

Central Composite Design

Giorgio Marrubini e Camillo Melzi

06 giugno 2020

I disegni fattoriali completi, frazionari e Plackett-Burman sono utili per lo screening dei fattori e delle loro eventuali interazioni che abbiano effetto su un fenomeno analizzato.

In questo capitolo siamo interessati al problema dell'ottimizzazione della variabile risposta nel dominio sperimentale. In termini analitici, per fissare le idee, ciò significa verificare se la risposta sperimentale ha massimi o minimi. Quindi, per gli studi di ottimizzazione, generalmente, bisogna analizzare la forma della superficie di risposta e verificare se essa ha una curvatura.

Per superficie di risposta intendiamo la superficie descritta dalla funzione f , funzione teorica che descrive il fenomeno studiato

$$y = f(X_1, \dots, X_k),$$

dove X_1, \dots, X_k sono i fattori che influenzano il fenomeno studiato. La risposta sarà quindi

$$Y = f(X_1, \dots, X_k) + \epsilon,$$

dove ϵ rappresenta l'errore sulla risposta osservata.

Ricordando che, poichè ogni funzione f passante per un punto $\underline{x}_0 = (x_{01}, \dots, x_{0k})$ di \mathbb{R}^k sufficientemente regolare (ossia differenziabile un numero sufficiente di volte in un intorno di \underline{x}_0) è approssimabile (formula di Taylor) da un polinomio P_m di grado m

$$f(\underline{x}) = P_m(\underline{x}) + R(\underline{x}), \quad \underline{x} \in \mathbb{R}^k$$

dove

$$\lim_{\underline{x} \rightarrow \underline{x}_0} \frac{R(\underline{x})}{\|\underline{x} - \underline{x}_0\|^m} = 0,$$

è sufficiente approssimare la risposta con un modello quadratico (posto $\underline{x}_0 = 0$)

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_k X_k + \beta_{12} X_1 X_2 + \dots + \beta_{k-1,k} X_{k-1} X_k + \beta_{11} X_1^2 + \dots + \beta_{kk} X_k^2 + \epsilon$$

Si osservi che nell'uso dei disegni fattoriali completi, frazionari e di Plackett-Burman abbiamo approssimato la superficie risposta con un piano descritto dal modello lineare contenente solo gli effetti principali dei fattori e abbiamo analizzato le “deformazioni” di questo piano dovute alle interazione tra fattori aggiungendo i termini di interazione a due termini nel modello lineare.

I domini sperimentali considerati in questi disegni non sono adatti ai modelli quadratici in quanto la relativa matrice di informazione non è invertibile, perché le colonne della matrice modello corrispondenti ai termini quadratici coincidono con la colonna *Int.*. Se la matrice di informazione non è invertibile, non esiste matrice di dispersione e non è possibile stimare i coefficienti del modello.

Per ovviare a questo problema Box e Wilson hanno proposto un disegno fattoriale completo a cui vanno aggiunti N punti centrali e $2k$ punti stellati, ossia per ogni fattore X_j consideriamo i punti $(0, \dots, 0, a, 0, \dots, 0)$ e $(0, \dots, 0, -a, 0, \dots, 0)$ lungo l'asse X_j , con $a > 1$. Per ogni fattore sono considerati 5 livelli. Otteniamo così un disegno, chiamato disegno composito centrale e indicato con CCD, di $2^k + 2k + N$ punti. Esempio di un CCD per $k = 2, 3$ e $a > 1$ è rappresentato in [Figura 1](#).

La matrice di tali disegni è data dalla matrice in [Tabella 1](#)

e la matrice relativa al modello quadratico è data dalla [Tabella 2](#).

Con un po' di calcolo si ottiene la matrice di informazione data in [Tabella 3](#).

