



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

**ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΕΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ
ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**ΟΜΟΙΟΜΟΡΦΟΙ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΙ
ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ**

ΔΕΤΣΗ ANNA

ΑΜ: 094122012

**ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ:
ΚΟΥΚΟΥΒΙΝΟΣ ΧΡΗΣΤΟΣ
ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ Ε.Μ.Π.**

ΑΘΗΝΑ 2018



NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS

**SCHOOL OF APPLIED MATHEMATICAL AND
PHYSICAL SCIENCES**

MASTER THESIS

**UNIFORM DESIGNS
THEORY AND APPLICATIONS**

DETSI ANNA

RN: 094122012

SUPERVISOR:

KOUKOUVINOS CHRISTOS

PROFESSOR NTUA

ATHENS 2018

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην εργασία αυτή γίνεται μελέτη μιας ειδικής κατηγορίας σχεδιασμών, των ομοιόμορφων σχεδιασμών. Οι σχεδιασμοί αυτοί αποτελούν ένα πολύ χρήσιμο και δυνατό εργαλείο στη μελέτη πειραμάτων για επιστημονικούς σκοπούς ή για βιομηχανικούς σκοπούς και παραγωγή προϊόντων, κατά τα οποία υπάρχει περιορισμός στους πόρους (υλικά και χρήματα) και γι' αυτό χρειάζεται να γίνουν όσο το δυνατόν λιγότερες δοκιμές για την εξαγωγή συμπερασμάτων. Το σημαντικό τους πλεονέκτημα είναι η ιδιότητά τους να αποτελούνται από σημεία ομοιόμορφα κατανεμημένα στο χώρο. Με αυτό τον τρόπο καλύπτουν εύκολα και με χαμηλό κόστος όλο το χώρο του πειράματος, επιτρέποντας την ασφαλή εξαγωγή συμπερασμάτων για τις υπάρχουσες μεταβλητές.

Στο πρώτο κεφάλαιο παρουσιάζονται μερικά κύρια εργαλεία της στατιστικής τα οποία θα μας είναι χρήσιμα καθ' όλη τη διάρκεια της μελέτης μας.

Στο δεύτερο κεφάλαιο παρουσιάζονται οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί, με ορισμούς και παραδείγματα. Επίσης, δίνονται τρόποι αξιολόγησής τους μέσω των συναρτήσεων ασυμφωνίας.

Στο τρίτο κεφάλαιο παρουσιάζονται αρκετές μέθοδοι κατασκευής ομοιόμορφων σχεδιασμών και παραδείγματα.

Στο τέταρτο κεφάλαιο διεξάγεται ένα πείραμα, η μελέτη του οποίου σκοπό έχει να αναδείξει τη χρησιμότητα και την ευστοχία των ομοιόμορφων σχεδιασμών.

Τέλος, στο πέμπτο κεφάλαιο παρουσιάζεται μια μέθοδος μελέτης των πειραμάτων μέσω συναρτήσεων ποινης. Σκοπός είναι η επιβεβαίωση των αποτελεσμάτων που λάβαμε μέσω των ομοιόμορφων σχεδιασμών.

Λέξεις – κλειδιά: Ομοιόμορφοι Σχεδιασμοί, Συνάρτηση Ασυμφωνίας, Συνάρτηση Ποινης, Μέθοδος GIp, Μέθοδος Βελτιστοποίησης

ABSTRACT

In this thesis, we study a special type of designs called uniform designs. These designs form a very useful and powerful tool in the study of experiments in the scientific or industrial sector and in the production of goods, when there are limited resources (materially or financially). We apply them when only a few runs are feasible but we also need correct answers to all factors of the experiment. The special characteristic of uniform designs is the ability to choose points that uniformly cover the entire space of the experiment. Therefore, reliable conclusions for existing variables may be drawn cost effectively and easily throughout the experiment.

In the first chapter we present some basic statistical tools which will be useful in our study.

In the second chapter we present uniform designs, accompanied with definitions and examples. We also study evaluation methods using discrepancy functions.

In the third chapter we present some uniform design construction methods, and some helpful examples of them.

In the fourth chapter, an interesting experiment is carried out. The goal of this is to highlight how useful and well aimed uniform designs are.

Finally, in the fifth chapter we present the study of the above experiment using the penalty function method. The aim of this is to validate the results gathered using uniform designs.

Key – Words: Uniform Design, Discrepancy Function, Penalty Function, Glp method, Threshold – Accepting Heuristic Method

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Πριν ο αναγνώστης ξεκινήσει τη μελέτη αυτής της εργασίας, κρίνω σκόπιμο να ευχαριστήσω όλους όσους με βοήθησαν στην εκπόνηση και ολοκλήρωσή της. Θα ήθελα λοιπόν να ευχαριστήσω θερμά τον Καθηγητή του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου κ. Χρήστο Κουκουβίνο για όλες τις γνώσεις και την πολύτιμη βοήθεια που μου προσέφερε καθ' όλη τη διάρκεια των προπτυχιακών και μεταπτυχιακών μου σπουδών, καθώς και για την υπομονή του και την εμπιστοσύνη που μου έδειξε ως το τέλος. Θεωρώ επίσης υποχρέωσή μου να ευχαριστήσω την υποψήφια διδάκτορα Κρυσταλλένια Δρόσου καθώς και την υποψήφια διδάκτορα Αγγελική Λάππα για την πολύτιμη βοήθειά τους και το ενδιαφέρον που έδειξαν. Θα ήθελα τέλος να ευχαριστήσω την οικογένειά μου και τους φίλους μου που στάθηκαν δίπλα μου, με στήριξαν και με βοήθησαν σε όλες τις ευχάριστες ή δυσάρεστες στιγμές της ζωής μου και ελπίζω να συνεχίσουν να το κάνουν, βοηθώντας με να πραγματοποιώ τα όνειρά μου.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΕΡΙΛΗΨΗ.....	5
ABSTRACT.....	7
ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ.....	9
ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ.....	11
ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	13
1. ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1.....	17
1.1. Απλό γραμμικό μοντέλο και γενικό γραμμικό μοντέλο.....	17
1.2. Στατιστικοί σχεδιασμοί με έναν ή περισσότερους παράγοντες.....	19
1.3. Στατιστικοί έλεγχοι.....	21
1.4. Λατινικά τετράγωνα.....	23
1.5. Κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί.....	25
1.6. Ορθογώνιοι σχεδιασμοί.....	26
2. ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2.....	29
2.1. Εισαγωγή στους ομοιόμορφους σχεδιασμούς.....	29
2.2. Οι μέθοδοι Monte Carlo και quasi – Monte Carlo.....	30
2.3. Ορισμοί και πίνακες ομοιόμορφων σχεδιασμών.....	34
2.4. Αναμεμιγμένοι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί.....	40
2.5. Συναρτήσεις ασυμφωνίας.....	42
2.6. Σχέσεις μεταξύ ομοιομορφίας και λοιπών σχεδιασμών.....	48
2.6.1. Ομοιομορφία και ισομορφισμοί.....	48
2.6.2. Ομοιομορφία και απόκλιση.....	50
2.6.3. Ομοιομορφία και ορθογωνιότητα.....	52
2.6.4. Ομοιομορφία και επιδράσεις.....	53
2.6.5. Ομοιόμορφοι σχεδιασμοί και έλεγχος ποιότητας.....	55
2.7. Μια σημαντική ιδιότητα των ομοιόμορφων σχεδιασμών.....	56
3. ΚΑΦΑΛΑΙΟ 3.....	59
3.1. Μια πρώτη κατασκευή ομοιόμορφων σχεδιασμών.....	59
3.2. Κατασκευή ομοιόμορφων σχεδιασμών με περισσότερους παράγοντες..	60
3.2.1. Η μέθοδος GLP και MGLP.....	61

3.2.2.	Η μέθοδος «κοπής»	67
3.2.3.	Η μέθοδος λατινικών τετραγώνων	71
3.2.4.	Η μέθοδος επέκτασης ορθογώνιων σχεδιασμών	73
3.2.5.	Η προς τα εμπρός διαδικασία	74
3.2.6.	Η μέθοδος βελτιστοποίησης (Threshold - Accepting Heuristic)	75
3.3.	Μια σύντομη σύγκριση των μεθόδων.....	77
4.	ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4	79
4.1.	Οθόνες υγρών κρυστάλλων (LCD): Βελτίωση ποιότητας με εφαρμογή ομοιόμορφων σχεδιασμών	79
4.2.	Πειραματική διαδικασία	82
4.3.	Σχολιασμός του πειράματος	95
5.	ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5	97
5.1.	Συναρτήσεις ποινής	97
5.2.	Η συνάρτηση ποινής SCAD	100
5.3.	Ανάλυση του πειράματος LCD	104
5.4.	Συμπεράσματα	105
	ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ	107
	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	109

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Στη σημερινή εποχή στον κλάδο της βιομηχανίας υπάρχει πλειάδα διαθέσιμων πληροφοριών. Ανεξάρτητα από το αν η διαδικασία συλλογής στοιχείων είναι μεγάλη ή μικρή, άμεση ή έμμεση, τα εργαλεία μέτρησης αφθονούν και μας δίνουν πληροφορίες για τη θερμοκρασία, το ρυθμό κατανάλωσης, την πίεση κ.α. τα οποία εξαρτώνται από τα χαρακτηριστικά της υπό μελέτη διαδικασίας. Μερικές από αυτές τις μετρήσεις γίνονται σε τακτά χρονικά διαστήματα όπως για παράδειγμα κάθε 5 λεπτά ή κάθε μία μέρα κλπ. ενώ για άλλες απαιτείται περισσότερος χρόνος και προσπάθεια. Συνήθως παίρνουμε δείγματα από το τελικό προϊόν μιας διαδικασίας για να γίνουν διάφορες μετρήσεις όπως για παράδειγμα την καθαρότητα του προϊόντος, την αντοχή του, το χρώμα του, ή όποιες άλλες ιδιότητες του τελικού προϊόντος ενδιαφέρουν τον κατασκευαστή και το χρήστη του.

Σε κάθε σύστημα το οποίο θέλουμε να μελετήσουμε και στο οποίο οι μεταβλητές ποσότητες αλλάζουν, μας ενδιαφέρει να εξετάσουμε τις επιδράσεις που μια ομάδα μεταβλητών ασκεί ή φαίνεται να ασκεί σε κάποιες άλλες. Πολλές φορές βρίσκουμε μια απλή συναρτησιακή σχέση η οποία συνδέει αυτές τις μεταβλητές. Στις φυσικές διαδικασίες η ύπαρξη μίας απλής σχέσης είναι σπάνια. Συνήθως υπάρχει μια αρκετά πολύπλοκη συναρτησιακή σχέση η οποία δεν μπορεί να γίνει απόλυτα κατανοητή και δε μπορεί να περιγραφεί με απλούς όρους. Σε αυτές τις περιπτώσεις προσπαθούμε να κάνουμε μια προσέγγιση αυτής της πολύπλοκης συναρτησιακής σχέσης με μια πιο απλή μαθηματική σχέση, όπως για παράδειγμα τα πολυώνυμα, στα οποία θα περιλαμβάνονται οι κατάλληλες μεταβλητές ώστε να μπορέσουμε να προσεγγίσουμε ικανοποιητικά την πραγματική συνάρτηση. Μελετώντας ύστερα αυτή τη μαθηματική σχέση μπορούμε να εξάγουμε χρήσιμες πληροφορίες για την πραγματική συναρτησιακή σχέση και να εκτιμήσουμε τις επιδράσεις (ξεχωριστές για κάθε μεταβλητή αλλά και αλληλεπιδράσεις δύο ή και περισσότερων μεταβλητών μαζί) που προκύπτουν ως αποτέλεσμα των αλλαγών σε συγκεκριμένες μεταβλητές που θεωρούμε σημαντικές.

Μερικές φορές δεν υπάρχει μια φυσική σχέση μεταξύ των μεταβλητών. Μπορούμε όμως αν θέλουμε να τις συσχετίσουμε με κάποια μαθηματική εξίσωση. Αυτή η εξίσωση θα στερείται φυσικής έννοιας, θα είναι όμως εξαιρετικά χρήσιμη για την πρόβλεψη των τιμών κάποιων μεταβλητών, όταν ισχύουν κάποιες συγκεκριμένες συνθήκες.

Σε μια μελέτη, οι μεταβλητές που ορίζονται μπορεί να ανήκουν σε δύο κύριες κατηγορίες: τις προβλέπουσες ή αλλιώς ανεξάρτητες μεταβλητές (predictor variables) και τις αποκριτικές ή αλλιώς εξαρτημένες μεταβλητές (response variables). Με τον όρο ανεξάρτητες μεταβλητές περιγράφουμε εκείνες τις μεταβλητές που μπορούν να

πάρουν μια επιθυμητή τιμή ή να πάρουν γενικά τιμές που μπορούν να παρατηρηθούν και να μετρηθούν αλλά δεν μπορούν πάντα να ελεγχθούν (π.χ. ατμοσφαιρική πίεση, υγρασία κ.α.). Σε αυτές τις μεταβλητές μπορούμε να κάνουμε σκόπιμα αλλαγές στην τιμή τους ή μπορούν απλά να συμβούν κάποιες τυχαίες αλλαγές. Αυτές οι μεταβολές έχουν επίδραση στις εξαρτημένες μεταβλητές. Για παράδειγμα η μεταβολή της υγρασίας μπορεί να έχει επίδραση στο τελικό χρώμα του προϊόντος. Αυτό που μας ενδιαφέρει είναι να ανακαλύψουμε πως επηρεάζονται οι τιμές των εξαρτημένων μεταβλητών από τις αλλαγές στις ανεξάρτητες μεταβλητές. Μια απλή σχέση ανάμεσα στην εξαρτημένη μεταβλητή και μια, δύο ή έστω μερικές ανεξάρτητες μεταβλητές θα ήταν η βέλτιστη λύση. Παρόλα αυτά η διάκριση μεταξύ εξαρτημένων και ανεξάρτητων μεταβλητών δεν είναι πάντοτε εμφανής. Για παράδειγμα, μια μεταβλητή που στην αρχή θεωρούνταν εξαρτημένη, μπορεί τελικά να είναι ανεξάρτητη. Συνήθως η διάκριση είναι εύκολη αλλά πρέπει πάντα να είμαστε προσεκτικοί. Μια γενική σχέση που περιγράφει την αλληλεπίδραση των μεταβλητών είναι η εξής:

$$\text{output} = f(\text{inputs}) + \text{random error},$$

όπου το «output» περιγράφει τις αποκριτικές μεταβλητές, «inputs» αποτελούν όλες οι ανεξάρτητες μεταβλητές που εισάγονται στο μοντέλο μας, και τέλος έχουμε και ένα τυχαίο σφάλμα.

Για τους διάφορους τύπους συναρτήσεων που μπορούμε να συναντήσουμε στην $f(\cdot)$, απαιτούνται διαφορετικοί σχεδιασμοί.

Τα επόμενα κεφάλαια διαμορφώνονται ως εξής:

Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μια γενική αναφορά στο απλό γραμμικό μοντέλο, το γενικό γραμμικό μοντέλο και τους στατιστικούς σχεδιασμούς με ένα ή και περισσότερους παράγοντες. Στη συνέχεια γίνεται αναφορά στους στατιστικούς ελέγχους t και F καθώς και στις μεθόδους επιλογής μεταβλητών. Επίσης αναφέρονται οι βασικές αρχές των λατινικών τετραγώνων, των κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών και των ορθογώνιων σχεδιασμών.

Στο δεύτερο κεφάλαιο γίνεται εισαγωγή στους ομοιόμορφους σχεδιασμούς. Δίνονται οι απαραίτητοι ορισμοί και παραδείγματα κατασκευής τέτοιων σχεδιασμών. Επίσης μελετάται ένας τρόπος αξιολόγησης των ομοιόμορφων σχεδιασμών ώστε να μπορούμε έχοντας μια πλειάδα σχεδιασμών να βρίσκουμε τον βέλτιστο. Αυτό γίνεται μέσω των συναρτήσεων ασυμφωνίας. Υπάρχουν πολλές συναρτήσεις ασυμφωνίας. Παρουσιάζονται μερικές από αυτές και δίνονται και πάλι οι απαραίτητοι ορισμοί. Επίσης μελετάται η σχέση των ομοιόμορφων σχεδιασμών με άλλους σχεδιασμούς.

Στο τρίτο κεφάλαιο γίνεται μελέτη διαφόρων μεθόδων κατασκευής ομοιόμορφων σχεδιασμών όπως για παράδειγμα η μέθοδος glp, η μέθοδος λατινικών τετραγώνων, η μέθοδος κοπής, η μέθοδος βελτιστοποίησης και άλλες. Δίνονται παραδείγματα κατασκευής ομοιόμορφων σχεδιασμών με χρήση αυτών των μεθόδων και στο τέλος υπάρχει μια σύντομη σύγκριση των τριών βασικότερων από αυτές.

Στο τέταρτο κεφάλαιο διεξάγεται ένα πείραμα που αφορά οθόνες υγρών κρυστάλλων LCD. Αρχικά παρουσιάζονται μερικά βασικά στοιχεία για τη λειτουργία των οθονών αυτών, τα στάδια παραγωγής τους, και οι παράγοντες που θα μελετηθούν ώστε να έχουμε βελτιστοποίηση της παραγωγής αλλά και μείωση του ποσοστού αστοχίας κατά την παραγωγική διαδικασία. Το πείραμα διεξάγεται σε τρεις φάσεις. Στην πρώτη γίνεται χρήση ομοιόμορφων σχεδιασμών, στη δεύτερη γίνεται χρήση ορθογώνιων σχεδιασμών ενώ στην τρίτη υπάρχει ένας μεικτός σχεδιασμός. Γίνεται ανάλυση των αποτελεσμάτων κάθε φάσης και παρουσίαση γραφημάτων.

Στο πέμπτο κεφάλαιο γίνεται μελέτη των συναρτήσεων ποιής. Αναφέρονται μερικές από αυτές όπως και οι γενικές ιδιότητές τους. Ορίζεται και μελετάται συγκεκριμένα η συνάρτηση ποιής SCAD και γίνεται εφαρμογή της στο πείραμα οθονών υγρών κρυστάλλων. Τέλος, γίνεται σύγκριση των αποτελεσμάτων που εξήχθησαν με τη χρήση της συνάρτησης SCAD και των ομοιόμορφων σχεδιασμών.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

Σε κάθε πείραμα που πραγματοποιείται, σκοπός μας είναι να κατασκευάσουμε ένα μοντέλο και να εκτιμήσουμε τις παραμέτρους που εμπλέκονται σε αυτό, με όσο το δυνατόν μεγαλύτερη ακρίβεια. Ο σωστός προσδιορισμός των παραμέτρων αλλά και του χώρου στον οποίο θα ανήκουν οι μεταβλητές είναι καθοριστικής σημασίας. Ένα καλά ορισμένο πείραμα μας δίνει σωστά αποτελέσματα ενώ παράλληλα γίνεται εξοικονόμηση χρόνου και χρημάτων. Κάθε μεταβλητή x μπορεί να είναι ποσοτική ή ποιοτική και να λαμβάνει τιμές μέσα σε ένα σύνολο, το σύνολο τιμών της. Έτσι, ο χώρος του πειράματος αποτελείται από ένα υπερ-ορθογώνιο της μορφής: $[a_1, \beta_1] \times [a_2, \beta_2] \times \dots \times [a_s, \beta_s]$ για τις s μεταβλητές. Οι τιμές μέσα στο σύνολο $[a_i, \beta_i]$ για τις οποίες εξετάζεται κάθε μεταβλητή ονομάζονται παράγοντες. Αν για παράδειγμα έχουμε τη μεταβλητή «Θερμοκρασία» που παίρνει τιμές στο σύνολο $[70^\circ C, 90^\circ C]$ τότε μπορούμε να ορίσουμε τα επίπεδα $70^\circ C, 80^\circ C, 90^\circ C$ και για αυτές τις τιμές να κάνουμε το πειράμα μας. Αυτό που πρέπει να προσέξουμε είναι τα επίπεδα να απέχουν αρκετά μεταξύ τους σε σχέση με το τυχαίο σφάλμα που μπορεί να υπάρξει. Επίσης, σε ένα πείραμα πρέπει να προσέχουμε στην επιλογή των σωστών παραγόντων γιατί δεν είναι πάντα όλες οι μεταβλητές σημαντικές. Κύριο μέλημά μας πρέπει να είναι η ελαχιστοποίηση των παραγόντων ενός πειράματος.

1.1. Απλό γραμμικό μοντέλο και γενικό γραμμικό μοντέλο

Το απλό γραμμικό μοντέλο (ΑΓΜ) περιλαμβάνει μόνο δύο μεταβλητές, την ανεξάρτητη και την εξαρτημένη που συνδέονται μεταξύ τους με μια γραμμική συνάρτηση παλινδρόμησης. Σκοπός μας είναι η προσαρμογή μιας ευθείας γραμμής που να επεξηγεί όσο το δυνατόν καλύτερα τα δεδομένα μας. Η ευθεία θα έχει τη μορφή

$$E(Y_x) = a + \beta x,$$

με a, β να αποτελούν τις παραμέτρους του μοντέλου. Η εκτίμηση της τιμής της τυχαίας μεταβλητής Y με βάση το απλό γραμμικό μοντέλο που προσαρμόσαμε στα δεδομένα μας δίνεται από τον τύπο

$$\hat{Y}_i = \hat{a} + \hat{\beta} x_i,$$

όπου \hat{a} και $\hat{\beta}$ είναι οι εκτιμήσεις των παραμέτρων του μοντέλου.

Οι παρατηρήσεις Y_i υπολογίζονται από τη σχέση:

$$Y_i = E(Y_i) + \varepsilon_i = a + \beta x_i + \varepsilon_i,$$

όπου ε_i ονομάζεται το τυχαίο σφάλμα και υπολογίζεται από τον τύπο:

$$\varepsilon_i = Y_i - \hat{Y}_i = Y_i - \hat{a} - \hat{\beta}x_i.$$

Η εκτίμηση των παραπάνω παραμέτρων γίνεται με τη μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων.

Η ανάλυση διασποράς (analysis of variance, ANOVA) εξετάζει τη σχέση της εξαρτημένης μεταβλητής Y με την ανεξάρτητη X . Με αυτό τον τρόπο παρατηρούμε κατά πόσο η μεταβλητότητα των τιμών της Y εξηγείται από τη X . Η ανάλυση αυτή παρουσιάζεται συγκεντρωτικά στον παρακάτω πίνακα:

Πίνακας 1.1: Ανάλυση διασποράς στο απλό γραμμικό μοντέλο

Πηγή μεταβλητότητας	Βαθμοί ελευθερίας	Άθροισμα τετραγώνων	Μέσο άθροισμα τετραγώνων	Έλεγχος F
Παλινδρόμηση	1	$SSR = \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2$	$MSR = \frac{SSR}{1}$	$F = \frac{MSR}{MSE}$
Υπόλοιπα	n-2	$SSE = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2$	$MSE = \frac{SSE}{n-2}$	
Σύνολο	n-1	$SST = \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2$		

Όταν τώρα οι τιμές κάποιας μεταβλητής που μας ενδιαφέρει να εξετάσουμε επηρεάζονται από περισσότερες από μια εξηγηματικές μεταβλητές, τότε χρειαζόμαστε μια γενίκευση του απλού γραμμικού μοντέλου που είναι το γενικό γραμμικό μοντέλο (ΓΓΜ) που περιγράφεται από τη σχέση:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_k x_{ik} + \varepsilon_i,$$

ή για συντομία:

$$\underline{Y} = \underline{X}\underline{\beta} + \underline{\varepsilon}.$$

Για το ΓΓΜ πρέπει να ισχύουν οι παρακάτω υποθέσεις:

1. $E(\varepsilon_i) = 0$ για κάθε $i = 1, 2, \dots, n$
2. $\text{Var}(\varepsilon_i) = \sigma^2$ ομοισκεδαστικότητα υπολοίπων
3. $\text{Cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0$ για $i = 1, 2, \dots, n \neq j = 1, 2, \dots, n$ δηλαδή ε_i ασυσχέτιστα
4. $\underline{\varepsilon}$ ακολουθούν κατανομή $N_n(0, \sigma^2 I_n)$.

Στόχος μας είναι και πάλι να εκτιμήσουμε το διάνυσμα των παραμέτρων β .

1.2. Στατιστικοί σχεδιασμοί με έναν ή περισσότερους παράγοντες

Οι παραγοντικοί σχεδιασμοί (Factorial Designs) αποτελούν μια ευρέως χρησιμοποιούμενη μέθοδο, που μας βοηθάει να εντοπίσουμε ποιοι παράγοντες έχουν επίδραση σε μία διαδικασία, και ποια είναι η τιμή τους καθώς και η τιμή των αλληλεπιδράσεών τους.

Πίνακας 1.2: Ανάλυση διασποράς για ένα παράγοντα σε k στάθμες

Πηγή μεταβλητότητας	Άθροισμα τετραγώνων	Βαθμοί Ελευθερίας	Μέσο άθροισμα τετραγώνων	Έλεγχος F
Παράγοντας A	$SSA = \sum_{i=1}^k n_i (\bar{Y}_i - \bar{Y}_{..})^2$	k-1	$MSA = \frac{SSA}{k-1}$	$F = \frac{MSA}{MSE}$
Υπόλοιπα	$SSE = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^{n_i} (Y_{ij} - \bar{Y}_i)^2$ $= SST - SSA$	n-k	$MSE = \frac{SSE}{n-k}$	
Σύνολο	$SST = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^{n_i} (Y_{ij} - \bar{Y}_{..})^2$	n-1		

Στην ανάλυση διασποράς με έναν παράγοντα υποθέτουμε ότι η μεταβλητή Y επηρεάζεται από ένα παράγοντα (factor). Παράγοντας είναι συνήθως μια ποσοτική ελέγξιμη μεταβλητή που παίρνει ένα πεπερασμένο πλήθος τιμών (στάθμες, levels). Αν είχαμε δύο ή περισσότερους παράγοντες, τότε οι παρατηρήσεις της Y θα γίνονταν για συγκεκριμένους συνδυασμούς από στάθμες που ονομάζονται αγωγές (treatment).

Η ανάλυση διασποράς (ANOVA) για έναν παράγοντα που εμφανίζεται σε k στάθμες, φαίνεται συνοπτικά στον Πίνακα 1.2.

Σε πολλά πειράματα θέλουμε να μελετήσουμε την επίδραση δύο ή περισσότερων παραγόντων. Ένα χρήσιμο εργαλείο για πειράματα τέτοιου τύπου είναι οι παραγοντικοί σχεδιασμοί. Με τον όρο αυτό εννοούμε ότι σε κάθε επανάληψη του πειράματος εξετάζουμε όλους τους δυνατούς συνδυασμούς επιπέδων των παραγόντων. Αν για παράδειγμα έχουμε δύο παράγοντες A και B και a και b επίπεδα για κάθε παράγοντα αντίστοιχα τότε σε κάθε επανάληψη ελέγχουμε όλους τους ab συνδυασμούς των επιπέδων. Σημειώνουμε ότι n είναι ο αριθμός επαναλήψεων. Η ανάλυση διασποράς παρουσιάζεται παρακάτω στον Πίνακα 1.3.

Πίνακας 1.3: Ανάλυση διασποράς για δύο παράγοντες

Πηγή Μεταβλητότητας	Άθροισμα Τετραγώνων	Βαθμοί Ελευθερίας	Μέσο Άθροισμα Τετραγώνων	Έλεγχος F
Παράγοντας A	$SSA = \sum_{i=1}^a \frac{y_{i..}^2}{bn} - \frac{y_{...}^2}{abn}$	$a-1$	$MSA = \frac{SSA}{a-1}$	$F = \frac{MSA}{MSE}$
Παράγοντας B	$SSB = \sum_{j=1}^b \frac{y_{.j.}^2}{an} - \frac{y_{...}^2}{abn}$	$b-1$	$MSB = \frac{SSB}{b-1}$	$F = \frac{MSB}{MSE}$
Αλληλεπίδραση	$SSAB = SS_{Subtotals} - SSA - SSB$ (*)	$(a-1)(b-1)$	$MSAB = \frac{SSAB}{(a-1)(b-1)}$	$F = \frac{MSAB}{MSE}$
Σφάλμα	$SSE = SST - SSA - SSB - SSAB$	$ab(n-1)$	$MSE = \frac{SSE}{ab(n-1)}$	
Σύνολο	$SST = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^n y_{ijk}^2 - \frac{y_{...}^2}{abn}$	$abn-1$		

$$(*) SS_{Subtotals} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \frac{y_{ij.}^2}{n} - \frac{y_{...}^2}{abn}$$

Ανάλογα με το μοντέλο με δύο παράγοντες, εργαζόμαστε και για το μοντέλο για τρεις ή περισσότερους παράγοντες. Σε αυτό εξετάζουμε α) τις επιδράσεις κάθε παράγοντα ξεχωριστά, β) τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραγόντων ανά δύο γ) τις αλληλεπιδράσεις όλων των παραγόντων ανά τρεις κ.ο.κ. δ) την αλληλεπίδραση όλων των παραγόντων μαζί. Υπολογίζοντας όλες αυτές τις επιδράσεις και αλληλεπιδράσεις,

μπορούμε με τον έλεγχο F να κρίνουμε ποιες από αυτές είναι στατιστικά σημαντικές και πρέπει να παραμείνουν στο μοντέλο, και ποιες δεν είναι στατιστικά σημαντικές και μπορούν να παραληφθούν χωρίς μεγάλη βλάβη της ακρίβειας.

Πρέπει να παρατηρήσουμε ότι όσο αυξάνονται οι παράγοντες, αυξάνεται σημαντικά και ο αριθμός των απαιτούμενων παρατηρήσεων. Στόχος λοιπόν είναι ο προσδιορισμός των σημαντικών επιδράσεων και αλληλεπιδράσεων με όσο το δυνατόν λιγότερες παρατηρήσεις.

1.3. Στατιστικοί έλεγχοι

Υπάρχουν δύο στατιστικοί έλεγχοι που μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε για να επιλέξουμε τις στατιστικά σημαντικές μεταβλητές ενός μοντέλου. Ο έλεγχος t και ο έλεγχος F . Οι έλεγχοι αυτοί αφορούν τους συντελεστές β των μεταβλητών στη συνάρτηση παλινδρόμησης την οποία προσαρμόζουμε στα δεδομένα του προβλήματος. Αν μια μεταβλητή δεν είναι στατιστικά σημαντική τότε η συνεισφορά της στη συνάρτηση είναι ελάχιστη ή μηδενική και μπορεί να παραληφθεί από το μοντέλο. Κάθε στατιστικός έλεγχος αποτελείται από τα ακόλουθα στοιχεία:

- 1) τη μηδενική υπόθεση H_0 και την εναλλακτική H_1 ,
- 2) το επίπεδο σημαντικότητας α το οποίο καθορίζεται από την αρχή της μελέτης,
- 3) τη στατιστική συνάρτηση ελέγχου η οποία ακολουθεί μια συγκεκριμένη κατανομή υπό την H_0 .

Ο έλεγχος t ελέγχει κάθε συντελεστή ξεχωριστά υπό την προϋπόθεση ότι όλες οι υπόλοιπες μεταβλητές συμπεριλαμβάνονται στο μοντέλο. Ο έλεγχος αυτός δεν είναι πολύ αξιόπιστος διότι αν έχουμε δύο μεταβλητές A και B οι οποίες έχουν μεγάλη συσχέτιση μεταξύ τους τότε ίσως θα χρειαζόταν να προσθέσουμε μόνο τη μία από τις δύο στο μοντέλο. Όμως ο έλεγχος t αφού θα ελέγξει κάθε μια ξεχωριστά θα τις δώσει και τις δύο στατιστικά σημαντικές.

