ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΙΓΑΙΟΥ
ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ

Σχεδιασμός και Ανάλυση Πειραμάτων

Διδακτορική Διατριβή

Ευθυμίου Ιφιγένεια

iefthimiou@aegean.gr

Καρλόβασι, 2015

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΙΓΑΙΟΥ
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ

Σχεδιασμός και Ανάλυση Πειραμάτων

Διδακτορική Διατριβή
για την απόκτηση Διδακτορικού Διπλώματος του Τμήματος Μαθηματικών
του Πανεπιστημίου Αιγαίου

Ευθυμίου Ιφιγένεια

ΤΡΙΜΕΛΗΣ ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ

Ξανθόπουλος Στέλιος
Επίκουρος Καθηγητής Τμήματος Μαθηματικών
(Επιβλέπων Καθηγητής)

Καραγρηγορίου Αλέξανδρος
Καθηγητής Τμήματος Μαθηματικών
(Μέλος)

Χατζησπύρος Σπύρος
Επίκουρος Καθηγητής Τμήματος Μαθηματικών
(Μέλος)

ΕΠΤΑΜΕΛΗΣ ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ

Γεωργίου Στέλιος
Senior Lecturer School of Mathematical and Geospatial Sciences,
Building 8, Level 9, Room 74 RMIT University Melbourne, Victoria 3000
(Μέλος)

Δημητράκος Θεοδόσης
Λέκτορας Τμήματος Μαθηματικών Πανεπιστημίου Αιγαίου
(Μέλος)

Ευαγγελάρας Χαράλαμπος
Επίκουρος Καθηγητής Τμήματος Στατιστικής και Ασφαλιστικής
Επιστήμης Πανεπιστημίου Πειραιώς
(Μέλος)

Καραγρηγορίου Αλέξανδρος
Καθηγητής Τμήματος Μαθηματικών Πανεπιστήμιου Αιγαίου
(Μέλος)

Ξανθόπουλος Στέλιος
Επίκουρος Καθηγητής Τμήματος Μαθηματικών Πανεπιστήμιου Αιγαίου
(Μέλος)

Στυλιανού Στέλλα
Lecturer RMIT University Bundoora East Campus, Melbourne, Australia.
(Μέλος)

Χατζησπύρος Σπύρος
Επίκουρος Καθηγητής του Τμήματος Μαθηματικών Πανεπιστήμιου Αιγαίου
(Μέλος)

Περιεχόμενα

Πρόλογος - Ευχαριστίες 9

1 Βασικές Έννοιες 15

1.1 Εισαγωγή 15
1.2 Πίνακες $Hadamard$ 15
1.2.1 Ισοδύναμοι Πίνακες 17
1.2.2 Κανονικοποιημένος Πίνακας - Normalized Hadamard Matrix 17
1.2.3 Ιδιότητες Πινάκων Hadamard 19
1.3 Κατασκευές Πινάκων $Hadamard$ 19
1.4 Απλό Γραμμικό Μοντέλο 24
1.4.1 Εκτιμητές των $\beta_0, \beta_1, \sigma^2$ 25
1.4.2 Ιδιότητες των εκτιμητών 26
1.4.3 Πολλαπλή Γραμμική Παλινδρόμηση 27
1.5 Πολλαπλό Γραμμικό Μοντέλο 28
1.5.1 Εκτιμητές Ελαχίστων Τετραγώνων στο πολλαπλό γραμμικό μοντέλο 30
1.6 Πολυωνυμικό Μοντέλο 32
1.6.1 Πειράματα Κρησαρίσματος 33
1.6.2 Κριτήρια Μεθόδων Κρησαρίσματος 34

2 Κλασσικοί Πειραματικοί Σχεδιασμοί 35

2.1 Πειραματικοί Σχεδιασμοί 35
2.2 Παραγοντικοί Πειραματικοί Σχεδιασμοί με δύο ή περισσότερα επίπεδα 37
2.2.1 Παραγοντικοί Σχεδιασμοί με Τρία ή Περισσότερα Επίπεδα 43
2.2.2 2^k Παραγοντικοί Σχεδιασμοί 44

2.2.3 Γραμμικό Μοντέλο για τους 2^2 Παραγοντικούς Σχεδιασμούς . . . 46
2.2.4 Γραμμικό Μοντέλο για τους 2^k Παραγοντικούς Σχεδιασμούς . . . 55
2.2.5 Ομοιομορφία (Uniformity) . . . 55
2.3 Κλασματικοί Παραγοντικοί Σχεδιασμοί με δύο επίπεδα . . . 56

3 Σχεδιασμοί Λατινικών Υπερκύβων 59
3.1 Εισαγωγή . . . 59
3.2 Kriging Μοντέλο . . . 59
3.2.1 Εισαγωγή . . . 59
3.2.2 Περιγραφή Μοντέλου . . . 60

