JURNAL GAUSSIAN, Volume 1, Nomor 1, Tahun 2012, Halaman 209-218
Online di: http://ejournal-s1.undip.ac.id/index.php/gaussian

RANCANGAN *D-OPTIMAL* UNTUK REGRESI POLINOMIAL DUA FAKTOR DERAJAT DUA

Rosmalia Safitri[1], Tatik Widiharih[2], Triastuti Wuryandari[3]
[1]Alumni Jurusan Statistika FSM UNDIP
[2]Staf Pengajar Jurusan Statistika FSM UNDIP
[3]Staf Pengajar Jurusan Statistika FSM UNDIP

Abstrak

Suatu penelitian dalam bidang kimia seringkali memerlukan suatu rancangan optimal untuk menentukan titik mana dari variabel prediktor yang akan dicobakan dengan tujuan memaksimalkan sejumlah informasi yang relevan sehingga terpenuhi kriteria yang diinginkan. Kriteria pemenuhan optimal didasarkan pada matriks rancangan dari model yang dipilih. Kriteria D-optimal digunakan untuk meminimalkan variansi dari estimasi parameter dengan cara memaksimalkan determinan matriks informasinya atau meminimalkan determinan matriks dispersinya. Pemilihan titik-titik dari variabel prediktor selain tergantung dari model yang dipilih juga tergantung dari banyaknya pengamatan yang diinginkan.

Kriteria D-optimal diaplikasikan pada data simulasi untuk kasus pengukuran nilai persentase kelarutan enam reaksi kimia berdasarkan nilai suhu dan lama reaksinya. Diperoleh kesimpulan bahwa determinan matriks informasi maksimal terjadi pada saat iterasi keempat dengan nilainya sebesar 2.2070 x 10^9.

Kata kunci: Rancangan Optimal, Matriks Informasi, Matriks Dispersi, Kriteria D-Optimal

1. Pendahuluan

Penelitian atau percobaan yang ingin mengetahui pengaruh dari efek beberapa faktor eksperimen dapat dipelajari melalui suatu rancangan (*design*) yang diolah menggunakan teori rancangan optimal (*optimal design*) (Atkinson et al. 2007). Analisis regresi bertujuan untuk mengetahui hubungan antara variabel prediktor dan variabel respon atau variabel dependen dengan variabel independen (Wibisono, 2005). Secara umum, model regresi polinomial order-*d* dalam satu variabel adalah:

$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^{d} \beta_j x_i^j + \varepsilon_i \quad ; i = 1,2,\dots,n \qquad (1)$$

dengan asumsi ε_i berdistribusi normal dengan rata-rata 0, variansi σ^2, dan saling independen. Dalam tulisan ini, hanya akan dibatasi pada pembahasan kasus regresi polinomial order-2 dengan dua variabel faktor yang berpengaruh.

Untuk menentukan pola hubungan yang baik antara variabel prediktor X dengan variabel respon Y, diperlukan suatu rancangan yang sesuai atau dapat dikatakan yang lebih optimal sehingga menghasilkan inferensi statistik yang akurat dan dengan biaya eksperimen yang minimum. Untuk keperluan ini digunakan kriteria optimal dan nilai effisiensi dari rancangan yang digunakan (Atkinson et al. 2007). Rancangan optimal (*optimal design*) diperlukan untuk menentukan titik-titik mana dari variabel prediktor X yang akan dicobakan dengan tujuan memaksimalkan sejumlah informasi yang relevan sehingga terpenuhi kriteria yang diinginkan (de Aguiar et al. 1995).

Kriteria pemenuhan rancangan optimal didasarkan pada matriks rancangan dari model yang dipilih. Matriks rancangan merupakan matriks yang diperoleh berdasarkan titik rancangan atau level yang dipilih. Bila dari model regresi polinomial pada persamaan (1) ditulis dalam bentuk matriksnya adalah:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$$

maka matriks $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ dikenal dengan matriks informasi. Asumsi yang diperlukan dalam model ini adalah ε mempunyai vektor rata-rata 0 dan matriks varian-kovarians $\sigma^2 I$. Berdasarkan kriteria-kriteria yang tersedia dalam rancangan optimal, ada beberapa macam kriteria yang dikenal, yaitu kriteria A-optimal, D-optimal, E-optimal, V-optimal, dan G-optimal. Namun dalam tulisan ini hanya akan dibatsai pada pembahasan kriteria D-optimal saja.