Ο έλεγχος F μπορεί να ελέγξει κάθε μία μεταβλητή ξεχωριστά, όπως και ο t , αλλά μπορεί να ελέγξει και τη σημαντικότητα μιας ομάδας μεταβλητών, δηλαδή:

$$H_0 : \beta_i = \beta_j = \dots = 0$$

$$H_1 : \text{διαφορετικά.}$$

Εδώ ελέγχεται η σημαντικότητα του μοντέλου με όλες τις μεταβλητές (H_1) σε σχέση με το μοντέλο χωρίς τις μεταβλητές με συντελεστή β_i, β_j, \dots

Η ελεγχουσυνάρτηση που χρησιμοποιούμε είναι η ακόλουθη:

$$F = \frac{(SSE_0 - SSE_1) / m}{SSE_1 / (n - k - 1)},$$

όπου m είναι το πλήθος των συντελεστών που μηδενίζονται υπό την H_0 .

Κύριο λόγο στη σύγκριση και επιλογή του κατάλληλου μοντέλου παίζει το σφάλμα SSE. Αν προσθέσουμε μια μεταβλητή στο μοντέλο και η μείωση στο SSE θεωρηθεί μικρή, τότε η μεταβλητή δε χρειάζεται στο μοντέλο. Αντίθετα, αν παρατηρήσουμε μεγάλη μείωση στο σφάλμα SSE οδηγούμαστε στο συμπέρασμα ότι η μεταβλητή είναι χρήσιμη στο μοντέλο μας.

Αυτό κάνουμε στη διαδικασία διαδοχικής πρόσθεσης (Forward Selection) όπου ξεκινάμε έχοντας μόνο το μοντέλο με το σταθερό όρο:

$$y = \beta_0$$

και κάθε φορά προσθέτουμε τη μεταβλητή με τη μεγαλύτερη στατιστικά σημαντική τιμή της ελεγχουσυνάρτησης F . Σταματάμε όταν δεν υπάρχει άλλη στατιστικά σημαντική μεταβλητή για να προσθέσουμε.

Μια αντίθετη διαδικασία είναι αυτή της διαδοχικής αφαίρεσης (Backward Elimination). Εδώ αν η αφαίρεση μιας μεταβλητής από το μοντέλο προκαλέσει μόνο μικρή αύξηση στο σφάλμα SSE τότε καταλαβαίνουμε ότι η μεταβλητή δεν είναι στατιστικά σημαντική και μπορεί να παραληφθεί από το μοντέλο. Αντίθετα, μεγάλη αύξηση στο SSE οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η μεταβλητή δε μπορεί να αφαιρεθεί από το μοντέλο. Στη διαδικασία αυτή, το αρχικό μοντέλο έχει μέσα όλες τις μεταβλητές και ξεκινάμε αφαιρώντας τη λιγότερο στατιστικά σημαντική μεταβλητή. Σταματάμε όταν δεν υπάρχει καμία στατιστικά μη σημαντική μεταβλητή για να αφαιρέσουμε.

Μια τρίτη μέθοδος είναι η διαδικασία κατά βήματα (Stepwise Selection). Με τη χρήση αυτής της μεθόδου κάθε νέα πρόσθεση μεταβλητής οδηγεί αυτόματα στον έλεγχο για το αν κάποια από τις ήδη υπάρχουσες μεταβλητές μπορεί να αφαιρεθεί.

1.4. Λατινικά τετράγωνα

Ορισμός 1.4.1

Λατινικό τετράγωνο είναι μια ταξινόμηση n γραμμάτων ή αριθμών σε t γραμμές και t στήλες έτσι ώστε κάθε γράμμα ή αριθμός να εμφανίζεται ακριβώς μια φορά σε κάθε γραμμή και κάθε στήλη. Έτσι προκύπτουν πίνακες διαστάσεων $t \times t$.

Μερικά παραδείγματα λατινικών τετραγώνων είναι τα ακόλουθα:

1) Λατινικό τετράγωνο 3×3

1	2	3
2	3	1
3	1	2

2) Λατινικό τετράγωνο 5×5

A	B	C	D	E
B	C	D	E	A
C	D	E	A	B
D	E	A	B	C
E	A	B	C	D

Για κάθε αριθμό t , που ονομάζεται τάξη, υπάρχει πάντα ένα τουλάχιστον λατινικό τετράγωνο που σχηματίζεται με κυκλική εναλλαγή των γραμμάτων (αριθμών). Έτσι, με αριστερή κυκλική εναλλαγή προκύπτει ένα λατινικό τετράγωνο τάξεως t ως εξής:

$$x_{i+1} = Lx_i, i = 1, 2, \dots, n-1,$$

όπου το x_i είναι η i -οστή γραμμή του τετραγώνου και το L ορίζεται ως εξής:

$$L(a_1, a_2, \dots, a_n) = (a_2, a_3, \dots, a_n, a_1).$$

Ορισμός 1.4.2

Δύο λατινικά τετράγωνα της ίδιας τάξης ονομάζονται ορθογώνια αν στις θέσεις που στο πρώτο εμφανίζεται κάποιο από τα γράμματα (αριθμούς) t , στις ίδιες θέσεις του άλλου εμφανίζονται όλα τα άλλα γράμματα (αριθμοί).

Τα λατινικά τετράγωνα απαιτούν λιγότερες παρατηρήσεις για ένα πείραμα σε σχέση με αυτές που απαιτεί ένας πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός. Για παράδειγμα: έστω ότι σε ένα πείραμα έχουμε τρεις παράγοντες με t στάθμες ο καθένας. Τότε αντί για t^3 παρατηρήσεις που πρέπει να κάνουμε για ένα πλήρες t^3 παραγοντικό πείραμα, μπορούμε να κάνουμε t^2 παρατηρήσεις και να σχηματίσουμε ένα λατινικό τετράγωνο του οποίου οι γραμμές θα εκφράζουν τον ένα παράγοντα, οι στήλες τον δεύτερο και τα γράμματα που θα περιέχονται στο τετράγωνο θα εκφράζουν τον τρίτο παράγοντα. Έτσι μειώνεται το κόστος και ο χρόνος του πειράματος.

Το μοντέλο που προσαρμόζεται είναι το εξής:

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_k + \varepsilon_{ijk},$$

όπου $\alpha_i, \beta_j, \gamma_k$ είναι οι κύριες επιδράσεις (γραμμές, στήλες, γράμματα), μ είναι ο γενικός μέσος και ε_{ijk} το σφάλμα. Τότε ο πίνακας ανάλυσης διασποράς είναι ο παρακάτω:

Πίνακας 1.4: Ανάλυση διασποράς λατινικών τετραγώνων

Πηγή	Άθροισμα Τετραγώνων	Βαθμοί Ελευθερίας
Γραμμές	$SSR = \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t y_{i..}^2 - \frac{1}{n} y_{...}^2$	t-1
Στήλες	$SSC = \frac{1}{t} \sum_{j=1}^t y_{.j.}^2 - \frac{1}{n} y_{...}^2$	t-1
Γράμματα	$SSTr = \frac{1}{t} \sum_{k=1}^t y_{..k}^2 - \frac{1}{n} y_{...}^2$	t-1
Υπόλοιπο	$SSE = SST - SSR - SSC - SSTr$	(t-1)(t-2)
Σύνολο	$SST = \sum_{i=1}^t \sum_{j=1}^t \sum_{k=1}^t y_{ijk}^2 - \frac{1}{n} y_{...}^2$	t ² -1

Σημειώνουμε ότι $n = t^2$ είναι το συνολικό πλήθος των παρατηρήσεων.

Για τους υπολογισμούς μας υποθέτουμε ότι ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις:

$$\sum_i a_i = \sum_j \beta_j = \sum_k \gamma_k = 0,$$

και τότε έχουμε τις παρακάτω εκτιμήσεις:

$$\begin{aligned}\hat{\mu} &= \bar{y}_{...} \\ \hat{a}_i &= \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...} \\ \hat{\beta}_j &= \bar{y}_{.j.} - \bar{y}_{...} \\ \hat{\gamma}_k &= \bar{y}_{..k} - \bar{y}_{...}\end{aligned}$$

Τέλος, να σημειώσουμε ότι τα λατινικά τετράγωνα είναι ατελείς σχεδιασμοί, κάτι που σημαίνει ότι δεν περιλαμβάνουν παρατηρήσεις για όλους τους πιθανούς συνδυασμούς i, j, k .

1.5. Κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί

Έχουμε ήδη παρατηρήσει ότι καθώς αυξάνει ο αριθμός των παραγόντων σε ένα πείραμα, αυξάνονται και οι εκτελέσεις που χρειάζονται για μια πλήρη επανάληψη του σχεδιασμού και μάλιστα εκθετικά. Έτσι, ακόμα και σε σχεδιασμούς 2^k ή 3^k , δηλαδή σχεδιασμούς με k παράγοντες σε δύο ή σε τρεις στάθμες αντίστοιχα, ο αριθμός εκτελέσεων αυξάνει πολύ γρήγορα. Για παράδειγμα, για έναν 2^4 σχεδιασμό χρειαζόμαστε 16 επαναλήψεις, για ένα 2^5 σχεδιασμό χρειαζόμαστε 32 επαναλήψεις, και για έναν 2^6 σχεδιασμό χρειαζόμαστε 64 επαναλήψεις. Στον 2^6 σχεδιασμό όμως, μόνο οι 6 από τους 63 βαθμούς ελευθερίας αντιστοιχούν σε κύριες επιδράσεις, 15 βαθμοί αντιστοιχούν σε αλληλεπιδράσεις 2 παραγόντων ενώ οι υπόλοιποι 42 αντιστοιχούν σε αλληλεπιδράσεις 3 ή περισσότερων παραγόντων.

Υποθέτοντας λοιπόν ότι κάποιες αλληλεπιδράσεις υψηλότερης τάξης είναι αμελητέες και ότι εμείς θέλουμε να εκτιμήσουμε μόνο τις κύριες επιδράσεις και κάποιες αλληλεπιδράσεις χαμηλότερης τάξης, οι οποίες φαίνεται να είναι σημαντικές, φτάνουμε στο συμπέρασμα ότι μπορούμε να εκτελέσουμε μόνο ένα κλάσμα του πλήρους παραγοντικού πειράματος, και να μειώσουμε σημαντικά τον αριθμό των επαναλήψεων. Έτσι προκύπτουν οι κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί, (Fractional Factorial Designs - FFD).

Για να επιλέξουμε το κλάσμα που θα χρησιμοποιήσουμε γράφουμε πρώτα ολόκληρο τον παραγοντικό σχεδιασμό (δηλαδή όλους τους συνδυασμούς αγωγών) και στη συνέχεια επιλέγουμε με κατάλληλο τρόπο και με τη βοήθεια μιας ορίζουσας σχέσης που ονομάζεται γεννήτορας το κομμάτι ή κλάσμα του σχεδιασμού που θα μελετήσουμε. Έτσι, αν για παράδειγμα έχουμε έναν 2^5 σχεδιασμό, δηλαδή 32 επαναλήψεις, μπορούμε να επιλέξουμε ένα $\frac{1}{2}$ - κλάσμα του σχεδιασμού και έτσι να μελετήσουμε έναν 2^{5-1} κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό που απαιτεί τις μισές επαναλήψεις. Με αυτό τον τρόπο μπορούμε να εκτιμήσουμε όλες τις κύριες επιδράσεις αλλά και κάποιες αλληλεπιδράσεις δύο ή περισσότερων παραγόντων. Αυτό είναι συνήθως αρκετό για να έχουμε μια πολύ καλή περιγραφή του πειράματός μας.

Συνήθως χρησιμοποιούνται 2^{s-p} και 3^{s-p} κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί όπου s είναι ο αριθμός των παραγόντων και $p < s$ ακέραιος. Βέβαια, ανάλογα με την αναλυτική τάξη του σχεδιασμού μπορεί κάποιες κύριες επιδράσεις να ταυτίζονται με κάποιες αλληλεπιδράσεις. Χαρακτηριστικό γνώρισμα των κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών είναι το ότι μερικοί από αυτούς μπορεί να είναι ορθογώνιοι σχεδιασμοί.

1.6. Ορθογώνιοι σχεδιασμοί

Οι ορθογώνιοι σχεδιασμοί (Orthogonal Designs, OD) αποτελούν μια κατηγορία των κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών. Χρησιμοποιούνται σε πολλά προβλήματα που σχετίζονται με τη βιομηχανία, τον ποιοτικό έλεγχο και τις φυσικές επιστήμες. Μπορούμε επίσης να τους θεωρήσουμε ειδική κατηγορία των ορθογωνίων πινάκων (Orthogonal Arrays, OA).

Ένας ορθογώνιος πίνακας δύναμης r και μεγέθους n (αριθμός επαναλήψεων), με s παράγοντες περιγράφεται από ένα πίνακα $O_{n \times s}$, με στοιχεία από ένα σύνολο $q \geq 2$ (επίπεδα). Καθένας από τους $n \times r$ υποπίνακες του O περιέχει όλα τα πιθανά $1 \times r$ διανύσματα γραμμής με την ίδια συχνότητα λ .

Πρακτικά ένας ορθογώνιος πίνακας δύναμης 2 είναι πολύ σημαντικός όσον αφορά τους πειραματικούς σχεδιασμούς. Ένας OA δύναμης 2 καλείται ορθογώνιος σχεδιασμός.

Ορισμός 1.6.1

Ένας $n \times s$ πίνακας που συμβολίζεται ως $L_n(q_1 \times q_2 \times \dots \times q_s)$ με στοιχεία $1, 2, \dots, q_j$ στην θέση $j=1, 2, \dots, s$ ονομάζεται ορθογώνιος σχεδιασμός αν ικανοποιεί τις εξής προϋποθέσεις:

- α) κάθε στοιχείο εμφανίζεται σε κάθε στήλη του τις ίδιες ακριβώς φορές,
β) σε κάθε δύο στήλες, κάθε ζεύγος $(1,1), \dots, (1,q_j), (2,1), \dots, (2,q_j), \dots, (q_i,q_j)$, για $1 \leq i < j \leq s$ εμφανίζεται τις ίδιες ακριβώς φορές.

Εναλλακτικά, αν κάποια από τα q_j είναι τα ίδια, έχουμε τον πίνακα $L_n(q_1^{t_1} \times q_2^{t_2} \times \dots \times q_m^{t_m})$ με $t_1 + t_2 + \dots + t_m = s$ ή για συντομία $L_n(q^s)$ που έχει s στήλες η κάθε μία από τις οποίες έχει τον ίδιο αριθμό επιπέδων q .

Πρέπει να σημειωθεί εδώ ότι ο αριθμός των επαναλήψεων n πρέπει να είναι πολλαπλάσιο του q_j όταν $t_j = 1$ ενώ πρέπει να είναι να είναι πολλαπλάσιο του q_j^2 όταν $t_j \geq 2$.

Παράδειγμα

Στον παρακάτω πίνακα φαίνεται μια απεικόνιση του ορθογώνιου σχεδιασμού $L_9(3^4)$:

Πίνακας 1.5: Ορθογώνιος Σχεδιασμός $L_9(3^4)$

1	1	1	1
1	2	2	2
1	3	3	3
2	1	2	3
2	2	3	1
2	3	1	2
3	1	3	2
3	2	1	3
3	3	2	1

Σε αυτό το σχεδιασμό έχουμε $s = 4$ παράγοντες, ο καθένας από τους οποίους έχει $q = 3$ επίπεδα και ο συνολικός αριθμός επαναλήψεων είναι $n = 9$.

Πρέπει να σημειωθεί εδώ ότι δεδομένων των παραμέτρων n, s, q_1, \dots, q_s ο ορθογώνιος σχηματισμός που θα προκύψει δεν είναι μοναδικός. Έτσι, για παράδειγμα, στον παραπάνω $L_9(3^4)$ σχεδιασμό εναλλάσσοντας τις γραμμές και τις στήλες του μπορούν να προκύψουν νέοι, ισοδύναμοι με τον αρχικό, σχεδιασμοί. Όταν επιλέξουμε το σχεδιασμό που στην πρώτη του γραμμή όλα τα στοιχεία είναι 1, λέμε ότι έχουμε την κανονική μορφή.

Έτσι λοιπόν, το παραπάνω παράδειγμα είναι σε κανονική μορφή. Ας παρατηρήσουμε τώρα το εξής: αν μετονομάσουμε τα επίπεδά του από 1, 2, 3 σε $-1, 0, 1$ τότε οι στήλες που προκύπτουν από τον πίνακα είναι ορθογώνιες μεταξύ τους. Η συνθήκη όμως της ορθογωνιότητας των στηλών ενός πίνακα δεν είναι αρκετή για να λάβουμε ορθογώνιους πίνακες. Για την κατασκευή τους, εξακολουθεί να είναι απαραίτητος ο ορισμός 1.6.1.

Μερικοί τρόποι κατασκευής των ορθογώνιων σχεδιασμών είναι:

- Μέσω των λατινικών τετραγώνων για τους $L_9(3^4), L_{16}(4^5), \dots$ και γενικά $L_{t^2}(t^{t+1})$.
- Μέσω των πινάκων Hadamard για τους $L_4(2^3), L_8(2^7), \dots$ και γενικά $L_{4t}(2^{4t-1})$.

Όταν οι ορθογώνιοι σχεδιασμοί προβάλλονται σε μία ή δύο διαστάσεις τότε είναι ομοιόμορφοι, δηλαδή τα σημεία τους είναι ομοιόμορφα κατανεμημένα στο χώρο του πειράματος. Στη συνέχεια θα μιλήσουμε εκτενέστερα για αυτή την έννοια της ομοιομορφίας.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

2.1. Εισαγωγή στους ομοιόμορφους σχεδιασμούς

Οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί (Uniform Design, UD) είναι σχεδιασμοί στους οποίους τα σημεία που τους απαρτίζουν είναι διασκορπισμένα ομοιόμορφα σε όλο το χώρο στον οποίο διεξάγεται το πείραμα. Προτάθηκαν για πρώτη φορά από τους Wang και Fang το 1981. Η ανάγκη δημιουργίας τέτοιων σχεδιασμών εμφανίστηκε όταν σε κάποια πειράματα μηχανικής που έγιναν το 1978 τέθηκε το ζήτημα της επίλυσης ενός συστήματος διαφορικών εξισώσεων, των οποίων κάθε επανάληψη απαιτούσε χρονικό διάστημα μίας ημέρας, δεδομένης της αργής ταχύτητας των τότε υπολογιστών. Χρειάστηκε λοιπόν να βρεθεί ένας τρόπος επεξεργασίας των πειραματικών δεδομένων ώστε με τη χρήση όσο το δυνατόν λιγότερων δεδομένων, να εξαχθεί το μέγιστο ποσό πληροφορίας.

Οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί έχουν τα εξής πλεονεκτήματα:

1. Έχοντας ένα μικρό αριθμό επαναλήψεων μπορούμε να εξάγουμε σημαντικό αριθμό πληροφοριών μελετώντας τις σχέσεις ανάμεσα στις μεταβλητές.
2. Ο σχηματισμός αυτός είναι εύρωστος. Αυτό σημαίνει ότι συμπεριφέρεται καλά και μπορούμε να εξάγουμε αποτελέσματα ακόμα και όταν δεν γνωρίζουμε το μοντέλο παλινδρόμησης.

Για αυτό το λόγο, οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί χρησιμοποιούνται πλέον ευρέως σε πολλά επιστημονικά και βιομηχανικά πειράματα.

Πρέπει να σημειωθεί ότι αντίθετα από τους κλασματικούς παραγοντικούς σχεδιασμούς (FFD) οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί (UD) συνήθως δεν είναι ορθογώνιοι.

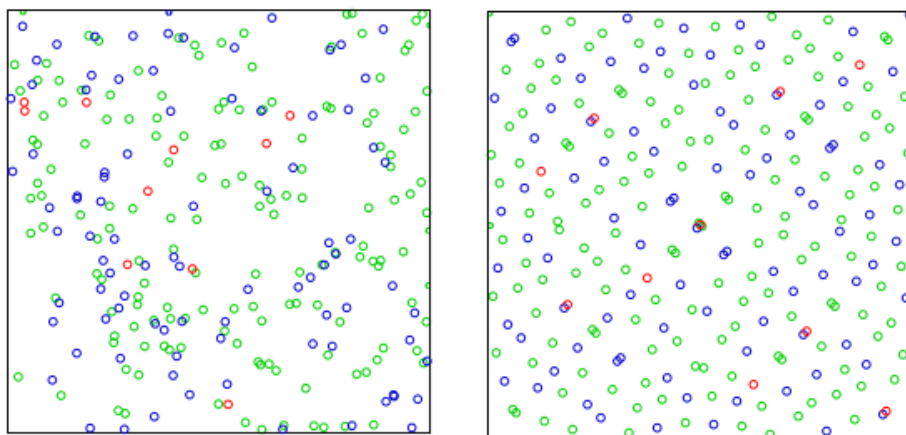
Η βασική ιδέα των ομοιόμορφων σχεδιασμών είναι να επιλέξουμε τα πιο αντιπροσωπευτικά σημεία μέσα από το χώρο του πειράματος έτσι ώστε να έχουμε ως αποτέλεσμα μεγάλο ποσό πληροφορίας με όσο το δυνατόν λιγότερες επαναλήψεις του πειράματος. Σημειώνεται ότι οι σχεδιασμοί αυτοί μπορούν να χρησιμοποιηθούν και σε μη γραμμικά μοντέλα όπου η χρήση σχεδιασμών πολλών επιπέδων είναι απαραίτητη. Επίσης, οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί μπορούν να θεωρηθούν ως μη παραμετρικά μοντέλα παλινδρόμησης. Αυτό έχει ως συνέπεια να μη μας είναι απαραίτητος ο προσδιορισμός των παραμέτρων του πειράματος (όπως συμβαίνει με τα παραμετρικά μοντέλα παλινδρόμησης).

2.2. Οι μέθοδοι Monte Carlo και quasi – Monte Carlo

Οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί βασίζονται στη μέθοδο quasi – Monte Carlo (quasi – Monte Carlo method). Η μέθοδος Monte Carlo αλλά και η παραλλαγή της (quasi – Monte Carlo μέθοδος) είναι δύο αριθμητικές τεχνικές ολοκλήρωσης που χρησιμοποιούνται ευρέως. Είναι απλή, εύκολη στη χρήση και εύρωστη (robust), πράγμα που σημαίνει ότι επηρεάζεται πολύ λίγο από τις επιρροές του εξωτερικού περιβάλλοντος. Αυτή της η ιδιότητα όμως την κάνει να είναι αργή και να έχει βαθμό σύγκλισης $O(N^{-\frac{1}{2}})$.

Η quasi – Monte Carlo μέθοδος χρησιμοποιεί quasi - τυχαίες ακολουθίες ή αλλιώς ακολουθίες χαμηλής ασυμφωνίας (low discrepancy) αντί για τυχαίες ή ψευδοτυχαίες. Με αυτό τον τρόπο τα στοιχεία της ακολουθίας που επιλέγονται δημιουργούν ομοιόμορφες ακολουθίες που μπορούν να καλύψουν όλο το χώρο του πειράματος (Σχήμα 2.1). Αυτή η ομοιομορφία έχει ως συνέπεια την πιο γρήγορη σύγκλιση της μεθόδου, $O(N^{-1}(\log N)^k)$, όπου k είναι μια σταθερά. Στόχος είναι να υπολογίσουμε κατά προσέγγιση το ολοκλήρωμα μιας συνάρτησης f από την παρακάτω σχέση, όπου x_1, \dots, x_N είναι το σύνολο των σημείων της ακολουθίας.

$$\int_{[0,1]^s} f(u) du \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$



Σχήμα 2.1: Ψευδοτυχαία ακολουθία

Ακολουθία χαμηλής ασυμφωνίας

Δεδομένου ότι (χωρίς βλάβη της γενικότητας) ολοκληρώνουμε σε ένα μοναδιαίο κύβο s -διαστάσεων $C = [0,1]^s$, κάθε x_i διάνυσμα είναι επιλεγμένο έτσι ώστε να έχουμε ομοιόμορφη κάλυψη του χώρου C^s .

Το σφάλμα της μεθόδου ορίζεται από την παρακάτω σχέση:

$$\varepsilon = \left| \int_{[0,1]^s} f(u) du - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \right|$$

και φράσσεται από τη σχέση:

$$|\varepsilon| \leq V(f) D_N,$$

η οποία ονομάζεται ανισότητα Koksma–Hlawka.

Η $V(f)$ είναι η διακύμανση της συνάρτησης f και D_N είναι η ασυμφωνία (discrepancy) του συνόλου (x_1, \dots, x_N) και είναι ένα μέτρο ομοιομορφίας.

Ορισμός 2.2.1

Γενικά, ως συνάρτηση ασυμφωνίας D_N ορίζεται κάθε μαθηματική σχέση που περιγράφει πόσο κοντά στα πραγματικά δεδομένα βρίσκεται το μοντέλο που έχουμε δημιουργήσει.

Για αυτό το λόγο, μεγάλες τιμές της D_N δείχνουν ένα όχι και τόσο καλό ταίριασμα της συνάρτησης στα δεδομένα. Έτσι λοιπόν, αν τα σημεία του χώρου που θα επιλέξουμε βρίσκονται συσσωρευμένα σε μια μικρή περιοχή όπως είναι προφανές, η ομοιομορφία του χώρου έχει παραβιαστεί. Αντιθέτως, μικρές τιμές της D_N δείχνουν ένα πολύ καλό ταίριασμα του μοντέλου, και πρακτικά, τα σημεία είναι ομοιόμορφα καταναμημένα στον χώρο.

Από τον ορισμό, προκύπτουν οι παρακάτω ιδιότητες: α) η συνάρτηση ασυμφωνίας D_N είναι πάντα μεγαλύτερη ή ίση του μηδενός, β) είναι μηδέν όταν έχουμε τέλειο ταίριασμα και γ) είναι συνεχής. Έτσι, στη μελέτη μας φροντίζουμε οι παράμετροι που ορίζουμε για την κατασκευή μιας συνάρτησης να ελαχιστοποιούν την συνάρτηση ασυμφωνίας.

Παραδείγματα τέτοιων συναρτήσεων είναι η συνάρτηση ελαχίστων τετραγώνων (ordinary least squares – OLS), η συνάρτηση γενικευμένων ελαχίστων τετραγώνων (generalized least squares - GLS), και η συνάρτηση μέγιστης πιθανοφάνειας (maximum likelihood - ML).

Η πιο διαδεδομένη συνάρτηση D_N στη μέθοδο quasi-Monte Carlo είναι η L_p -συνάρτηση ασυμφωνίας. Αυτή ορίζεται ως εξής:

$$D_N = D_p(P) = \left\{ \int_{C^s} \left| \frac{N(P, [0, x])}{n} - \text{Vol}([0, x]) \right|^2 dx \right\}^{1/p},$$

όπου το $[0, x)$ δηλώνει το διάστημα $[0, x_1) \times [0, x_2) \times \dots \times [0, x_s)$, το $N(P, [0, x))$ δηλώνει τον αριθμό των σημείων του P που βρίσκονται μέσα στο διάστημα $[0, x)$ και $\text{Vol}([0, x))$ είναι ο όγκος του $[0, x)$.

Επίσης ορίζεται και η L_∞ -συνάρτηση ασυμφωνίας με τύπο:

$$D(P) = \max_{x \in C^s} \left| \frac{N(P, [0, x])}{n} - \text{Vol}([0, x]) \right|.$$

Το μειονέκτημα των συναρτήσεων ασυμφωνίας που έχουν δοθεί εδώ είναι η δυσκολία του υπολογισμού τους. Έχουν γίνει προσπάθειες να δοθούν αναλυτικοί τύποι και να γίνει ο υπολογισμός τους αριθμητικά. Με αυτό θα ασχοληθούμε σε επόμενη ενότητα.

Από την ανισότητα Koksma – Hlawka συμπεραίνουμε πως αν έχουμε τη $V(f)$ φραγμένη τότε όσο περισσότερο ομοιόμορφα κατανεμημένο στο χώρο είναι το σύνολο των σημείων που έχουμε επιλέξει, τόσο πιο μικρό θα είναι το σφάλμα ε , άρα τόσο καλύτερα θα προσεγγίζεται η $f(u)$ από την $f(x)$ και συνεπώς θα έχουμε μια βέλτιστη εκτίμηση.

Από τα παραπάνω, έχοντας ένα διάνυσμα x που είναι ομοιόμορφα κατανεμημένο στο χώρο $[0, 1]^s$ και για μια συνάρτηση $f(u)$ μπορούμε να προσεγγίσουμε την αναμενόμενη τιμή:

$$E\{f(u)\} = \int_{[0, 1]^s} f(u) du,$$

χρησιμοποιώντας τη σχέση:

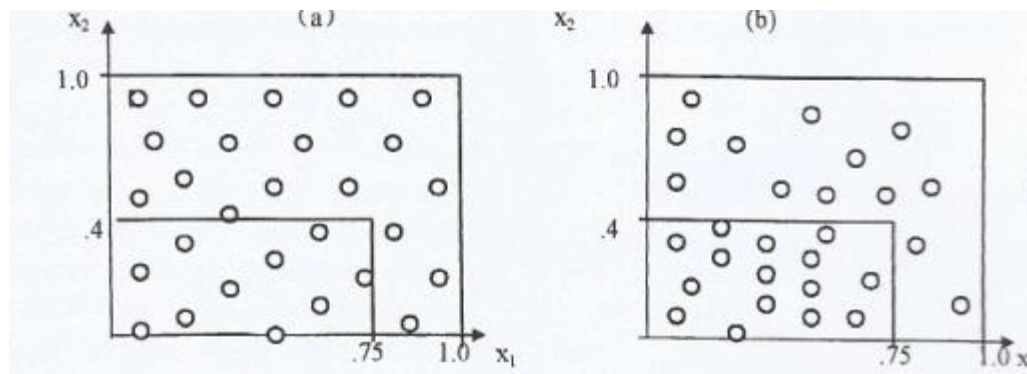
$$\bar{f} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i).$$

Η βασική ιδέα των ομοιόμορφων σχεδιασμών είναι η εξής: δεδομένου του αριθμού των παραγόντων και του αριθμού επαναλήψεων του πειράματος κύριος στόχος είναι να επιλέξουμε ένα σύνολο σημείων στο χώρο του πειράματος που να έχουν τη μικρότερη δυνατή ασυμφωνία, άρα να είναι όσο το δυνατόν περισσότερο ομοιόμορφα κατανεμημένα στο χώρο.

Ένας πρώτος, εύκολος, γεωμετρικός τρόπος υπολογισμού της συνάρτησης ασυμφωνίας και επομένως της ομοιομορφίας σε δεδομένο χώρο είναι η παρακάτω απόλυτη τιμή:

$$\left| \frac{\text{αριθμός σημείων σε δεδομένο ορθογώνιο}}{\text{συνολικός αριθμός σημείων στο χώρο}} - \text{όγκος ορθογωνίου} \right|$$

Με το Σχήμα 2.2 επεξηγείται η παραπάνω γεωμετρική ερμηνεία:



Σχήμα 2.2: Γεωμετρικός τρόπος υπολογισμού της συνάρτησης ασυμφωνίας

Εκ πρώτης όψεως φαίνεται ότι τα σημεία στο πρώτο γράφημα είναι ομοιόμορφα κατανεμημένα ενώ στο δεύτερο όχι.

Πραγματικά, για το (α) έχουμε: $\left| \frac{10}{28} - 0.4 \times 0.75 \right| = 0.0571,$

ενώ για το (β) έχουμε: $\left| \frac{15}{28} - 0.4 \times 0.75 \right| = 0.2357.$

Φαίνεται λοιπόν ότι η ασυμφωνία είναι πολύ μικρότερη στο (α) απ' ό τι στο (β).

