|c} \alpha^{-1}I_m + D_{hh} & D_{hi} \\ \hline D_{ih} & -\alpha^{-1}I_m + D_{ii} \end{array} \right], \text{ symmetrisch, } D_{ih} = D'_{hi}$$

$$\bar{G}_{hi} = \left[ \begin{array}{c|c} \alpha^{-1} + d_{hh} & d_{hi} \\ \hline d_{hi} & -\alpha^{-1} + d_{ii} \end{array} \right]$$

Covariantie matrix.

$$M^{-1}(\underline{p} + \alpha(\underline{\delta}_h - \underline{\delta}_i)) = M^{-1}(\underline{p}) - M^{-1}(\underline{p}) \tilde{W}_{hi} \tilde{G}_{hi}^{-1} \tilde{W}'_{hi} M^{-1}(\underline{p})$$

Variantie.

$$V(\underline{p} + \alpha(\underline{\delta}_h - \underline{\delta}_i)) = V(\underline{p}) - \text{tr}\{\tilde{A}_{hi} \tilde{G}_{hi}^{-1}\}$$

Welch vond voor  $m=1$ :

$$V(\underline{p} + \alpha(\underline{\delta}_h - \underline{\delta}_i)) = V(\underline{p}) - \text{tr}\{\bar{A}_{hi} \bar{G}_{hi}^{-1}\}$$

Bias.

$$B^{**}(\underline{p} + \alpha(\underline{\delta}_h - \underline{\delta}_i)) = B^{**}(\underline{p}) - 2\text{tr}\{\check{C}_{hi} \check{G}_{hi}^{-1}\} + \\ + \text{tr}\{\check{B}_{hi} \check{G}_{hi}^{-1} \check{A}_{hi} \check{G}_{hi}^{-1}\}$$

Welch vond voor  $m=1$ :

$$B^{**}(\underline{p} + \alpha(\underline{\delta}_h - \underline{\delta}_i)) = B^{**}(\underline{p}) - 2\text{tr}\{T_{hi} \bar{G}_{hi}^{-1}\} + \\ + \text{tr}\{S_{hi} \bar{G}_{hi}^{-1} \bar{A}_{hi} \bar{G}_{hi}^{-1}\},$$

met

$$S_{hi} = \left[ \begin{array}{c|c} b_{hh} - 2p_h d_{hh} + 1 & b_{hi} - (p_h + p_i) d_{hi} \\ \hline b_{hi} - (p_h + p_i) d_{hi} & b_{ii} - 2p_i d_{ii} + 1 \end{array} \right]$$

$$T_{hi} = \left[ \begin{array}{c|c} c_{hh} - p_h a_{hh} & c_{hi} - \frac{1}{2}(p_h + p_i) a_{hi} \\ \hline c_{hi} - \frac{1}{2}(p_h + p_i) a_{hi} & c_{ii} - p_i a_{ii} \end{array} \right]$$

Dit resultaat is echter om te werken tot

$$B^{**}(\underline{p} + \alpha(\underline{\delta}_h - \underline{\delta}_i)) = B^{**}(\underline{p}) - 2\text{tr}\{\bar{C}_{hi} \bar{G}_{hi}^{-1}\} + \\ + \text{tr}\{\bar{B}_{hi} \bar{G}_{hi}^{-1} \bar{A}_{hi} \bar{G}_{hi}^{-1}\}$$

De gradiënten worden verkregen door 2 maal toepassen van  $g_j = \frac{d}{d\alpha} J^{**}(\underline{p} + \alpha \underline{\delta}_j)$ , eerst voor  $j=h$  en vervolgens voor  $j=i$ .

Symbolenlijst.

$\alpha$	onbetrouwbaarheidsnivo
B	systematische variantie
$\underline{b}$	k-vector met modelparameters
c	optimalisatie-kriterium
$d(\underline{x}, \underline{p})$	de, voor $\sigma^2/n$ genormeerde variantie in de respons-schatting in $\underline{x}$
$D(\underline{x}, \underline{p})$	de, voor $S^2/n$ genormeerde variantie-covariantie-matrix in de respons-schatting in $\underline{x}$ , formaat (m.m)
det	determinant
$\underline{\delta}_j$	eenheidsvector in richting j
E	verwachte waarde
$e_i$	toevallige afwijking
$\eta$	rendement van een proefopzet
$\underline{f}(\underline{x})$	k-vector met modelfuncties
$F(\underline{x})$	matrix met modelfuncties, formaat (k.m)
$\phi$	aantal vrijheidsgraden
g	gradiënt
I	eenheidsmatrix
J	genormeerde gemiddelde restkwadratensom
k	aantal parameters
$\chi$	ontwerpruimte
$l_j$	ondergrens voor de fractie van het totale aantal waarnemingen dat in $\underline{x}_j$ moet worden verricht
$\underline{l}$	r-vector met ondergrenzen
m	aantal afhankelijke variabelen
$M(\underline{p})$	informatiematrix, formaat (k.k)
n	aantal punten $\underline{x}$ in de proefopzet
$n_j$	het aantal waarnemingen dat verricht moet worden in $\underline{x}_j$
$p_j$	de fractie van het totale aantal waarnemingen dat in $\underline{x}_j$ moet worden verricht

