Statistica Neerlandica **12** (1958), 135—142

Roteerbare proefopzetten *

door A. R. Bloemena

S u m m a r y
Rotatable designs

An expository paper on the rotatable designs developed by B o x *and* H u n t e r, *and their use in regression analysis.*

Bij een proces, dat te beïnvloeden is door k kwantitatieve factoren $x_1, \ldots, x_k$, kan men bij elke combinatie van waarden voor $x_1, \ldots, x_k$ een waarneming $\underline{y}$ doen van een grootheid η (bijv. opbrengst, zuiveringsgraad).

Hierbij is:

$$\underline{y} = \eta + \underline{\varepsilon}$$

waarbij ε, met verwachting 0, de responsiefluctuatie bij constante experimentele condities voorstelt (met inbegrip van de waarnemingsonnauwkeurigheid). Om na te gaan hoe η wordt beïnvloed door de keuze van

$$x_1, \ldots, x_k,$$

gaat men uit van het model, voorgesteld door de vergelijking

$$\eta = E\underline{y} = \beta_o + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_k x_k + \beta_{11} x_1^2 + \ldots + \beta_{kk} x_k^2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \\ + \ldots + \beta_{k-1,k}\, x_{k-1} x_k + \beta_{111} x_1^3 + \ldots, \qquad (1)$$

die van de graad d is in $x_1, \ldots, x_k$.

Men wil nu waarnemingen doen volgens een schema (een „proefopzet''), zodanig dat men uit de waarnemingen de β's kan schatten. Door deze eis is de proefopzet allerminst ondubbelzinnig bepaald. Daarom kan men aan de proefopzet nog verdere eisen stellen, waardoor deze gunstige eigenschappen zal hebben bij toepassing op een specifiek probleem c.q. bij het bepalen van een meerdimensionaal regressie-oppervlak, en als bijzonder geval hiervan bij het opsporen van optimale condities.

Stel dat men n proeven uitvoert en dat bij de u-de proef, waarbij als factoren waarden

$$x_{1u}, \ldots, x_{ku}$$

worden toegepast, een waarneming $\underline{y}_u$ wordt gevonden.

---

*) Voordracht, gehouden op de Statistische Dag 1958.

Rapport S 237 van de Statistische Afdeling van het Mathematisch Centrum, Amsterdam. Hoofd van de Statistische Afdeling: Prof. Dr D. v a n D a n t z i g, Adviseur voor de Statistische Consultatie: Prof. Dr J. H e m e l r ij k.

Teneinde een vergelijking mogelijk te maken tussen verschillende proefopzetten, voeren wij een normering in:

$$\left.\begin{array}{l} \dfrac{1}{n}\sum\limits_{u=1}^{n} x_{iu} = 0 \\[2ex] \dfrac{1}{n}\sum\limits_{u=1}^{n} x_{iu}^{2} = 1 \end{array}\right\} \text{ voor } i = 1, \ldots, k. \tag{2}$$

Definiëren wij [1])

$$\begin{aligned} y' &= (y_1, \ldots, y_n), \\ \beta' &= (\beta_o, \beta_1, \ldots, \beta_k, \beta_{11}, \ldots, \beta_{kk}, \beta_{12}, \ldots), \\ b' &= (b_o, b_1, \ldots, b_k, b_{11}, \ldots, b_{kk}, b_{12}, \ldots) \end{aligned}$$

en

$$X \overset{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} 1 & x_{11} \ldots x_{k1} & x_{11}^2 \ldots x_{k1}^2 & x_{11}x_{21} \ldots x_{k-1,1}x_{k1} & x_{11}^3 \ldots \\ 1 & x_{12} \ldots x_{k2} & x_{12}^2 \ldots x_{k2}^2 & x_{12}x_{22} \ldots x_{k-1,2}x_{k2} & x_{12}^3 \ldots \\ \cdot & \cdot \quad \cdot & \cdot \quad \cdot & \cdot \quad \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \quad \cdot & \cdot \quad \cdot & \cdot \quad \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \quad \cdot & \cdot \quad \cdot & \cdot \quad \cdot & \cdot \\ 1 & x_{1n} \ldots x_{kn} & x_{1n}^2 \ldots x_{kn}^2 & x_{1n}x_{2n} \ldots x_{k-1,n}\, x_{k,n} & x_{1n}^3 \ldots \end{bmatrix}$$