2.3. Ορισμοί και πίνακες ομοιόμορφων σχεδιασμών

Οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί, όπως και οι ορθογώνιοι σχεδιασμοί, μας προσφέρουν πολλούς πίνακες για να ταιριάζουμε σε κάθε υπό μελέτη περίπτωση. Μοιάζουν με τους ορθογώνιους $L_n(q^s)$, όμως ο αριθμός των επιπέδων που διαθέτουν είναι ίσος με τον αριθμό των επαναλήψεων του πειράματος. Η εισαγωγή των ομοιόμορφων σχεδιασμών έγινε από τους Fang (1980) και Wang και Fang (1981). Αυτοί οι σχεδιασμοί επιτρέπουν την ομοιόμορφη κατανομή των πειραματικών σημείων (experimental points) σε όλο το πεδίο ορισμού.

Ορισμός 2.3.1

Ένας σχεδιασμός τύπου U (U-type) συμβολίζεται με $U(n, q^s)$ και αποτελείται από ένα πίνακα από n σειρές και s στήλες. Έχει $\{1, 2, \dots, q\}$ καταχωρήσεις έτσι ώστε κάθε μια από αυτές να εμφανίζεται σε κάθε στήλη το ίδιο συχνά.

Τους σχεδιασμούς τύπου U μπορούμε να τους χρησιμοποιήσουμε στη μελέτη πειραμάτων για τα οποία θα έχουμε s παράγοντες καθένας από τους οποίους θα έχει q επίπεδα και συνολικά θα γίνουν n επαναλήψεις. Προφανώς ο αριθμός επιπέδων q πρέπει να είναι διαιρέτης του αριθμού επαναλήψεων n . Να σημειωθεί εδώ πως οι σχεδιασμοί τύπου U δεν έχουν πάντα καλή ομοιομορφία.

Στη συνέχεια μπορούμε να ορίσουμε ως $U^*(n, q^s)$ το σύνολο όλων των σχεδιασμών τύπου U , $U(n, q^s)$. Ορίζουμε επίσης και M να είναι ένα μέτρο ομοιομορφίας πάνω στο σύνολο U^* . Ως γνωστόν όσο μικρότερο είναι το μέτρο M τόσο καλύτερη ομοιομορφία υπάρχει στο σχεδιασμό. Υπάρχουν πολλά διαφορετικά μέτρα ομοιομορφίας. Το χαρακτηριστικό τους γνωρίσματα είναι η σταθερότητά τους σε περίπτωση που αλλάξουμε τη σειρά των επαναλήψεων ή στην περίπτωση διαφορετικής επισημάνσης των παραγόντων.

Ορισμός 2.3.2

Ένας σχεδιασμός U που ανήκει στο σύνολο $U^*(n, q^s)$ ονομάζεται ομοιόμορφος σχεδιασμός υπό το μέτρο M αν:

$$M(U) = \min_{V \in U^*(n, q^s)} M(V),$$

και συμβολίζεται με $U_n(q^s)$.

Σημείωση: ως μέτρο M λαμβάνουμε τη συνάρτηση ασυμφωνίας D_N .

Οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί παρουσιάζονται σε μορφή πινάκων. Πρόκειται για τους UD πίνακες. Παρακάτω παρουσιάζονται οι πίνακες των ομοιόμορφων σχεδιασμών $U_7(7^3)$ και $U_{12}(12^4)$.

Ένας εύκολος τρόπος κατασκευής ενός $U_n(n^s)$ πίνακα είναι να πάρουμε ως πρώτη τη στήλη $(1, 2, \dots, n)$. Στη συνέχεια υπάρχουν $(n!-1)$ πιθανές εναλλαγές στις θέσεις των αριθμών $\{1, 2, \dots, n\}$ ώστε να προκύψει η δεύτερη στήλη, $(n!-2)$ πιθανές εναλλαγές ώστε να προκύψει η τρίτη στήλη και λοιπά.

Πίνακας 2.1: Ομοιόμορφος σχεδιασμός $U_7(7^3)$

$U_7(7^3)$			
No.	1	2	3
1	1	5	4
2	2	2	2
3	3	7	6
4	4	3	7
5	5	6	1
6	6	1	5
7	7	4	3

Πίνακας 2.2: Ομοιόμορφος σχεδιασμός $U_{12}(12^4)$

$U_{12}(12^4)$				
No.	1	2	3	4
1	1	10	4	7
2	2	5	11	3
3	3	1	7	9
4	4	6	1	5
5	5	11	10	11
6	6	9	8	1
7	7	4	5	12
8	8	2	3	2
9	9	7	12	8
10	10	12	6	4
11	11	8	2	10
12	12	3	9	6

Ο ομοιόμορφος σχεδιασμός $U_7(7^3)$ μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να περιγράψει ένα πείραμα τριών παραγόντων καθένας από τους οποίους έχει επτά επίπεδα και με το συνολικό αριθμό επαναλήψεων του να ανέρχεται στις επτά. Ο σχεδιασμός $U_{12}(12^4)$ αντίστοιχα, περιγράφει ένα πείραμα τεσσάρων παραγόντων καθένας από τους οποίους έχει δώδεκα επίπεδα και οι συνολικές επαναλήψεις είναι δώδεκα.

Πρέπει να γνωρίζουμε ότι δεδομένων των παραμέτρων n, q, s ο αντίστοιχος ομοιόμορφος σχεδιασμός που μπορεί να φτιαχτεί δεν είναι μοναδικός. Έτσι, δύο σχεδιασμούς μπορούμε να τους ονομάσουμε ισοδύναμους αν ο ένας προκύπτει από τον άλλο με αλλαγές στις γραμμές και τις στήλες.

Ένας άλλος παράγοντας που πρέπει να λάβουμε υπ' όψιν μας είναι ότι οι αριθμοί των επιπέδων μπορεί να διαφέρουν από παράγοντα σε παράγοντα λόγω των διαφορετικών αναγκών του πειράματος ή λόγω του περιορισμού από παράγοντες του περιβάλλοντος π.χ. οικονομικοί λόγοι. Για αυτό το λόγο υπάρχουν διαθέσιμοι και ομοιόμορφοι σχηματισμοί πολλαπλών επιπέδων (mixed levels).

Ορισμός 2.3.3

Ένας σχεδιασμός τύπου U (U -type) που συμβολίζεται με $U(n; q_1 \times \dots \times q_s)$ είναι ένας πίνακας $n \times s$ με στοιχεία $\{1, \dots, q_j\}$ στις j στήλες του, που εμφανίζονται το

ίδιο συχνά. Στην περίπτωση που κάποια q_j είναι ίσα τότε ο σχεδιασμός συμβολίζεται με $U(n; q_1^{r_1} \times \dots \times q_m^{r_m})$ όπου $r_1 + \dots + r_m = s$.

Σημείωση: τα q_j , $j = 1, \dots, s$ πρέπει να είναι διαιρέτες του n .

Έστω τώρα $U^*(n; q_1 \times \dots \times q_s)$ το σύνολο όλων των σχεδιασμών τύπου U . Τότε, όμοια με πριν ισχύει ο παρακάτω ορισμός:

Ορισμός 2.3.4

Ένας σχεδιασμός U που ανήκει στο σύνολο $U^*(n; q_1 \times \dots \times q_s)$ ονομάζεται ομοιόμορφος σχεδιασμός υπό το μέτρο M αν:

$$M(U) = \min_{V \in U^*(n; q_1 \times \dots \times q_s)} M(V)$$

και συμβολίζεται με $U_n(q_1 \times \dots \times q_s)$.

Παράδειγμα

Στον παρακάτω πίνακα βλέπουμε έναν $U_6(3^2 \times 2^1)$ ομοιόμορφο σχεδιασμό. Ένας τέτοιος σχεδιασμός μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να περιγράψει ένα πείραμα τριών παραγόντων εκ των οποίων οι δύο θα είναι τριών επιπέδων και ο ένας θα είναι δύο επιπέδων.

Πίνακας 2.3: Ομοιόμορφος σχεδιασμός $U_6(3^2 \times 2^1)$

No.	1	2	3
1	1	1	1
2	2	1	2
3	3	2	1
4	1	2	2
5	2	3	1
6	3	3	2

Γενικά, πίνακες ομοιόμορφων σχεδιασμών μπορούν να βρεθούν στο διαδίκτυο. Ωστόσο υπάρχουν περιπτώσεις που δεν μπορεί να βρεθεί στη βιβλιογραφία ομοιόμορφος σχεδιασμός που να μπορεί να περιγράψει επακριβώς το πείραμα που εκτελούμε. Σε αυτή την περίπτωση μπορούμε να εφαρμόσουμε την τεχνική των ψευδο-επιπέδων (pseudo-level technique) ώστε να μπορέσουμε να προσαρμόσουμε έναν ήδη υπάρχον σχεδιασμό στις απαιτήσεις του πειράματός μας. Η παρουσίαση της τεχνικής αυτής θα γίνει μέσα από το επόμενο παράδειγμα:

Τεχνική των ψευδο-επιπέδων

Έστω ότι στο πείραμά μας υπάρχουν δύο παράγοντες τεσσάρων επιπέδων και δύο παράγοντες δύο επιπέδων. Ενώ στη βιβλιογραφία δεν μπορούμε να βρούμε πίνακα που να περιγράφει επακριβώς αυτή την κατάσταση, μπορούμε να βρούμε διαθέσιμους πίνακες επιπέδων πολλαπλάσιων του 4, με τέσσερις παράγοντες: $U_{4m}(4^4)$. Έστω λοιπόν ο σχεδιασμός $U_8(4^4)$ όπως φαίνεται παρακάτω:

Πίνακας 2.4: Ομοιόμορφος σχεδιασμός $U_8(4^4)$

No.	1	2	3	4
1	1	2	1	2
2	1	4	2	3
3	2	1	3	4
4	2	3	4	1
5	3	1	2	1
6	3	3	1	4
7	4	2	4	3
8	4	4	3	2

Ας υποθέσουμε τώρα ότι οι δυο πρώτες στήλες του παραπάνω σχεδιασμού παραμένουν ως έχουν και χρησιμοποιούνται για να εκφράσουν τους δύο παράγοντες τεσσάρων επιπέδων που είναι το ζητούμενο. Για τις δύο επόμενες στήλες εργαζόμαστε ως εξής: όπου υπάρχουν τα επίπεδα 1 ή 2 τα αντικαθιστούμε με τον αριθμό 1 και όπου υπάρχουν τα επίπεδα 3 ή 4 τα αντικαθιστούμε με τον αριθμό 2.

Πίνακας 2.5: Ομοιόμορφος σχεδιασμός $U_8(4^2 \times 2^2)$

1	2	3	4
1	2	1	1
1	4	1	2
2	1	2	2
2	3	2	1
3	1	1	1
3	3	1	2
4	2	2	2
4	4	2	1

Με αυτό τον τρόπο, προκύπτει ο παραπάνω πίνακας ο οποίος αντιστοιχεί σε ένα σχεδιασμό τύπου $U, U_8(4^2 \times 2^2)$.

Να σημειώσουμε ότι και ο νέος σχεδιασμός που προέκυψε έχει καλή ομοιομορφία. (Μέτρα για την εξακρίβωση της ομοιομορφίας θα δούμε παρακάτω.)

Στο παράδειγμα που ακολουθεί θα δούμε πως οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί έχουν την δυνατότητα να μοντελοποιήσουν πειράματα στα οποία εκτός από ποσοτικές έχουμε και ποιοτικές μεταβλητές.

Παράδειγμα

Έστω ότι θέλουμε να μελετήσουμε ένα πείραμα στο οποίο έχουμε τρεις ποσοτικές μεταβλητές X_1, X_2, X_3 , κάθε μια από τις οποίες έχει 12 επίπεδα, και μια ποιοτική μεταβλητή X_4 με 3 επίπεδα (c_1, c_2, c_3). Δεδομένου ότι δεν υπάρχει πίνακας ομοιόμορφου σχεδιασμού $U_{12}(12^3 \times 3^1)$ θα χρησιμοποιήσουμε την τεχνική των ψευδο-επιπέδων έτσι ώστε να δημιουργήσουμε τον ζητούμενο πίνακα από τον αντίστοιχο $U_{12}(12^4)$.

Όμοια με την προηγούμενη κατασκευή οι τρεις πρώτες στήλες του σχεδιασμού θα παραμείνουν ίδιες ενώ η τέταρτη θα μετασχηματιστεί αφού πρώτα επιλέξουμε την αλλαγή που θέλουμε να κάνουμε. Για παράδειγμα θα μπορούσαμε να έχουμε τον παραπάνω πίνακα, μετατρέποντας την πρώτη στήλη: όπου (2, 6, 8, 10) να θέσουμε την τιμή 1, όπου (1, 4, 9, 12) να θέσουμε την τιμή 2 και όπου (3, 5, 7, 11) να θέσουμε την τιμή 3. Έτσι θα έχουμε τον πίνακα $U_{12}(12^3 \times 3^1)$ όπως φαίνεται παρακάτω.

Πίνακας 2.6: ομοιόμορφος σχεδιασμός $U_{12}(12^3 \times 3^1)$

No.	1	2	3	4
1	1	10	4	2
2	2	5	11	1
3	3	1	7	3
4	4	6	1	2
5	5	11	10	3
6	6	9	8	1
7	7	4	5	3
8	8	2	3	1
9	9	7	12	2
10	10	12	6	1
11	11	8	2	3
12	12	3	9	2

Με αυτό τον τρόπο οι τρεις πρώτες στήλες περιγράφουν τις ποσοτικές μας μεταβλητές που έχουν δώδεκα επίπεδα ενώ η τέταρτη στήλη περιγράφει την ποιοτική μας μεταβλητή η οποία έχει τρία επίπεδα.

Χρησιμοποιώντας ψευδομεταβλητές μπορούμε να περιγράψουμε το παραπάνω πείραμα με ένα γραμμικό μοντέλο:

$$E(Y) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \gamma_1 z_1 + \gamma_2 z_2$$

$$\text{όπου για } i = 1, 2 \quad z_i = \begin{cases} 1, & X_4 = c_i \\ 0, & X_4 \neq c_i. \end{cases}$$

2.4. Αναμειγμένοι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί

Στην καθημερινή μας ζωή πολλά προϊόντα αναφέρονται σε αναμείξεις συγκεκριμένων συστατικών. Για παράδειγμα τα συστατικά ενός φαρμάκου πρέπει να μπουν σε συγκεκριμένες αναλογίες με κάποια από αυτά να υπερτερούν σε σχέση με κάποια άλλα. Το ίδιο συμβαίνει κατά την παρασκευή τσιμέντου για μια οικοδομή η ακόμα και για την παρασκευή ενός κέικ! Είναι φανερό ότι οι ποσότητες που πρέπει

να αναμείξουμε είναι συγκεκριμένες και σίγουρα κάποια από τα υλικά πρέπει να είναι σε μεγαλύτερη αναλογία μέσα στο μείγμα σε σχέση με τα υπόλοιπα.

Οι σχεδιασμοί που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή τέτοιων πειραμάτων ονομάζονται αναμειγμένοι (experiment designs with mixtures). Σε αυτούς μπορούν να τεθούν περιορισμοί στις τιμές που μπορούν να πάρουν οι εκάστοτε παράγοντες του πειράματος. Έτσι, μπορεί να ισχύει η εξής συνθήκη:

$$0 \leq a_j < x_j < b_j \leq 1, \quad 1 \leq j \leq s, \quad \sum_{j=1}^s x_j = 1,$$

όπου a_j, b_j είναι δοσμένες σταθερές και s είναι οι παράγοντες του πειράματος.

Έστω ένας σχεδιασμός n -επαναλήψεων για την ανάμειξη s συστατικών του πειράματος. Αυτό μας δίνει n σημεία στο χώρο:

$$T_s = \{(x_1, \dots, x_s) : x_j \geq 0, j=1, \dots, s, \text{ και } x_1 + \dots + x_s = 1\},$$

δηλαδή $0 = a_j < x_j < b_j = 1$ που είναι και η απλούστερη περίπτωση.

Για να παραχθεί ένας ομοιόμορφος σχεδιασμός με τα παραπάνω δεδομένα, δηλαδή τα σημεία του πειράματος να είναι ομοιόμορφα κατανεμημένα στο χώρο, και να έχουμε τη χαμηλότερη δυνατή ασυμφωνία οι Wang και Fang (1990) πρότειναν μια μέθοδο μετατροπής (transformation method). Αυτή περιγράφεται παρακάτω:

Μέθοδος μετατροπής

Έστω $U(u_{ki})$ να είναι ένας $U_n(n^{s-1})$ ομοιόμορφος σχεδιασμός στο χώρο C^{s-1} .

Κάνουμε τον μετασχηματισμό $c_{ki} = \frac{(u_{ki} - 0.5)}{n}$ και

$$x_{ki} = \left(1 - c_{ki}^{\frac{1}{(s-i)}} \right) \prod_{j=1}^{i-1} c_{kj}^{\frac{1}{(s-j)}}, \quad i = 1, \dots, s-1$$

$$x_{ks} = \prod_{j=1}^{s-1} c_{kj}^{\frac{1}{(s-j)}}, \quad k = 1, \dots, n.$$

Με αυτό τον τρόπο, τα σημεία $\{x_k = (x_{k1}, \dots, x_{ks}), k = 1, \dots, n\}$ αποτελούν έναν ομοιόμορφο σχεδιασμό στον χώρο T_s . Αν τώρα εφαρμόσουμε και τους περιορισμούς που αναφέραμε παραπάνω για μερικές ή για όλες τις μεταβλητές του πειράματος τότε ο χώρος μας θα είναι ο παρακάτω:

$$T_s(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \{\mathbf{x} : \mathbf{0} \leq \mathbf{a} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{b} \leq \mathbf{1}\},$$

όπου \mathbf{a} και \mathbf{b} είναι τα διανύσματα $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_s)$ και $\mathbf{b} = (b_1, \dots, b_s)$ αντίστοιχα.

2.5. Συναρτήσεις ασυμφωνίας

Σε προηγούμενη ενότητα είχαμε αναφερθεί στις συναρτήσεις ασυμφωνίας D_N όπως επίσης και στην χρησιμότητά τους σε έναν ομοιόμορφο σχεδιασμό αλλά και στη δυσκολία υπολογισμού τους.

Ο Warnock (1972) έδωσε ένα αναλυτικό τύπο για τον υπολογισμό της L_2 - συνάρτησης ασυμφωνίας:

$$(D_2(P))^2 = 3^{-s} - \frac{2^{1-s}}{n} \sum_{k=1}^n \prod_{l=1}^s (1 - x_{kl}^2) + \frac{1}{n^2} \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n \prod_{i=1}^s [1 - \max(x_{ki}, x_{ji})],$$

όπου $x_k = (x_{k1}, \dots, x_{ks})$. Η L_2 - συνάρτηση ασυμφωνίας υπολογίζεται ευκολότερα από την αντίστοιχη L_p , $p \neq 2$.

Ένα μειονέκτημα της L_2 είναι ότι δεν είναι πάντα σωστή όταν λαμβάνουμε υποχώρους χαμηλότερης διάστασης από τον αρχικό, γι' αυτό και δεν είναι κατάλληλη για ομοιόμορφους σχεδιασμούς. Αυτό συμβαίνει γιατί αγνοεί τις διαφορές:

$$\left| \frac{N(P, [0, x])}{n} - \text{Vol}([0, x]) \right|^2.$$

Για το λόγο αυτό προτάθηκαν από τον Hickernell (1998) τρία νέα μέτρα για την συνάρτηση ασυμφωνίας σε αναλυτική μορφή. Και τα τρία βασίζονται στην παρακάτω σχέση:

$$(D_2(P))^2 = \sum_{u \neq \emptyset} \int_{C^u} \left| \frac{N(P_u, J_{x_u})}{n} - \text{Vol}(J_{x_u}) \right|^2 du,$$

όπου u είναι ένα μη κενό υποσύνολο του συνόλου των συντεταγμένων των δεικτών $S = \{1, \dots, s\}$, $|u|$ είναι η πληθυκότητα του u , C^u είναι ο μοναδιαίος $|u|$ -διάστατος κύβος που περιέχει τις συντεταγμένες του u , P_u αποτελεί την προβολή του συνόλου P στο C^u , J_x είναι ένα ορθογώνιο μοναδικά ορισμένο από το \mathbf{x} , J_{x_u} είναι η προβολή του J_x στο C^u , και τέλος $N(P_u, J_{x_u})$ είναι ο αριθμός των σημείων του P_u που πέφτουν μέσα στο J_{x_u} .

Τα μέτρα που προτάθηκαν είναι:

1) η **συμμετρική L_2 συνάρτηση ασυμφωνίας** (symmetric L_2 -discrepancy, SD)

$$(SD(P))^2 = \left(\frac{4}{3}\right)^s - \frac{2}{n} \sum_{k=1}^n \prod_{j=1}^s (1 + 2x_{kj} - 2x_{kj}^2) + \frac{2^s}{n^2} \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n \prod_{i=1}^s [1 - |x_{ki} - x_{ji}|],$$

η οποία παραμένει αμετάβλητη αν το x_{kj} αντικατασταθεί από το $1 - x_{kj}$ για κάθε j , $1 \leq j \leq s$.

2) η **κεντραρισμένη L_2 συνάρτηση ασυμφωνίας** (centered L_2 -discrepancy, CD)

$$(CD(P))^2 = \left(\frac{13}{12}\right)^s - \frac{2}{n} \sum_{k=1}^n \prod_{j=1}^s \left(1 + \frac{1}{2}|x_{kj} - 0.5| - \frac{1}{2}|x_{kj} - 0.5|^2\right) + \frac{1}{n^2} \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n \prod_{i=1}^s \left[1 + \frac{1}{2}|x_{ki} - 0.5| + \frac{1}{2}|x_{ji} - 0.5| - \frac{1}{2}|x_{ki} - x_{ji}|\right] \quad (2.5.1)$$

η οποία έχει την πολύ καλή ιδιότητα να παραμένει αμετάβλητη αν οι επαναλήψεις γίνουν με διαφορετική σειρά ή αν ονομαστούν διαφορετικά οι παράγοντες. Επίσης παραμένει αμετάβλητη αν αντικαταστήσουμε την i -οστή μεταβλητή x_i με $1 - x_i$ για κάποια $i = 1, 2, \dots, s$. Επίσης διατηρεί την ομοιομορφία του χώρου στο μοναδιαίο κύβο C^s αλλά και σε οποιαδήποτε προβολή του συνόλου P στον C^u .

3) η τροποποιημένη L_2 συνάρτηση ασυμφωνίας (modified L_2 -discrepancy, MD)

$$(MD(P))^2 = \left(\frac{4}{3}\right)^s - \frac{2^{1-s}}{n} \sum_{k=1}^n \prod_{l=1}^s (3 - x_{kl}^2) + \frac{1}{n^2} \frac{1}{n^2} \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n \prod_{i=1}^s [2 - \max(x_{ki}, x_{ji})],$$

η οποία διατηρεί την ομοιομορφία σε όποια υποδιάσταση επιλέξουμε.

Να σημειώσουμε εδώ ότι και οι τρεις παραπάνω συναρτήσεις ικανοποιούν την ανισότητα Koksma – Hlawka. Επίσης, οι πίνακες των ομοιόμορφων σχεδιασμών συνήθως κατασκευάζονται υπό την κεντραρισμένη L_2 συνάρτηση ασυμφωνίας.

Στη συνέχεια προτάθηκαν και άλλες συναρτήσεις ασυμφωνίας ως μέτρα για την ομοιομορφία των σχεδιασμών:

4) η κυκλική L_2 συνάρτηση ασυμφωνίας (wrap-around L_2 -discrepancy, WD)

$$(WD(P))^2 = -\left(\frac{4}{3}\right)^s + \frac{1}{n^2} \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n \prod_{i=1}^s \left[\frac{3}{2} - |x_{ki} - x_{ji}| \cdot (1 - |x_{ki} - x_{ji}|) \right],$$

η οποία παραμένει αναλλοίωτη αν αλλάξουμε τη σειρά των επαναλήψεων ή αν μετονομάσουμε τους παράγοντες. Όπως και οι προηγούμενες ικανοποιεί την ανισότητα Koksma–Hlawka και διατηρεί την ομοιομορφία είτε αναφερόμαστε στο μοναδιαίο κύβο C^s είτε σε οποιαδήποτε προβολή στον C^u .

5) η αναμειγμένη συνάρτηση ασυμφωνίας (mixture discrepancy, MD)

$$(MD(P))^2 = \left(\frac{19}{12}\right)^k - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^k \left(\frac{5}{3} - \frac{1}{4} |x_{ij} - \frac{1}{2}| - \frac{1}{4} |x_{ij} - \frac{1}{2}|^2 \right) + \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{s=1}^n \prod_{j=1}^k \left(\frac{15}{8} - \frac{1}{4} |x_{ij} - \frac{1}{2}| - \frac{1}{4} |x_{kj} - \frac{1}{2}| - \frac{3}{4} |x_{ij} - x_{kj}| + \frac{1}{2} |x_{ij} - x_{kj}|^2 \right),$$

η οποία διατηρεί και αυτή όλες τις καλές ιδιότητες των παραπάνω συναρτήσεων.

Οι παραπάνω συναρτήσεις ασυμφωνίας δόθηκαν για παράγοντες οι οποίοι μπορούσαν να λάβουν οποιαδήποτε τιμή μέσα στο πεδίο ορισμού τους. Υπάρχουν

όμως και παράγοντες που παίρνουν μόνο διακριτές τιμές οι οποίες δημιουργούν ένα πλέγμα (lattice points). Για αυτές τις περιπτώσεις δίνονται οι δύο παρακάτω συναρτήσεις ασυμφωνίας:

6) η διακριτή συνάρτηση ασυμφωνίας (discrete discrepancy, DD)

$$(DD(P))^2 = -\prod_{i=1}^s \frac{(\rho + q_i - 1)\alpha}{q_i} + \frac{(\alpha\rho)^m}{n} + \frac{2\alpha^s}{n^2} \sum_{k=1}^n \sum_{l=k+1}^n \rho^{\sigma_{kl}},$$

όπου $a > 0$ και $\rho > 1$ δοσμένοι αριθμοί, σ_{kl} είναι ο αριθμός συναντήσεων μεταξύ της i -οστής και j -οστής σειράς του P_n (βλ. Ορισμό 2.5.2) και q_i είναι τα επίπεδα του i -οστού παράγοντα του P_n .

7) η συνάρτηση ασυμφωνίας Lee (Lee discrepancy, LD)

Η συνάρτηση αυτή διακρίνεται σε δύο σκέλη, ανάλογα με το αν ο αριθμός των επιπέδων q είναι άρτιος ή περιττός. Έτσι, αν ο q είναι περιττός αριθμός έχουμε τον ακόλουθο τύπο:

$$(LD_{odd}(P))^2 = \frac{1}{n} - \left(\frac{3}{4} + \frac{1}{4q^2}\right)^s + \frac{2}{n^2} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \prod_{k=1}^s (1 - a_{ij}^k),$$

ενώ αν ο q είναι άρτιος αριθμός έχουμε τον τύπο:

$$(LD_{even}(P))^2 = \frac{1}{n} - \left(\frac{3}{4}\right)^s + \frac{2}{n^2} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \prod_{k=1}^s (1 - a_{ij}^k),$$

όπου $a_{ij}^k = \min\{|x_{ik} - x_{jk}|, 1 - |x_{ik} - x_{jk}|\}$.

8) η κεντρική σύνθετη συνάρτηση ασυμφωνίας (central composite discrepancy, CCD)

Υπάρχουν περιπτώσεις όπου δεν είναι δυνατή η χρήση ενός κύβου ή ενός μοναδιαίου κύβου s διαστάσεων, C^s ως περιοχή μελέτης του πειράματός μας. Η περιοχή στην οποία μελετάται ο σχεδιασμός μπορεί να είναι ακανόνιστη και τότε οι παραπάνω συναρτήσεις ασυμφωνίας δεν μπορούν να μας βοηθήσουν. Ορίστηκε λοιπόν η κεντρική σύνθετη συνάρτηση ασυμφωνίας η οποία δουλεύει ως εξής:

Χωρίζει τον πειραματικό χώρο D σε αρκετές υποπεριοχές. Στη συνέχεια υπολογίζονται δύο λόγοι. Ο πρώτος λόγος υπολογίζει τον αριθμό των σημείων του σχεδιασμού που βρίσκονται μέσα σε κάθε υποπεριοχή προς τον συνολικό αριθμό των σημείων του σχεδιασμού. Ο δεύτερος λόγος υπολογίζει την αναλογία του όγκου της υποπεριοχής προς τον συνολικό όγκο της περιοχής μελέτης του πειράματος. Οι δύο αυτοί λόγοι δεν θα πρέπει να διαφέρουν πολύ αν ο σχεδιασμός είναι ομοιόμορφος, και έτσι η διαφορά τους αποτελεί μέτρο ομοιομορφίας.

Για ένα σχεδιασμό n σημείων P_n , με $P_n = \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$ ορισμένο σε μια ακανόνιστη περιοχή $X \subset \mathfrak{R}^K$, και M^K οι υποπεριοχές στις οποίες έχει χωριστεί ο χώρος μας έχουμε:

$$CCD_p(P_n) = \left(\frac{1}{u(X)} \int_X \frac{1}{M^K} \sum_{k=1}^{M^K} \left| \frac{N(X_k(x), P_n)}{n} - \frac{u(X_k(x))}{u(X)} \right|^p dx \right)^{1/p},$$

όπου $x^{(i)} = \{r \in \mathfrak{R} : x + a_i < r < x + a_{i+1}, i = 0, \dots, M-1\}$. Επίσης, $a_0 \equiv -\infty$, $a_M \equiv +\infty$, $a_1 < a_2 < \dots < a_{M-1}$ και για κάποιο a_j ισχύει $a_j = 0$ για $1 \leq j \leq M-1$. Τέλος, $X_k(x) = \{x_1^{i_1} \times \dots \times x_K^{i_K}\} \cap X$ και $N(X_k(x), P) = \sum_{i=1}^n I\{p_i \in X_k(x)\}$, $p > 0$.

Για την κεντραρισμένη συνάρτηση ασυμφωνίας (CD) και την κυκλική συνάρτηση ασυμφωνίας (WD) ενός $U(n, 2^k)$ σχεδιασμού αποδεικνύεται ότι μπορούν να υπάρξουν και πιο απλοί τύποι υπολογισμού τους. Για αυτό το σκοπό χρειαζόμαστε τους δύο παρακάτω ορισμούς:

Ορισμός 2.5.1

Έστω $\mathbf{X} = (x'_1, x'_2, \dots, x'_n)$ ο πίνακας σχεδιασμού του $U(n, q^k)$ ομοιόμορφου σχεδιασμού, όπου x_i είναι η i -οστή γραμμή του πίνακα, με $i = 1, 2, \dots, n$. Ορίζουμε την απόσταση hamming (hamming distance), d_{ij} , ανάμεσα σε δύο γραμμές x_i και x_j ως τον αριθμό των στηλών για τις οποίες οι σειρές x_i και x_j παίρνουν διαφορετικές τιμές.

(Προφανώς ισχύει η σχέση $d_{ii} = 0$.)

Ορισμός 2.5.2

Ο αριθμός των συναντήσεων (meeting number) ανάμεσα σε δύο σειρές x_i και x_j αποτελεί τη συμπληρωματική έννοια της απόστασης hamming. Ορίζεται ως $\lambda_{ij} = k - d_{ij}$ και περιγράφει τον αριθμό στηλών για τις οποίες οι σειρές x_i και x_j έχουν την ίδια τιμή.