Si osservi che la correlazione tra i termini lineari e interazioni è nulla (parte dovuta al disegno fattoriale

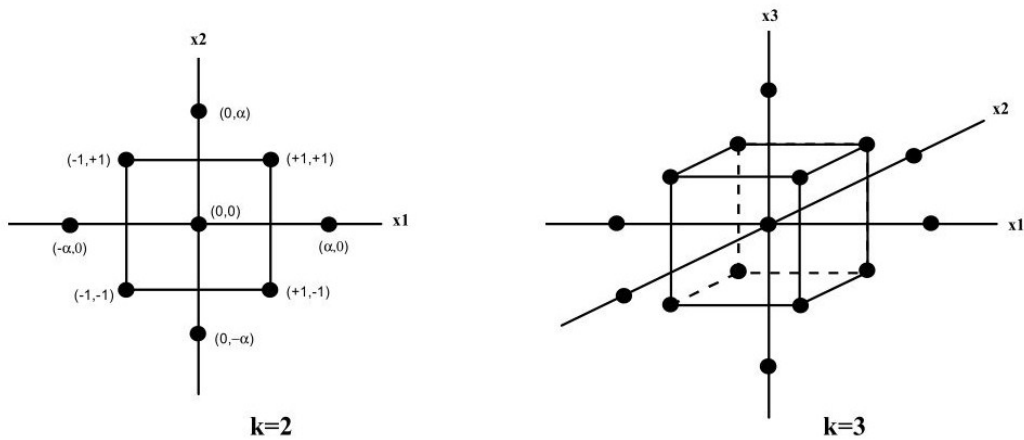


Figura 1: Rappresentazione grafica del posizionamento dei punti stella in CCD

completo 2^k) così come interazione tra i termini lineari e interazione con i termini di secondo grado (questo implica che i termini lineari “leggono” correttamente la crescita o la decrescita della risposta) mentre in generale non è nulla la correlazione tra termini quadratici e i termini quadratici e intercetta.

Nei CCD, per qualsiasi numero k di fattori, devono essere specificati necessariamente ogni volta anche 2 parametri geometrici del disegno: la distanza assiale a dal centro e il numero N di punti centrali. La scelta di questi parametri dipende dalle proprietà che si desidera siano soddisfatte dal CCD.

Ruotabilità - Piano ruotabile - tutte le risposte ottenuti da esperimenti che giacciono su una sfera centrata nel centro sono stimate con la stessa approssimazione e hanno lo stesso valore di Leverage. Ossia $Var(\hat{y})$ e Leverage dipendono solo dalla distanza dal centro.

Per

$$a = \sqrt[4]{2^k}$$

otteniamo un CCD ruotabile.

Sfericità - Piano a simmetria sferica - il disegno è inserito in una sfera centrata nel centro e raggio \sqrt{k} .

Per

$$a = \sqrt{k}$$

otteniamo un CCD sferico.

Si noti che per $k = 2$ le proprietà di ruotabilità e di sfericità coincidono.

Ortogonalità - Piano ortogonale - un CCD è detto ortogonale quando i termini quadratici sono ortogonali tra loro, ossia la correlazione tra termini quadratici è nulla (da non confondere con l'ortogonalità del modello in cui si richiede l'ortogonalità tra tutti i termini, intercetta compresa).

Per

$$a^2 = \frac{\sqrt{(2^k + 2k + N)2^k} - 2^k}{2}$$

otteniamo un CCD ortogonale.

Facce centrate - nel caso in cui la regione dello spazio in cui variano i fattori di interesse sia un cuboide, è possibile aumentare il dominio del piano fattoriale completo scegliendo i punti centrali delle facce del cuboide con

$$a = 1$$

Tabella 1: Matrice disegno composito centrale

	X_1	X_2	\cdots	X_k
1	-1	-1	\cdots	-1
2	1	-1	\cdots	-1
3	-1	1	\cdots	-1
4	1	1	\cdots	-1
\vdots	\vdots	\vdots	\cdots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\cdots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\cdots	\vdots
2^k	1	1	\cdots	1
$2^k + 1$	-a	0	\cdots	1
\vdots	a	0	\cdots	1
\vdots	\vdots	\vdots	\cdots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\cdots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\cdots	\vdots
\vdots	0	0	\cdots	-a
$2^k + 2k$	0	0	\cdots	a
$2^k + 2k + 1$	0	0	\cdots	0
\vdots	\vdots	\vdots	\cdots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\cdots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\cdots	\vdots
$2^k + 2k + N$	0	0	\cdots	0