Hierbij is X een $n \times \binom{k+d}{d}$ matrix: voor elke proef heeft X een rij, en voor elke term van het model een kolom. In de onderstelling, dat alle waarnemingen onderling onafhankelijk zijn en dezelfde variantie $\sigma_\epsilon^2 = \sigma^2$ bezitten, zijn de kleinste kwadraten schattingen b van β:

$$\underline{b} = (X'X)^{-1} X'\underline{y}, \tag{3}$$

met als covariantiematrix:

$$E\,(\underline{b} - \beta)\,(\underline{b} - \beta)' = (X'X)^{-1}\sigma^2. \tag{4}$$

Zie bijv. [2].

Uit (3) en (4) ziet men, dat de matrix $(X'X)$ zeer belangrijk is en wel omdat:

a) de nauwkeurigheid van de schattingen door deze matrix wordt bepaald,
b) de hoeveelheid rekenwerk, die men zal ondervinden bij het berekenen van de schattingen in hoofdzaak bepaald wordt door het feit of $(X'X)$ al dan niet gemakkelijk te inverteren is.

Is het schema, volgens welk men de proeven wil uitvoeren vastgesteld,

---

[1]) De getransponeerde van y wordt aangegeven met y'.

dan is daarmee X bekend. Immers, in X komen de waarnemingen, die bij het opstellen van de proefopzet uiteraard nog niet bekend zijn, niet voor. Het is dus van veel belang bij het opstellen van de proefopzet er naar te streven $(X'X)$ een bepaalde gunstige structuur te geven. Nog beter is het uit te gaan van een matrix $(X'X)$, die zonder speciale hulpmiddelen geïnverteerd kan worden en waarbij de schattingen gunstige eigenschappen zullen hebben ten aanzien van het probleem, waarbij de proefopzet wordt toegepast. Uit $(X'X)$ bepaalt men dan de (of een) proefopzet.

Een wel zeer eenvoudige vorm van $(X'X)$ is die, waarbij alleen op de diagonaal elementen $\neq 0$ voorkomen. Tengevolge van de schaalafspraken (2) is dan:

$$(X'X) = nI, \tag{5}$$

waarin I de eenheidsmatrix voorstelt. Alle schattingen zijn dan ongecorreleerd en het rekenwerk, dat men moet verrichten voor het uitrekenen van de schattingen, is zeer gering. Voor $d = 1$, dus voor een model, dat lineair is in $x_1, \ldots, x_k$, is deze „ideale" toestand inderdaad bereikbaar; bijvoorbeeld met een 2^k-schema of een deel hiervan. Hier blijkt al direct, dat alleen door de keuze van $(X'X)$ de proefopzet allerminst vastgelegd is: een 3^k-schema zou, ten koste van een groter aantal proeven, ook tot (5) geleid hebben.

Kiest men $d = 2$, dan is het niet meer mogelijk zonder kunstgrepen een diagonale matrix $(X'X)$ te verkrijgen. Rekening houdend met (4), krijgt men bijv. voor $k = 2$, $d = 2$:

$$(X'X) = \left[\begin{array}{c|cc|cc|c} 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & [12] \\ \hline 0 & 1 & [12] & [111] & [122] & [112] \\ 0 & [12] & 1 & [211] & [222] & [122] \\ \hline 1 & [111] & [112] & [1111] & [1122] & [1112] \\ 1 & [122] & [222] & [1122] & [2222] & [1222] \\ \hline [12] & [112] & [122] & [1112] & [1222] & [1122] \end{array}\right] \tag{6}$$

Hierbij is:

$$[ij] \overset{\text{def}}{=} \frac{1}{n} \sum_{u=1}^{n} x_{iu} x_{ju},$$

$$[iij] \overset{\text{def}}{=} \frac{1}{n} \sum_{u=1}^{n} x_{iu}^2 x_{ju}, \quad \text{enz.}$$

Daar (6) buiten de diagonaal elementen bezit, die $\neq 0$ zijn, kan (6) dus niet identiek zijn met de eenheidsmatrix.