Προφανώς για τον αριθμό συναντήσεων ισχύουν οι παρακάτω ιδιότητες:

$$\begin{aligned}\lambda_{ij} &= \lambda_{ji} \\ \lambda_{ii} &= k, \text{ αφού } d_{ii} = 0.\end{aligned}$$

Έτσι λοιπόν, για σχεδιασμούς $U(n, 2^k)$, με τη βοήθεια των παραπάνω ορισμών, η κεντραρισμένη L_2 - συνάρτηση ασυμφωνίας μπορεί να οριστεί εναλλακτικά ως:

$$(CD(X))^2 = \left(\frac{13}{12}\right)^k - 2\left(\frac{35}{32}\right)^k + \frac{1}{n^2} \sum_{i,j=1}^n \left(\frac{5}{4}\right)^{\lambda_{ij}}$$

και η κυκλική L_2 συνάρτηση ασυμφωνίας ως:

$$(WD(X))^2 = -\left(\frac{4}{3}\right)^k + \frac{1}{n^2} \left(\frac{5}{4}\right)^k \sum_{i,j=1}^n \left(\frac{6}{5}\right)^{\lambda_{ij}}.$$

Για $U(n, 3^k)$ σχεδιασμούς αποδεικνύεται επίσης πως η κυκλική L_2 συνάρτηση ασυμφωνίας μπορεί επίσης να λάβει την παρακάτω μορφή:

$$(WD(X))^2 = -\left(\frac{4}{3}\right)^k + \frac{1}{n^2} \left(\frac{23}{18}\right)^k \sum_{i,j=1}^n \left(\frac{27}{23}\right)^{\lambda_{ij}},$$

ενώ αντίθετα για την κεντραρισμένη L_2 - συνάρτηση ασυμφωνίας δεν έχει δοθεί αντίστοιχος τύπος.

Όταν θέλουμε να κατασκευάσουμε ένα ομοιόμορφο σχεδιασμό, αυτός θα πρέπει να μελετάται υπό κάποια από τις γνωστές συναρτήσεις ασυμφωνίας. Οι δύο ευρέως χρησιμοποιούμενες συναρτήσεις ασυμφωνίας είναι η κεντραρισμένη (CD) και η κυκλική (WD). Αποδεικνύεται πως υπάρχουν κάτω όρια για τις συναρτήσεις ασυμφωνίας τα οποία χρησιμοποιούνται στον έλεγχο του κατά πόσο ο ομοιόμορφος σχεδιασμός που έχει κατασκευαστεί είναι βέλτιστος.

Στο επόμενο κεφάλαιο θα προσπαθήσουμε να κατασκευάσουμε ομοιόμορφους σχεδιασμούς υπό την κεντραρισμένη συνάρτηση ασυμφωνίας.

Αναλυτικά, ο αναγνώστης μπορεί να δει αναφορές των συναρτήσεων ασυμφωνίας από τους Fang και Lin (2003), Fang, Li και Sudjianto (2006), Fang, Lin, Winker και Zhang (2012) και Androulakis, Drosou και Koukouvinos (2016).

2.6. Σχέσεις μεταξύ ομοιομορφίας και λοιπών σχεδιασμών

Είναι γνωστό πως η ιδιότητα της ορθογωνιότητας ή της ευρωστίας παίζουν σημαντικό ρόλο στην επιλογή και χρήση ενός σχεδιασμού σε ένα πείραμα. Σε αυτό το κεφάλαιο θα δούμε πως η ιδιότητα της ομοιομορφίας μπορεί να παίζει σημαντικό ρόλο ως κριτήριο επιλογής κάποιου σχεδιασμού.

2.6.1. Ομοιομορφία και ισομορφισμοί

Έστω ένας παραγοντικός σχεδιασμός $d(n, q, s)$ με n επαναλήψεις και s παράγοντες, κάθε ένας από τους οποίους έχει q επίπεδα.

Ορισμός 2.6.1.1

Δύο παραγοντικοί σχεδιασμοί καλούνται ισομορφικοί αν ο ένας μπορεί να προκύψει από τον άλλο μετονομάζοντας τους παράγοντες ή αναδιατάσσοντας τις επαναλήψεις ή εναλλάσσοντας τα επίπεδα των παραγόντων.

Εν γένει, δύο ισομορφικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί μπορούν να θεωρηθούν ισοδύναμοι αν παρουσιάζουν τα ίδια αποτελέσματα σε μια ανάλυση διασποράς ANOVA. Ωστόσο, θα ήταν χρήσιμο να υπάρχει κάποιο εργαλείο που να ταυτοποιεί ή να διαχωρίζει δύο ισομορφικούς σχεδιασμούς.

Για να δούμε αν δυο $d(n, q, s)$ σχεδιασμοί είναι ισομορφικοί θα έπρεπε να κάνουμε $n!(q!)^s s!$ συγκρίσεις σχεδιασμών. Αν για παράδειγμα θέλαμε να βρούμε τους ισομορφικούς σχεδιασμούς ενός $d(12, 2, 11)$ σχεδιασμού, θα χρειαζόταν να κάνουμε $12!2^{11}11! \approx 3.9158 \times 10^{19}$ συγκρίσεις. Για αυτό το λόγο έχουν αναπτυχθεί διάφορες μέθοδοι ώστε να μειωθεί η πολυπλοκότητα της διαδικασίας. Οι Ma, Lin και

Fang (2001) πρότειναν να χρησιμοποιηθεί η ιδιότητα της ομοιομορφίας στην εξεύρεση των μη ισομορφικών σχεδιασμών.

Ένας $d(n, q, s)$ παραγοντικός σχεδιασμός αντιστοιχεί σε ένα $n \times s$ πίνακα όπου το στοιχείο d_{ij} αντιστοιχεί στο επίπεδο του j -οστού παράγοντα στην i -οστή επανάληψη. Ορίζουμε επίσης τον πίνακα $P_d = (p_{ij})$, όπου $p_{ij} = \frac{d_{ij} - 0.5}{q}$ και M ένα μέτρο ομοιομορφίας, με $M(d(n, q, s)) = M(P_d)$. Ως μέτρο ομοιομορφίας μπορεί να χρησιμοποιηθεί η κεντραρισμένη (CD) ή η κυκλική (WD) συνάρτηση ασυμφωνίας. Για ένα δοσμένο $D = d(n, q, s)$ σχεδιασμό και ένα αριθμό k , $1 \leq k \leq s$ υπάρχουν $\binom{s}{k} d(n, q, s)$ υποπίνακες. Για αυτούς τους υποπίνακες, μπορεί να γίνει υπολογισμός των συναρτήσεων ασυμφωνίας (π.χ. CD). Οι τιμές που προκύπτουν δημιουργούν μια $F_k(D)$ κατανομή. Αποδείχθηκε ότι δύο ισομορφικοί $d(n, 2, s)$ σχεδιασμοί έχουν την ίδια τιμή συνάρτησης ασυμφωνίας όπως επίσης και την ίδια F_k κατανομή, για $1 \leq k \leq s$. Μπορούμε λοιπόν να εντοπίσουμε αν δύο $d(n, 2, s)$ σχεδιασμοί είναι μη ισομορφικοί, ακολουθώντας τα παρακάτω βήματα, γνωστά ως αλγόριθμος NIU.

Βήμα 1

Συγκρίνουμε τις τιμές $CD(D_1)$ και $CD(D_2)$. Αν $CD(D_1) \neq CD(D_2)$ τότε οι δύο σχεδιασμοί δεν είναι ισομορφικοί. Αλλιώς συνεχίζουμε στο επόμενο βήμα.

Βήμα 2

Για $k = 1, s-1, 2, s-2, \dots, \left\lfloor \frac{s}{2} \right\rfloor, s - \left\lfloor \frac{s}{2} \right\rfloor$ συγκρίνουμε τις κατανομές $F_k(D_1)$ και $F_k(D_2)$. Αν $F_k(D_1) \neq F_k(D_2)$ τότε οι δύο σχεδιασμοί δεν είναι ισομορφικοί. Αλλιώς προχωράμε και ελέγχουμε τις κατανομές για τις επόμενες τιμές του k .

Παράδειγμα

Έστω δύο $L_{32768}(2^{31})$ σχεδιασμοί. Ακολουθώντας τα βήματα του αλγόριθμου NIU βλέπουμε ότι οι δύο σχεδιασμοί έχουν την ίδια τιμή για την κυκλική συνάρτηση

ασυμφωνίας, $CD=4.279$. Στη συνέχεια ελέγχουμε τις τιμές της συνάρτησης ασυμφωνίας για τους k -διάστατους υποπίνακες, για $k=1, 30, 2, 29$. Και αυτές ταυτίζονται. Όμως, για $k=28$, $F_{28}(D_1) \neq F_{28}(D_2)$. Βλέπουμε λοιπόν ότι οι δύο σχεδιασμοί δεν είναι ισομορφικοί κάνοντας μόνο λίγες επαναλήψεις του αλγορίθμου.

2.6.2. Ομοιομορφία και απόκλιση

Οι κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί (FFD) αποτελούν άλλη μια κατηγορία σχεδιασμών που χρησιμοποιείται ευρέως. Ένας q^{s-p} κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός αποτελείται από s παράγοντες, καθένας από τους οποίους έχει q επίπεδα, συνολικά $n = q^{s-p}$ επαναλήψεις και ορίζεται μοναδικά από p ανεξάρτητες ορίζουσες λέξεις. Κάθε μια από τις λέξεις αποτελείται από γράμματα τα οποία είναι τα ονόματα των παραγόντων F_1, \dots, F_s . Ο αριθμός των γραμμάτων σε μια λέξη ονομάζεται μήκος της λέξης (word length) και το διάνυσμα $W = (A_1(D), \dots, A_s(D))$ αποτελεί το διάνυσμα μήκους λέξεων (word length pattern), όπου το $A_i(D)$ δείχνει τον αριθμό λέξεων μήκους i .

Ως αναλυτική τάξη (resolution) ενός σχεδιασμού D ορίζουμε τον μικρότερο αριθμό t για τον οποίο $A_t(D) > 0$ στο διάνυσμα μήκους λέξεων. Έτσι, για παράδειγμα, υπάρχουν σχεδιασμοί αναλυτικής τάξης *III*, *IV*, *V*. Όσο μεγαλύτερη είναι η αναλυτική τάξη του σχεδιασμού, τόσο καλύτερη ικανότητα πρόβλεψης έχει. Ωστόσο, σχεδιασμοί που έχουν την ίδια αναλυτική τάξη ενδέχεται παρουσιάζουν διαφορές στην ικανότητα πρόβλεψης. Το διάνυσμα μήκους λέξεων μπορεί να διαχωρίσει δύο σχεδιασμούς με ίδια αναλυτική τάξη.

Ανάμεσα σε δύο σχεδιασμούς D_1, D_2 λέμε ότι ο D_1 έχει μικρότερη απόκλιση από τον D_2 αν υπάρχει ακέραιος k , $1 \leq k \leq s$ ώστε:

$$A_1(D_1) = A_1(D_2), \dots, A_{k-1}(D_1) = A_{k-1}(D_2), A_k(D_1) < A_k(D_2).$$

Τέλος, λέμε ότι ένας σχεδιασμός έχει την ελάχιστη απόκλιση (minimum aberration) αν κανείς άλλος σχεδιασμός δεν έχει μικρότερη απόκλιση από αυτόν. Για δοσμένα q, s, p το κριτήριο της ελάχιστης απόκλισης χρησιμοποιείται ευρέως για τη σύγκριση των q^{s-p} κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών.

Έχει αποδειχθεί ότι υπάρχει κάποια σύνδεση ανάμεσα στην ομοιομορφία και την ελάχιστη απόκλιση. Αυτό φαίνεται από την παρακάτω σχέση η οποία υπολογίζει την κεντραρισμένη συνάρτηση ασυμφωνίας για ένα κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό D με $n = 2^{s-p}$ επαναλήψεις.

$$(CD(X))^2 = \left(\frac{13}{12}\right)^k - 2\left(\frac{35}{32}\right)^k + \left(\frac{8}{9}\right)^s \left\{1 + \sum_{i=1}^s \frac{A_i(D)}{9^i}\right\}.$$

Με τη χρήση αυτού του τύπου η κεντραρισμένη συνάρτηση ασυμφωνίας μπορεί να διαχωρίσει δυο 2^{s-p} κλασματικούς παραγοντικούς σχεδιασμούς που έχουν ελάχιστη απόκλιση.

Επίσης, η κυκλική συνάρτηση ασυμφωνίας WD συνδέεται με την ελάχιστη απόκλιση για 2^{s-p} και 3^{s-p} σχεδιασμούς με τον ακόλουθο τύπο:

$$(WD(D))^2 = \begin{cases} \left(\frac{11}{8}\right)^s \sum_{r=1}^s \frac{A_r(D)}{11^r} + \left(\frac{11}{8}\right)^s - \left(\frac{4}{3}\right)^s, & \text{αν } q=2 \\ \left(\frac{73}{54}\right)^s \left[1 + 2 \sum_{j=1}^s \left(\frac{4}{73}\right)^j A_j(D)\right] - \left(\frac{4}{3}\right)^s, & \text{αν } q=3. \end{cases}$$

Τέλος, και η συνάρτηση ασυμφωνίας Lee συνδέεται με την ελάχιστη απόκλιση για 2^{s-p} και 3^{s-p} σχεδιασμούς με τον τύπο:

$$(LD(P))^2 = \begin{cases} \left(\frac{3}{4}\right)^s \sum_{j=1}^s \frac{A_j(D)}{3^j}, & \text{αν } q = 2 \\ \left(\frac{7}{9}\right)^s \sum_{j=1}^s \frac{A_j(D)}{7^j}, & \text{αν } q = 3. \end{cases}$$

Συμπεραίνουμε λοιπόν πως το να ψάχνουμε για σχεδιασμούς ελάχιστης απόκλισης χρησιμοποιώντας την ιδιότητα της ομοιομορφίας μπορεί να μειώσει σημαντικά την πολυπλοκότητα των υπολογισμών.

2.6.3. Ομοιομορφία και ορθογωνιότητα

Όπως είναι γνωστό, μια πολύ σημαντική ιδιότητα των ορθογώνιων σχεδιασμών $L_n(q^s)$ είναι πως κάθε στοιχείο κάθε στήλης εμφανίζεται το ίδιο συχνά. Επίσης όλοι οι συνδυασμοί επιπέδων οποιονδήποτε δύο στηλών εμφανίζονται το ίδιο συχνά. Αυτό σημαίνει ότι κατά κάποιο τρόπο τα πειραματικά σημεία είναι ομοιόμορφα καταναμημένα στο χώρο. Πιο συγκεκριμένα, τα σημεία που αποτελούν τις προβολές του ορθογώνιου πίνακα σε υποπίνακες μίας και δύο διαστάσεων είναι ομοιόμορφα καταναμημένα στο χώρο. Αυτό όμως δεν συμβαίνει για προβολές υψηλότερης διάστασης.

Από την άλλη μεριά, οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί εμφανίζουν αυτή την ιδιότητα ομοιομορφίας σε μία διάσταση αλλά και σε χώρους υψηλότερης διάστασης. Βλέπουμε λοιπόν ότι οι ορθογώνιοι και οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί έχουν κάποια κοινά χαρακτηριστικά. Επίσης φαίνεται ότι υπάρχει η δυνατότητα εφαρμογής των ιδιοτήτων της ομοιομορφίας στους ορθογώνιους σχεδιασμούς.

Ορισμός 2.6.3.1

Έστω $L(n, q^s)$ το σύνολο όλων των πιθανών $L_n(q^s)$ ορθογώνιων σχεδιασμών, και έστω D μια συνάρτηση ασυμφωνίας. Για δοσμένα (n, q, s) ένας ορθογώνιος σχεδιασμός καλείται ομοιόμορφα ορθογώνιος σχεδιασμός (uniformly orthogonal design) $UL_n(q^s)$ αν παρουσιάζει τη χαμηλότερη τιμή ασυμφωνίας από όλους τους υπόλοιπους σχεδιασμούς του συνόλου $L(n, q^s)$, υπό την D .

Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται δύο $L(9, 3^4)$ σχεδιασμοί. Ο σχεδιασμός στα αριστερά είναι κανονικός ενώ στα δεξιά είναι ομοιόμορφα ορθογώνιος με χρήση συνάρτησης ασυμφωνίας D . Αυτό που προκύπτει είναι ότι ο πρώτος σχεδιασμός έχει μεγαλύτερη τιμή στη συνάρτηση ασυμφωνίας, $D_1 = 0.050059$ απ' ότι ο δεύτερος $D_2 = 0.0493645$.

Πίνακας 2.7:

Ορθογώνιος $L(9, 3^4)$ και ομοιόμορφα ορθογώνιος $UL(9, 3^4)$ σχεδιασμός

No.	$L(9; 3^4)$			$UL(9; 3^4)$				
1	1	1	1	1	1	1	1	2
2	1	2	2	2	1	2	3	1
3	1	3	3	3	1	3	2	3
4	2	1	2	3	2	1	3	3
5	2	2	3	1	2	2	2	1
6	2	3	1	2	2	3	1	2
7	3	1	3	2	3	1	2	1
8	3	2	1	3	3	2	1	3
9	3	3	2	1	3	3	3	2

Έχει αποδειχθεί ότι πολλοί ομοιόμορφοι σχεδιασμοί με μικρό αριθμό επαναλήψεων είναι και ορθογώνιοι. Τέτοιοι είναι οι ακόλουθοι: $U_4(2^3)$, $U_8(2^7)$, $U_{12}(2^{11})$, $U_{16}(2^{15})$, $U_9(3^4)$, $U_{12}(3 \times 2^3)$, $U_{16}(4^5)$, $U_{16}(4 \times 2^{12})$, $U_{18}(2 \times 3^7)$ και $U_{25}(5^6)$. Από αυτό το γεγονός συμπεραίνουμε πως αρκετοί ορθογώνιοι σχεδιασμοί είναι επίσης ομοιόμορφοι υπό την κεντραρισμένη L_2 συνάρτηση ασυμφωνίας.

Τελικά, έχει αποδειχθεί ότι όλοι οι ορθογώνιοι αλλά και 2^{s-1} κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί είναι ομοιόμορφοι υπό την κεντραρισμένη L_2 συνάρτηση ασυμφωνίας

2.6.4. Ομοιομορφία και επιδράσεις

Ας μελετήσουμε τώρα λίγο περισσότερο τους δύο σχεδιασμούς του Πίνακα 2.7, τον ορθογώνιο $L(9, 3^4)$ και τον ομοιόμορφα ορθογώνιο $UL(9, 3^4)$.

Υποθέτουμε ότι θέλουμε να μελετήσουμε ένα πείραμα τριών παραγόντων A , B , C , καθένας από τους οποίους έχει τρία επίπεδα. Μπορούμε να διαλέξουμε οποιοσδήποτε τρεις στήλες από τον $L(9, 3^4)$ ή τον $UL(9, 3^4)$ για τους παράγοντες. Έστω ότι διαλέγουμε τις τρεις πρώτες στήλες από κάθε πίνακα και ας ονομάσουμε

για ευκολία τον υποπίνακα που προέκυψε από τον $L(9,3^4)$, d_1 ενώ τον υποπίνακα που προέκυψε από τον $UL(9,3^4)$, d_2 . Υπάρχουν γραμμικές και τετραγωνικές επιδράσεις οι οποίες συμβολίζονται με A_l, B_l, C_l και A_q, B_q, C_q αντίστοιχα, όπως και οι αλληλεπιδράσεις τους.

Για τον σχεδιασμό d_1 προκύπτει ότι:

$$A_l = -0.75B_lC_l - 0.25B_lC_q + 0.25B_qC_l - 0.25B_qC_q$$

$$A_q = 0.75B_lC_l - 0.75B_lC_q + 0.75B_qC_l + 0.25B_qC_q$$

$$B_l = -0.75A_lC_l - 0.25A_lC_q + 0.25A_qC_l - 0.25A_qC_q$$

$$B_q = 0.75A_lC_l - 0.75A_lC_q + 0.75A_qC_l + 0.25A_qC_q$$

$$C_l = -0.75A_lB_l + 0.25A_lB_q + 0.25A_qB_l + 0.25A_qB_q$$

$$C_q = -0.75A_lB_l - 0.75A_lB_q - 0.75A_qB_l + 0.25A_qB_q$$

ενώ για τον σχεδιασμό d_2 προκύπτει ότι:

$$A_l = 0.5B_lC_q + 0.5B_qC_l$$

$$A_q = 1.5B_lC_l - 0.5B_qC_q$$

$$B_l = 0.5A_lC_q + 0.5A_qC_l$$

$$B_q = 1.5A_lC_l - 0.5A_qC_q$$

$$C_l = 0.5A_lB_q + 0.5A_qB_l$$

$$C_q = 1.5A_lB_l - 0.5A_qB_q.$$

Αγνοώντας τώρα τις αλληλεπιδράσεις υψηλότερης τάξης και κρατώντας μόνο τις γραμμικές, για τον σχεδιασμό d_1 βλέπουμε ότι:

$$\begin{aligned}
A_l &= -0.75B_lC_l & A_q &= 0.75B_lC_l \\
B_l &= -0.75A_lC_l & B_q &= 0.75A_lC_l \\
C_l &= -0.75A_lB_l & C_q &= -0.75A_lB_l
\end{aligned}$$

ενώ για τον σχεδιασμό d_2 βλέπουμε ότι:

$$\begin{aligned}
A_q &= 1.5B_lC_l \\
B_q &= 1.5A_lC_l \\
C_q &= 1.5A_lB_l
\end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι στον σχεδιασμό d_1 οι κύριες επιδράσεις εμπλέκονται με τις αλληλεπιδράσεις, ενώ στον σχεδιασμό d_2 μπορούμε να εκτιμήσουμε όλες τις γραμμικές επιδράσεις. Βλέπουμε λοιπόν πως ο σχεδιασμός d_2 που προέκυψε από τον ομοιόμορφα ορθογώνιο σχεδιασμό $UL(9,3^4)$ έχει καλύτερες επιδόσεις από τον αντίστοιχο ορθογώνιο $L(9,3^4)$.

2.6.5. Ομοιόμορφοι σχεδιασμοί και έλεγχος ποιότητας

Ο έλεγχος ποιότητας είναι ένα πολύ σημαντικό και χρήσιμο εργαλείο που εφαρμόζεται στην παραγωγή προϊόντων και στην προσφορά υπηρεσιών η ποιότητα των οποίων θα εξαρτάται όσο γίνεται λιγότερο από τους εξωτερικούς παράγοντες. Οι παραμετρικοί σχεδιασμοί είναι αυτοί που χρησιμοποιούνται στα πειράματα για τον έλεγχο ποιότητας. Αποτελούνται στην ουσία από δύο πίνακες, συνήθως ορθογώνιους. Στον πρώτο πίνακα που ονομάζεται εσωτερικός (inner array) υπάρχουν οι παράγοντες ελέγχου, δηλαδή παράγοντες που μπορούν να ελεγχθούν κατά την πειραματική διαδικασία και να προσδιοριστούν οι βέλτιστες τιμές τους ώστε να έχουμε ένα προϊόν με όσο το δυνατόν λιγότερες αστοχίες. Στον δεύτερο πίνακα που ονομάζεται εξωτερικός (outer array) υπάρχουν οι παράγοντες θορύβου. Αυτοί είναι παράγοντες που δύσκολα μπορούν να ελεγχθούν κατά την πειραματική διαδικασία και συχνά εξαρτώνται από τους περιβαλλοντικούς παράγοντες ή τον τρόπο με τον οποίο ο καταναλωτής μεταχειρίζεται το προϊόν.

Για την περιγραφή του εξωτερικού πίνακα, ή ακόμα και για την περιγραφή και των δύο πινάκων προτάθηκε η χρήση και των ομοιόμορφων σχεδιασμών. Έτσι, έγινε ο έλεγχος κατά τον οποίο την πρώτη φορά επιλέχθηκε ο ορθογώνιος σχεδιασμός $L_{36}(2^3 \times 3^{11})$ για τον εσωτερικό και εξωτερικό σχεδιασμό. Το σύνολο των

επαναλήψεων είναι $36 \times 36 = 1269$. Την δεύτερη φορά χρησιμοποιήθηκε ο ομοιόμορφος σχεδιασμός $U_{13}(13^8)$ για τον εσωτερικό σχεδιασμό και ο ομοιόμορφος σχεδιασμός $U_{12}(12^{10})$ για τον εξωτερικό σχεδιασμό. Το συνολικό πλήθος επαναλήψεων εδώ ήταν μόνο $12 \times 13 = 156$, ενώ τα αποτελέσματα που έδωσαν ήταν το ίδιο καλά με τους ορθογώνιους.

Συμπερασματικά λοιπόν, βλέπουμε ότι υπάρχει πρόσφορο έδαφος για την εφαρμογή των ομοιόμορφων σχεδιασμών και στον έλεγχο ποιότητας.

2.7. Μία σημαντική ιδιότητα των ομοιόμορφων σχεδιασμών

Έστω ότι έχουμε ένα μοντέλο παλινδρόμησης που περιγράφεται από τη σχέση:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_s) + e, \quad (2.7.1)$$

όπου f είναι μία άγνωστη συνάρτηση. Αυτό που θέλουμε να επιτύχουμε είναι να εκτιμήσουμε τη μέση τιμή $E(f(x)) = \frac{1}{n} \sum_{x \in S} f(x)$ στον χώρο του πειράματος, όπου S είναι το σύνολο των n πειραματικών σημείων. Από την ανισότητα Koksma – Hlawka έχουμε ότι:

$$\left| E(f(x)) - \bar{f} \right| \leq D(S)V(f),$$

όπου $D(S)$ είναι η εκάστοτε χρησιμοποιούμενη συνάρτηση ασυμφωνίας και $V(f)$ η διακύμανση της f .

Αποδεικνύεται ότι οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί είναι εύρωστοι απέναντι στις αλλαγές της συνάρτησης f πράγμα που σημαίνει ότι η διακύμανση $V(f)$ παραμένει αμετάβλητη. Συνεπώς, η χρήση των ομοιόμορφων σχεδιασμών μπορεί να δώσει μια πολύ καλή εκτίμηση της μέσης τιμής $E(f(x))$.

Πιο αναλυτικά, οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί δεν είναι ιδιαίτερα ευαίσθητοι σε διάφορες υποθέσεις που μπορεί να γίνουν ή να μεταβληθούν στο μοντέλο. Υποθέτουμε πως στο μη παραμετρικό μοντέλο (2.7.1) η συνάρτηση $f(x)$ μπορεί να εκφραστεί ως:

$$f(x) = \sum_{i=0}^m \beta_i f_i(x).$$

Εάν αυτό δεν μπορεί να συμβεί, τότε μπορούμε να θεωρήσουμε το παρακάτω σχεδόν γραμμικό μοντέλο για την περιγραφή της $f(x)$:

$$y(x_1, \dots, x_s) = \sum_{i=0}^m \beta_i f_i(x_1, \dots, x_s) + \psi(x_1, \dots, x_s) + e,$$

όπου $\psi(x)$, με $x = (x_1, \dots, x_s)$ είναι μία άγνωστη απόκλιση (bias). Αποδεικνύεται ότι υπό ορισμένες προϋποθέσεις για την $\psi(x)$ οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί είναι οι πιο κατάλληλοι για την περιγραφή του μοντέλου, υπό τον έλεγχο F .

ΚΑΦΑΛΑΙΟ 3

3.1 Μια πρώτη κατασκευή ομοιόμορφων σχεδιασμών

Για πειράματα που περιλαμβάνουν μόνο ένα παράγοντα ($s=1$) οι Fang, Ma και Winker (2001) επισήμαναν ότι υπάρχει μοναδικός ομοιόμορφος σχεδιασμός. Αυτός ο ομοιόμορφος σχεδιασμός αποτελείται από ένα σύνολο σημείων που ισαπέχουν. Προκύπτει υπό την κεντραρισμένη L_2 - συνάρτηση ασυμφωνίας στο χώρο $[0,1]$ και είναι ο ακόλουθος:

$$\left\{ \frac{1}{2n}, \frac{3}{2n}, \dots, \frac{2i-1}{2n}, \dots \right\}, i=1, \dots, n,$$

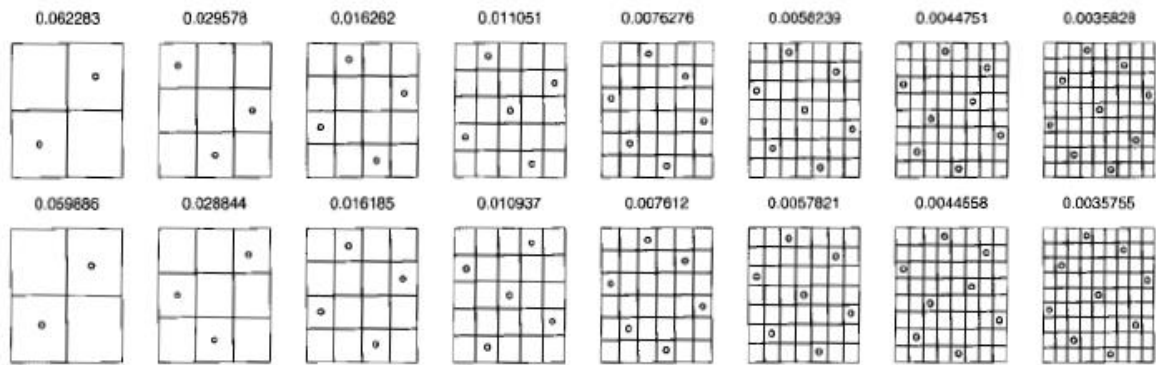
με συνάρτηση ασυμφωνίας $CD^2 = 1/12n^2$.

Τα παραπάνω σημεία αποτελούν τα $x_i = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ σημεία του σχεδιασμού και προέκυψαν μετά από πράξεις και ελαχιστοποίηση της σχέσης 2.5.1.

Για περισσότερους από ένα παράγοντες ($s > 1$) δεν μπορούμε να βρούμε μοναδική λύση και κατ' επέκταση μοναδικό ομοιόμορφο σχεδιασμό με ελάχιστη τιμή της συνάρτησης ασυμφωνίας. Επίσης, η έρευνα για ομοιόμορφους σχεδιασμούς δεδομένου του αριθμού επαναλήψεων n και του αριθμού των παραγόντων s καταλήγει να είναι ένα δύσκολο πρόβλημα (NP hard problem) όσο οι τιμές των n , s αυξάνονται. Για να βρεθεί λοιπόν κάποιος σχεδιασμός με τα βέλτιστα χαρακτηριστικά, πρέπει να μειώσουμε το σύνολο των υποψήφιων σχεδιασμών.

Για αυτό το λόγο υπήρξε η ιδέα να εργαστούμε στο σύνολο των σχεδιασμών τύπου U , (U type). Οι σχεδιασμοί που θα προκύψουν αν βασιστούμε σε σχεδιασμούς τύπου U , για δεδομένο τον αριθμό επαναλήψεων n θα αποτελούν μια καλή προσέγγιση του αντίστοιχου ομοιόμορφου σχεδιασμού.

Για του λόγου το αληθές παρακάτω παρουσιάζονται τα γραφήματα των ομοιόμορφων σχεδιασμών (δεύτερη γραμμή) και των αντίστοιχων προσεγγίσεών τους με τους τύπου U σχεδιασμούς (πρώτη γραμμή) για $s = 2$ και $n = 2, 3, \dots, 9$.



Σχήμα 3.1: Γραφήματα ομοιόμορφων σχεδιασμών και σχεδιασμών τύπου U

Ο αριθμός που βρίσκεται πάνω από κάθε γράφημα αντιστοιχεί στο τετράγωνο της τιμής της κεντραρισμένης συνάρτησης ασυμφωνίας. Συγκρίνοντας τις δύο τιμές των συναρτήσεων ασυμφωνίας για κάθε τιμή του n παρατηρούμε ότι οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί που προκύπτουν από τους αντίστοιχους σχεδιασμούς τύπου U προσεγγίζουν πολύ καλά τους ομοιόμορφους.

3.2 Κατασκευή ομοιόμορφων σχεδιασμών με περισσότερους παράγοντες

Έχουν προταθεί διάφορες μέθοδοι για την κατασκευή των ομοιόμορφων σχεδιασμών που να έχουν την ελάχιστη συνάρτηση ασυμφωνίας. Μπορούμε να τις χωρίσουμε σε δύο κύριες κατηγορίες: α) κατασκευαστικές μέθοδοι, β) μέθοδοι βελτιστοποίησης.