Kriteria yang paling populer dalam teori rancangan optimal adalah kriteria D-optimal. Tujuan dari kriteria D-optimal ini adalah memperhatikan kualitas estimasi parameter modelnya, yaitu mendapatkan varian parameter atau Var($\widehat{\boldsymbol{\beta}}$) yang minimum. Hal ini dapat dicapai dengan memaksimalkan determinan matriks informasinya, yaitu $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ atau meminimalkan determinan matriks dispersinya, yaitu $(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}$ (de Aguiar et al. 1995).

2. Deskripsi Teoritis

2.1. Rancangan Optimal (*Optimal Design*)

Rancangan optimal merupakan bagian dari perancangan percobaan (*design of experiments*) yang mengestimasi parameter tanpa bias dan dengan varian minimum sehingga akan menghasilkan inferensi statistik yang akurat dan biaya minimum. Menurut de Aguiar et al. (1995) tujuan utama rancangan optimal adalah mengusulkan sejumlah *n* titik rancangan atau level yang dapat membantu kita untuk menjelaskan koefisien-koefisien pada model dengan sangat baik.

Rancangan yang optimal bergantung dari model yang digunakan dan banyaknya pengamatan yang diinginkan dengan menaksirnya menggunakan kriteria-kriteria optimal. Kriteria D-optimal bertujuan untuk mendapatkan kualitas estimasi parameter modelnya yaitu mendapatkan Var($\widehat{\boldsymbol{\beta}}$) yang minimum. Hal ini dapat dicapai dengan memaksimalkan determinan matriks informasinya, yaitu $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ atau meminimalkan determinan matriks dispersinya, yaitu $(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}$ (de Aguiar et al. 1995). Jadi, kriteria D-optimal dapat digunakan dengan syarat bahwa invers dari matriks infomasinya yaitu $(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}$ ada.

2.2. Rancangan ($\boldsymbol{\xi}_N$)

Rancangan (*design*) $\boldsymbol{\xi}_N$ merupakan matriks berisi titik rancangan atau level yang telah ditentukan sebelumnya, dimana setiap barisnya menunjukkan eksperimen dan setiap kolomnya menunjukkan variabel faktor yang berpengaruh. Sedangkan *N* merupakan jumlah titik rancangan secara keseluruhan (populasi). Akan dipilih beberapa titik rancangan yang dapat mewakili pengamatan secara keseluruhan, maka hasil titik rancangan pilihan ini juga dinamakan sebagai rancangan yang disimbolkan dengan $\boldsymbol{\xi}_n$.

Bila dari *n* titik rancangan, x_1 ada r_1 ulangan, x_2 ada r_2 ulangan, dan seterusnya hingga x_r ada r_n ulangan, maka $n = r_1 + r_2 + \cdots + r_n$. Design $\boldsymbol{\xi}_n$ memiliki *n* titik rancangan yang didefinisikan sebagai $\boldsymbol{\xi}_n = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ w_1 & w_2 & \cdots & w_n \end{pmatrix}$

dengan $w_i = r_i/n$ adalah bobot rancangan dan *n* adalah banyaknya ulangan secara keseluruhan serta r_i adalah besarnya ulangan pada x_i. Maka untuk suatu rancangan $\boldsymbol{\xi}$, $0 \leq w_i \leq 1$ dengan $\sum_{i=1}^{n} w_i = 1$. Seringkali untuk model dengan *p* parameter, terdapat minimal *p* titik rancangan atau level dengan besar bobotnya adalah 1/*p*, sehingga suatu rancangan dengan *n* = *p* adalah optimal (Atkinson et al. 2007).

2.3. Model Matriks (X)

Model matriks $\mathbf{X}$ ini merupakan matriks (*n* x *p*), dimana *p* merupakan banyaknya koefisien parameter pada model dan *n* merupakan banyaknya titik rancangan yang ditetapkan oleh peneliti dan mewakili eksperimen pada rancangan (de Aguiar et al. 1995). Bila model pada persamaan (1) diambil regresi polinomial *d* = 1, maka matriks $\mathbf{X}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{bmatrix}$ dengan *n* adalah banyaknya eksperimen pada rancangan. Sehingga menghasilkan matriks informasi berupa $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} 1 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{bmatrix}$. Selanjutnya, bila diambil regresi polinomial *d* = 2, maka matriks $\mathbf{X}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_n^2 \end{bmatrix}$ dengan *n* adalah banyaknya eksperimen pada rancangan. Sehingga menghasilkan matriks informasi berupa $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} 1 & \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i^3 \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i^3 & \sum_{i=1}^{n} x_i^4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i^3 \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i^3 & \sum_{i=1}^{n} x_i^4 \end{bmatrix}$. Bentuk matriks (*p* x *p*) dari $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ inilah yang akan diproses agar memenuhi kriteria D-optimal. Kombinasi titik rancangan terbaik dalam suatu rancangan yang berbentuk matriks inilah yang dikatakan sebagai matriks optimal.