Un caso particolare interessante è quello per $k=2$: il CCD a facce centrate è identico al piano fattoriale completo 3^2 .

Esempio

Consideriamo la resa Y_1 di una reazione chimica che dipende da 2 fattori: il tempo della reazione X_1 e la temperatura X_2 (cf.(D.C. Montgomery 2013, Ex 11.2)). Siamo interessati a massimizzare la resa Y_1 sotto alcune condizioni (vincoli) sulla viscosità Y_2 e il peso molecolare Y_3 del prodotto. Siamo interessati al seguente problema

$$\begin{aligned} &\text{Max} && Y_1 \\ &\text{sub} && 62 \leq Y_2 \leq 68 \\ &&& Y_3 \leq 3400. \end{aligned}$$

Per affrontare il problema costruiamo un CCD con $k = 2$, $a = \sqrt{2}$ e $N = 2$. Per quanto visto è un disegno sferico, ruotabile non ortogonale.

Il dominio sperimentale con i valori autentici dei fattori, il dominio sperimentale codificato e le risposte sono dati in [Tabella 3](#).

Tabella 2: Matrice modello

	$Int.$	X_1	X_2	\dots	X_k	X_1X_2	\dots	X_k^2
1	1	-1	-1	\dots	-1	1	\dots	1
2	1	1	-1	\dots	-1	-1	\dots	1
3	1	-1	1	\dots	-1	-1	\dots	1
4	1	1	1	\dots	-1	1	\dots	1
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots
2^k	1	1	1	\dots	1	1	\dots	1
$2^k + 1$	1	-a	0	\dots	1	0	\dots	1
\vdots	1	a	0	\dots	1	0	\dots	1
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots
\vdots	1	0	0	\dots	-a	0	\dots	1
$2^k + 2k$	1	0	0	\dots	a	0	\dots	1
$2^k + 2k + 1$	1	0	0	\dots	0	0	\dots	1
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots	\vdots	\dots	\vdots
$2^k + 2k + N$	1	0	0	\dots	0	0	\dots	1

Tabella 4: Dominio sperimentale autentico, dominio sperimentale codificato e risposte

Time	Temp	X1	X2	Y1	Y2	Y3
80.0	170	-1.00	-1.00	76.5	62	2940
90.0	170	1.00	-1.00	78.0	66	3680
80.0	180	-1.00	1.00	77.0	60	3470
90.0	180	1.00	1.00	79.5	59	3890
77.9	175	-1.41	0.00	75.6	71	3020
92.1	175	1.41	0.00	78.4	68	3360
85.0	168	0.00	-1.41	77.0	57	3150
85.0	182	0.00	1.41	78.5	58	3630
85.0	175	0.00	0.00	79.9	72	3480
85.0	175	0.00	0.00	80.3	69	3200

Nell'applicativo, nel menù *CCD* selezioniamo 2 fattori, 2 punti al centro e scegliamo un disegno di tipo sferico, **Figura 2**