Bij het bepalen van optimale condities zal men de met behulp van (3) gevonden schattingen invullen in het model (1) en dan voor een aantal factorencombinaties de waarde van de responsie $\hat{\eta}$ schatten, die bij ieder van deze factorencombinaties behoort. De schattingen $\underline{b}$ zijn stochastisch, dus ook deze schattingen $\hat{\eta}$. Als voorbeeld nemen wij het geval $k = 2$, $d = 2$, dus een model, dat kwadratisch is in twee grootheden x_1 en x_2. Men voert bijv. een 3^2-schema uit: men kiest dus voor ieder der beide factoren 3 niveaux en de proeven worden gedaan bij alle negen combinaties van deze niveaux. Uit de afspraken (2) volgt dat deze niveaux aangegeven worden als

$$-\tfrac{1}{2}\sqrt{6},\ 0,\ +\tfrac{1}{2}\sqrt{6}.$$

Hierbij wordt X:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2}\sqrt{6} & \frac{1}{2}\sqrt{6} & 3/2 & 3/2 & 3/2 \\ 1 & \frac{1}{2}\sqrt{6} & 0 & 3/2 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{1}{2}\sqrt{6} & -\frac{1}{2}\sqrt{6} & 3/2 & 3/2 & -3/2 \\ 1 & 0 & \frac{1}{2}6 & 0 & 3/2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -\frac{1}{2}\sqrt{6} & 0 & 3/2 & 0 \\ 1 & -\frac{1}{2}\sqrt{6} & \frac{1}{2}\sqrt{6} & 3/2 & 3/2 & 3/2 \\ 1 & -\frac{1}{2}\sqrt{6} & 0 & 3/2 & 0 & 0 \\ 1 & -\frac{1}{2}\sqrt{6} & -\frac{1}{2}\sqrt{6} & 3/2 & 3/2 & -3/2 \end{bmatrix}$$

en dus:

$$(X'X)^{-1} = \frac{1}{9}\left[\begin{array}{c:cc:cc:c} 5 & 0 & 0 & -2 & -2 & 0 \\ \hdashline 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hdashline -2 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ \hdashline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right]$$

Men kan een schatting $\underline{\hat{\eta}}$ doen van de verwachting der responsie, die men volgens het model mag verwachten bij gekozen waarden x_1 en x_2; deze is:

$$\underline{\hat{\eta}} = \underline{b}_o + \underline{b}_1 x_1 + \underline{b}_2 x_2 + \underline{b}_{11} x_1^2 + \underline{b}_{22} x_{21} + \underline{b}_{12} x_1 x_2,$$

waarbij volgens (3):

$$\operatorname{var}\{\underline{\hat{\eta}}\} = \frac{\sigma^2}{9}(5 - 3x_1^2 - 3x_2^2 + 2x_1^4 + 2x_2^4 + x_1^2 x_2^2).$$

Deze variantie is geen functie van alleen $r^2 = x_1^2 + x_2^2$.
Bijvoorbeeld voor $r^2 = 3/2$:

$x_1 = \frac{1}{2}\sqrt{6},\ x_2 = 0$: $\qquad$ $\operatorname{var}\{\underline{\hat{\eta}}\} = \frac{5}{9}$,

$x_1 = \frac{1}{2}\sqrt{3},\ x_2 = \frac{1}{2}\sqrt{3}$; $\qquad$ $\operatorname{var}\{\underline{\hat{\eta}}\} = \frac{53}{144}$.