4 Ορθογώνιοι Σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων 65
4.1 Εισαγωγή . . . 68
4.2 Αξιολόγηση Πειραμάτων Με Υπολογιστές . . . 71
4.3 Γενική Κατασκευή . . . 75
4.3.1 Αλγόριθμος . . . 76
4.3.2 Αποτελέσματα και Παραδείγματα . . . 77
4.4 Τεχνικές Πολλαπλασιασμού - Συγκρίσεις . . . 86
4.5 Ιδιότητες των Σχεδιασμών . . . 87

5 Σχεδόν Ορθογωνίοι Σχεδιασμοί Λατινικών Υπερκύβων 93
5.1 Γενική Κατασκευή . . . 93
5.1.1 Αποτελέσματα και Παραδείγματα . . . 98
5.2 Συμπεράσματα . . . 101

6 Εμφωλευμένοι (Τεμαχισμένοι) Σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων 103
6.1 Εισαγωγή . . . 103
6.2 Γενική Κατασκευή . . . 105
6.2.1 Αλγόριθμοι . . . 105
6.2.2 Γενικό Θεώρημα . . . 107
6.3 Κατασκευές νέων σχεδιασμών . . . 108
6.4 Παραδείγματα . . . 108
6.5 Σχεδόν Ορθογώνιοι Εμφωλευμένοι Σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων . . . 112
6.5.1 Αλγόριθμοι . . . 112
6.5.2 Γενικό Θεώρημα . . . 114
6.6 Συμπεράσματα . . . 117

Βιβλιογραφία **119**

Α′ Αλγόριθμοι -Πρόγραμμα σε γλώσσα $Matlab$ **125**

Α′.1 Πρόγραμμα για την κατασκεύη OLHD kai NOLHD 125
Α′.2 Πρόγραμμα για την κατασκευή Goeithal-Seidel Matrix 127
Α′.3 Πρόγραμμα για την κατασκευή Kharaghani Array 128
Α′.4 Πρόγραμμα για την κατασκευή Amicability 129
Α′.5 Πρόγραμμα για την κατασκευή Is LHD 143
Α′.6 Πρόγραμμα για την κατασκευή OLHD 143
Α′.7 Πρόγραμμα για την κατασκευή Example 3 149
Α′.8 Πρόγραμμα για την κατασκευή Example 4 150
Α′.9 Πρόγραμμα για την κατασκευή Example 5 152
Α′.10Πρόγραμμα για την κατασκευή NOHLD 153

Ευρετήριο **154**

Πρόλογος - Ευχαριστίες

Τα πειράματα με υπολογιστές (Computer Experiments) και πιο συγκεκριμένα οι σχεδιασμοί ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων (Orthogonal Latin hypercube designs) εμφανίζονται στην βιβλιογραφία μόνο για πειράματα με πλήθος δοκιμών να είναι δύναμη του 2 αφού η κατασκευή τους είναι εξαιρετικά δύσκολο πρόβλημα λόγω των περιορισμών που πρέπει να ικανοποιούν.

Σκοπός της παρούσας **διδακτορικής εργασίας** είναι η παρουσίαση νέων μεθόδων και διαδικασιών κατασκευής σχεδιασμών ορθογώνιων και σχεδόν ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων. Κατασκευάσαμε ορθογώνιους σχεδιασμούς Λατινικών υπερκύβων οι οποίοι έχουν ευέλικτο αριθμό πειραματικών εκτελέσεων. Αρχικά θα γίνει μια σύνοψη αποτελεσμάτων που αφορά την κατασκευή νέων σχεδιασμών Λατινικών Υπερκύβων (που από δω και πέρα για χάριν ευκολίας θα τους συμβολίζουμε ως LHDs), Ορθογώνιων και σχεδόν ορθογώνιων Λατινικών Υπερκύβων και Τεμαχισμένων σχεδιασμών Λατινικών Υπερκύβων και στη συνέχεια θα παρουσιαστούν τα σημαντικότερα κριτήρια μελέτης και αξιολόγησης τους.

Οι νέοι σχεδιασμοί που θα παρουσιαστούν ικανοποιούν επίσης δύο σημαντικές ιδιότητες οι οποίες είναι επιθυμητές σε τέτοιους σχεδιασμούς. Αυτές είναι η ορθογωνιότητα μεταξύ των παραγόντων και η ομοιομορφία μεταξύ των επιπέδων των μεταβλητών.

Τέλος τα προτεινόμενα κριτήρια θα υλοποιηθούν σε αλγόριθμους και προγράμματα που θα εφαρμοστούν για την εύρεση σχεδιασμών με τις δυο παραπάνω αναφερθείσες επιθυμητές ιδιότητες.

Στο **πρώτο κεφάλαιο** και πριν προχωρήσουμε στην περιγραφή και παρουσίαση των νέων μεθόδων κατασκευής μας, δηλαδή, των Ορθογώνιων και σχεδόν Ορθογώνιων σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων καθώς και των Εμφωλευμένων σχεδιασμών Λατινικών Υπερκύβων, κρίνεται σκόπιμο να παρουσιαστούν οι βασικές έννοιες και οι όροι που χρησιμοποιούνται στην παρούσα διατριβή. θα παρουσιάσουμε τα σημαντικότερα μοντέλα που χρησιμοποιηθηκαν για την ανάλυση αυτών των σχεδιασμών. Συγκεκριμένα θα περιγραφούν το Απλό και το Πολλαπλό Γραμμικό Μοντέλο καθώς και το Πολυωνυμικό Μοντέλο.