Tabella 3: Matrice informazione $X^t X$

	$Int.$	X_1	\dots	X_k	$X_1 X_2$	\dots	$X_{k-1} X_k$	X_1^2	\dots	X_k^2
$Int.$	$2^k + 2k + N$	0	\dots	0	0	\dots	0	$2^k + 2a^2$	\dots	$2^k + 2a^2$
X_1	0	$2^k + 2a^2$	\dots	0	0	\dots	0	0	\dots	0
\cdot	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot
\cdot	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot
\cdot	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot
X_k	0	0	\dots	$2^k + 2a^2$	0	\dots	0	0	\dots	0
$X_1 X_2$	0	0	\dots	0	2^k	\dots	0	0	\dots	0
\cdot	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot
\cdot	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot
\cdot	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot
$X_{k-1} X_k$	0	0	\dots	0	0	\dots	2^k	0	\dots	0
X_1^2	$2^k + 2a^2$	0	\dots	0	0	\dots	0	$2^k + 2a^4$	\dots	2^k
\cdot	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot
\cdot	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot
\cdot	\cdot	1	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot	\cdot	\dots	\cdot
X_k^2	$2^k + 2a^2$	0	\dots	0	0	\dots	0	2^k	\dots	$2^k + 2a^4$

n° fattori

n° punti al centro

tipo:

Figura 2: Scelta numero fattori, punti al centro e tipo di CCD nell'applicativo

Ognuna delle 3 risposte sarà analizzata con il modello quadratico [Figura 3](#). Dalla lettura della matrice di dispersione si nota la non ortogonalità del modello (i termini quadratici sono correlati tra di loro, v. riquadro colorato in giallo nella Figura).

Le linee di livello del Leverage [Figura 4](#) mettono in evidenza invece la ruotabilità del piano sperimentale scelto.

Procediamo come di consueto inserendo le Risposte nell'apposito riquadro. Una volta convalidato il modello con tre misure indipendenti [Tabella 5](#)