2.4. Kriteria D-Optimal

Kriteria D-optimal merupakan kriteria yang lebih menekankan pada kualitas dari estimasi parameter yang bisa ditunjukkan oleh nilai dari Var($\widehat{\boldsymbol{\beta}}$). Harapan dari pengoptimalan ini adalah mendapatkan nilai Var($\widehat{\boldsymbol{\beta}}$) yang minimum dengan cara memaksimalkan determinan matriks informasi $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ atau meminimalkan determinan matriks dispersi $(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}$ (de Aguiar et al. 1995). Kriteria keoptimalan D-optimal adalah memilih matriks $\mathbf{X}$ yang meminimalkan determinan matriks dispersi yaitu $(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}$.

$$\det\,(\mathbf{X}^{*\mathrm{T}}\mathbf{X}^{*})^{-1} = \min\,(\det(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}) \qquad (2)$$

Selain meminimalkan matriks dispersi, kriteria D-optimal juga dapat diperoleh dengan memaksimalkan determinan dari matriks informasi yaitu $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$..

$$\det(\mathbf{X}^{*\mathrm{T}}\mathbf{X}^{*}) = \max(\det(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})) = \max\left(\frac{1}{\det(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}}\right) \qquad (3)$$

Namun kriteria D-optimal yang sering digunakan untuk memilih matriks $\mathbf{X}$ optimal adalah yang memaksimalkan determinan dari matriks informasinya $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$..

Bila terdapat dua rancangan, yaitu $\boldsymbol{\xi}_1$ dan $\boldsymbol{\xi}_2$ yang memiliki jumlah titik rancangan atau level yang sama yaitu sebanyak *n*, dimana masing-masing titik rancangan memiliki jumlah ulangan yang sama, maka $\mathbf{X}_1$ dan $\mathbf{X}_2$ merupakan model matriks $\mathbf{X}$ yang bersesuaian untuk kedua rancangan tersebut. Berdasarkan kriteria D-optimal, model matriks $\mathbf{X}_1$ akan lebih optimal dibandingkan dengan model matriks $\mathbf{X}_2$ bila $\det(\mathbf{X}_1{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_1) > \det(\mathbf{X}_2{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_2)$. Namun, bila rancangan tersebut masing-masing titik rancangannya tidak memiliki jumlah ulangan yang sama, maka perbandingan dari determinan matriks informasi tersebut tidak dapat digunakan. Untuk meniadakan pengaruh dari jumlah ulangan yang tidak sama dan bisa menggunakan perbandingan determinan matriks informasi seperti diatas, maka didefinisikan bahwa matriks rancangan yaitu $\mathbf{M} = (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})/n$ merupakan matriks informasi yang terboboti. Matriks ini dinamakan dengan matriks rancangan dengan *n* adalah banyaknya ulangan secara keseluruhan pada matriks **X**. Sehingga dapat dikatakan bahwa model matriks $\mathbf{X}_1$ akan lebih optimal dibandingkan dengan model matriks $\mathbf{X}_2$ bila $\det(\mathbf{M}(\mathbf{X}_1)) > \det(\mathbf{M}(\mathbf{X}_2))$ (de Aguiar et al. 1995). Atkinson et al. (2007) menyatakan bahwa perhitungan effisiensi untuk kriteria D-optimal adalah D-effisiensi untuk sembarang matriks **X**, yaitu:

$$D_{eff} = \left(\frac{|\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}|}{|\mathbf{X}^{*\mathrm{T}}\mathbf{X}^{*}|}\right)^{1/p} \qquad (4)$$

dimana *p* adalah jumlah koefisien pada model.