Bij het opsporen van optimale condities is deze omstandigheid niet gunstig. Men weet immers a priori niet in welke richting het optimum gelegen zal zijn en daarom is het juister, dat de schattingen in alle richtingen even nauwkeurig zijn. Proefopzetten, waarbij dit mogelijk is en waarbij dus var $\{\hat{\underline{\eta}}\}$ alleen een functie is van

$$r^2 = \sum_{i=1}^{k} x_i^2,$$

zijn door G. E. P. Box en J. S. Hunter in [1] roteerbare proefschema's genoemd. Een roteerbaar schema van de orde d is een proefopzet, die de roteerbaarheidseigenschap bezit, indien men uitgaat van een model in de graad d of lager in de onafhankelijke variabelen.

Het is te bewijzen (zie [1]) dat $(X'X)$ bij een roteerbaar schema invariant moet zijn ten opzichte van een orthogonale transformatie van de $x_1, \ldots, x_k$.

Bij een roteerbaar schema van de orde 1, dus een proefopzet, die men zal gebruiken voor het aanpassen van een plat vlak, blijkt dan (5) te moeten gelden. Door de schaalafspraken (2) zijn de diagonaalelementen $= n$, terwijl de roteerbaarheidseis inhoudt, dat de andere elementen $= 0$ zijn. De bekende 2^k factoriële schema's en de partiële schema's hiervan zijn dus roteerbare schema's van de orde 1.

Roteerbare schema's van de orde 2 hebben, rekening houdend met (2), als $(X'X)$ de matrix:

$$\left[\begin{array}{c|ccc|ccc|ccc}
1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline
0 & 1 & & 0 & & & & & & \\
\vdots & & \ddots & & & 0 & & & 0 & \\
0 & 0 & & 1 & & & & & & \\ \hline
1 & & & & 3\lambda & \lambda \cdots & \lambda & & & \\
\vdots & & 0 & & \lambda & \ddots & \lambda & & 0 & \\
1 & & & & \lambda & \cdots \lambda & 3\lambda & & & \\ \hline
0 & & & & & & & \lambda & & 0 \\
\vdots & & 0 & & & 0 & & & \ddots & \\
0 & & & & & & & 0 & & \lambda
\end{array}\right]$$

waarbij λ nog te kiezen is.

Bij toepassen van dit schema krijgt men (zie [1], pag. 213):

$$\text{var } \underline{b}_o = \frac{\sigma^2}{N} 2\lambda^2 (k+2) A,$$

$$\text{var } \underline{b}_i = \frac{\sigma^2}{N},$$

$$\text{var } \underline{b}_{ii} = \frac{\sigma^2}{N} [(k+1)\lambda - (k-1)] A,$$

$$\text{var } \underline{b}_{ij} = \frac{\sigma^2}{N} \cdot \frac{1}{\lambda},$$

$$\text{cov } \underline{b}_o, \underline{b}_{ii} = -\frac{\sigma^2}{N} 2\lambda A,$$

$$\text{cov } \underline{b}_{ii}, \underline{b}_{jj} = \frac{\sigma^2}{N} (1-\lambda) A \text{ en}$$

andere covarianties $= 0$,

terwijl $$A \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\lambda [(k+2)\lambda - k]}.$$

Hierbij wordt:

$$\text{var } \underline{\hat{\eta}} = A [2(k+2)\lambda^2 + 2\lambda(\lambda-1)(k+2) r^2 + \\ + \{(k+1)\lambda - (k-1)\} r^4],$$

hetgeen inderdaad een functie van r^2 is.

Voor $\lambda = 1$ noemt men het schema orthogonaal (een ietwat ongelukkige term, daar de matrices niet orthogonaal zijn; wel zijn de covarianties van $\underline{b}_{ii}$ en $\underline{b}_{jj}$ gelijk aan 0). Voorts moet

$$\lambda > \frac{k}{k+2} \text{ zijn, daar bij } \lambda \to \frac{k}{k+2},\ A \to \infty$$

gaat. Waarden van λ tussen $\frac{k}{k+2}$ en 1 kan men toepassen in gevallen dat men de variantie van de schatting $\underline{\hat{\eta}}$ van de verwachte responsie bij benadering constant wil houden binnen dāt deel van de k-dimensionale ruimte, waarin de experimentele punten gelegen zijn. Dit kan vooral van belang zijn, als men niet een optimum wil bepalen, maar uitsluitend een globale indruk wil krijgen van de samenhang van responsie en de onafhankelijke variabelen.