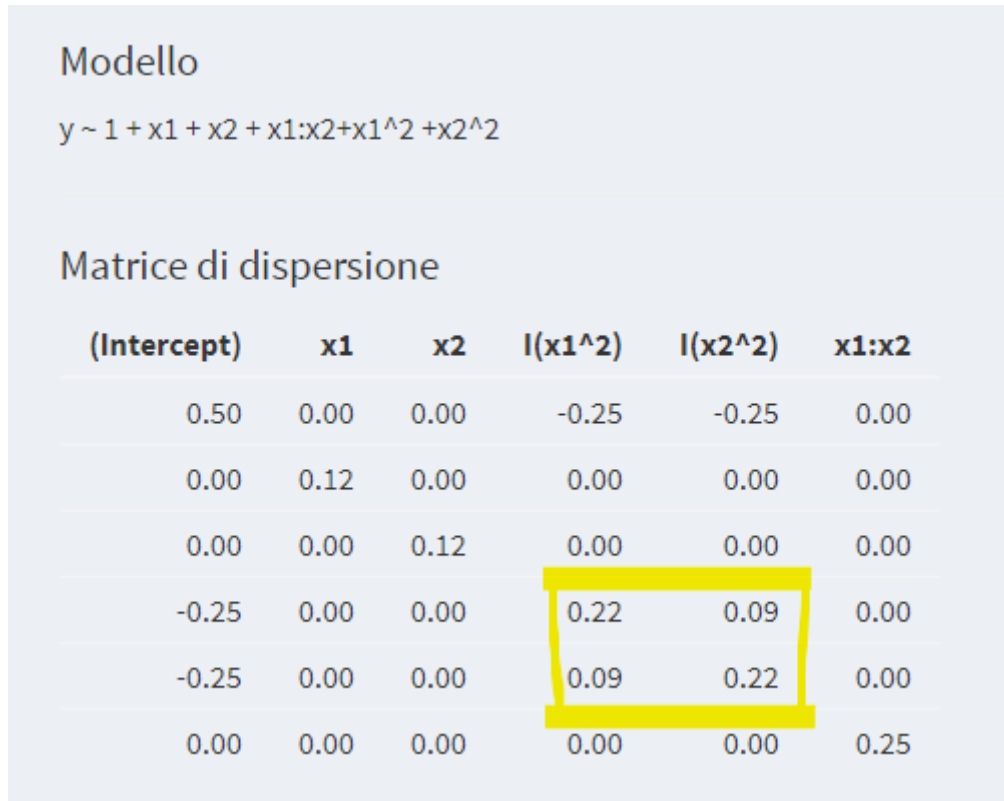


Figura 3: Modello e matrice di dispersione del CCD

Tabella 5: Misure indipendenti per convalidare il modello

	Time	Temp	X1	X2	Y1	Y2	Y3
11	85	175	0	0	80.0	68	3410
12	85	175	0	0	79.7	70	3290
13	85	175	0	0	79.8	71	3500

possiamo utilizzare il grafico delle linee di livello [Figura 5](#) per confrontare le risposte tra di loro.

Nell'applicativo si noti che è possibile scegliere il colore delle linee di livello. Questa risorsa è utile quando, come in questo caso, bisogna confrontare più grafici tra loro [Figura 6](#).

Analizzando i vincoli e le linee di livello della resa Y_1 si vede che le zona in cui cercare soluzione del problema sono quelle colorate in grigio (v. [Figura 6](#)).