Παρακάτω αναφέρουμε μερικές από αυτές και στη συνέχεια θα δώσουμε παραδείγματα για την κατασκευή των σχεδιασμών.

- ❖ η μέθοδος glp (good lattice point method)
- ❖ η τροποποιημένη μέθοδος glp (modified good lattice point method)
- ❖ η μέθοδος «κοπής» (cutting method)
- ❖ η μέθοδος των λατινικών τετραγώνων (latin square method)
- ❖ η μέθοδος επέκτασης των ορθογώνιων σχεδιασμών (expanding orthogonal design method)
- ❖ η προς τα εμπρός διαδικασία (forward procedure)
- ❖ η μέθοδος βελτιστοποίησης (optimization searching) .

Με χρήση των παραπάνω μεθόδων, λαμβάνουμε πολύ καλές προσεγγίσεις των ομοιόμορφων σχεδιασμών.

Για τη συνέχεια είναι χρήσιμος ο παρακάτω ορισμός:

Ορισμός 3.2.1

Μια καλή προσέγγιση ενός ομοιόμορφου σχεδιασμού ονομάζεται σχεδόν-ομοιόμορφος σχεδιασμός (nearly uniform design) και έχει χαμηλή συνάρτηση ασυμφωνίας.

3.2.1 Η μέθοδος GLP και MGLP

Αρχικά θα αναφερθούμε στην μέθοδο glp. Πρόκειται για μια αποτελεσματική quasi-Monte-Carlo μέθοδο και παρουσιάζει τη χαμηλότερη πολυπλοκότητα όσον αφορά τους υπολογισμούς που απαιτεί. Τα βήματα για την κατασκευή ενός $U_n(n^s)$ ομοιόμορφου σχεδιασμού με s παράγοντες, n επίπεδα παραγόντων και n επαναλήψεις φαίνονται παρακάτω:

Βήμα 1

Βρίσκουμε ένα σύνολο θετικών ακέραιων αριθμών που να είναι ως εξής:

$$H_n = \{h_1, h_2, \dots, h_m : h_j < n, \text{MK}\Delta(n, h_j) = 1\}$$

με $j = 1, 2, \dots, m$. Ο αριθμός m , δηλαδή η πληθυκότητα του συνόλου H_n μπορεί να είναι γνωστός εκ των προτέρων αφού προκύπτει από τη συνάρτηση του Euler:

$$m = \phi(n) = n \left(1 - \frac{1}{p_1}\right) \left(1 - \frac{1}{p_2}\right) \dots \left(1 - \frac{1}{p_r}\right),$$

όπου $n = p_1^{t_1} \times p_2^{t_2} \times \dots \times p_r^{t_r}$ είναι η ανάλυση του n σε γινόμενο πρώτων παραγόντων, με p_1, p_2, \dots, p_r να είναι πρώτοι αριθμοί διαφορετικοί μεταξύ τους και t_1, t_2, \dots, t_r θετικοί ακέραιοι αριθμοί.

Βήμα 2

Διαλέγουμε s ξεχωριστά στοιχεία του H_n , και δημιουργούμε έναν $n \times s$ πίνακα $U = (u_{ij})$, τα στοιχεία του οποίου έχουν υπολογιστεί ως εξής:

$$u_{ij} = \begin{cases} ih_j \pmod{n}, & \text{αν } ih_j \pmod{n} \neq 0 \\ n, & \text{αν } ih_j \pmod{n} = 0 \end{cases}$$

με $i = 1, 2, \dots, n$ και $j = 1, 2, \dots, s$. Προφανώς για τις τιμές του πίνακα ισχύει ότι $1 \leq u_{ij} \leq n$. Το διάνυσμα $\mathbf{h} = (h_1, h_2, \dots, h_s)$ καλείται γεννήτορας του $U = U(n, \mathbf{h})$.

Ορίζουμε τώρα ως $\mathcal{G}_{n,s}$ το σύνολο όλων των $U(n, \mathbf{h})$ πινάκων.

Βήμα 3

Βρίσκουμε τώρα ένα διάνυσμα γεννήτορα \mathbf{h}^* με $U(n, \mathbf{h}^*) \in \mathcal{G}_{n,s}$ τέτοιο ώστε να έχουμε την καλύτερη τιμή ομοιομορφίας σε όλο το σύνολο $\mathcal{G}_{n,s}$, υπό κάποια συνάρτηση ασυμφωνίας. Τότε ο πίνακας $U(n, \mathbf{h}^*)$ είναι ένας ομοιόμορφος ή σχεδόν-ομοιόμορφος σχεδιασμός $U_n(n^s)$.

Παράδειγμα

Θέλουμε να κατασκευάσουμε έναν $U_{21}(21^2)$ ομοιόμορφο σχεδιασμό.

Για $n = 21$ και $s = 2$ ψάχνουμε το σύνολο H_{21} το οποίο αναμένουμε να έχει 12 στοιχεία αφού $s = \phi(21) = 21 \left(1 - \frac{1}{3}\right) \left(1 - \frac{1}{7}\right) = 12$, όπου $p_1 = 3$ και $p_2 = 7$ οι διαιρέτες του 21.

Πράγματι, έχουμε $H_{21} = \{1, 2, 4, 5, 8, 10, 11, 13, 16, 17, 19, 20\}$ το σύνολο των ακεραίων για τους οποίους $MK\Delta(21, h) = 1$. Για κάθε $s = 2$ ξεχωριστά στοιχεία του H_{21} δημιουργούμε τους 21×2 πίνακες $U = (u_{ij})$.

Μετά από δοκιμές προκύπτει ότι το διάνυσμα $\mathbf{h}^* = (1, 13)$ μας δίνει τον πίνακα $U(21, \mathbf{h}^*)$ που έχει τη μικρότερη δυνατή τιμή για την κεντραρισμένη συνάρτηση

ασυμφωνίας (CD) που έχουμε επιλέξει να χρησιμοποιήσουμε ως μέτρο ομοιομορφίας στο σύνολο $\mathcal{G}_{21,2}$.

Οι τιμές του πίνακα υπολογίζονται ως εξής: για $i = 1, 2, \dots, 21$ και $j = 1$ έχουμε:

$$\begin{aligned} u_{11} &= 1 \cdot 1 \pmod{21} = 1 \\ u_{21} &= 2 \cdot 1 \pmod{21} = 2 \\ u_{31} &= 3 \cdot 1 \pmod{21} = 3 \\ &\dots \\ u_{191} &= 19 \cdot 1 \pmod{21} = 19 \\ u_{201} &= 20 \cdot 1 \pmod{21} = 20 \\ u_{211} &= 21 \cdot 1 \pmod{21} = 21 \end{aligned}$$

και όμοια για $i = 1, 2, \dots, 21$ και $j = 13$ έχουμε:

$$\begin{aligned} u_{113} &= 1 \cdot 13 \pmod{21} = 13 \\ u_{213} &= 2 \cdot 13 \pmod{21} = 5 \\ u_{313} &= 3 \cdot 13 \pmod{21} = 18 \\ &\dots \\ u_{1913} &= 19 \cdot 13 \pmod{21} = 16 \\ u_{2013} &= 20 \cdot 13 \pmod{21} = 8 \\ u_{2113} &= 21 \cdot 13 \pmod{21} = 21. \end{aligned}$$

Έτσι προκύπτει ο $U_{21}(21^2)$ πίνακας με την ελάχιστη τιμή στη συνάρτηση ασυμφωνίας όπως φαίνεται παρακάτω:

Πίνακας 3.1: $U_{21}(21^2)$ ομοιόμορφος σχεδιασμός

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 & 13 & 14 & 15 & 16 & 17 & 18 & 19 & 20 & 21 \\ 13 & 5 & 18 & 10 & 2 & 15 & 7 & 20 & 12 & 4 & 17 & 9 & 1 & 14 & 6 & 19 & 11 & 3 & 16 & 8 & 21 \end{pmatrix}'$$

Υπάρχουν περιπτώσεις που όταν το πλήθος των στοιχείων του H_n είναι πολύ μικρό, ο σχεδόν ομοιόμορφος σχεδιασμός που λαμβάνουμε με τη μέθοδο glp απέχει

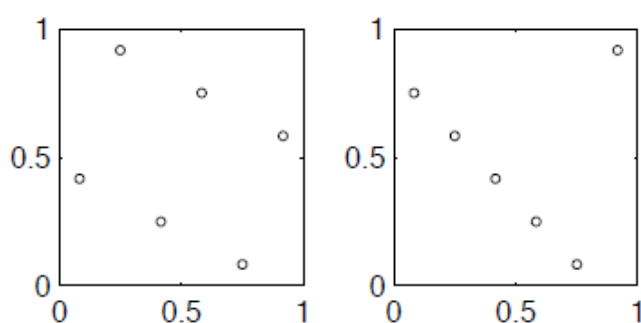
πολύ από το να είναι πραγματικά ομοιόμορφος. Αυτό μπορεί εύκολα να φανεί με μια απλή απεικόνιση των σημείων.

Σε αυτή την περίπτωση αυξάνουμε την τιμή του n κατά 1 και δουλεύουμε με το σύνολο H_{n+1} . Αυτό αποτελεί μια τροποποίηση της μεθόδου glp (mglp). Στο τέλος στον πίνακα $U(n+1, h_1, \dots, h_s)$ που θα προκύψει διαγράφουμε την τελευταία γραμμή ώστε τελικά να προκύψει ο ζητούμενος $n \times s$ πίνακας. Έχει αποδειχθεί ότι οι πίνακες που θα προκύψουν από αυτή την τροποποίηση θα έχουν πολύ χαμηλότερη συνάρτηση ασυμφωνίας σε σχέση με τους αρχικούς.

Παράδειγμα

Έστω ότι θέλουμε να κατασκευάσουμε έναν $U_6(6^2)$ ομοιόμορφο σχεδιασμό. Το σύνολο $H_6 = \{1, 5\}$ αποτελείται από μόνο δύο στοιχεία. Ο σχεδόν ομοιόμορφος σχεδιασμός που θα προκύψει από την εφαρμογή της μεθόδου glp απέχει πολύ από το να είναι ομοιόμορφος, όπως φαίνεται στο δεξί μέρος του Σχήματος 3.2. Επίσης με το σύνολο H_6 είναι αδύνατος ο σχηματισμός σχεδιασμών $U_6(6^s)$ για $s > 2$.

Εάν τώρα γίνει χρήση της τροποποιημένης μεθόδου glp (mglp) θα έχουμε το παρακάτω σύνολο: $H_7 = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Οι σχεδόν ομοιόμορφοι σχεδιασμοί που προκύπτουν έχουν σαφώς καλύτερη ομοιομορφία, όπως φαίνεται και από το αριστερό μέρος του Σχήματος 3.2. Επιπροσθέτως, τώρα έχουμε τη δυνατότητα να δημιουργήσουμε σχεδόν ομοιόμορφους σχεδιασμούς $U_6(6^s)$ για $s \leq 6$.



Σχήμα 3.2 Ομοιόμορφος και όχι ομοιόμορφος σχεδιασμός $U_6(6^2)$

Να σημειώσουμε εδώ πως αφού το πλήθος των στοιχείων του H_n άρα και ο μέγιστος αριθμός στηλών (παραγόντων) που μπορούν να παραχθούν από τη μέθοδο

glp οριοθετείται από την τιμή του $\phi(n)$, δεν είμαστε ελεύθεροι να κατασκευάσουμε ένα πίνακα όσο μεγάλο θέλουμε. Γενικά η μέθοδος glp δεν μπορεί να μας δώσει σχεδιασμούς για τους οποίους ισχύει $s > \frac{n}{2}$. Γι' αυτό το λόγο είναι απαραίτητη και η χρήση άλλων μεθόδων κατασκευής ομοιόμορφων σχεδιασμών.

Πίνακας 3.2: διανύσματα γεννήτορες και τιμές CD για την glp μέθοδο

n	$s = 2$	$s = 3$	$s = 4$	$s = 5$
4	0.1350 (1 3)			
5	0.1125 (1 2)	0.1762 (1 2 3)	0.2490 (1 2 3 4)	
6	0.1023 (1 5)			
7	0.0812 (1 3)	0.1336 (1 2 3)	0.1993 (1 2 3 5)	0.2729 (1 2 3 4 5)
8	0.0713 (1 5)	0.1315 (1 3 5)	0.1904 (1 3 5 7)	
9	0.0650 (1 4)	0.1044 (1 4 7)	0.1751 (1 2 4 7)	0.2435 (1 2 4 5 7)
10	0.0614 (1 3)	0.1197 (1 3 7)	0.1749 (1 3 7 9)	
11	0.0528 (1 7)	0.0879 (1 5 7)	0.1364 (1 2 5 7)	0.1919 (1 2 3 5 7)
12	0.0506 (1 5)	0.1112 (1 5 7)	0.1628 (1 5 7 11)	
13	0.0472 (1 5)	0.0796 (1 4 6)	0.1191 (1 4 5 11)	0.1653 (1 3 4 5 11)
14	0.0432 (1 9)	0.0710 (1 9 11)	0.1418 (1 3 5 13)	0.2021 (1 3 5 9 11)
15	0.0400 (1 11)	0.0812 (1 4 7)	0.1186 (1 4 7 13)	0.1904 (1 2 4 7 13)
16	0.0381 (1 7)	0.0676 (1 5 9)	0.0997 (1 5 9 13)	0.1666 (1 3 5 9 13)
17	0.0362 (1 10)	0.0626 (1 4 10)	0.0958 (1 4 5 14)	0.1384 (1 4 10 14 15)
18	0.0341 (1 7)	0.0580 (1 7 13)	0.1247 (1 5 7 13)	0.1784 (1 5 7 11 13)
19	0.0321 (1 8)	0.0560 (1 6 8)	0.0857 (1 6 8 14)	0.1228 (1 6 8 14 15)
20	0.0313 (1 9)	0.0563 (1 9 13)	0.0835 (1 9 13 17)	0.1580 (1 3 7 11 19)
21	0.0292 (1 13)	0.0570 (1 4 5)	0.0917 (1 5 8 19)	0.1310 (1 4 10 13 16)
22	0.0284 (1 13)	0.0529 (1 5 13)	0.0808 (1 5 7 13)	0.1157 (1 3 5 7 13)
23	0.0272 (1 9)	0.0480 (1 7 18)	0.0745 (1 7 18 20)	0.1088 (1 4 7 17 18)
24	0.0258 (1 17)	0.0455 (1 11 17)	0.0679 (1 11 17 19)	0.1422 (1 5 7 13 23)
25	0.0248 (1 11)	0.0437 (1 6 16)	0.0672 (1 6 11 16)	0.0946 (1 6 11 16 21)
26	0.0238 (1 11)	0.0456 (1 11 17)	0.0700 (1 5 11 17)	0.1049 (1 3 5 11 17)
27	0.0240 (1 16)	0.0420 (1 8 10)	0.0670 (1 8 20 22)	0.1013 (1 8 20 22 23)
28	0.0234 (1 11)	0.0446 (1 9 11)	0.0703 (1 9 11 15)	0.0993 (1 9 11 15 23)
29	0.0214 (1 18)	0.0381 (1 9 17)	0.0606 (1 8 17 18)	0.0901 (1 7 16 20 24)
30	0.0206 (1 19)	0.0369 (1 17 19)	0.0559 (1 17 19 23)	0.1301 (1 7 11 13 29)
31	0.0206 (1 22)	0.0357 (1 18 24)	0.0583 (1 6 14 22)	0.0849 (1 6 13 20 27)

Πίνακας 3.3: διανύσματα γεννήτορες και τιμές CD για την $mgpr$ μέθοδο

n	$s = 2$	$s = 3$	$s = 4$	$s = 5$
4	0.1275 (1 2)	0.2083(1 2 3)	0.2858(1 2 3 4)	
5	0.1392 (1 5)			
6	0.0902 (1 2)	0.1365(1 2 3)	0.2140(1 2 3 4)	0.2881(1 2 3 4 5)
7	0.0763 (1 3)	0.1539(1 3 5)	0.2194(1 3 5 7)	
8	0.0738 (1 2)	0.1150(1 2 4)	0.1914(1 2 4 5)	0.2616(1 2 4 5 7)
9	0.0615 (1 3)	0.1407(1 3 7)	0.2033(1 3 7 9)	
10	0.0576 (1 3)	0.0965(1 2 3)	0.1397(1 2 3 4)	0.1858(1 2 3 4 5)
11	0.0497 (1 5)	0.1305(1 5 7)	0.1892(1 5 7 11)	
12	0.0456 (1 5)	0.0782(1 3 4)	0.1211(1 2 3 5)	0.1656(1 2 3 4 5)
13	0.0485 (1 3)	0.0790(1 3 5)	0.1568(1 3 5 9)	0.2211(1 3 5 9 11)
14	0.0445 (1 4)	0.0889(1 2 4)	0.1270(1 2 4 7)	0.2029(1 2 4 7 8)
15	0.0387 (1 7)	0.0665(1 3 5)	0.0954(1 3 5 7)	0.1724(1 3 5 7 9)
16	0.0357 (1 5)	0.0641(1 3 5)	0.0937(1 3 4 5)	0.1406(1 2 3 5 8)
17	0.0339 (1 5)	0.0544(1 5 7)	0.1359(1 5 7 11)	0.1951(1 5 7 11 13)
18	0.0318 (1 7)	0.0519(1 7 8)	0.0916(1 3 4 5)	0.1295(1 2 5 6 8)
19	0.0333 (1 9)	0.0637(1 3 7)	0.0920(1 3 7 9)	0.1692(1 3 7 9 11)
20	0.0284 (1 8)	0.0538(1 4 5)	0.0973(1 2 5 8)	0.1382(1 2 4 5 8)
21	0.0292 (1 5)	0.0534(1 3 5)	0.0811(1 3 5 7)	0.1103(1 3 5 7 9)
22	0.0268 (1 7)	0.0492(1 4 10)	0.0764(1 4 5 7)	0.1075(1 3 4 5 7)
23	0.0263 (1 7)	0.0492(1 5 7)	0.0714(1 5 7 11)	0.1512(1 5 7 11 13)
24	0.0247 (1 7)	0.0442(1 4 11)	0.0660(1 4 6 9)	0.0901(1 4 6 9 11)
25	0.0245 (1 7)	0.0496(1 3 7)	0.0742(1 3 5 7)	0.1050(1 3 5 7 9)
26	0.0225 (1 8)	0.0385(1 8 10)	0.0725(1 4 5 7)	0.1088(1 2 5 7 8)
27	0.0251 (1 5)	0.0496(1 3 5)	0.0737(1 3 5 11)	0.1022(1 3 5 9 11)
28	0.0208 (1 12)	0.0357(1 8 12)	0.0559(1 8 9 12)	0.0892(1 4 5 7 13)
29	0.0209 (1 11)	0.0351(1 7 11)	0.0521(1 7 11 13)	0.1371(1 7 11 13 17)
30	0.0194 (1 12)	0.0353(1 7 9)	0.0592(1 4 13 14)	0.0855(1 4 5 6 14)
31	0.0201 (1 7)	0.0385(1 7 9)	0.0570(1 7 9 15)	0.0906(1 3 5 11 13)

Στον Πίνακα 3.2 και στον Πίνακα 3.3 παρουσιάζονται τα διανύσματα γεννήτορες και οι τιμές για την συνάρτηση ασυμφωνίας CD για $4 \leq n \leq 31$ επαναλήψεις και για $s = 2, 3, 4$ παράγοντες όπως προέκυψαν από την εφαρμογή των μεθόδων gpr και $mgpr$ αντίστοιχα.

3.2.2 Η μέθοδος «κοπής»

Η παρούσα μέθοδος αποτελεί μια βελτίωση της μεθόδου glr και έχει πολύ καλύτερη απόδοση. Έστω $U_p(p^s)$ ένας ομοιόμορφος ή σχεδόν ομοιόμορφος σχεδιασμός. Έστω τώρα P_u ο επαγόμενος (induced) σχεδιασμός του, στο χώρο C^s και R ένα ορθογώνιο στο χώρο C^s . Τέλος, έστω P το σύνολο όλων των σημείων του P_u που πέφτουν στο R . Από τη θεωρία της μεθόδου quasi-Monte Carlo αποδεικνύεται πως τα σημεία του P είναι ομοιόμορφα κατανεμημένα στο R . Τα βήματα της μεθόδου παρουσιάζονται ευθύς αμέσως:

Βήμα 1

Για δεδομένο ζευγάρι παραμέτρων (n, s) βρίσκουμε έναν $U_p(p^s)$ σχεδιασμό με $p \gg n$ και υπολογίζουμε τον επαγόμενο σχεδιασμό $P_u = \{c_1, c_2, \dots, c_p\}$, τον οποίο συμβολίζουμε με $\mathbf{C} = (c_{ij})$. Ο σχεδιασμός $U_p(p^s) = P_u$ καλείται αρχικός σχεδιασμός.

Βήμα 2

Για $l = 1, 2, \dots, s$ επαναδιατάσσουμε τις γραμμές του \mathbf{C} ταξινομώντας τη j -οστή στήλη του \mathbf{C} ώστε τα στοιχεία σε αυτή τη στήλη να είναι ταξινομημένα από το μικρότερο στο μεγαλύτερο. Συμβολίζουμε τον νέο ταξινομημένο πίνακα $\mathbf{C}^{(l)} = (c_{kj}^{(l)})$.

Βήμα 3

Για $m = 1, 2, \dots, p$ φτιάχνουμε τον πίνακα $\mathbf{C}^{(l,m)} = (c_{kj}^{(l,m)})$ όπου:

$$c_{kj}^{(l,m)} = \begin{cases} c_{k+m-n-1j}^{(l)}, & \text{για } m > n, k = 1, 2, \dots, n \\ c_{kj}^{(l)}, & \text{για } m \leq n, k = 1, 2, \dots, m-1, j = 1, 2, \dots, s \\ c_{k+p-nj}^{(l)}, & \text{για } m \leq n, k = m, m+1, \dots, n \end{cases}$$

Βήμα 4

Μετονομάζουμε τα στοιχεία της j στήλης του $\mathbf{C}^{(l,m)}$ με τους αριθμούς $1, 2, \dots, n$ σύμφωνα με το μέγεθος αυτών των στοιχείων. Ο πίνακας που προέκυψε είναι ένας $U(n, n^s)$ σχεδιασμός τύπου U και μπορούμε να τον συμβολίσουμε ως $U^{(l,m)}$. Από τον τρόπο κατασκευής βλέπουμε ότι υπάρχουν $p \times s$ πιθανοί σχεδιασμοί τύπου U που μπορούμε να κατασκευάσουμε με τέτοια δομή.

Βήμα 5

Έστω M μία δεδομένη συνάρτηση ασυμφωνίας. Συγκρίνουμε τις τιμές της για όλους τους $p \times s$ σχεδιασμούς. Ο σχεδιασμός με τη χαμηλότερη τιμή M είναι ένας σχεδόν ομοιόμορφος σχεδιασμός $U_n(n^s)$.

Παράδειγμα

Έστω ότι είδη έχουμε επιτύχει να κατασκευάσουμε τον παρακάτω $U_{30}(30^2)$ ομοιόμορφο σχεδιασμό:

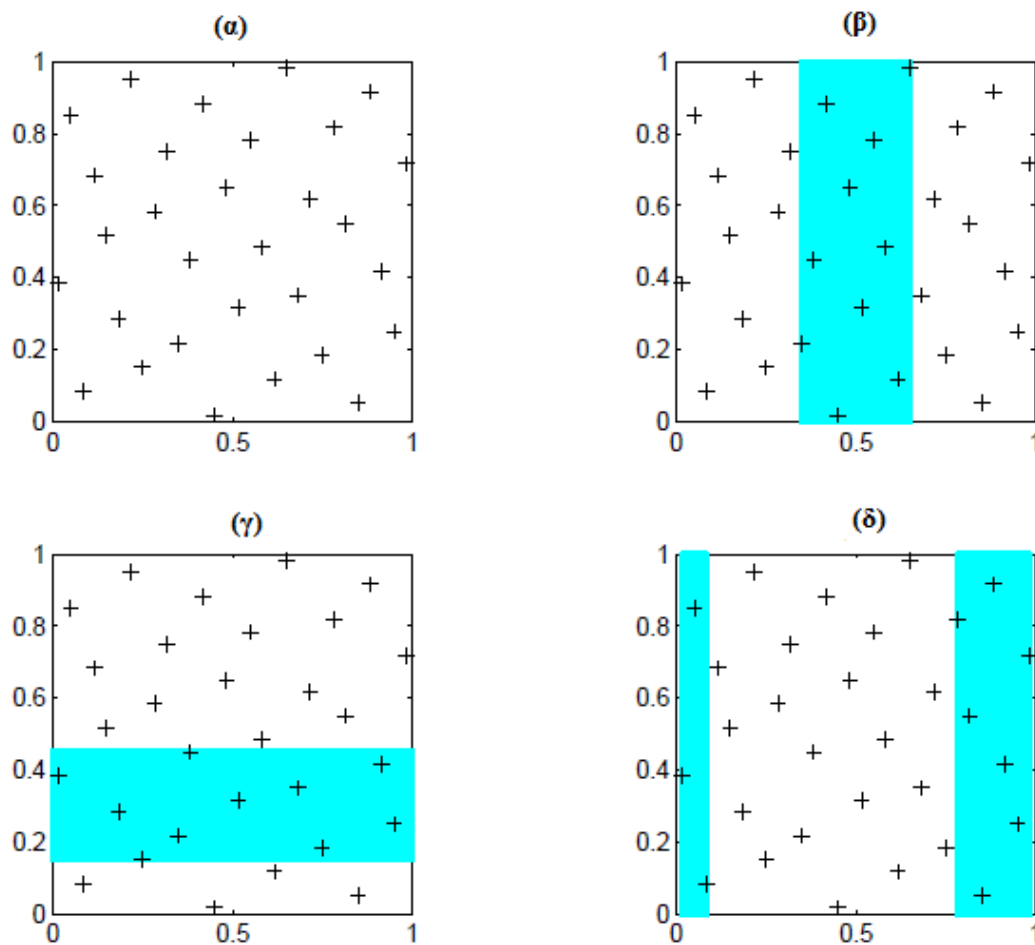
Πίνακας 3.4: $U_{30}(30^2)$ ομοιόμορφος σχεδιασμός

$$U_{30} = \begin{pmatrix} 24 & 23 & 1 & 9 & 5 & 11 & 19 & 6 & 21 & 3 & 12 & 15 & 20 & 18 & 17 \\ 25 & 6 & 12 & 18 & 16 & 7 & 4 & 9 & 11 & 3 & 14 & 20 & 30 & 15 & 24 \\ 26 & 7 & 4 & 28 & 27 & 25 & 13 & 14 & 29 & 22 & 8 & 2 & 16 & 30 & 10 \\ 2 & 29 & 21 & 13 & 28 & 17 & 27 & 1 & 8 & 19 & 5 & 26 & 10 & 22 & 23 \end{pmatrix}$$

Το ζητούμενο είναι να κατασκευάσουμε έναν $U_{10}(10^2)$ σχεδόν ομοιόμορφο σχεδιασμό από τον $U_{30}(30^2)$.

Αρχικά, τοποθετούμε τα σημεία του σχεδιασμού στο επίπεδο όπως φαίνεται παρακάτω στο Σχήμα 3.3(α). Τα σημεία έχουν τοποθετηθεί με τέτοιο τρόπο ώστε οι αριθμοί 1 έως 30 να αντιστοιχούν στην κλίμακα 0-1. Στη συνέχεια, δεδομένου ότι

θέλουμε έναν $U_{10}(10^2)$ σχεδιασμό, μπορούμε να επιλέξουμε 10 στοιχεία σύμφωνα με την πρώτη συντεταγμένη (Σχήμα 3.3(β)) ή 10 σημεία σύμφωνα με τη δεύτερη συντεταγμένη (Σχήμα 3.3(γ)). Επίσης, για κάθε συντεταγμένη μπορούμε να δημιουργήσουμε δύο ορθογώνια που συνολικά να περιέχουν 10 στοιχεία. Η διαφορά είναι ότι το πρώτο θα βρίσκεται στην αρχή και θα περιλαμβάνει το 0 και σημεία κοντά στο 0, ενώ το δεύτερο θα βρίσκεται στο τέλος και θα περιλαμβάνει το 1 και σημεία κοντά στο 1 (Σχήμα 3.3(δ)).



Σχήμα 3.3: Κατασκευή ενός $U_{10}(10^2)$ σχεδόν ομοιόμορφου σχεδιασμού

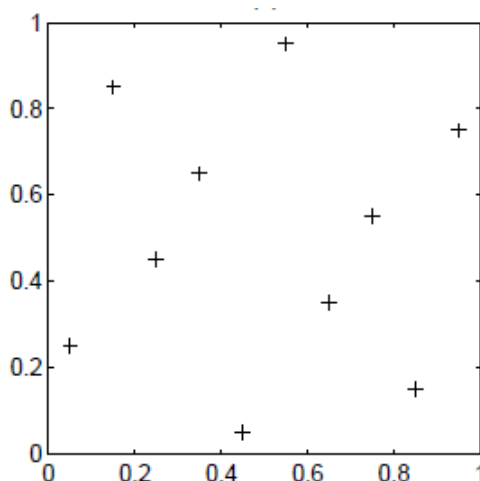
Υπάρχουν $30 \times 2 = 60$ πιθανά τέτοια υποσύνολα 10 σημείων. Τα σημεία κάθε τέτοιου υποσυνόλου είναι ομοιόμορφα κατανεμημένα στο ορθογώνιο μέσα στο οποίο βρίσκονται. Κάνοντας τώρα ένα γραμμικό μετασχηματισμό τα σημεία αυτά μπορούν

να δώσουν ένα μοναδιαίο τετράγωνο μέσα στο οποίο τα ίδια τα σημεία είναι και πάλι ομοιόμορφα καταναμημένα. Με αυτό τον τρόπο από τα 60 υποσύνολα των 10 σημείων έχουμε παράγει 60 σχεδιασμούς των 10 επαναλήψεων ο καθένας. Στη συνέχεια επιλέγουμε τη συνάρτηση ασυμφωνίας με την οποία θα εργαστούμε και βρίσκουμε το σχεδιασμό με την χαμηλότερη τιμή.

Στο παράδειγμά μας έχουμε επιλέξει την κυκλική L_2 συνάρτηση ασυμφωνίας CD και ο ομοιόμορφος σχεδιασμός με τη χαμηλότερη τιμή ($CD = 0.0543$) φαίνεται στη συνέχεια:

$$CU_{10} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \\ 5 & 9 & 1 & 7 & 3 & 8 & 4 & 10 & 2 & 6 \end{bmatrix}.$$

Το γράφημά του, φαίνεται στο Σχήμα 3.4:



Σχήμα 3.4: Σχεδιασμός $U_{10}(10^2)$ με τη χαμηλότερη τιμή CD

Αν αντί της μεθόδου κοπής εφαρμόζαμε τη μέθοδο glp ο σχεδόν ομοιόμορφος σχεδιασμός που θα προέκυπτε είναι ο εξής:

$$U_{glp,10} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \\ 3 & 6 & 9 & 2 & 5 & 8 & 1 & 4 & 7 & 10 \end{bmatrix}$$

Ο σχεδιασμός αυτός είναι χειρότερος από αυτόν που προέκυψε με τη μέθοδο κοπής λόγω του ότι έχει υψηλότερη τιμή στη συνάρτηση ασυμφωνίας, $CD = 0.0614$.