3. Pembahasan

3.1. Regresi Polinomial Dua Faktor Derajat Dua

Model regresi polinomial order-2 dengan dua variabel faktor adalah sebagai berikut:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \varepsilon_i \qquad (5)$$

dengan $i = 1,2,\ldots,n$ dan bentuk matriksnya adalah:

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix};\ \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & x_{11}^2 & x_{21}^2 & x_{11}x_{21} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & x_{12}^2 & x_{22}^2 & x_{12}x_{22} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} & x_{1n}^2 & x_{2n}^2 & x_{1n}x_{2n} \end{bmatrix};\ \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_{11} \\ \beta_{22} \\ \beta_{12} \end{bmatrix};\ \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

Apabila dari bentuk matriks **X** diatas akan dibentuk matriks informasi dengan ukuran 6 x 6 maka hasilnya adalah sebagai berikut:

$$\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X} =$$

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n 1 & \sum_{i=1}^n x_{1i} & \sum_{i=1}^n x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i} \\ \sum_{i=1}^n x_{1i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}^3 & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2x_{2i} \\ \sum_{i=1}^n x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{2i}^3 & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i}^2 \\ \sum_{i=1}^n x_{1i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^3 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}^4 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^3x_{2i} \\ \sum_{i=1}^n x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{2i}^3 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{2i}^4 & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i}^3 \\ \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^3x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i}^3 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2x_{2i}^2 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_{1i} & \sum_{i=1}^n x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i} \\ \sum_{i=1}^n x_{1i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}^3 & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2x_{2i} \\ \sum_{i=1}^n x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{2i}^3 & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i}^2 \\ \sum_{i=1}^n x_{1i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^3 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}^4 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^3x_{2i} \\ \sum_{i=1}^n x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{2i}^3 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{2i}^4 & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i}^3 \\ \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^3x_{2i} & \sum_{i=1}^n x_{1i}x_{2i}^3 & \sum_{i=1}^n x_{1i}^2x_{2i}^2 \end{bmatrix}$$

Tujuan utama dari rancangan optimal yang harus dicapai adalah mendapatkan determinan matriks informasi $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ yang maksimal untuk diproses menggunakan kriteria D-optimal. Untuk menemukan rancangan optimal tersebut, maka perlu dicobakan semua kombinasi titik rancangan yang mungkin dan menghitung semua nilai determinannya. Namun tindakan tersebut bukanlah suatu penyelesaian terbaik karena pastinya memerlukan banyak waktu, tenaga, dan biaya yang lebih. Terdapat suatu algoritma yang dapat membantu untuk menemukan rancangan terbaik yang memenuhi kriteria D-optimal dengan cara yang lebih praktis. Algoritma yang dimaksud adalah algoritma Fedorov yang ditemukan oleh Fedorov pada tahun 1972.

3.2. Algoritma Fedorov

Algoritma ini juga disebut sebagai algoritma penukaran karena pada dasarnya algoritma ini merupakan penukaran titik rancangan x_i yang berasal dari matriks $\mathbf{X}$ dengan titik rancangan x_j yang berasal dari rancangan populasi $\boldsymbol{\xi}_N$ karena mampu mewakili eksperimen secara keseluruhan dengan sangat baik. Pertukaran titik rancangan x_i dengan titik rancangan x_j pada suatu rancangan pilihan $\boldsymbol{\xi}_n$ tersebut akan membuat perubahan terhadap matriks informasinya menjadi:

$$(\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}) = (\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)}) - (x_i * x_i{}^{\mathrm{T}}) + (x_j * x_j{}^{\mathrm{T}}) \tag{6}$$

Sehingga determinannya menjadi:

$$|\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}| = |\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)}| * (1 + \Delta(x_i, x_j)) \tag{7}$$

dengan,

$$\Delta(x_i, x_j) = d(x_j) - \left[d(x_i)d(x_j) - d^2(x_i, x_j)\right] - d(x_i) \tag{8}$$

$$d(x_i) = x_i{}^{\mathrm{T}}\,(\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)})^{-1}\,x_i \tag{9}$$

$$d(x_j) = x_j{}^{\mathrm{T}}(\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)})^{-1}\,x_j \tag{10}$$

$$d(x_i, x_j) = x_i{}^{\mathrm{T}}\,(\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)})^{-1}\,x_j \tag{11}$$

Langkah-langkah dalam menggunakan algorima Fedorov adalah sebagai berikut:

1. Buatlah suatu rancangan ($\boldsymbol{\xi}_n$) berdasarkan pada model yang telah ditetapkan. Didapatkan bentuk matriks $\mathbf{X}_{(0)}$ sebagai matriks $\mathbf{X}$ awal yang terdiri dari *n* titik rancangan atau level.
2. Hitunglah determinan dari matriks informasinya ($\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)}$) yaitu $|\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)}|$.
3. Hitunglah nilai Δ untuk semua pasangan titik rancangan (x_i, x_j) menggunakan rumus persamaan (3.7), dengan fungsi varian $d(x_i)$, $d(x_j)$, dan $d(x_i, x_j)$ dihitung menggunakan rumus persamaan (9), (10), dan persamaan (11).
4. Pilihlah salah satu diantara pasangan titik rancangan yang nilai $\Delta(x_i, x_j)$-nya paling maksimal.
5. Tukarkan titik rancangan x_i tersebut dengan titik rancangan x_j sehingga didapatkan rancangan ($\boldsymbol{\xi}_n$) baru dan matriks $\mathbf{X}$ baru, yaitu $\mathbf{X}_{(1)}$.
6. Kembali ke langkah (2), hitunglah determinan dari matriks informasi ($\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}$) tersebut yaitu $|\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}|$.
7. Secara kontinu, lakukan langkah 3 dan langkah selanjutnya. Hal ini nantinya akan membentuk suatu iterasi yang terus berjalan hingga didapatkan kekonvergenan pada iterasi tersebut. Intinya, perhitungan algoritma Fedorov

ini berhenti bila perbandingan jarak antara nilai determinan $|\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}|$ dengan $|\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)}|$ atau secara umum nilai determinan matriks informasi baru dengan determinan matriks informasi lama mendekati nilai $(1+\Delta(x_i,x_j))$, dimana $\Delta(x_i,x_j) = 10^{-6}$. Hal ini sesuai dengan rumus persamaan (7).

8. Apabila ditemukan nilai $\Delta(x_i,x_j)$-nya sama pada lebih dari satu pasangan titik rancangan (x_i,x_j), maka algoritma penukarannya dipilih secara random.

3.3. Contoh Aplikasi

Pada suatu percobaan kimia, terdapat kasus pengoptimalan mengenai pengukuran nilai persentase kelarutan dari enam reaksi kimia. Dua variabel penting yang digunakan dalam kasus ini, yaitu suhu (°C) dan lama reaksi (menit). Peneliti mengharapkan bahwa nilai persentase kelarutan dari reaksi kimia tersebut nantinya berada pada batas $0.1 < \% < 1$. Untuk menggambarkan koefisien pada model maka diusulkan sejumlah n titik rancangan atau level yang bersama-sama mampu memaksimalkan sejumlah informasi yang terkandung dalam model tersebut. Berikut ini adalah tabel 1 yang memberikan daftar nilai suhu (°C) dan lama reaksi (menit):

Tabel 1. Nilai suhu dan lama reaksi dari enam reaksi kimia

Suhu (°C)	Lama Reaksi (menit)
40	30
90	25
50	20
70	10
99	20
80	25

Sumber: Wibisono, 2005

Dari tabel tersebut, dapat dianalisa bahwa banyaknya titik rancangan yang dapat dibentuk pada rancangan populasi $\boldsymbol{\xi}_N$ adalah sebanyak 6 titik yang disimbolkan dengan $\boldsymbol{\xi}_6 = \begin{pmatrix} 40 & 30 \\ 90 & 25 \\ 50 & 20 \\ 70 & 10 \\ 99 & 20 \\ 80 & 25 \end{pmatrix}$. Pada rancangan tersebut, baris menunjukkan eksperimen dan kolom menunjukkan variabel faktor yang berpengaruh. Model yang telah ditetapkan oleh peneliti untuk menggambarkan perilaku variabel respon (Y) berdasarkan dua variabel faktor tersebut adalah:

$$Y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2^2$$

Berdasarkan model polinomial yang ditetapkan diatas, dapat dianalisa banyaknya titik rancangan yang diperlukan untuk mewakili keseluruhan eksperimen, yaitu sebanyak minimal jumlah parameternya yaitu $n = p$. Namun pada kasus ini peneliti menginginkan sebuah rancangan yang berisi $n = p+1 = 4$ titik rancangan. Sehingga rancangan $\boldsymbol{\xi}_n$ yang tepat adalah $\boldsymbol{\xi}_4$. Bila dalam kasus pengoptimalan pengukuran nilai persentase kelarutan enam reaksi kimia tersebut dikerjakan menggunakan algoritma Fedorov, maka pengerjaannya adalah sebagai berikut:

1. Dibentuk suatu rancangan kemungkinan pertama adalah:
$$\boldsymbol{\xi}_4 = \begin{pmatrix} 40 & 30 \\ 90 & 25 \\ 99 & 20 \\ 80 & 25 \end{pmatrix}$$
yaitu eksperimen 1, 2, 5, 6 yang dipilih dari titik rancangan $\boldsymbol{\xi}_6$.
2. Matriks $\mathbf{X}_{(0)}$ dari rancangan $\boldsymbol{\xi}_4$ yang pertama adalah:
$$\mathbf{X}_{(0)} = \begin{pmatrix} 1 & 40 & 900 \\ 1 & 90 & 625 \\ 1 & 99 & 400 \\ 1 & 80 & 625 \end{pmatrix}$$
3. Menghitung determinan matriks informasi ($\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)}$)
$$\left|\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)}\right| = \begin{vmatrix} 4 & 309 & 2550 \\ 309 & 25901 & 181850 \\ 2550 & 181850 & 1751250 \end{vmatrix} = 1.0388 * 10^8$$
4. Menghitung nilai $\Delta(x_i, x_j) = d(x_j) - [d(x_i)d(x_j) - d^2(x_i, x_j)] - d(x_i)$ dengan i = 1, 2, 5, 6 dan j = 3, 4

Tabel 2. Nilai Δ untuk setiap pasangan titik design (x_i, x_j) iterasi 1

		$\mathbf{X}_{(0)}$			
		1	2	5	6
$\boldsymbol{\xi}_2$	3	1.4378	8.9504	6.7520	11.4558
	4	1.5721	15.9876	14.4727	**20.2465**

Pilih nilai $\Delta(x_i, x_j)$ yang paling maksimum, yaitu ditemukan pada $\Delta(x_6, x_4)$ = 20.2465.
5. Ganti titik rancangan 6 dari $\boldsymbol{\xi}_4$ dengan titik rancangan 4. Sehingga dimiliki rancangan $\boldsymbol{\xi}_4$ yang baru dengan titik rancangannya adalah nomor 1, 2, 4, 5.
$$\boldsymbol{\xi}_4 = \begin{pmatrix} 40 & 30 \\ 90 & 25 \\ 70 & 10 \\ 99 & 20 \end{pmatrix}$$
6. Matriks $\mathbf{X}_{(1)}$ berasal dari titik rancangan $\boldsymbol{\xi}_4$
$$\mathbf{X}_{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 40 & 900 \\ 1 & 90 & 625 \\ 1 & 70 & 100 \\ 1 & 99 & 400 \end{pmatrix}$$
7. Kembali ke tahap 2. Hitung determinan matriks informasi ($\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}$)
$$\left|\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}\right| = \begin{vmatrix} 4 & 299 & 2025 \\ 299 & 24401 & 138850 \\ 2025 & 138850 & 1370625 \end{vmatrix} = 2.2070 * 10^9$$
8. Menghitung nilai $\Delta(x_i, x_j) = d(x_j) - [d(x_i)d(x_j) - d^2(x_i, x_j)] - d(x_i)$ dengan i = 1, 2, 4, 5 dan j = 3, 6

Tabel 3. Nilai Δ untuk setiap pasangan titik design (x_i, x_j) iterasi 2

		$\mathbf{X}_{(1)}$			
		1	2	4	5
$\boldsymbol{\xi}_2$	3	-0.6851	**-0.1381**	-0.4137	-0.1734
	6	-0.8789	-0.2005	-0.9529	-0.2718

Berdasarkan perhitungan dua iterasi ini, dapat dihitung perbandingan jarak antara nilai determinan matriks informasi $|\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}|$ dan $|\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)}|$ apakah sudah mendekati nilai $(1 + \Delta(x_i, x_j))$, dimana $\Delta(x_i, x_j) = 10^{-6}$. Jadi dari persamaan (7) diketahui bahwa:

$|\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}| = |\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)}| * (1 + \Delta(x_i, x_j))$

$(1 + 10^{-6}) = \frac{|\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}|}{|\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)}|}$

Dengan $\frac{|\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}|}{|\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)}|} = \frac{2.2070 * 10^9}{1.0388 * 10^8} = 21.2465$

Ternyata nilai perbandingan jarak determinan matriks informasi baru dan determinan matriks informasi lama masih jauh dari 1.000001. Berarti iterasi akan terus dilanjutkan. Pilih nilai $\Delta(x_i, x_j)$ yang paling maksimum, yaitu ditemukan pada $\Delta(x_2, x_3)$ = -0.1381.