Grafico Leverage

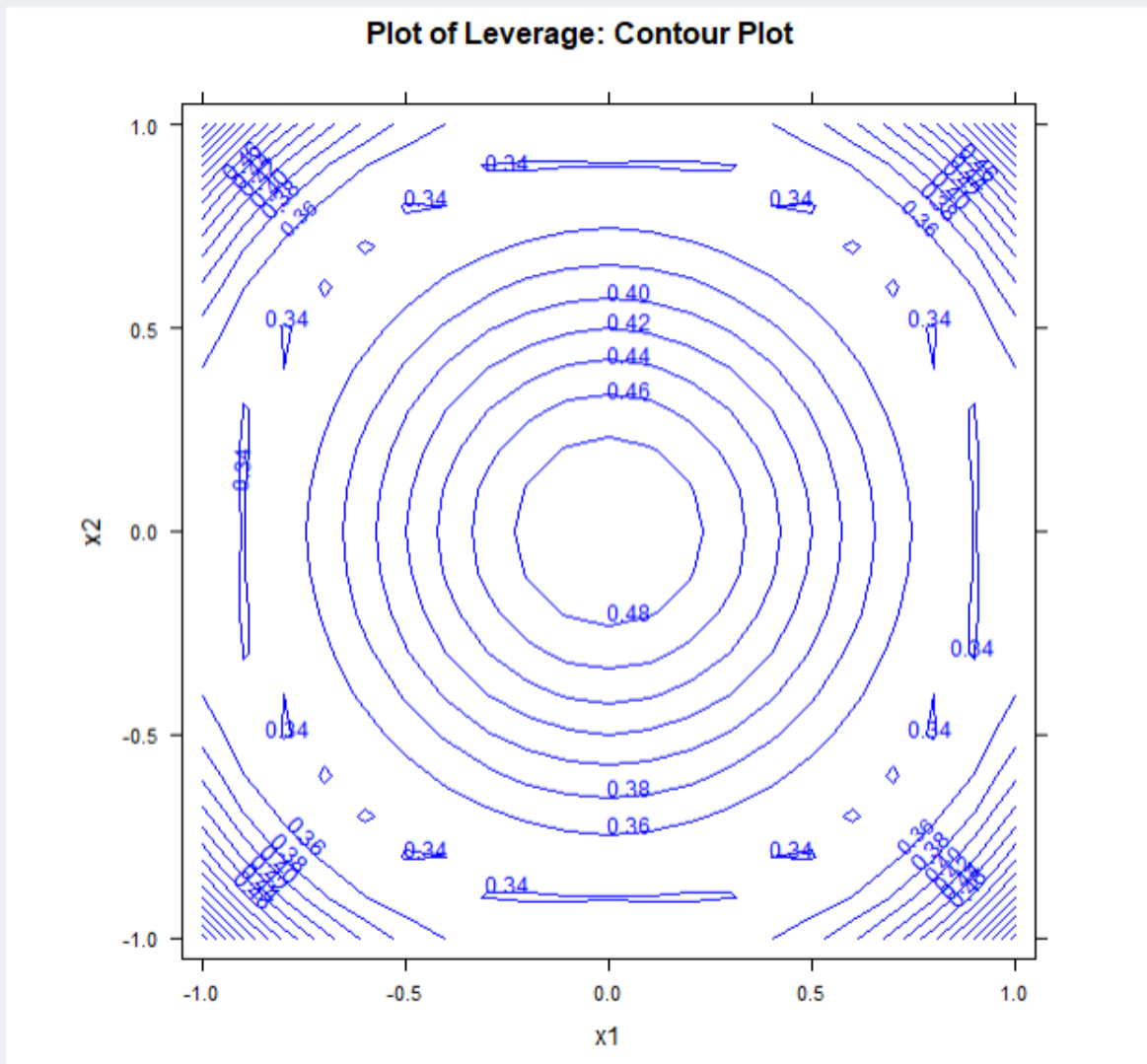


Figura 4: Grafico delle linee di livello del Leverage

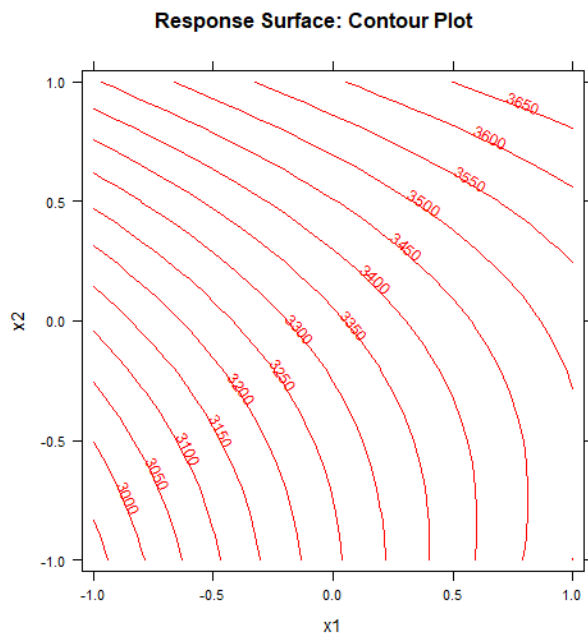
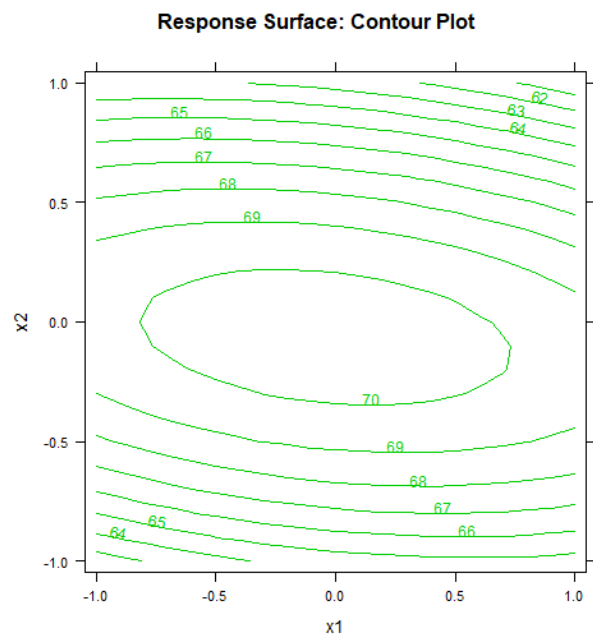
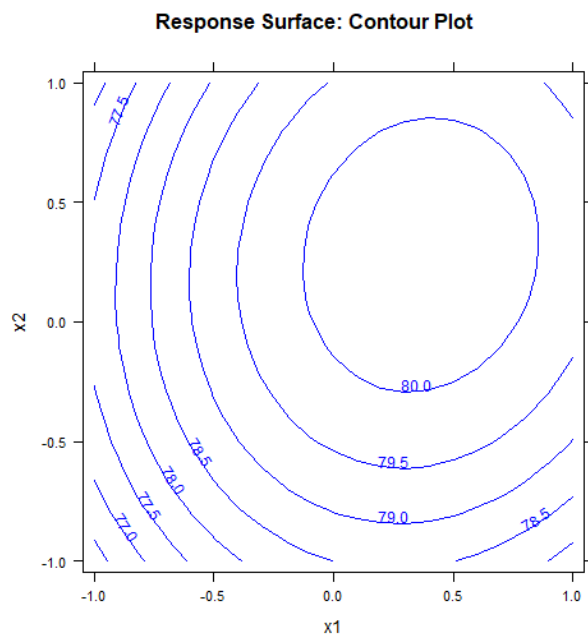