Συνολικά, η μέθοδος κοπής έχει περισσότερα πλεονεκτήματα σε σχέση με τη μέθοδο glp όσον αφορά την υπολογιστική πολυπλοκότητα και την ομοιομορφία των σχεδιασμών που επιτυγχάνονται μέσω αυτής. Έτσι, ο ρυθμός σύγκλισης της μεθόδου glp είναι $O(p^{-1}(\log p)^s)$, ενώ με τη μέθοδο κοπής επιτυγχάνεται ρυθμός $O(p^{-1}(\log p)^s \log \log p)$, ο οποίος είναι ελάχιστα χαμηλότερος. Επίσης, όπως είδαμε και από το παραπάνω παράδειγμα οι σχεδιασμοί που επιτυγχάνονται με τη μέθοδο κοπής έχουν γενικά χαμηλότερες τιμές στη συνάρτηση ασυμφωνίας και προκύπτουν ευκολότερα ομοιόμορφοι σχεδιασμοί. Τέλος η μέθοδος κοπής είναι πολύ καλή για την κατασκευή σχεδόν ομοιόμορφων σχεδιασμών όταν ο αριθμός επαναλήψεων n γίνεται αρκετά μεγάλος.

3.2.3 Η μέθοδος λατινικών τετραγώνων

Γνωρίζουμε ότι κάθε λατινικό τετράγωνο τάξης n αποτελεί ένα σχεδιασμό τύπου U , $U(n, n^n)$. Αν τώρα επιλέξουμε s από τις n στήλες του λατινικού τετραγώνου, τότε θα έχουμε δημιουργήσει έναν $U(n, n^s)$ σχεδιασμό τύπου U . Για δεδομένο τον αριθμό n υπάρχουν $n!$ λατινικά τετράγωνα τα οποία δημιουργούνται από ένα αρχικό διάλυμα γραμμής και αριστερές κυκλικές εναλλαγές αυτού. Στόχος είναι, από αυτά τα λατινικά τετράγωνα να βρούμε αυτό που δίνει τη μικρότερη τιμή για την συνάρτηση ασυμφωνίας που έχουμε επιλέξει.

Πιο αναλυτικά, τα βήματα της μεθόδου είναι τα εξής:

Βήμα 1

Ξεκινάμε με την πρώτη γραμμή του πίνακα που περιέχει τους αριθμούς από 1 έως n τοποθετημένους σε τυχαία σειρά και στη συνέχεια κάνουμε τις $n-1$ κυκλικές εναλλαγές που χρειαζόμαστε ώστε να προκύψει το λατινικό τετράγωνο. Βρίσκουμε το λατινικό τετράγωνο $L = (l_{ij}) = (l_1, l_2, \dots, l_n)$ τάξης n , που να έχει τη χαμηλότερη τιμή στη συνάρτηση ασυμφωνίας ανάμεσα σε όλα τα πιθανά $n!$ λατινικά τετράγωνα τάξεως n .

Βήμα 2

Διαλέγουμε s από τις n στήλες του τετραγώνου ($s \leq n$), τις l_1, l_2, \dots, l_s και δημιουργούμε τον $U(n, n^s)$ σχεδιασμό τύπου U έτσι ώστε και πάλι ο σχεδιασμός μας να έχει τη χαμηλότερη τιμή συνάρτησης ασυμφωνίας ανάμεσα σε όλους τους πιθανούς συνδυασμούς s στηλών που θα μπορούσαμε να επιλέξουμε και των $U(n, n^s)$ σχεδιασμών που θα προέκυπταν. Με αυτά τα δεδομένα ο σχεδιασμός που έχουμε επιλέξει είναι ένας σχεδόν ομοιόμορφος σχεδιασμός $U_n(n^s)$.

Ένα από τα βασικά προτερήματα της μεθόδου των λατινικών τετραγώνων είναι ότι μπορεί να δημιουργήσει όποιο ομοιόμορφο σχεδιασμό θέλουμε για κάθε $s \leq n$.

Παράδειγμα

Έστω $n=8$ και $s=3$. Ανάμεσα σε όλα τα λατινικά τετράγωνα που προκύπτουν από τις κυκλικές εναλλαγές βρίσκουμε ότι το παρακάτω έχει τη χαμηλότερη τιμή στη συνάρτηση ασυμφωνίας που χρησιμοποιούμε, τη CD , με $CD=0.4358$.

Πίνακας 3.5: 8×8 λατινικό τετράγωνο

1	2	5	4	7	3	8	6
2	5	4	7	3	8	6	1
5	4	7	3	8	6	1	2
4	7	3	8	6	1	2	5
7	3	8	6	1	2	5	4
3	8	6	1	2	5	4	7
8	6	1	2	5	4	7	3
6	1	2	5	4	7	3	8

Από αυτό το 8×8 λατινικό τετράγωνο μπορούμε να δημιουργήσουμε ομοιόμορφους ή σχεδόν ομοιόμορφους σχεδιασμούς $U_8(8^s)$ με $s \leq 8$ και $n=8$. Πράγματι:

- για $s=2$ και διαλέγοντας την πρώτη και την τέταρτη στήλη έχουμε τον $U_8(8^2)$ με $CD=0.0696$,
- για $s=3$ και διαλέγοντας την πρώτη, την δεύτερη και την έκτη στήλη έχουμε τον $U_8(8^3)$ με $CD=0.1123$,
- για $s=4$ και διαλέγοντας την πρώτη, την δεύτερη, την πέμπτη και την έκτη στήλη έχουμε τον $U_8(8^4)$ με $CD=0.1601$,
- για $s=5$ και διαλέγοντας την πρώτη, την δεύτερη, την τρίτη, την έκτη και την έβδομη στήλη έχουμε τον $U_8(8^5)$ με $CD=0.2207$.

Με τη χρήση αυτής της μεθόδου μπορούμε να δημιουργήσουμε οποιονδήποτε ομοιόμορφο ή σχεδόν ομοιόμορφο $U_n(n^s)$ σχεδιασμό, με $s \leq n$.

3.2.4 Η μέθοδος επέκτασης ορθογώνιων σχεδιασμών

Έστω ένας ορθογώνιος σχεδιασμός $L_n(q^s)$. Κάθε τέτοιος σχεδιασμός μπορεί να επεκταθεί και να δώσει αρκετούς σχεδιασμούς τύπου U . Από αυτούς τους σχεδιασμούς εκείνος με τη χαμηλότερη τιμή συνάρτησης ασυμφωνίας θα είναι ένας σχεδόν ομοιόμορφος σχεδιασμός. Παρακάτω φαίνονται αναλυτικά τα βήματα για αυτή την κατασκευή:

Έστω ότι έχουμε ένα $L_n(q^s)$ με $r = \frac{n}{q}$ να είναι οι επαναλήψεις κάθε επιπέδου.

Βήμα 1

Για κάθε στήλη του ορθογώνιου σχεδιασμού, βρίσκουμε r από τα στοιχεία «1» και τα αντικαθιστούμε με μεταθέσεις των $\{1, 2, \dots, r\}$, βρίσκουμε r από τα στοιχεία «2» και τα αντικαθιστούμε με μεταθέσεις των $\{r+1, r+2, \dots, 2r\}$ και συνεχίζουμε έτσι έως ότου αντικαταστήσουμε r από τα στοιχεία « q » με μεταθέσεις των $\{(q-1)r+1, \dots, qr\}$. Το αποτέλεσμα θα είναι ένας $U(n, n^s)$ σχεδιασμός τύπου U .

Έστω $\mathcal{O}_{n,s,q}$ το σύνολο όλων των σχεδιασμών τύπου U που μπορούμε να δημιουργήσουμε.

Βήμα 2

Έστω τώρα $U^* \in \mathcal{O}_{n,s,q}$ με τον σχεδιασμό U^* να έχει τη μικρότερη τιμή για δεδομένη συνάρτηση ασυμφωνίας. Τότε ο U^* είναι ένας σχεδόν ομοιόμορφος $U_n(n^s)$ σχεδιασμός.

Με τη χρήση αυτής της μεθόδου μπορούμε να δημιουργήσουμε ομοιόμορφους ή σχεδόν ομοιόμορφους σχεδιασμούς $U_n(n^s)$ μόνο στην περίπτωση που ο αντίστοιχος $L_n(q^s)$ ορθογώνιος σχεδιασμός υπάρχει.

3.2.5 Η προς τα εμπρός διαδικασία

Πρόκειται για μια κατασκευαστική διαδικασία που ξεκινά με μία στήλη και δημιουργεί τον (σχεδόν) ομοιόμορφο $U_n(q^s)$ σχεδιασμό στήλη – στήλη ελέγχοντας πάντα την τιμή της συνάρτησης ασυμφωνίας. Παρατηρούμε εδώ ότι δεν είναι αναγκαίο να ισχύει η ισότητα $n = q$. Αντ' αυτού, εδώ ισχύει $n = q^2$. Αναλυτικά τα βήματα της περιγράφονται παρακάτω:

Βήμα 1

Χωρίς βλάβη της γενικότητας επιλέγουμε την πρώτη στήλη να έχει $q \ll 1$, $q \ll 2$, ..., $q \ll q$. Έτσι έχουμε μια στήλη με q^2 στοιχεία. Βρίσκουμε τώρα μια δεύτερη στήλη η οποία αποτελεί αναδιάταξη της πρώτης. Θα διαλέξουμε την κατάλληλη στήλη ώστε οι δύο στήλες να μας δίνουν τη χαμηλότερη τιμή στη συνάρτηση ασυμφωνίας.

Βήμα 2

Η διαδικασία συνεχίζει με τον ίδιο τρόπο. Για δεδομένες t στήλες επιλέγουμε μια αναδιάταξη για να δημιουργήσουμε την $(t+1)$ στήλη ελέγχοντας πάντα τη συνάρτηση ασυμφωνίας. Η διαδικασία σταματάει όταν δημιουργήσουμε και τις s στήλες.

Από την παραπάνω μέθοδο, λαμβάνουμε συνήθως ένα σχεδόν ομοιόμορφο σχεδιασμό, ενώ το έδαφος είναι πρόσφορο και για τη δημιουργία $U_n(q_1 \times \dots \times q_s)$ σχεδιασμών.

3.2.6 Η μέθοδος βελτιστοποίησης (Threshold - Accepting Heuristic)

Πριν ξεκινήσουμε την περιγραφή της μεθόδου βελτιστοποίησης (Threshold Accepting, TA) είναι απαραίτητο να μιλήσουμε για την έννοια της «γειτονιάς» και να ορίσουμε πότε δύο σχεδιασμοί τύπου U θεωρούμε ότι είναι «κοντά» ο ένας στον άλλο. Οι δύο αυτές έννοιες βασίζονται στην απόσταση hamming.

Ορισμός 3.2.6.1

Για ένα δοσμένο σχεδιασμό τύπου U , έστω U^0 , και έναν σταθερό ακέραιο αριθμό λ , μια γειτονιά $\mathcal{N}(U^0)$ ορίζεται ως μια σφαίρα ακτίνας λ με κέντρο τον U^0 χρησιμοποιώντας ως μετρική απόσταση την απόσταση hamming.

Έτσι, ένας σχεδιασμός τύπου U , έστω ο U^1 , θεωρείται ότι βρίσκεται στη γειτονιά του U^0 (ή αλλιώς θεωρείται ότι είναι κοντά του) αν και μόνο αν διαφέρει σε όχι περισσότερες από λ καταχωρήσεις από τον U^0 .

Να σημειωθεί εδώ ότι για να παραμείνουμε εντός του συνόλου των σχεδιασμών τύπου U οι αλλαγές στις καταχωρήσεις που θα κάνουμε θα πρέπει να βρίσκονται εντός των στηλών.

Ας δούμε τώρα αναλυτικά, τα βήματα της μεθόδου βελτιστοποίησης:

Βήμα 1

Επιλέγουμε τυχαία ένα σχεδιασμό τύπου U , έστω τον U^0 και δίνουμε στην παράμετρο έναρξης T_i την αρχική της τιμή T_0 , (γενικά η παράμετρος έναρξης αποτελείται από μία ακολουθία τιμών καθορισμένη από πριν).

Βήμα 2

Επιλέγουμε τυχαία έναν άλλο σχεδιασμό τύπου U , έστω τον U^1 τέτοιον ώστε για δοσμένο λ να βρίσκεται στη γειτονιά του U^0 και υπολογίζουμε τις $M(U^0)$ και $M(U^1)$ όπου M είναι η συνάρτηση ασυμφωνίας που έχουμε επιλέξει. Συνήθως δουλεύουμε και εδώ με την CD ή WD συνάρτηση.

Εδώ πρέπει να σημειωθεί ότι αν για τις συναρτήσεις CD και WD επιλέξουμε να χρησιμοποιήσουμε τους τύπους που έχουν προκύψει με τη χρήση της απόστασης hamming τότε μειώνεται η δυσκολία υπολογισμού. Αυτό συμβαίνει γιατί αντί να ξεκινάμε τον υπολογισμό της συνάρτησης από την αρχή σε κάθε επανάληψη, απλά επαναυπολογίζουμε την απόσταση hamming μόνο για τις στήλες που έγιναν οι αλλαγές. Επίσης, λόγω του ότι κινούμαστε σε γειτονικούς σχεδιασμούς η συνάρτησή μας υπολογίζεται με ακόμη χαμηλότερο υπολογιστικό κόστος.

Βήμα 3

Αν $M(U^1) < M(U^0) \times (1 + T_i)$ τότε θέτουμε $U^0 = U^1$, αλλιώς αφήνουμε το U^0 αμετάβλητο. Στη συνέχεια η διαδικασία επαναλαμβάνεται διαλέγοντας ένα νέο σχεδιασμό U^i στη γειτονιά του σχεδιασμού που ήδη έχουμε (ο αριθμός επαναλήψεων είναι προκαθορισμένος).

Βήμα 4

Επιλέγουμε την επόμενη τιμή T_i έως ότου εξαντληθεί η ακολουθία των παραμέτρων έναρξης και επαναλαμβάνουμε την όλη διαδικασία.

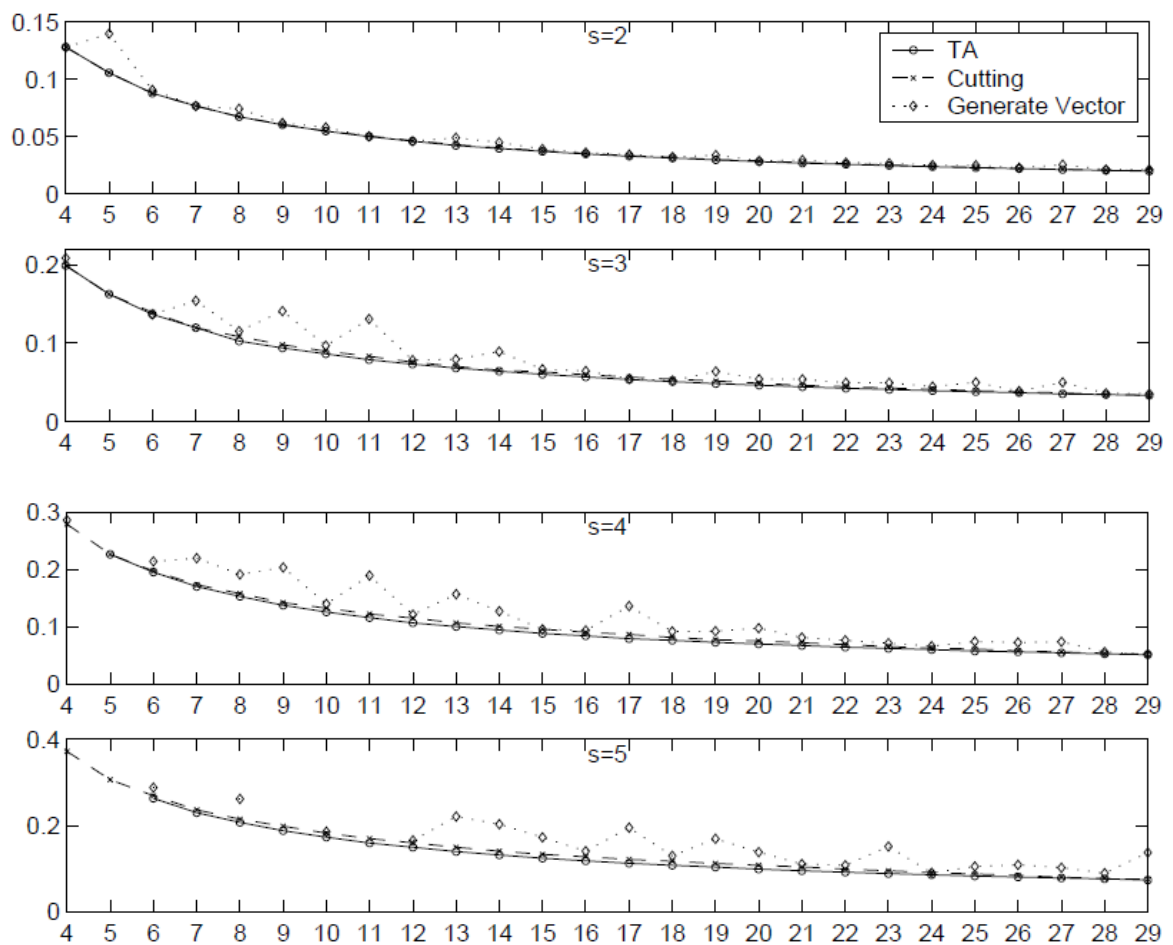
Το αποτέλεσμα που προκύπτει από αυτή τη διαδικασία είναι ένας σχεδιασμός με ελάχιστη συνάρτηση ασυμφωνίας M . Η αποτελεσματικότητα της μεθόδου βασίζεται στην προεπιλεγμένη τιμή λ , στην ακολουθία παραμέτρων έναρξης T_i , και στο συνολικό αριθμό επαναλήψεων.

Εδώ πρέπει να προσέξουμε ότι η ακολουθία παραμέτρων έναρξης είναι γνησίως φθίνουσα και τείνει στο 0. Επίσης, στα πρώτα βήματα της διαδικασίας μπορούν να γίνουν αποδεκτές και μικρές αυξήσεις στην τιμή της συνάρτησης ασυμφωνίας M έτσι ώστε να μπορέσουμε να ξεφύγουμε από πιθανά τοπικά ελάχιστα και έτσι να μπορέσουμε να βρούμε τον βέλτιστο σχεδιασμό. Προς το τέλος της διαδικασίας όμως, μόνο βελτιώσεις είναι αποδεκτές, αφού η ακολουθία $T_i \rightarrow 0$ πράγμα που οδηγεί τελικά σε μείωση της συνάρτησης ασυμφωνίας. Λόγω του ότι ο αριθμός των επαναλήψεων για κάθε αριθμό έναρξης T_i μπορεί να είναι όσο μεγάλος θέλουμε

αποδεικνύεται πως θα έχουμε σύγκλιση με πιθανότητα να τείνει στο ένα, και έτσι τελικά θα βρεθεί το ολικό ελάχιστο.

3.3 Μια σύντομη σύγκριση των μεθόδων

Η μέθοδος βελτιστοποίησης TA είναι σίγουρα η πιο αποτελεσματική αφού με αυτή επιτυγχάνουμε τις χαμηλότερες τιμές στη συνάρτηση ασυμφωνίας και λαμβάνουμε ομοιόμορφους σχεδιασμούς.



Σχήμα 3.5: Γραφική σύγκριση των μεθόδων κοπής, glp και TA

Επίσης όπως ήδη έχουμε αναφέρει η μέθοδος κοπής δίνει πολύ καλύτερες τιμές συνάρτησης ασυμφωνίας σε σχέση με την μέθοδο gIp και μάλιστα οι τιμές αυτές είναι πολύ κοντά σε αυτές της μεθόδου βελτιστοποίησης. Ωστόσο ο υπολογιστικός χρόνος που απαιτείται για να λάβουμε αποτελέσματα μέσω της μεθόδου TA είναι μεγαλύτερος σε σχέση με αυτόν που απαιτεί η μέθοδος κοπής.

Στο παραπάνω σχήμα βλέπουμε τη σύγκριση της μεθόδου TA, της μεθόδου κοπής και της μεθόδου gIp για διάφορους αριθμούς παραγόντων ($s = 2, 3, 4, 5$).

Για τη σύγκριση χρησιμοποιήθηκε η κεντραρισμένη L_2 συνάρτηση ασυμφωνίας CD της οποίας και οι τιμές φαίνονται στο σχήμα. Αποδεικνύεται ότι τα αποτελέσματα είναι παρόμοια και με τη χρήση των άλλων συναρτήσεων.

Τα γραφήματα επιβεβαιώνουν το πόσο κοντά στην μέθοδο TA βρίσκονται οι τιμές της μεθόδου κοπής, σε αντίθεση με τη μέθοδο gIp που οι τιμές της παρουσιάζουν αρκετές αποκλίσεις.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

4.1 Οθόνες υγρών κρυστάλλων (LCD): Βελτίωση ποιότητας με εφαρμογή ομοιόμορφων σχεδιασμών

Σε αυτό το κεφάλαιο θα μελετήσουμε τη βελτιστοποίηση της παραγωγής οθονών υγρών κρυστάλλων (LCD – Liquid Crystal Displays). Αυτό θα γίνει με χρήση ομοιόμορφων σχεδιασμών αφού, όπως ήδη έχουμε αναφέρει, οι σχεδιασμοί αυτοί απαιτούν ένα μικρό αριθμό επαναλήψεων ακόμα και όταν ο αριθμός των παραγόντων αλλά και των επιπέδων κάθε παράγοντα είναι μεγάλος. Με τον τρόπο αυτό γίνεται μεγάλη εξοικονόμηση πόρων. Πιο αναλυτικά, ο αναγνώστης μπορεί να δει αναφορές από τους Li, Lin και Chen (2004) όπως και Chan και Lo (2004).

Πριν μελετήσουμε την βελτιστοποίηση της παραγωγής τους καλό είναι να κάνουμε μια μικρή αναφορά στον τρόπο με τον οποίο κατασκευάζονται οι οθόνες υγρών κρυστάλλων, και στους παράγοντες οι οποίοι μπορεί να προκαλέσουν αστοχίες στην παραγωγή τους.

Κατ' αρχάς, όπως είναι γνωστό, τα μόρια ενός υγρού έχουν απεριόριστη ελευθερία κινήσεων ενώ αντίθετα, τα μόρια ενός στερεού (ή ενός κρυστάλλου) έχουν σταθερές θέσεις και μπορούν να κάνουν μόνο πολύ μικρές κινήσεις γύρω από αυτές τις θέσεις. Οι υγροί κρύσταλλοι (LC) είναι ένα υλικό το οποίο μπορεί να συνδυάζει αυτές τις δύο ιδιότητες. Από τη μία, η φυσική του κατάσταση είναι υγρή, αλλά από την άλλη έχει εν μέρει κρυσταλλική δομή. Δηλαδή, τα μόριά του από τη μία είναι στραμμένα προς μια διεύθυνση όπως σε ένα στερεό αλλά από την άλλη μπορούν να μετακινούνται σε διαφορετικές θέσεις μέσα στο υλικό όπως σε ένα υγρό.

Η λειτουργία μιας οθόνης υγρών κρυστάλλων βασίζεται στο χειρισμό του φωτός που περνά δια μέσου των υγρών κρυστάλλων. Όταν εφαρμόζεται μια τάση V σε μία οθόνη υγρών κρυστάλλων LCD, τα μόρια των υγρών κρυστάλλων ευθυγραμμίζονται και περιστρέφονται κατά μήκος του ηλεκτρικού πεδίου, και όταν το φως περάσει δια μέσου των υγρών κρυστάλλων θα βγει πολωμένο.

Η παραγωγική διαδικασία των οθονών LCD είναι αρκετά σύνθετη για να μπορέσουμε να την περιγράψουμε αναλυτικά. Μπορεί όμως να χωριστεί σε τέσσερα βασικά στάδια τα οποία βλέπουμε συνοπτικά παρακάτω:

- στο πρώτο στάδιο κατασκευάζεται το κύκλωμα το οποίο θα εφαρμοστεί στο γυαλί,

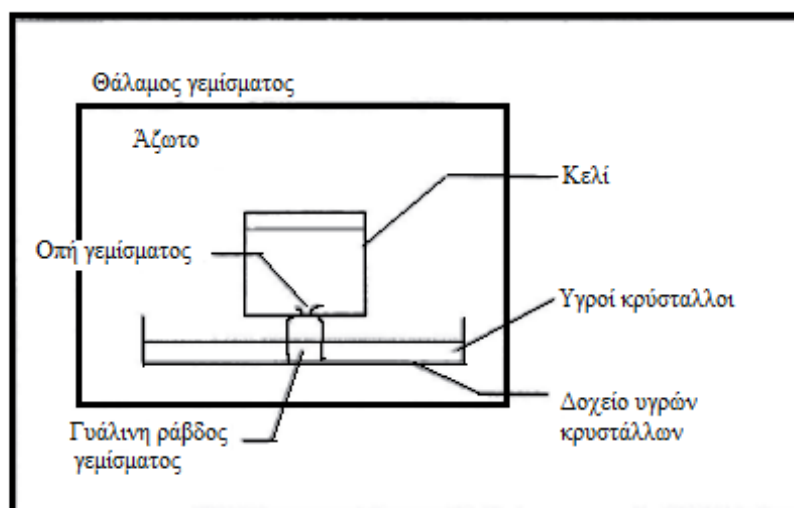
- στο δεύτερο στάδιο ενώνονται δύο όμοια γυαλιά και δημιουργείται ένας σχηματισμός,
- στο τρίτο στάδιο μικρά στοιχεία που τα ονομάζουμε κελιά κόβονται από τον μεγάλο σχηματισμό και στη συνέχεια γεμίζονται με το υλικό των υγρών κρυστάλλων προς το σχηματισμό των οθονών,
- στο τέταρτο και τελευταίο στάδιο οι οθόνες ενώνονται με τα άλλα ηλεκτρονικά μέρη ώστε να προκύψει μια πλήρως λειτουργική οθόνη LCD.

Σε κάθε ένα ξεχωριστό κομμάτι της παραγωγικής διαδικασίας μπορούν να εφαρμοστούν σχεδιασμοί ώστε να βελτιωθεί η ποιότητα και η αποδοτικότητα του προϊόντος. Εμείς θα επικεντρώσουμε τη μελέτη μας για τη βελτίωση της ποιότητας του προϊόντος στο στάδιο του γεμίσματος. Στο στάδιο δηλαδή κατά το οποίο τα κελιά που έχουν δημιουργηθεί γεμίζονται με το υλικό των υγρών κρυστάλλων.

Για το γέμισμα των κελιών χρησιμοποιείται μια ράβδος από γυάλινες ίνες δια μέσου της οποίας περνά το υλικό. Ωστόσο σε αυτό το στάδιο μπορεί να υπάρξουν αστοχίες λόγω του ατελούς γεμίσματος των κελιών. Αυτό αποτελεί ένα μεγάλο πρόβλημα ειδικά όταν το ποσοστό αστοχίας είναι μεγαλύτερο από 1% .

Ο στόχος λοιπόν του πειράματος είναι να βρούμε τις βέλτιστες συνθήκες στις οποίες πρέπει να βρίσκεται η γυάλινη ράβδος αλλά και τα κελιά ώστε το ποσοστό αστοχίας να μην υπερβαίνει το 1% .

Στην παρακάτω εικόνα βλέπουμε το σχεδιάγραμμα που περιγράφει πως γίνεται το γέμισμα των κελιών με τους υγρούς κρυστάλλους.

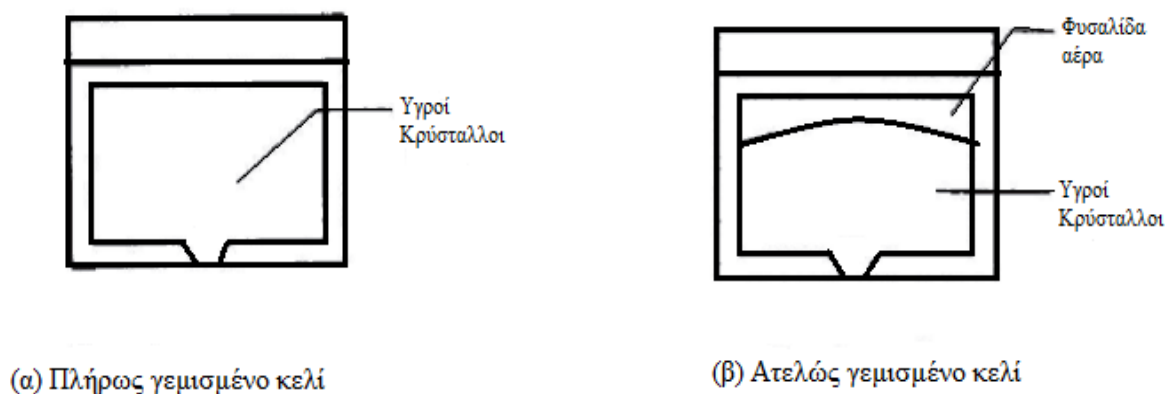


Σχήμα 4.1: Γέμισμα κελιών με υγρούς κρύσταλλους

Οι πέντε παράγοντες που θα μελετήσουμε και θα προσπαθήσουμε να βρούμε τις βέλτιστες τιμές τους είναι οι ακόλουθοι:

1. Χρόνος κενού, (V) μετριέται σε λεπτά. Πρόκειται για το χρονικό διάστημα κατά το οποίο ο θάλαμος γεμίσματος παραμένει κενός.
2. Χρόνος γεμίσματος, (F) μετριέται σε λεπτά. Πρόκειται για το χρόνο κατά το οποίο το κελί βρίσκεται σε επαφή με τη γυάλινη ράβδο γεμίσματος.
3. Πάχος της γυάλινης ράβδου, (T) μετριέται σε κομμάτια. Πρόκειται για τον αριθμό των γυάλινων ινών που ενώνονται έτσι ώστε να δημιουργηθεί η γυάλινη ράβδος.
4. Επίπεδο των υγρών κρυστάλλων, (L) μετριέται σε χιλιοστά. Πρόκειται για το ύψος του υγρού που βρίσκεται μέσα στο δοχείο υγρών κρυστάλλων. Μέσα σε αυτό θα πρέπει να βυθιστεί η γυάλινη ράβδος.
5. Χρόνος εμποτισμού πριν το γέμισμα, (S) μετριέται σε ώρες. Πρόκειται για το χρονικό διάστημα κατά το οποίο η γυάλινη ράβδος παραμένει βυθισμένη μέσα σε δοχείο που περιέχει υγρούς κρυστάλλους.

Ένα κελί θα πρέπει να απορριφθεί αν το γέμισμά του είναι ατελές. Αυτό θα συμβεί αν δημιουργηθεί μια φυσαλίδα αέρα μέσα του η οποία δεν θα του επιτρέψει να γεμίσει πλήρως. Αυτό φαίνεται και στο επόμενο σχήμα:



Σχήμα 4.2: κελιά γεμισμένα με υγρούς κρυστάλλους

Στόχος μας λοιπόν είναι να αυξηθεί το ποσοστό των αποδεκτών κελιών.

Το πείραμα που θα γίνει θα περιλαμβάνει τους πέντε προαναφερθέντες παράγοντες που θεωρείται ότι επηρεάζουν το τελικό αποτέλεσμα.

4.2 Πειραματική διαδικασία

1^η φάση του πειράματος

Αρχικά θα πρέπει να ορίσουμε κάποιες μέγιστες και ελάχιστες τιμές που μπορούν να λάβουν οι προς εξέταση παράγοντες. Από την προϋπάρχουσα εμπειρία στην παραγωγή οθονών υγρών κρυστάλλων μπορούμε να πούμε ότι οι παράγοντες V, F, T, L, και S μπορούν να κινηθούν στα παρακάτω πλαίσια τιμών ούτως ώστε να έχουμε μία αποδεκτή παραγωγή:

$$16 \leq V \leq 24$$

$$9 \leq F \leq 17$$

$$4 \leq T \leq 8$$

$$2 \leq L \leq 23$$

$$1 \leq S \leq 3$$

Τα επίπεδα τα οποία μπορούν να λάβουν οι παράγοντες φαίνονται παρακάτω:

- Παράγοντας I (V): 16, 18, 20, 22, 24 (Επίπεδα 1, 2, 3, 4, 5)
- Παράγοντας II (F): 9, 11, 13, 15, 17 (Επίπεδα 1, 2, 3, 4, 5)
- Παράγοντας III (T): 4, 5, 6, 7, 8 (Επίπεδα 1, 2, 3, 4, 5)
- Παράγοντας IV (L): 2 (οριακά βυθισμένο), 11 (μισοβυθισμένο), 23 (πλήρως βυθισμένο) (Επίπεδα 1, 2, 3)
- Παράγοντας V (S): 1, 1.5, 2, 2.5, 3 (Επίπεδα 1, 2, 3, 4, 5)

Για τη διεξαγωγή του πειράματος, και δεδομένων των περιορισμένων πόρων, αρχικά θα πραγματοποιηθούν 15 επαναλήψεις.