$\underline{p}$	r-vector met de frakties $p_j$
$\underline{p}^*$	optimale proefopzet
$P$	diagonaalmatrix met frakties $p_j$ op de hoofddiagonaal, formaat (rm.rm)
$r$	het aantal kandidaatpunten
$\sigma$	standaard-afwijking
$S$	diagonaalmatrix met standaard-afwijkingen, formaat (m.m)
$t$	statistische grootheid met Student-verdeling
$tr$	spoor van een matrix
$u_j$	bovengrens voor de fraktie van het aantal waarnemingen dat in $\underline{x}_j$ mag worden verricht
$\underline{u}$	r-vector met bovengrenzen
$v$	aantal onafhankelijke variabelen
$V$	steekproefvariantie
$var$	variantie
$W(\underline{x})$	matrix met gewogen modelfunkties, formaat (k.m)
$\underline{x}$	v-vector in de ontwerpruimte, een nivokombinatie van de onafhankelijke variabelen
$X$	ontwerpmatrix, formaat (rm.k)
$y_i$	waarneming in $x_i$
$z_i$	regressievariabele; ook systematische afwijking

LITERATUURLIJST

Björck, A (1967)

"Iterative Refinement of Linear Least Squares Solutions", BIT 7, 257-278.

Box, G.E.P., Hunter, W.G. en Hunter, J.S. (1978).

"Statistics for Experimenters", New York, John Wiley.

Cochran, W.G. en Cox, G.M. (1950).

"Experimental Designs", New York, John Wiley.

Cox, D.R. (1958).

"Planning of Experiments", New York, John Wiley.

Doornbos, R. (1984).

"Kansberekening en Statistiek 2", T.U. Eindhoven, diktaat nr. 2.319.0.

Draper, N.R. en Smith, H. (1981).

"Applied Regression Analysis", New York, John Wiley.

Dijkstra, O. (1971).

"The Augmentation of Experimental Data to Maximize  $\det(X'X)$ ", Technometrics 13, 682-688.

Efroymson, M.A. (1960).

"Multiple Regression Analysis". In A. Ralston, H.S. Wilf, Mathematical Methods for Digital Computers, New York, John Wiley.

Fedorov, V.V. (1972).

"Theory of Optimal Experiments", Academic Press, New York

Galil, Z. en Kiefer, J. (1977a.)

"Comparison of Simplex Designs for Quadratic Mixture Models". Technometrics, 19, 445-453.

Galil, Z. en Kiefer, J. 1977b.)

"Comparison of Box-Draper and D-optimum Designs for Experiments with Mixtures". Technometrics, 19, 441-444.

Van Heck, J. (1983).

"Notities en voorbeelden bij de statistische theorie van het proefopzetten", T.U. Eindhoven, intern rapport.

Van Heck, J. (1986).

"Evaluatie van de programma's ACED en CADE". Eindhoven, intern rapport DAF-trucks.

Jones, B. en Eccleston, J.A. (1980).

"Exchange and Interchange Procedures to Search for Optimal Designs". Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B., 42, 238-243.

Johnson, M.E., Nachtsheim, C.J. (1983).

"Some Guidelines for Constructing Exact D-optimal Designs on Convex Design Spaces". Technometrics 25, 271-277.

Kiefer, J. en Wolfowitz, J. (1959).

"Optimum Designs in Regression Problems". Ann.Math. Statist., 30, 271-294.

Kiefer, J. en Wolfowitz, J. (1960).

"The Equivalence of Two Extremum Problems". Canadian J. Math., 12, 363-366.

Maas, P.J.J. (1985).

"Onderzoek naar de geometrie van een grote-terts-klok". T.U. Eindhoven, afstudeerverslag nr. WFW 85-027.

Mitchell, T.J. (1974a).

"An Algorithm for the Construction of D-optimal Experimental Designs". Technometrics, 16, 203-210.

Mitchell, T.J. (1974b).

"Computer Construction of D-optimal First-order Designs". Technometrics, 16, 211-220.

Montgomery, D.C., Peck, E.A. (1982).

"Introduction to Linear Regression Analysis",  
New York, John Wiley.

Patterson H.D. (1976).

"Generation of Factorial Designs." *Journal of the  
Royal Statistical Society, Ser B*, 38, 175-179.

Patterson, H.D, Bailey, R.A. (1978).

"Design Keys for Factorial Experiments." *Applied  
Statistics*, 27, 335-343.

Seber. G.A.F. (1977).

"Linear Regression Analysis", New York, John Wiley.

Smith, K. (1918).

"On the Standard Deviations of Adjusted and Interpo-  
lated Values of an Observed Polynomial Function and  
its Constants and the Guidance They Give Towards a  
Proper Choice of the Distribution of Observations",  
*Biometrika*, 12, 1-85.

Welch, W.J. (1982).

"Branch and Bound Search for Experimental Designs  
Based on D-Optimality and Other Criteria",  
*Technometrics*, 24, 41-48.

Welch, W.J. 1983).

"A Mean Squared Error Criterion for the Design of  
Experiments", *Biometrika*, 70, 205-213.

Welch, W.J. (1984).

"Computer Aided Design of Experiments for Response  
Estimation", *Technometrics*, 26, 217-223.

Welch, W.J. (1985).

"Algorithms for the Construction of Experimental  
Designs". *Gebruikershandleiding*, versie 1.6.1.