Figura 5: Grafico delle linee di livello delle risposte Y_1 , Y_2 e Y_3

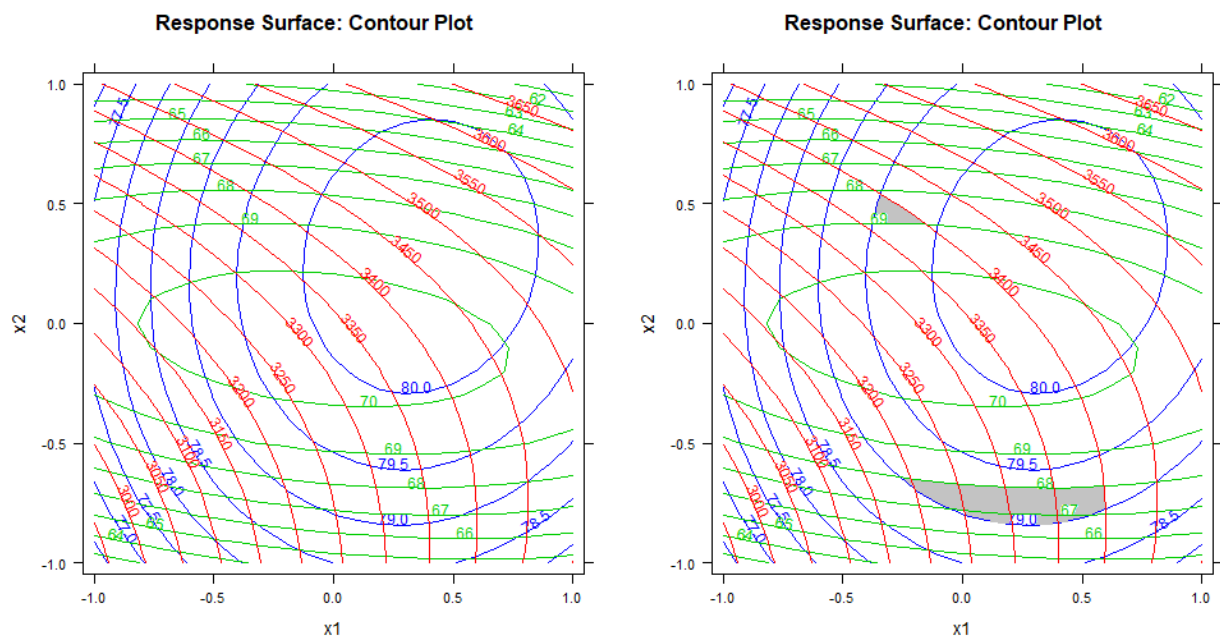


Figura 6: Grafici delle linee di livello delle risposte Y_1 , Y_2 e Y_3 sovrapposti e regione di ottimo