Όπως φαίνεται και παραπάνω υπάρχουν τέσσερις παράγοντες ο καθένας από τους οποίους έχει πέντε επίπεδα και ένας παράγοντας που έχει τρία επίπεδα. Θα χρησιμοποιήσουμε λοιπόν έναν $U_{15}(5^4 \times 3^1)$ ομοιόμορφο σχεδιασμό. Αξίζει να σημειωθεί εδώ πως αν αντί του ομοιόμορφου σχεδιασμού χρησιμοποιούσαμε έναν πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό ή ένα ορθογώνιο σχεδιασμό οι επαναλήψεις που θα έπρεπε να πραγματοποιηθούν θα ήταν $5^4 \times 3^1 = 1875$ και $5^2 \times 3^1 = 75$ αντίστοιχα. Η

πρώτη περίπτωση λόγω του μεγέθους της κρίνεται απαγορευτική ενώ η δεύτερη αρκετά κοστοβόρα.

Αρχικά θα πρέπει να κατασκευάσουμε τον $U_{15}(5^4 \times 3^1)$ ομοιόμορφο σχεδιασμό από τον αντίστοιχο $U_{15}(15)$. Και οι δύο πίνακες φαίνονται στη συνέχεια:

Πίνακας 4.1: $U_{15}(15)$ ομοιόμορφος σχεδιασμός

Αριθμός Επαναλ.	Παράγοντες				
	I	II	III	IV	V
1	1	4	7	11	13
2	2	8	14	7	11
3	3	12	6	3	9
4	4	1	13	14	7
5	5	5	5	10	5
6	6	9	12	6	3
7	7	13	4	2	1
8	8	2	11	13	14
9	9	6	3	9	12
10	10	10	10	5	10
11	11	14	2	1	8
12	12	3	9	12	6
13	13	7	1	8	4
14	14	11	8	4	2
15	15	15	15	15	15

Πίνακας 4.2: $U_{15}(5^4 \times 3^1)$ ομοιόμορφος σχεδιασμός

Αριθμός επαναλ.	Παράγοντες				
	I (V)	II (F)	III (T)	IV (L)	V (S)
1	1 (16)	2 (11)	3 (6)	3 (23)	5 (3)
2	1 (16)	3 (13)	5 (8)	2 (11)	4 (2.5)
3	1 (16)	4 (15)	2 (5)	1 (2)	3 (2)
4	2 (18)	1 (9)	5 (8)	3 (23)	3 (2)
5	2 (19)	2 (11)	2 (5)	2 (11)	2 (1.5)
6	2 (18)	3 (13)	4 (7)	2 (11)	1 (1)
7	3 (20)	5 (17)	2 (5)	1 (2)	1 (1)
8	3 (20)	1 (9)	4 (7)	3 (23)	5 (3)
9	3 (20)	2 (11)	1 (4)	2 (11)	4 (2.5)
10	4 (22)	4 (15)	4 (7)	1 (2)	4 (2.5)
11	4 (22)	5 (17)	1 (4)	1 (2)	3 (2)
12	4 (22)	1 (9)	3 (6)	3 (23)	2 (1.5)
13	5 (24)	3 (13)	1 (4)	2 (11)	2 (1.5)
14	5 (24)	4 (15)	3 (6)	1 (2)	1 (1)
15	5 (24)	5 (17)	5 (8)	3 (23)	5 (3)

Ο τρόπος με τον οποίο κατασκευάσαμε τον $U_{15}(5^4 \times 3^1)$ δεδομένου του $U_{15}(15)$ παρουσιάζεται παρακάτω:

Έπρεπε να κατασκευαστούν τέσσερις παράγοντες πέντε επιπέδων ο καθένας, και ένας παράγοντας τριών επιπέδων. Έτσι, για τους παράγοντες I, II, III, και V έγινε η εξής αντικατάσταση:

1, 2, 3	1
4, 5, 6	2
7, 8, 9	3
10, 11, 12	4
13, 14, 15	5

ενώ για τον παράγοντα IV έγινε η αντικατάσταση:

1, 2, 3, 4, 5	1
6, 7, 8, 9, 10	2
11, 12, 13, 14, 15	3

(Οι αριθμοί εντός των παρενθέσεων στον Πίνακα 4.2 αντιπροσωπεύουν τις πραγματικές τιμές των παραγόντων.)

Για το πείραμα χρησιμοποιήθηκαν πέντε δοχεία, που το καθένα από αυτά περιείχε 66 πειραματικές μονάδες για κάθε γύρο. Ο αριθμός των αποδεκτών οθονών LCD που υπήρξαν στο τέλος καθεμιάς από τις 15 επαναλήψεις του πειράματος φαίνονται παρακάτω, στον Πίνακα 4.3.

Παρατηρώντας τα αποτελέσματα του πειράματος συμπεραίνουμε ότι η πρώτη επανάληψη έδωσε τέλεια αποτελέσματα αφού και τα 66 κελιά ήταν επιτυχημένα στο γέμισμά τους. (Μέση τιμή 66 και μηδενική τυπική απόκλιση.) Επίσης πολύ καλά αποτελέσματα είχαμε στην 8^η επανάληψη με τη μέση τιμή να είναι 63.0 και την τυπική απόκλιση 5.20, αλλά και στην 12^η επανάληψη με μέση τιμή 63.6 και τυπική απόκλιση 3.39. Σε αυτές τις επαναλήψεις τα αποτελέσματα της μέσης τιμής είναι τα καλύτερα αλλά και οι τυπικές αποκλίσεις είναι πολύ μικρές.

Οι παρατηρήσεις που μπορούμε να κάνουμε για την επιλογή του βέλτιστου επιπέδου για τους παράγοντές μας είναι οι ακόλουθες:

- Στις τρεις καλύτερες επαναλήψεις ο παράγοντας L, που μετρά το ύψος του υγρού μέσα στο δοχείο υγρών κρυστάλλων, βρίσκεται στην υψηλότερη τιμή του (επίπεδο 3: 23 χιλιοστά). Καταλαβαίνουμε λοιπόν ότι αυτή είναι και η καλύτερη τιμή που θα πρέπει να δοθεί σε αυτό τον παράγοντα.
- Βλέποντας και πάλι τις καλύτερες επαναλήψεις, ο παράγοντας F, που μετρά το χρόνο κατά τον οποίο το κελί είναι σε επαφή με τη γυάλινη ράβδο, βρίσκεται στα χαμηλότερα επίπεδά του (επίπεδο 1: 9 λεπτά και επίπεδο 2: 11 λεπτά). Καταλαβαίνουμε λοιπόν πως σίγουρα πρέπει να παίρνει χαμηλή τιμή, όμως λόγω του ότι εμφανίζονται δύο επίπεδα μάλλον υπάρχουν και κάποιες αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραγόντων. Έτσι δεν μπορούμε να επιλέξουμε με σιγουριά κάποιο από τα δύο επίπεδα.
- Στην βέλτιστη επανάληψη βλέπουμε πως ο παράγοντας V που μετράει το χρονικό διάστημα κατά το οποίο ο θάλαμος γεμίσματος παραμένει κενός είχε τη χαμηλότερη τιμή (επίπεδο 1: 16), ενώ στις δύο επόμενες καλύτερες η τιμή του αυξήθηκε (επίπεδο 2 και επίπεδο 3). Δεδομένου όμως ότι από πρότερη γνώση και εμπειρία της παραγωγικής διαδικασίας είναι γνωστό πως οι

παράγοντες V και F είναι καλό να λαμβάνουν χαμηλές τιμές για να μειώνεται ο χρόνος παραγωγής και να αυξάνεται το ποσοστό παραγωγής μάλλον θα επιλέξουμε τα χαμηλότερα επίπεδα αυτών των παραγόντων. Διαφαίνεται επίσης η ανάγκη να μελετήσουμε περαιτέρω μείωση των τιμών των προαναφερθέντων παραγόντων.

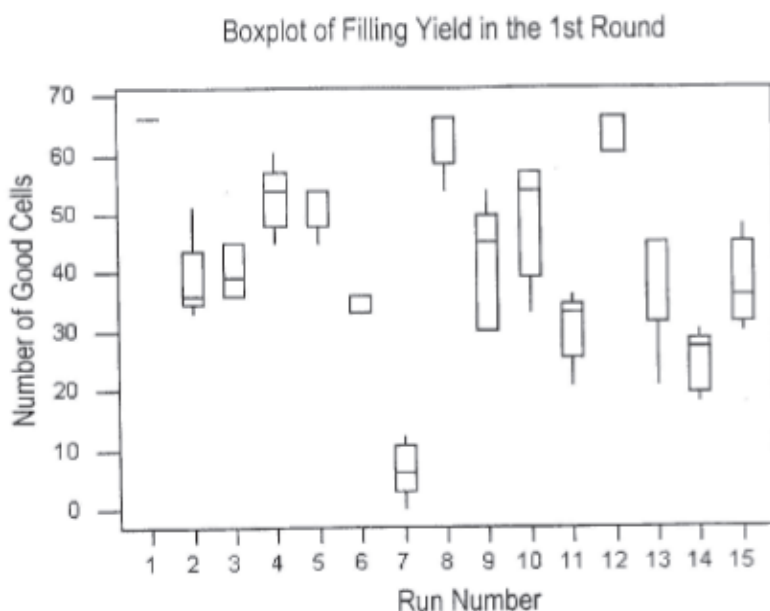
Πίνακας 4.3: Αποτελέσματα πειράματος με χρήση ομοιόμορφου σχεδιασμού

Αριθμός Επαναλ.	Δοχεία					Mean	S.D.
	1	2	3	4	5		
1	66	66	66	66	66	66	0
2	33	36	36	36	51	38.4	7.16
3	36	36	45	39	45	40.2	4.55
4	45	54	51	60	54	52.8	5.45
5	45	54	54	51	54	51.6	3.91
6	33	36	33	36	36	34.8	1.64
7	0	6	6	12	9	6.6	4.45
8	54	66	63	66	66	63.0	5.20
9	30	30	54	45	45	40.8	10.52
10	33	45	57	54	57	49.2	10.31
11	21	30	33	36	33	30.6	5.77
12	60	60	66	66	66	63.6	3.29
13	21	45	45	42	45	39.6	10.48
14	18	21	27	27	30	24.6	4.93
15	30	36	33	42	48	37.8	6.50

- Όσον αφορά τον παράγοντα T, που μετρά τον αριθμό των γυάλινων ιών που ενώνονται ώστε να δημιουργηθεί η γυάλινη ράβδος, παρατηρούμε ότι στις καλύτερες επαναλήψεις έχει βρεθεί στα ενδιάμεσα επίπεδά του (επίπεδο 3: 6 και επίπεδο 4:7) άρα μάλλον πρέπει να κινηθούμε σε αυτές τις κεντρικές τιμές.
- Τέλος, για τον παράγοντα S, που μετρά το χρονικό διάστημα σε ώρες κατά το οποίο η γυάλινη ράβδος παραμένει βυθισμένη μέσα στο δοχείο με τους υγρούς κρυστάλλους δεν μπορούμε να βγάλουμε κάποιο ασφαλές

συμπέρασμα αφού στις βέλτιστες περιπτώσεις παίρνει ακραίες τιμές (επίπεδο 2: 1,5 αλλά και επίπεδο 5: 3).

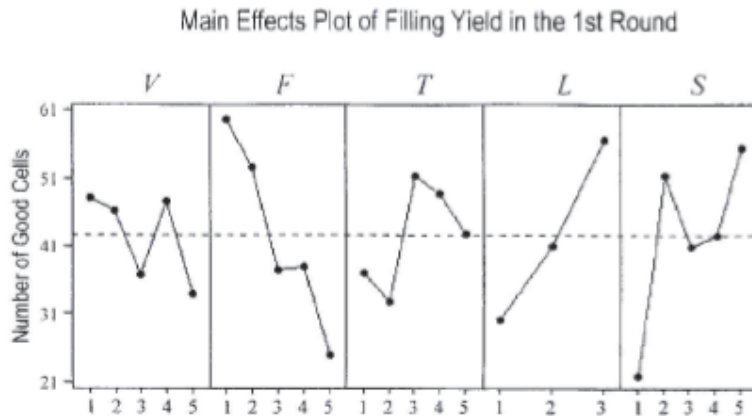
Οι παραπάνω παρατηρήσεις μας επιβεβαιώνονται και με τα ακόλουθα σχήματα:



Σχήμα 4.3: Αριθμός καλών καλιών ανά επανάληψη (1^η φάση)

Όπως φαίνεται ξεκάθαρα από το Σχήμα 4.3, οι επαναλήψεις 1, 8, και 12 είναι οι καλύτερες αφού φέρουν τις υψηλότερες τιμές καλών κελιών και χωρίς μεγάλα σφάλματα.

Επίσης, από το Σχήμα 4.4 είναι φανερό πως όσο αυξάνεται η τιμή του παράγοντα F έχουμε πτώση στον αριθμό καλών κελιών, ενώ το ακριβώς αντίθετο αποτέλεσμα έχουμε στον παράγοντα L με τον αριθμό καλών κελιών να αυξάνεται με την αύξηση της τιμής του επιπέδου του.



Σχήμα 4.4: κύριες επιδράσεις (1^η φάση)

2^η φάση του πειράματος

Χρησιμοποιώντας ως κύριο άξονα τα αποτελέσματα που λάβαμε από την πρώτη επανάληψη, η οποία ήταν και η καλύτερη, αλλά και τα γενικά συμπεράσματα που βγάλαμε από την πρώτη φάση του πειράματος, θα προχωρήσουμε στην περαιτέρω μελέτη των επιπέδων των παραγόντων.

Στο νέο μας σχεδιασμό θα δοθούν τρία επίπεδα σε κάθε παράγοντα. Όπως είδαμε, ο παράγοντας F έμεινε σε χαμηλά επίπεδα οπότε σε αυτή τη φάση θα περικόψουμε τα υψηλά επίπεδα και θα δώσουμε και μία ακόμα χαμηλότερη τιμή ελπίζοντας πως ο σχεδιασμός να μας δώσει ακόμα καλύτερα αποτελέσματα. Για τον παράγοντα V εφόσον τα δεδομένα της πρώτης φάσης τον έδειχναν σε ακραίες τιμές θα επιδιώξουμε να τον κρατήσουμε και αυτόν σε χαμηλά επίπεδα, δεδομένου ότι από κατασκευαστικής άποψης είναι γνωστό πως V και F καλό είναι να βρίσκονται σε χαμηλά επίπεδα. Έτσι, θα περικόψουμε την υψηλότερη τιμή του και θα του δώσουμε την ευκαιρία να πάρει και μία ακόμα χαμηλότερη τιμή. Στον παράγοντα T θα δοθούν οι κεντρικές του τιμές. Για τον παράγοντα S, δεδομένου ότι δεν είχαμε εξάγει κάποιο συμπέρασμα, θα λάβουμε και πάλι όλο το εύρος τιμών του. Τέλος, ο παράγοντας L έχει δείξει σαφή τάση ανόδου κάτι που συμφωνεί και με την κατασκευαστική εμπειρία και έτσι έχει σταθεροποιηθεί στην τιμή 23.

Για το πείραμά μας θα χρησιμοποιηθούν και πάλι πέντε δοχεία που το καθένα περιέχει 66 πειραματικές μονάδες.

Τα επίπεδα τα οποία μπορούν να λάβουν οι παράγοντες φαίνονται αναλυτικά παρακάτω:

- Παράγοντας I (V): 12, 16, 20 (Επίπεδα 1, 2, 3)
- Παράγοντας II (F): 7, 9, 11 (Επίπεδα 1, 2, 3)
- Παράγοντας III (T): 5, 6, 7 (Επίπεδα 1, 2, 3)
- Παράγοντας IV (L): 23 (Σταθεροποιημένος)
- Παράγοντας V (S): 1, 2, 3 (Επίπεδα 1, 2, 3)

Με τα παραπάνω δεδομένα κατασκευάζουμε έναν 3^4 ορθογώνιο σχεδιασμό ο οποίος απαιτεί μόλις $3 \times 3 = 9$ επαναλήψεις. Ο σχεδιασμός αυτός φαίνεται παρακάτω:

Πίνακας 4.4: $OD(3^4)$ ορθογώνιος σχεδιασμός

Αριθμός Επαναλ.	Παράγοντες				
	I (V)	II (F)	III (T)	IV (L)	V (S)
16	1 (12)	1 (7)	1 (5)	1 (23)	1 (1)
17	1 (12)	2 (9)	2 (6)	1 (23)	2 (2)
18	1 (12)	3 (11)	3 (7)	1 (23)	3 (3)
19	2 (16)	1 (7)	2 (6)	1 (23)	2 (2)
20	2 (16)	2 (9)	3 (7)	1 (23)	3 (3)
21	2 (16)	3 (11)	1 (5)	1 (23)	1 (1)
22	3 (20)	1 (7)	3 (7)	1 (23)	3 (3)
23	3 (20)	2 (9)	1 (5)	1 (23)	1 (1)
24	3 (20)	3 (11)	2 (6)	1 (23)	2 (2)

Ο αριθμός των αποδεκτών οθονών LCD που υπήρξαν στο τέλος καθεμιάς από τις επαναλήψεις του πειράματος φαίνονται παρακάτω, στον Πίνακα 4.5.

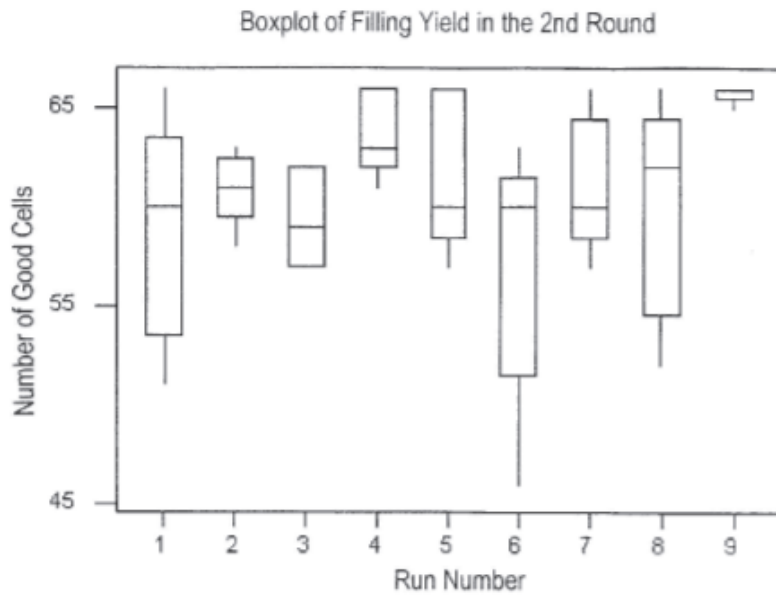
Παρατηρώντας τα αποτελέσματα του πειράματος συμπεραίνουμε ότι η καλύτερη επανάληψη αυτής της φάσης είναι η 24^η, η οποία έδωσε τη μεγαλύτερη μέση τιμή (Mean=65.9) και είχε ελάχιστη τυπική απόκλιση (Standard Deviation S.D.=0.45). Η δεύτερη καλύτερη επανάληψη της φάσης αυτής είναι η 19^η αφού έλαβε τιμές Mean=63.8 και S.D.=2.17.

Πίνακας 4.5: Αποτελέσματα πειράματος με χρήση ορθογώνιου σχεδιασμού

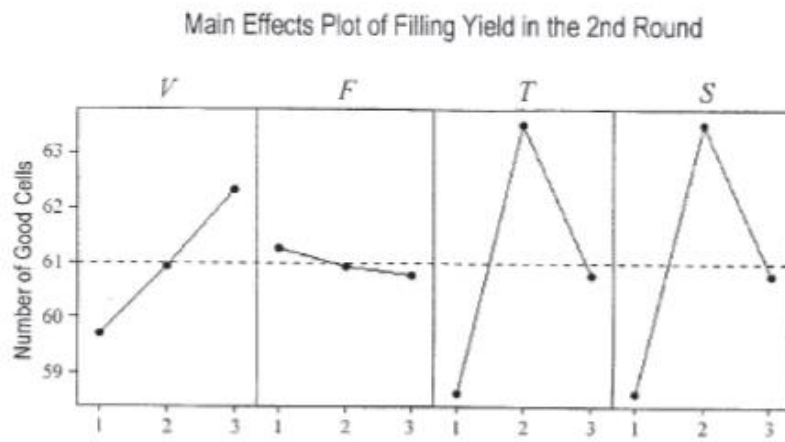
Αριθμός Επανάλ.	Δοχεία					Mean	S.D.
	1	2	3	4	5		
16	51	61	60	56	66	58.8	5.63
17	56	62	61	63	61	61.0	1.87
18	57	59	57	62	62	59.4	2.51
19	61	63	63	66	66	63.8	2.17
20	57	60	60	66	66	61.8	4.02
21	46	60	57	63	60	57.2	6.61
22	57	60	63	60	66	61.2	3.42
23	66	66	62	57	63	60.0	5.52
24	65	65	66	56	66	65.9	0.45

Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα γραφήματα του αριθμού καλών κελιών ανά επανάληψη καθώς και των κύριων επιδράσεων. Παρατηρώντας τα μπορούμε να εξάγουμε τα εξής συμπεράσματα:

- Αξιοπρόσεχτο είναι το στοιχείο πως η τιμή της βέλτιστης επανάληψης του γύρου επετεύχθη για την υψηλότερη τιμή του παράγοντα V (βρέθηκε στο τρίτο επίπεδο με τιμή 20) ενώ στην προηγούμενη φάση στη βέλτιστη επανάληψη είχε λάβει τη χαμηλότερη τιμή και αναμέναμε κάτι παρόμοιο. Στα ίδια αντικρουόμενα συμπεράσματα καταλήγουμε και αν κοιτάξουμε το γράφημα των κύριων επιδράσεων του V. Προκύπτει σαφώς ότι ο παράγοντας αυτός χρειάζεται περεταίρω μελέτη.
- Ο παράγοντας T έλαβε την τιμή 6. Η τιμή αυτή συμφωνεί με τις τιμές που είχαν οι καλύτερες επιδόσεις της προηγούμενης φάσης και με την αμέσως επόμενη καλύτερη επανάληψη αυτής της φάσης που είναι η 19^η και έτσι επιλέγουμε να σταθεροποιήσουμε τον παράγοντα T στην τιμή αυτή.
- Ο παράγοντας F δεν έδειξε κάποια αξιολογη μεταβολή και παρέμεινε στην τιμή 11 όπως και στην καλύτερη επανάληψη της προηγούμενης φάσης. Όμως στην 19^η επανάληψη πήρε τη χαμηλότερη τιμή του και έτσι θα διερευνηθεί περισσότερο στη συνέχεια.
- Ο παράγοντας S λαμβάνει την τιμή 2 στις δυο καλύτερες επαναλήψεις της φάσης αυτής. Για αυτό το λόγο θα σταθεροποιηθεί στην τιμή αυτή κάτι που επιβεβαιώνεται και από το γράφημα των κύριων επιδράσεων.



Σχήμα 4.5: Αριθμός καλών κελιών ανά επανάληψη (2^η φάση)



Σχήμα 4.6: κύριες επιδράσεις (2^η φάση)

3^η φάση του πειράματος

Σε αυτή τη φάση του πειράματος θα μελετήσουμε τα αποτελέσματα που προκύπτουν από τις διάφορες τιμές των παραγόντων V και F που είναι αυτοί για τους οποίους δε μπορέσαμε να βγάλουμε ασφαλή συμπεράσματα στις προηγούμενες φάσεις. Οι υπόλοιποι παράγοντες, T, L, S έχουν σταθεροποιηθεί στις τιμές που βρέθηκαν καλύτερες από τις δύο προηγούμενες φάσεις.

Για το πείραμά μας θα χρησιμοποιηθούν και πάλι πέντε δοχεία που το καθένα περιέχει 66 πειραματικές μονάδες.

Τα επίπεδα τα οποία μπορούν να λάβουν οι παράγοντες φαίνονται αναλυτικά παρακάτω:

- Παράγοντας I (V): 14, 18, 20 (Επίπεδα 1, 2, 3)
- Παράγοντας II (F): 7, 9, 11 (Επίπεδα 1, 2, 3)
- Παράγοντας III (T): 6 (Σταθεροποιημένος)
- Παράγοντας IV (L): 23 (Σταθεροποιημένος)
- Παράγοντας V (S): 2 (Σταθεροποιημένος)

Με τα παραπάνω δεδομένα κατασκευάζουμε έναν 3×3 πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό για τις τιμές των παραγόντων όπως φαίνεται στον Πίνακα 4.6.

Ο Πίνακας 4.7 που περιγράφει την αυτή τη φάση του πειράματος παρουσιάζεται παρακάτω ενώ στη συνέχεια, μπορούμε να δούμε και τον Πίνακα 4.8 με τα αποτελέσματα της πειραματικής διαδικασίας.

Πίνακας 4.6: 3×3 πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός

Αριθμός Επαναλ.	Παράγοντες				
	I (V)	II (F)	III (T)	IV (L)	V (S)
25	14	7	6	23	2
26	14	9	6	23	2
27	14	11	6	23	2
28	18	7	6	23	2
29	18	9	6	23	2
30	18	11	6	23	2
31	20	7	6	23	2
32	20	9	6	23	2
33	20	11	6	23	2

Όπως φαίνεται, καλά αποτελέσματα έδωσαν οι επαναλήψεις 28, 29, 30 και 35 με τη μέση τιμή καθεμίας από αυτές να έχει αρκετά υψηλή τιμή και παράλληλα να υπάρχουν πολύ χαμηλές τυπικές αποκλίσεις. Η τελευταία επανάληψη που έγινε για τον έλεγχο μείωσης του χρόνου δεν έδωσε αρκετά ικανοποιητικά αποτελέσματα. Άρα δεν μπορούμε να συμπεράνουμε περεταίρω μείωση του χρόνου.

Πίνακας 4.7: Ο σχεδιασμός της 3^{ης} φάσης του πειράματος

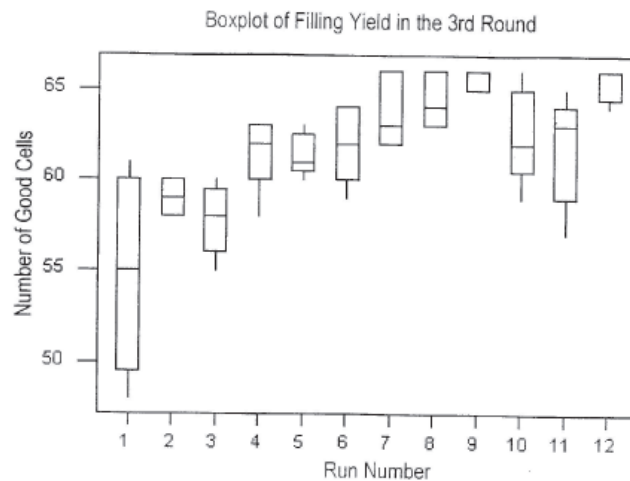
Αριθμός Επανάλ.	Παράγοντες				
	I (V)	II (F)	III (T)	IV (L)	V (S)
25	14	7	6	23	2
26	14	9	6	23	2
27	14	11	6	23	2
28	18	7	6	23	2
29	18	9	6	23	2
30	18	11	6	23	2
31	20	7	6	23	2
32	20	9	6	23	2
33	12	7	6	23	2
34	12	11	6	23	2
35	22	11	6	23	2
36	16	9	6	23	2

Πίνακας 4.8: Αποτελέσματα πειράματος

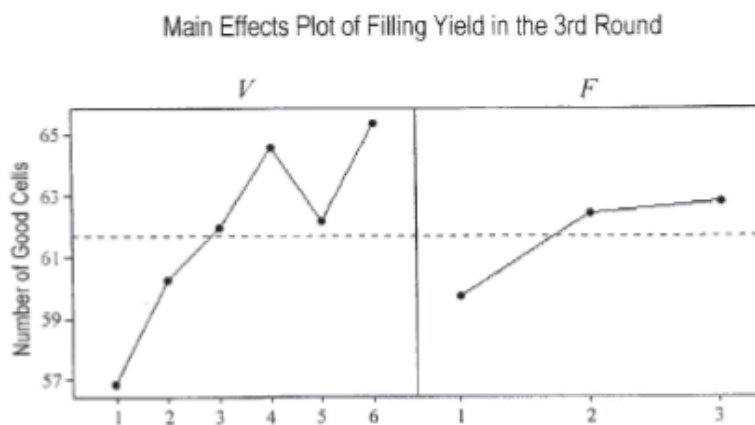
1	Δοχεία				Mean	S.D.
	2	3	4	5		
55	57	60	58	59	57.8	1.92
58	62	62	63	63	61.6	2.07
60	61	61	62	63	61.4	1.14
62	62	66	63	66	63.8	2.05
64	63	63	66	66	64.4	1.52
65	66	66	66	65	65.6	0.55
59	62	62	64	66	62.6	2.61
57	61	63	63	66	61.8	3.03
48	51	55	59	61	54.9	5.40
58	58	60	59	60	59.0	1.00
65	66	64	66	66	65.4	0.89
59	61	62	64	64	62.0	2.12

Η βέλτιστη επανάληψη είναι η 30^η στην οποία ο παράγοντας V λαμβάνει την τιμή 18 (ενδιάμεση) και ο παράγοντας F λαμβάνει την τιμή 11 (υψηλή) ενώ παρουσιάζει και τη μέγιστη μέση τιμή (Mean = 65.6) και την χαμηλότερη τυπική απόκλιση (S.D.=0.55).

Οι παραπάνω παρατηρήσεις μπορούν να παρουσιαστούν και με τα επόμενα σχήματα:



Σχήμα 4.7: Αριθμός καλών κελιών ανά επανάληψη (3^η φάση)



Σχήμα 4.8: κύριες επιδράσεις (3^η φάση)

4.3 Σχολιασμός του πειράματος

Έχοντας στο μυαλό μας όλα τα παραπάνω συμπεράσματα από τις τρεις φάσεις του πειράματος που πραγματοποιήθηκαν, μπορούμε αρχικά να εντοπίσουμε τις τρεις καλύτερες επαναλήψεις από όλες τις φάσεις του πειράματος, που φαίνονται παρακάτω:

Πίνακας 4.9: Βέλτιστες επαναλήψεις και από τις τρεις φάσεις

Αριθμός επανάλ	V	F	T	L	S	Mean	S.D.
1	16	11	6	23	3	66	0
24	20	11	6	23	2	65.9	0.45
30	18	11	6	23	2	65.6	0.55

Παρατηρούμε ότι οι τιμές των παραγόντων F, T, και L είναι οι ίδιες και στις τρεις επαναλήψεις. Αν θέλαμε να βρούμε τη βέλτιστη όλων των επαναλήψεων σίγουρα είναι η 1^η η οποία προέρχεται από τον ομοιόμορφο σχεδιασμό, αφού μας δίνει μέση τιμή 66 και τυπική απόκλιση 0. Επίσης σε αυτή την επανάληψη ο παράγοντας V λαμβάνει τη χαμηλότερη τιμή σε σχέση με τις άλλες δυο και αυτό είναι αρκετά συμφέρον και βολικό από κατασκευαστικής άποψης αφού σηματοδοτεί χαμηλό χρονικό διάστημα κατά το οποίο ο θάλαμος παραμένει κενός άρα και συντόμευση της όλης διαδικασίας.