9. Ganti titik rancangann 2 dari $\boldsymbol{\xi}_4$ dengan titik rancangan 3. Sehingga dimiliki design $\boldsymbol{\xi}_3$ yang baru dengan titik-titik design nomor 1, 3, 4, 5.

$$\boldsymbol{\xi}_4 = \begin{pmatrix} 40 & 30 \\ 50 & 20 \\ 70 & 10 \\ 99 & 20 \end{pmatrix}$$

10. Matriks $\mathbf{X}_{(2)}$ berasal dari titik rancangan $\boldsymbol{\xi}_4$

$$\mathbf{X}_{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 40 & 900 \\ 1 & 50 & 400 \\ 1 & 70 & 100 \\ 1 & 99 & 400 \end{pmatrix}$$

11. Kembali ke tahap 2. Hitung determinan matriks informasi ($\mathbf{X}_{(2)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(2)}$)

$$|\mathbf{X}_{(2)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(2)}| = \begin{vmatrix} 4 & 259 & 1800 \\ 259 & 18801 & 102600 \\ 1800 & 102600 & 1140000 \end{vmatrix} = 1.9022 * 10^9$$

12. Menghitung nilai $\Delta(x_i, x_j) = d(x_j) - [d(x_i)d(x_j) - d^2(x_i, x_j)] - d(x_i)$ dengan i = 1, 3, 4, 5 dan j = 2, 6

Tabel 4. Nilai Δ untuk setiap pasangan titik design (x_i, x_j) iterasi 3

		$\mathbf{X}_{(2)}$			
		1	3	4	5
$\boldsymbol{\xi}_2$	2	-0.6346	**0.1602**	-0.3198	-0.0409
	6	-0.6481	-0.0723	-0.4566	-0.4255

Berdasarkan perhitungan iterasi ketiga ini, dapat dihitung perbandingan jarak antara nilai determinan matriks informasi $|\mathbf{X}_{(2)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(2)}|$ dan $|\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}|$ apakah sudah mendekati nilai $(1 + \Delta(x_i, x_j))$, dimana $\Delta(x_i, x_j) = 10^{-6}$. Jadi dari persamaan (7) diketahui bahwa:

$|\mathbf{X}_{(2)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(2)}| = |\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}| * (1 + \Delta(x_i, x_j))$

$(1 + 10^{-6}) = \frac{|\mathbf{X}_{(2)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(2)}|}{|\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}|}$

Dengan $\frac{|\mathbf{X}_{(2)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(2)}|}{|\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}|} = \frac{1.9022 * 10^9}{2.2070 * 10^9} = 0.8619$

Ternyata nilai perbandingan jarak determinan matriks informasi baru dan determinan matriks informasi lama telah mendekati nilai 1.000001. Berarti iterasi cukup sampai disini. Untuk membuktikan apakah memang benar bahwa iterasi berhenti dengan rancangan tersebut, maka dapat dilanjutkan untuk iterasi berikutnya dan dilihat apakah perbandingan jarak determinan matriks informasi baru dan determinan matriks informasi lebih mendekati nilai 1.000001.

Pilih nilai $\Delta(x_i, x_j)$ yang paling maksimum, yaitu ditemukan pada $\Delta(x_3, x_2)$ = 0.1602.

13. Ganti titik rancangan 3 dari $\boldsymbol{\xi}_4$ dengan titik rancangan 2. Sehingga dimiliki rancangan $\boldsymbol{\xi}_4$ yang baru dengan titik-titik design nomor 1, 2, 4, 5. $\boldsymbol{\xi}_4 = \begin{pmatrix} 40 & 30 \\ 90 & 25 \\ 70 & 10 \\ 99 & 20 \end{pmatrix}$

    Ternyata rancangan $\boldsymbol{\xi}_4$ dengan nomor eksperimen 1, 2, 4, 5 pada iterasi keempat ini juga sama dengan rancangan $\boldsymbol{\xi}_4$ pada iterasi kedua. Dan setelah dilakukan perhitungan lebih lanjut, nilai dari semua pasangan titik rancangan $\Delta(x_i, x_j)$ pada iterasi keempat ini sama dengan iterasi kedua.
14. Sama halnya dengan poin 13, untuk rancangan $\boldsymbol{\xi}_4$ pada iterasi kelima ternyata sama dengan rancangan $\boldsymbol{\xi}_4$ pada iterasi ketiga. Dan setelah dilakukan perhitungan lebih lanjut, nilai dari semua pasangan titik rancangan $\Delta(x_i, x_j)$ pada iterasi kelima ini sama dengan iterasi ketiga.
15. Berikut ini diberikan tabel hasil determinan $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ dan nilai effisiensinya untuk semua iterasi:

Tabel 5. Nilai determinan dan effisiensi untuk semua iterasi

Iterasi	1	2	3	4	5
Det	$\lvert\mathbf{X}_{(0)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(0)}\rvert$	$\lvert\mathbf{X}_{(1)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(1)}\rvert$	$\lvert\mathbf{X}_{(2)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(2)}\rvert$	$\lvert\mathbf{X}_{(3)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(3)}\rvert$	$\lvert\mathbf{X}_{(4)}{}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_{(4)}\rvert$
Nilai	1.0388 x 10^8	**2.2070 x 10^9**	1.9022 x 10^9	**2.2070 x 10^9**	1.9022 x 10^9
Eff	0.361058	1	0.951666	1	0.951666

Dapat dilihat bahwa terjadi kekonvergenan hasil iterasi yang sama pada nilai determinan dan nilai effisiensi untuk iterasi ke-2 dan iterasi ke-4 serta iterasi ke-3 dan iterasi ke-5, maka perhitungan algoritma Fedorov berhenti sampai disini. Nilai determinan paling maksimal terjadi saat iterasi ke-2 dan ke-4 sebesar 2.2070 x 10^9 dengan nilai effisiensinya sebesar 1. Dapat disimpulkan bahwa matriks $\mathbf{X}_{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 40 & 900 \\ 1 & 90 & 625 \\ 1 & 70 & 100 \\ 1 & 99 & 400 \end{pmatrix}$ dan bentuk rancangannya $\boldsymbol{\xi}_4 = \begin{pmatrix} 40 & 30 \\ 90 & 25 \\ 70 & 10 \\ 99 & 20 \end{pmatrix}$ dengan nomor eksperimen 1, 2, 4, 5 merupakan rancangan terbaik yang memenuhi kriteria D-optimal. Semakin besar nilai effisiensi suatu rancangan, maka dikatakan bahwa rancangan tersebut lebih baik (lebih optimal) dibandingkan dengan rancangan lainnya.

4. Kesimpulan

1. Rancangan optimal (*optimal design*) adalah bagian dari perancangan percobaan (*design of experiments*) yang menentukan titik-titik mana dari variabel prediktor X yang akan dicobakan dengan tujuan memaksimalkan sejumlah informasi relevan dari percobaan sehingga terpenuhi kriteria yang diinginkan oleh peneliti.

2. Kriteria D-optimal adalah kriteria yang meminimumkan varian dari estimasi parameternya yaitu dengan cara memaksimalkan determinan matriks informasinya $(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})$ atau meminimalkan determinan matriks dispersinya $(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}$.
3. Kriteria D-optimal dapat dikonstruksikan untuk regresi polinomial dua faktor derajat dua dengan menggunakan algoritma Fedorov yang memaksimalkan determinan matriks informasi dan nilai effisiensi dari rancangan optimal yang disarankan.
4. Berdasarkan pengaplikasian konsep kriteria D-optimal terhadap kasus pengoptimalan pengukuran nilai persentase kelarutan enam reaksi kimia yang dilihat dari nilai suhu dan lama reaksinya menggunakan model regresi polinomial $Y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2^2$, diperoleh kesimpulan bahwa rancangan optimal yang memenuhi kriteria D-optimal adalah rancangan $\boldsymbol{\xi}_4 = \begin{pmatrix} 40 & 30 \\ 90 & 25 \\ 70 & 10 \\ 99 & 20 \end{pmatrix}$ dengan nomor eksperimen 1, 2, 4, 5 dan diperoleh nilai determinan maksimumnya sebesar 2.2070 x 10^9 serta nilai effisiensinya sebesar 1.

Daftar Pustaka

Anton, H., 1984, *Aljabar Linier Elementer*, *Terjemahan Pantur Silaban, Edisi Ketiga,* Penerbit Erlangga, Jakarta.

Atkinson, A.C., A.N. Donev, and R.D. Tobias, 2007, *Optimum Experimental Design, With SAS,* Oxford University Press, Oxford.

Boon, J.E., 2007, Generating Exact D-Optimal Designs For Polynomial Models, *Journal of SpringSim*, Vol.2: 121-126.

De Aguiar, P.F. et al., 1995, Tutorial D-Optimal Designs, *Journal of Chemometrics and Intelligent Laboratory System*, Vol.30: 199-210.

Triefenbach, F., 2008, *Design of Experiments: The D-Optimal Approach and Its Implementation As a Computer Algorithm*, Umea University Press, Sweden.

Wibisono, Y., 2005, *Metode Statistik*, Gadjah Mada University Press, Yogyakarta.