De opbouw van een dergelijk tweede orde roteerbaar schema (d.w.z. de keuze van X) kan op vele manieren geschieden. Een type, dat bijzonder goed hanteerbaar blijkt te zijn, is als volgt opgebouwd, als configuratie van punten in een k-dimensionaal assenstelsel:

1) $(\frac{1}{2})^p$ deel van een 2^k factorieel schema, met de coördinaten:

$$\pm c, \ \pm c, \ \ldots, \ \pm c.$$

2) $2k$ punten met coördinaten:

$$\begin{array}{cccccc}
+d, & 0, & 0, & \ldots, & 0, & 0 \\
-d, & 0, & 0, & \ldots, & 0, & 0 \\
0, & +d, & 0, & \ldots, & 0, & 0 \\
0, & -d, & 0, & \ldots, & 0, & 0 \\
\cdot & \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot \\
0, & 0, & 0, & \ldots, & 0, & +d \\
0, & 0, & 0, & \ldots, & 0, & -d
\end{array}$$

3) n punten in oorsprong:

$$0, 0, \ldots, 0.$$

Dit schema is roteerbaar (orde 2) als

$$\frac{d^2}{c^2} = 2^{\frac{k-p}{2}},$$

$$c^2 = \frac{2^{k-p} + 2k + n}{2^{k-p} + 2^{\frac{k-p}{2}} + 1},$$

waarbij

$$\lambda = \frac{2^{k-p} + 2k + n}{2^{k-p} + 4\left(1 + 2^{\frac{k-p}{2}}\right)}.$$

Voor een catalogus van deze schema's zie: [1], pag. 227 en 233.

Behalve de roteerbaarheidseigenschap, bezitten de roteerbare schema's nog een aantal andere prettige eigenschappen.

a) De analyse van de waarnemingsresultaten is zeer eenvoudig.

b) Bij een schema van orde $\geqslant 2$ worden een aantal proeven met dezelfde factorencombinatie uitgevoerd. Dit geeft een goede controle op een verloop van de responsie met de tijd. Voorts kan uit deze waarnemingen, indien de responsie in de tijd constant blijft, een zuivere en ongecorreleerde schatting van σ^2 verkregen worden.

c) Het is mogelijk te controleren of het model van de graad d, dat als uitgangspunt is genomen, wel representatief geacht kan worden voor de werkelijke situatie. Onder meer kan dit geschieden door de som van de kwadraten van de verschillen van de waarnemingen en de geschatte modelwaarden te vergelijken met de schatting van σ^2.

d) Indien men een eerste graadsvergelijking aan wil passen, zal hierbij meestal een 2^k-schema worden toegepast. Blijkt nu bij de analyse van de waarnemingen, dat een eerste graadsvergelijking de situatie niet goed weergeeft, dan kan men alsnog de verrichte proeven gebruiken als basis voor een tweede orde schema. Zelfs indien de responsie dan met een voor alle factorenwaarden constant bedrag is toegenomen, wordt alleen de schatting b_0 onzuiver, hetgeen voor het bepalen van optimale condities van geen belang is.

e) Het is mogelijk de proefopzet in gedeelten uit te voeren ("blocking") met eliminatie van een (voor alle factorencombinaties gelijk verondersteld) verloop in de tijd.

Literatuur

[1] Box, G. E. P. and J. S. Hunter, Multifactor experimental designs for exploring response surfaces, A.M.S. **28**, 1955, 195—242.

[2] Van IJzeren, J.: De theoretische zijde van de methode der kleinste kwadraten, Statistica **8**, 1954, 21—47.