Έτσι φθάνουμε στο σημείο να υιοθετήσουμε τα αποτελέσματα της 1^{ης} επανάληψης για την κατασκευή των οθονών υγρών κρυστάλλων.

Τα αποτελέσματα αυτά βρέθηκαν με χρήση του ομοιόμορφου σχεδιασμού γεγονός που μας δείχνει πόσο χρήσιμοι αλλά και αποτελεσματικοί είναι οι συγκεκριμένοι σχεδιασμοί. Ιδιαίτερα δε όταν οι πόροι για την εκτέλεση πειραμάτων είναι περιορισμένοι, οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί με την ικανότητά τους να επιλέγουν σημεία ομοιόμορφα κατανομημένα σε όλο το χώρο του πειράματος και να εκτελούν σχετικά μικρό αριθμό επαναλήψεων ακόμα και όταν ο αριθμός των παραγόντων είναι μεγάλος, αποτελούν ιδανική επιλογή.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

Σε αυτό το κεφάλαιο θα ασχοληθούμε με ένα άλλο τρόπο μελέτης ενός πειράματος. Θα χρησιμοποιήσουμε και πάλι το πείραμα των οθονών υγρών κρυστάλλων, LCD, για να εξάγουμε κάποια συμπεράσματα. Κύριο μέλημά μας θα είναι η μελέτη μιας συνάρτησης ποινής (penalty function) της επονομαζόμενης SCAD (Smoothly Clipped Absolute Deviation – ομαλά περικομμένη απόλυτη απόκλιση).

5.1 Συναρτήσεις ποινής

Έστω ότι έχουμε μια συνάρτηση $f(x) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ την οποία πρέπει να βελτιστοποιήσουμε (είτε να την μεγιστοποιήσουμε, είτε να την ελαχιστοποιήσουμε). Έστω επίσης ότι το πρόβλημα το οποίο μελετάμε θέτει κάποιους περιορισμούς:

$$g(x) = g(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq, =, \geq 0$$

στη βελτιστοποίηση αυτή. Αν λάβουμε ως δεδομένο ότι οι περιορισμοί μας είναι της μορφής $g(x) \leq 0$ τότε ισχύουν τα ακόλουθα:

Ορισμός 5.1.1

Συνάρτηση ποινής ονομάζεται κάθε μαθηματική έκφραση $p_j(x) \geq 0$ έτσι ώστε:

$$p_j(x) = 0 \text{ αν } g_j(x) \leq 0$$

$$p_j(x) > 0 \text{ αν } g_j(x) > 0.$$

Χρησιμοποιώντας συναρτήσεις ποινής για όλους τους περιορισμούς $g_j(x) \leq 0$ η μελέτη μας ανάγεται στη μελέτη του παρακάτω προβλήματος βελτιστοποίησης χωρίς άλλους περιορισμούς:

$$\min \varphi(x) = f(x) + \sum_{j=1}^m p_j(x).$$

Ας θεωρήσουμε τώρα το παρακάτω πρόβλημα γραμμικής παλινδρόμησης:

$$y = \mathbf{X}\beta + \varepsilon,$$

όπου $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$, και $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ με $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{id})^T$.

Η εκτιμήτρια ελαχίστων τετραγώνων επιτυγχάνεται ελαχιστοποιώντας την ποσότητα $\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta\|^2$ ή ισοδύναμα την ποσότητα $\|\hat{\beta} - \beta\|^2$, όπου $\hat{\beta} = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$. Ας ορίσουμε τώρα ως $z = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$. Τότε $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\mathbf{X}^T \mathbf{y}$.

Τότε, μια μορφή ελαχίστων τετραγώνων με ποινή (penalized least squares) είναι η ακόλουθη:

$$\frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta\|^2 + \lambda \sum_{j=1}^d p_j(|\beta_j|) = \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^d (z_j - \beta_j)^2 + \lambda \sum_{j=1}^d p_j(|\beta_j|) \quad (5.1.1)$$

όπου $\|\mathbf{a}\| = (\mathbf{a}^T \mathbf{a})^{\frac{1}{2}}$.

Δεδομένου ότι το πρόβλημα ελαχιστοποίησης που δίνεται από τη σχέση (5.1.1) είναι ισοδύναμο με την ελαχιστοποίηση κάθε παράγοντά του, μπορούμε να θεωρήσουμε αντ' αυτού το παρακάτω πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων με ποινή:

$$\frac{1}{2} (z - \beta)^2 + p_\lambda(|\beta|) \quad (5.1.2)$$

Να σημειώσουμε εδώ ότι εν γένει οι συναρτήσεις ποινής $p_j(\cdot)$ δεν είναι κατ' ανάγκη ίδιες για όλα τα j . Έτσι, για παράδειγμα, σε μεταβλητές οι οποίες θεωρούνται σημαντικές για ένα πείραμα, μπορούμε να κρατήσουμε τις παραμέτρους τους χωρίς ποινή.

Το λ είναι μια παράμετρος που ρυθμίζει την πολυπλοκότητα του μοντέλου. Υπολογίζεται από μεθόδους που βασίζονται στα δεδομένα του εκάστοτε προβλήματος όπως για παράδειγμα η μέθοδος GCV (Generalized Cross Validation).

Να σημειώσουμε εδώ για την GCV, πως πρόκειται για μια μέθοδο κατά την οποία σε κάθε επανάληψη της από τα n δεδομένα του πειράματος αφαιρούμε το ένα και έπειτα με τα υπόλοιπα $n-1$ προσπαθούμε να κάνουμε σωστή πρόβλεψη. Σε κάθε πραγματοποίηση του πειράματος υπάρχει ένας ρυθμιστικός παράγοντας λ . Το καλύτερο μοντέλο επιλέγεται να είναι αυτό που έχει κάνει την βέλτιστη πρόβλεψη.

Στην μελέτη μας θα θεωρήσουμε χάριν απλότητας ότι οι συναρτήσεις ποινής είναι ίδιες για όλες τις παραμέτρους, $p_j(\cdot)$. Επίσης ορίζουμε $p_\lambda(\cdot) = \lambda p(\cdot)$.

Μερικές συναρτήσεις ποινής είναι οι ακόλουθες:

- Η ποινή L_0 με τύπο: $p_{\lambda_n}(|\theta|) = \frac{1}{2} \lambda_n^2 I(|\theta| \neq 0)$, όπου $I(\cdot)$ είναι η δείκτρια συνάρτηση.
Με αυτό τον τύπο, και για τις διάφορες τιμές του λ_n προκύπτουν διαφορετικά κριτήρια επιλογής μεταβλητών. Έτσι, για παράδειγμα, για $\lambda_n = \sqrt{2} \left(\frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right)$ προκύπτει το κριτήριο AIC, ενώ για $\lambda_n = \sqrt{\log n} \left(\frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right)$ προκύπτει το κριτήριο BIC.
- Η οικογένεια ποινών L_p με τύπο: $p_{\lambda_n}(|\theta|) = \lambda_n p^{-1} |\theta|^p$. Εδώ έχουμε τις εξής περιπτώσεις:
 - α) για $p = 2$, η L_2 αποτελεί την παλινδρόμηση κορυφογραμμής (ridge regression),
 - β) για $0 < p < 1$, η L_p αποτελεί την παλινδρόμηση γέφυρας (bridge regression),
 - γ) για $p = 1$, η L_1 οδηγεί στη μέθοδο LASSO.

Να σημειώσουμε εδώ ότι το άθροισμα $\sum_{j=1}^d I(|\beta_j| \neq 0)$ εκφράζει το σύνολο των μη μηδενικών όρων του β .

Μια συνάρτηση ποινής, για να θεωρείται καλή, πρέπει να ικανοποιεί τις τρεις ακόλουθες ιδιότητες:

1. Να είναι αραιή. Αυτό πρακτικά σημαίνει πως η εκτιμήτρια που θα προκύπτει θα πρέπει να μηδενίζει όσους από τους συντελεστές προκύπτουν να είναι πολύ κοντά στο μηδέν ούτως ώστε να μειώσει την πολυπλοκότητα του μοντέλου. Θα πρέπει λοιπόν να έχει ένα κατώτατο όριο τιμών με βάση το οποίο θα «αποφασίζει» την τιμή του συντελεστή.
2. Να είναι αμερόληπτη. Η εκτιμήτρια που θα προκύψει θα πρέπει να είναι σχεδόν αμερόληπτη όταν οι πραγματικοί άγνωστοι συντελεστές που θα προκύπτουν είναι μεγάλοι, ώστε να αποφευχθεί οποιαδήποτε προκατάληψη μέσα στο μοντέλο.

3. Να είναι συνεχής. Η εκτιμήτρια που θα προκύψει θα πρέπει να είναι συνεχής έτσι ώστε να αποφευχθεί οποιαδήποτε αστάθεια στην πρόβλεψη του μοντέλου.

Για τη σχέση (5.1.2) αποδεικνύονται τα παρακάτω:

- $p'_\lambda(|\beta|) = 0$ για μεγάλα $|\beta|$ είναι μια ικανή συνθήκη αμεροληψίας για τους μεγάλους συντελεστές, όπου p'_λ είναι η παράγωγος πρώτης τάξης της p_λ ,
- $\min\{|\beta| + p'_\lambda(|\beta|)\} > 0$ αποτελεί το κατώτατο όριο που χρειάζεται η συνάρτηση ποινής έτσι ώστε να είναι αραιή,
- η παραπάνω τιμή ελαχίστου να επιτυγχάνεται στο 0, είναι η αναγκαία συνθήκη ώστε να επιτευχθεί η συνέχεια της συνάρτησης ποινής.

Οι συναρτήσεις ποινής L_p , ($0 \leq p < \infty$) στις οποίες αναφερθήκαμε πριν δεν ικανοποιούν τις τρεις παραπάνω ιδιότητες αραιότητας, αμεροληψίας και συνέχειας ταυτόχρονα. Έτσι, για παράδειγμα, η L_1 δεν ικανοποιεί τη συνθήκη αμεροληψίας για μεγάλους συντελεστές, ενώ η L_2 δεν ικανοποιεί τη συνθήκη αραιότητας και αμεροληψίας.

Για αυτό το λόγο προτάθηκε μια νέα συνάρτηση ποινής, η συνάρτηση SCAD για την οποία και θα μιλήσουμε στη συνέχεια.

5.2 Η συνάρτηση ποινής SCAD

Η συνάρτηση SCAD προτάθηκε από τους Fan και Li (2001) ως μια συνάρτηση ποινής η οποία μπορεί να ικανοποιήσει τις συνθήκες αραιότητας, αμεροληψίας και συνέχειας.

Η μέθοδος αυτή όπως θα δούμε στη συνέχεια, έχει δύο άγνωστες παραμέτρους: λ και a . Το λ αποτελεί μια ρυθμιστική παράμετρο η οποία επιλέγεται μέσω της μεθόδου GCV ενώ το a μπορεί να πάρει διάφορες τιμές, με $a > 2$. Όμως οι Fan και Li (2001) πρότειναν μετά από σχετική μελέτη ως καλύτερη τιμή το $a = 3.7$.

Η συνάρτηση ποινής SCAD είναι η ακόλουθη:

$$p_\lambda(|\beta|) = \lambda \begin{cases} |\beta| & , 0 \leq |\beta| \leq \lambda \\ -\frac{1}{2(a-1)\lambda}(\beta^2 - 2a\lambda|\beta| + \lambda^2), & \lambda < |\beta| \leq a\lambda \\ \frac{1}{2}(a+1)\lambda^2 & , |\beta| > a\lambda. \end{cases}$$

Η παράγωγός της δίνεται από τον παρακάτω τύπο:

$$p'_\lambda(|\beta|) = \lambda \left\{ I(\beta \leq \lambda) + \frac{(a\lambda - \beta)_+}{(a-1)\lambda} I(\beta > \lambda) \right\},$$

για $a > 2$ και $\beta > 0$.

Η έκφραση $(a\lambda - \beta)_+$ δηλώνει ότι σε περίπτωση που η τιμή του ορίσματος είναι αρνητική, τότε θα εκχωρηθεί η τιμή 0 σε αυτό.

Η λύση που προκύπτει για την εκτιμήτρια $\hat{\beta}$ μέσω της παραπάνω μεθόδου είναι η ακόλουθη:

$$\hat{\beta} = \begin{cases} \text{sing}(z)(|z| - \lambda) & , |z| \leq 2\lambda \\ \frac{1}{a-2}((a-1)z - \text{sing}(z)a\lambda), & 2\lambda < |z| \leq a\lambda \\ z & , |z| > a\lambda. \end{cases}$$

Η παραπάνω συνάρτηση ποινής αφήνει τις μεγάλες τιμές της παραμέτρου β χωρίς μεγάλη ποινή, και έτσι η λύση είναι συνεχής και αμερόληπτη. Επίσης μηδενίζει τις παραμέτρους που είναι κοντά στο μηδέν ικανοποιώντας τη συνθήκη αραιότητας. Με αυτό τον τρόπο ικανοποιεί και τις τρεις απαιτήσεις που χρειάζονται ώστε να θεωρηθεί ικανοποιητική μια τέτοια συνάρτηση.

Να σημειωθεί εδώ ότι η συνάρτηση ποινής SCAD ικανοποιεί και την ιδιότητα μαντέματος (oracle property). Ας δούμε αμέσως τώρα τι σημαίνει αυτό:

Έστω ότι το μοντέλο μας περιγράφεται από την παρακάτω σχέση:

$$y = \mathbf{X}_1\beta_1 + \mathbf{X}_2\beta_2 + \varepsilon.$$

Παρατηρούμε ότι η μεταβλητή \mathbf{X} είναι χωρισμένη σε δύο μέρη: $\mathbf{X} = (\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2)$. Χωρίς βλάβη της γενικότητας μπορούμε να υποθέσουμε ότι οι παράγοντες \mathbf{X}_1 είναι ενεργοί, ενώ οι παράγοντες \mathbf{X}_2 είναι μη ενεργοί. Οι ιδανικές εκτιμήτριες $\hat{\beta}$ που θα έχουν την ιδιότητα μαντέματος είναι οι ακόλουθες:

$$\hat{\beta}_1 = (\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}_1^T y \text{ και } \hat{\beta}_2 = 0.$$

Οι εκτιμήτριες αυτές προσδιορίζουν επακριβώς το μοντέλο και μας δίνουν τους συντελεστές της παλινδρόμησης που σχετίζονται με το \mathbf{X}_1 . Αυτή είναι μια πολύ καλή ιδιότητα για τα μοντέλα επιλογής μεταβλητών και έχει αποδειχθεί ότι η μέθοδος SCAD για κατάλληλες τιμές του λ_n την ικανοποιεί ασυμπτωτικά.

Η επίλυση ενός μη κυρτού προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων με ποινή είναι μια αρκετά δύσκολη διαδικασία αφού η συνάρτηση είναι μη κυρτή και το πρόβλημα ενδέχεται να έχει πολλές διαστάσεις. Χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος Newton Raphson, όμως λόγω του ότι η συνάρτηση που προκύπτει με τη μέθοδο SCAD δεν έχει πάντα δεύτερη παράγωγο η οποία είναι απαραίτητη για την εφαρμογή τη μεθόδου, γίνεται η εξής προσέγγιση:

Ξεκινάμε έχοντας μια αρχική τιμή $\beta^{(0)}$ κοντά στην πραγματική τιμή β . Όταν η τιμή $\beta_j^{(0)}$ δεν είναι κοντά στο μηδέν, προσεγγίζουμε τη συνάρτηση ποινής $p_\lambda(|\beta_j|)$ από την παρακάτω τετραγωνική συνάρτηση:

$$p_{\lambda_n}(|\beta_j|) \approx p_{\lambda_n}(|\beta_j^{(0)}|) + \frac{1}{2} \left(\frac{p'_{\lambda_n}(|\beta_j^{(0)}|)}{|\beta_j^{(0)}|} \right) (\beta_j^2 - \beta_j^{(0)2}), \quad (5.2.1)$$

αλλιώς θέτουμε $\hat{\beta}_j = 0$. Με την παραπάνω προσέγγιση μπορούμε να βρούμε επαναληπτικά τη λύση στο πρόβλημα ελαχίστων τετραγώνων με ποινή κάνοντας χρήση της παλινδρόμησης κορυφογραμμής από τη σχέση:

$$\beta^{(1)} = \left\{ \mathbf{X}^T \mathbf{X} + n \Sigma_\lambda(\beta^{(0)}) \right\}^{-1} \mathbf{X}^T y, \quad (5.2.2)$$

όπου

$$\Sigma_{\lambda}(\boldsymbol{\beta}^{(0)}) = \text{diag} \left\{ \frac{p_{\lambda_1}(|\boldsymbol{\beta}_1^{(0)}|)}{|\boldsymbol{\beta}_1^{(0)}|}, \dots, \frac{p_{\lambda_d}(|\boldsymbol{\beta}_d^{(0)}|)}{|\boldsymbol{\beta}_d^{(0)}|} \right\}.$$

Τέλος, πρέπει να γίνει η επιλογή της ρυθμιστικής παραμέτρου λ_n . Με βάση τις παραπάνω σχέσεις, η προσαρμοσμένη τιμή του y είναι:

$$\hat{y} = \mathbf{X} \left\{ \mathbf{X}^T \mathbf{X} + n \Sigma_{\lambda_n}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) \right\}^{-1} \mathbf{X}^T y$$

με πίνακα προβολής

$$\mathbf{P}_{\mathbf{X}} \left\{ \hat{\boldsymbol{\beta}}(\lambda) \right\} = \mathbf{X} \left\{ \mathbf{X}^T \mathbf{X} + n \Sigma_{\lambda}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) \right\}^{-1} \mathbf{X}^T.$$

Ορίζουμε τώρα ως $e(\lambda) = \text{tr} \left[\mathbf{P}_{\mathbf{X}} \left\{ \hat{\boldsymbol{\beta}}(\lambda) \right\} \right]$. Από τη γενικευμένη μέθοδο GCV προκύπτει ότι:

$$\text{GCV}(\lambda) = \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}(\lambda)\|^2}{[n - e(\lambda)]^2} \quad (5.2.3)$$

και από την παραπάνω σχέση λαμβάνουμε την εκτιμήτρια $\hat{\lambda}_n$ της λ_n :

$$\hat{\lambda}_n = \text{argmin}_{\lambda} \left\{ \text{GCV}(\lambda) \right\}. \quad (5.2.4)$$

Διαδικασία επιλογής μεταβλητών

Δοθήσης της τιμής της παραμέτρου λ_n και μιας αρχικής τιμής για το β μπορούμε να υπολογίσουμε επαναληπτικά την παλινδρόμηση κορυφογραμμής από τη σχέση (5.2.2.) ανανεώνοντάς την μέσω της σχέσης (5.2.1) σε κάθε επαναληπτικό βήμα. Μέσω αυτής της διαδικασίας, μερικοί όροι θα καταλήξουν να είναι μηδενικοί. Αυτοί οι παράγοντες θα είναι οι συντελεστές των μη ενεργών παραγόντων του πειράματος. Έτσι, μόνο οι μη μηδενικοί όροι θα αντιστοιχούν στους ενεργούς παράγοντες, σε αυτούς δηλαδή που πραγματικά επηρεάζουν τα αποτελέσματα του πειράματος.

5.3 Ανάλυση του πειράματος LCD

Θα επανέλθουμε τώρα στο παράδειγμα της μελέτης των οθονών υγρών κρυστάλλων LCD και θα εφαρμόσουμε σε αυτό τη μέθοδο SCAD.

Στον παρακάτω πίνακα δίνονται η μέση τιμή και η τυπική απόκλιση των πέντε μεταβλητών του πειράματος:

Πίνακας 5.1: Αποτελέσματα πειράματος υγρών κρυστάλλων

	<i>V</i>	<i>F</i>	<i>T</i>	<i>L</i>	<i>S</i>
Mean	20	13	6	12	2
SD	2.8475	2.8475	1.4237	8.6603	0.7119

Για να αποφευχθεί κίνδυνος να παρουσιαστεί αριθμητική αστάθεια, οι ελεγχόμενες μεταβλητές έχουν τυποποιηθεί. Τις τυποποιημένες τιμές θα τις συμβολίζουμε V_Z, F_Z, T_Z, L_Z, S_Z .

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (5.2.3) και (5.2.4) υπολογίζουμε την παράμετρο λ και λαμβάνουμε την τιμή $\hat{\lambda} = 0.6099$. Με αυτή την τιμή μπορούμε να εκτιμήσουμε τους συντελεστές του μοντέλου, όπως επίσης την τυπική απόκλιση και την p -τιμή.

Τα αποτελέσματα που υπάρχουν στον Πίνακα 5.2 μας δείχνουν όλους τους στατιστικά σημαντικούς παράγοντες, σε επίπεδο σημαντικότητας $p = 0.05$.

Το μοντέλο που προκύπτει με βάση τον παρακάτω πίνακα είναι το ακόλουθο:

$$\hat{f} = 52.5231 - 9.6258F_Z + 9.9433S_Z - 2.1342L_Z - 9.5534T_Z^2 + 7.9921T_Z \times L_Z - 2.6838V_Z \times L_Z - 2.5289V_Z \times T_Z.$$

Πίνακας 5.2: Στατιστικά σημαντικοί παράγοντες του πειράματος

X-variable	Estimate	Standard Error	P-value
Intercept	52.5231	1.5146	0.0000
F_z	-9.6258	0.8790	0.0000
S_z	9.9433	1.0042	0.0000
L_z	-2.1342	0.8296	0.0123
T_z^2	-9.5534	1.3683	0.0000
$T_z * L_z$	7.9921	1.0267	0.0000
$V_z * L_z$	-2.6838	0.9715	0.0074
$V_z * T_z$	-2.5289	1.1491	0.0312

Από αυτό το μοντέλο, και με σκοπό τη βελτιστοποίηση της παραγωγικής διαδικασίας στο πείραμά μας, μπορούμε να παρατηρήσουμε τα εξής:

- Η μεταβλητή F η οποία περιγράφει το χρόνο κατά τον οποίο το κελί βρίσκεται σε επαφή με τη γυάλινη ράβδο γεμίσματος πρέπει να λαμβάνει χαμηλές τιμές. Αυτή η παρατήρηση είναι σύμφωνη με τις βέλτιστες επαναλήψεις 1, 8, 12 που έγιναν με τη βοήθεια του ομοιόμορφου σχεδιασμού.
- Η μεταβλητή S η οποία περιγράφει το χρόνο κατά τον οποίο η γυάλινη ράβδος παραμένει βυθισμένη μέσα στο δοχείο των υγρών κρυστάλλων πρέπει να λαμβάνει υψηλές τιμές. Και αυτή η παρατήρηση είναι σύμφωνη με τους βέλτιστους γύρους 1 και 8 του ομοιόμορφου σχεδιασμού.
- Υπάρχουν επίσης ισχυρές αλληλεπιδράσεις δεύτερης τάξης ανάμεσα στις μεταβλητές V (περιγράφει το χρόνο κατά τον οποίο ο θάλαμος γεμίσματος παραμένει κενός), T (περιγράφει τον αριθμό των γυάλινων ινών που χρειάζεται να ενωθούν ώστε να δημιουργηθεί μια γυάλινη ράβδος) και L (περιγράφει το ύψος του υγρού μέσα στο δοχείο υγρών κρυστάλλων).

5.4 Συμπεράσματα

Όλα τα παραπάνω αποτελέσματα που έγιναν με τη χρήση της μεθόδου SCAD συνάδουν με τα συμπεράσματα που είχαμε εξάγει με τη χρήση ομοιόμορφων και στη συνέχεια ορθογώνιων σχεδιασμών. Οδηγούμαστε λοιπόν στο συμπέρασμα ότι η χρήση των ομοιόμορφων σχεδιασμών είναι ένα πολύ χρήσιμο και αξιόπιστο εργαλείο.

Με την εφαρμογή των ομοιόμορφων σχεδιασμών μπορούμε να εξάγουμε ασφαλή συμπεράσματα ακόμα και σε περιπτώσεις όπου το πείραμα έχει μεγάλο αριθμό

παραγόντων ή μεγάλο αριθμό επιπέδων στους παράγοντες. Επίσης δεδομένου ότι οι σχεδιασμοί αυτοί μπορούν να δουλέψουν σωστά με τη χρήση μικρού αριθμού επαναλήψεων, είναι πολύ χρήσιμοι σε περιπτώσεις κοστοβόρων πειραμάτων ή σε περιπτώσεις πειραμάτων περιορισμένου κόστους.

ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ

L_p συνάρτηση ασυμφωνίας.....	32
L_∞ συνάρτηση ασυμφωνίας	32
ανισότητα Koksma – Hlawka	31
απόσταση hamming	46
αριθμός συναντήσεων	47
γειτονιά	75
ισομορφικοί σχεδιασμοί.....	48
λατινικό τετράγωνο.....	23
ομοιόμορφα ορθογώνιος σχεδιασμός	52
ομοιόμορφος σχεδιασμός υπό το μέτρο M	35, 37
ορθογώνια λατινικά τετράγωνα	24
ορθογώνιος σχεδιασμός	27
συνάρτηση ασυμφωνίας.....	31
συνάρτηση ασυμφωνίας Lee, LD	45
συνάρτηση ασυμφωνίας αναμειγμένη, MD	44
συνάρτηση ασυμφωνίας διακριτή, DD	45
συνάρτηση ασυμφωνίας κεντραρισμένη, CD	43
συνάρτηση ασυμφωνίας κεντρική σύνθετη, CCD	45
συνάρτηση ασυμφωνίας κυκλική, WD	44
συνάρτηση ασυμφωνίας συμμετρική, SD.....	43
συνάρτηση ασυμφωνίας τροποποιημένη, MD.....	44
συνάρτηση ποινής.....	97
συνάρτηση ποινής SCAD	100
σχεδιασμός τύπου U	34, 36
σχεδόν - ομοιόμορφος σχεδιασμός	61

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] A. S. Hedayat, N. J. A. Sloane John Stufken (1999) *Orthogonal arrays: Theory and applications*, Springer, Verlag New York.
- [2] Androulakis E., Drosou K., Koukouvinos C. and Zhou, Y. D. (2016), Measures of uniformity in experimental designs: A selective overview. *Communication in Statistics – Theory and Methods*, 45:13, 3782-3806.
- [3] Chan, Ling-Yau & Lo, Man-Leung. (2004). Quality improvement in the manufacture of liquid crystal displays using uniform design. *International Journal of Materials and Product Technology*. 20.
- [4] Dimitri Bilyk and Michael Lacey The supremum norm of the discrepancy function: recent results and connections Springer Proceedings in Mathematics & Statistics book series (PROMS, volume 65).
- [5] Ευστρατιάδης Ανδρέας, Μακρόπουλος Χρήστος (2012) *Θεμελιώδεις έννοιες βελτιστοποίησης και κλασικές μαθηματικές μέθοδοι*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις ΕΜΠ.
- [6] Fan, Jianqing & Li, Runze. (2001). Variable Selection via Nonconcave Penalized Likelihood and Its Oracle Properties. *Journal of the American Statistical Association*. 96. 1348 – 1360.
- [7] Fang, K. T., Li, R., Sudjianto, A., (2006) *Design and Modeling for Computer Experiments*. Taylor and Francis Group, LLC Chapman and Hall/ CRC
- [8] Fang, K.T. (1980). The uniform design: application of number – theoretic methods in experimental design, *Acta Math. Appl. Sinica* 3, 363-372.
- [9] Fang, K.T. and Mo, C.X. (2001), Wrap – around L_2 - discrepancy of random sampling, Latin Hypercube and uniform designs, *J. complexity*, 608 – 624.
- [10] Fang, K.T. and Lin, D.K.J. (2003). Uniform designs and their applications in industry, in Handbook on Statistics 22: *Statistics in Industry*, Eds by R. Khattree and C.R. Rao, Elsevier, North – Holland, 131-170.
- [11] Fang, Kai – Tai & Lu, Xuan & Winker, Peter. (2003). Lower bounds for centered and wrap – around L_2 - discrepancies and construction of uniform designs by threshold accepting. *Journal of Complexity*. 19. 692-711. 10.1016/S0885-064X(03)00067-0.
- [12] Fang, Kai – Tai & Ma, Changxing & Winker, Peter. (2000). Centered L_2 - Discrepancy of Random Sampling and Latin Hypercube Design, and Construction of Uniform Designs, *Mathematics of Computation*. 71. 275 – 296.
- [13] Fang, Kai – Tai, Runze Li, Agus Sudjianto (2006), *Design and modeling for computer experiments*, Chapman & Hall / CRC Taylor & Francis group, USA.

- [14] Hickernell, F. J. (1988) A generalized discrepancy and quadrature error bound. *Math. Comput.* 67, 299-322.
- [15] Kai – Tai Fang, Dennis K.J. Lin, Peter Winker & Yong Zhang (2012) Uniform Design: Theory and Application, *Technometrics* 42:3, 237-248.
- [16] Κουκουβίνος Χ. (2005) *Γραμμικά Μοντέλα και Σχεδιασμοί*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις ΕΜΠ.
- [17] Κουκουβίνος Χ. (2005) *Στατιστικοί Σχεδιασμοί*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις ΕΜΠ.
- [18] Κουκουβίνος Χ. (2008) *Στατιστικός Έλεγχος Ποιότητας*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις ΕΜΠ.
- [19] Li, R. (2002), Model Selection for analysis of uniform design and computer experiment, *Inter. J. Reliability, Quality and Safety Engineering* 9, 305 – 315.
- [20] Ma, C. X., K. T. Fang and D. K. J. Lin (2001) On isomorphism of factorial designs. *J. Complexity* 17, 86-97.
- [21] Ma, Changxing & Fang, Kai – Tai (2004) A new approach to construction of nearly uniform designs. *International Journal of Materials & Product Technology*.
- [22] Οικονόμου Πολυχρόνης, Καρώνη Χρυσή, (2005) *Ανάλυση παλινδρόμησης και ανάλυση διασποράς με το Minitab*, Τομέας Μαθηματικών ΣΕΜΦΕ, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις ΕΜΠ.
- [23] Runchu Zhang, (1996), On a transformation method in constructing multivariate uniform design, *Statistica Sinica* Vol. 6, No. 2(1996), pp 455 – 469.
- [24] Runze Li, Dennis K.J. Lin, Yan Chen, (2004), Uniform design analysis and application, *Int. J. Materials and Product Technology*.
- [25] Russel E. Caflish, (1998), Monte Carlo and quasi Monte Carlo methods, *Acta Numerica*, University Press, 1- 49.
- [26] Wang, Y. and Fang, K.T. (1996), Uniform design of experiments with mixtures, *Science in China (Series A)*, 39 264 – 275.
- [27] Wang, Y. and Fang. K. T. (1981), A note on uniform distribution and experimental design, *KeXue TongBao* 26, 485-489.
- [28] Wang, Y. and K. T. Fang (1990). Number theoretic methods in applied statistics (II). *Chinese Ann. Math. Ser. B.* 11, 41-55.
- [29] Warnock, T. T. (1972) *Computational investigations of low discrepancy point sets*. In Application of Number Theory to Numerical Analysis, p.p. 319-343 (Ed. S. K. Zaremba). Academic Press, New York.
- [30] Yi – Zeng Liang, Kai – Tai Fang, Qing – Song Xu (2001) Uniform design and its applications in chemistry and chemical engineering, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 58, 1, 43 – 57.

- [31] Yoon, Young Joo & Song, Moon – Sup. (2005) Variable Selection Via Penalized Regression. *Communications for Statistical Applications and Methods*. 12. 615 – 624.
- [32] Zhou, Y. – D., Fang, K.T. (2013). An efficient method for constructing uniform designs with large size. *Comput. Stat.* 28:1319 – 1331.
- [33] en.wikipedia.org/wiki/Quasi_MonteCarlomethod.
- [34] <http://www.math.hkbu.edu.hk/UniformDesign>
- [35] <https://onlinecourses.science.psu.edu/stat503/node121>