Στο **δεύτερο κεφάλαιο** αναφερόμαστε στους κλασσικούς πειραματικούς σχεδιασμούς και γίνεται μικρή ανασκόπηση των σημαντικότερων κατηγοριών τους. Παρόλα αυτά, οι σχεδιασμοί που αναφέρουμε σε αυτό το κεφάλαιο δεν είναι κατάλληλοι για πειράματα με υπολογιστές και αυτό είχε σαν επακόλουθο να αναπτυχθούν οι σχεδιασμοί που παρουσιάζονται στα επόμενα κεφάλαια.

Στο **τρίτο κεφάλαιο** θα αναφερθούμε στους σχεδιασμούς Λατινικών Υπερκύβων, τι είναι, που χρειάζονται και πιο συγκεκριμένα στην εφαρμογή τους με την βοήθεια του Kriging μοντέλου.

Στο **τέταρτο και πέμπτο κεφάλαιο** θα αναφερθούμε στους ορθογώνιους και σχεδόν ορθογώνιους σχεδιασμούς Λατινικών Υπερκύβων (Orthogonal and Near Orthogonal Latin Hypercube Designs) αντίστοιχα. Θα παρουσιάσουμε γνωστές μεθόδους κατασκευής τους και θα δούμε τις σημαντικότερες ιδιότητες τους. Στο **τέταρτο** κεφάλαιο θα προτείνουμε νεες κατασκευές και μεθόδους για LHDs ενώ στο **πέμπτο** κεφάλαιο θα επεκτείνουμε τα αποτελέσματα μας σε σχεδόν LHDs. Η νέα ιδέα πίσω από αυτές τις κατασκευές είναι η χρήση κυκλικών πινάκων σε μπλόκ δομές.

Τέλος, στο **έκτο κεφάλαιο** θα μιλήσουμε για τους Εμφωλευμένους (Τεμαχισμένους) σχεδιασμούς Λατινικών υπερκύβων (Nested Latin Hypercube Designs) οι οποίοι αποτελούν μια ειδική κατηγορία σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων, που μπορούν να οδηγήσουν σε σχεδιασμούς Λατινικών υπερκύβων μικροτέρων διαστάσεων (slices). Οι σχεδιασμοί αυτοί είναι πολύ χρήσιμοι και έχουν πολλές εφαρμογές όπως για παράδειγμα σε πειράματα με υπολογιστές που περιλαμβάνουν ποιοτικούς και ποσοτικούς παράγοντες ή πειράματα με υπολογιστές σε πολλαπλά επίπεδα. Τόσο η ορθογωνιότητα όσο και η ομοιομορφία είναι σημαντικές ιδιότητες τέτοιων σχεδιασμών.

Για την εφαρμογή των μεθόδων, έχουν αναπτυχθεί αλγόριθμοι και έχουν υλοποιηθεί τα αντίστοιχα προγράμματα σε **Matlab**. Οι κώδικες των προγραμμάτων αυτών βρίσκονται στο Παράρτημα Α΄. Εκτός από τον αλγόριθμο των μεθόδων στο παράρτημα δίνονται και προγράμματα για την κατασκευή Ορθογώνιων και σχεδόν Ορθογώνιων σχεδιασμών Λατινικών Υπερκύβων.

Ολοκληρώνοντας, η παρούσα διατριβή είναι αποτέλεσμα ερευνητικού έργου σχεδόν τεσσάρων ετών στο Τμήμα Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Αιγαίου (Σάμου). Μέρος των αποτελεσμάτων του ερευνητικού μου έργου παρουσιάστηκε με επιστημονικές ομιλίες σε Πανελλήνια Συνέδρια και με δημοσιεύσεις σε ελληνικά και διεθνή επιστημονικά περιοδικά. Βέβαια η ολοκλήρωση της διατριβής θα ήταν αδύνατη χωρίς την βοήθεια αρκετών ανθρώπων.

Καταρχήν, θα ήθελα να εκφράσω τις ειλικρινείς ευχαριστίες μου στον καθηγητή μου κύριο **Στέλιο Γεωργίου**. Τα λόγια δεν αρκούν για να περιγράψω την ευγνωμοσύνη μου για την ανεκτίμητη βοήθεια του στην ολοκλήρωση της διδακτορικής διατριβής μου και τη συνεχή καθοδήγηση. Θέλω να εκφράσω την εκτίμηση μου για την ετοιμότητα και την αποτελεσματικότητα του να μου λύσει οποιαδήποτε απορία μου. Τον ευχαριστώ ολόψυχα για την άριστη συνεργασία μας και τέλος για την υπομονή και κατανόηση που έδειξε όλα αυτά τα χρόνια της συνεργασίας μας. Του εύχομαι από ψυχής υγεία και ευτυχία τόσο στον ίδιο όσο και στην οικογενειά του.

Επίσης θα ήθελα να εκφράσω τις ειλικρινείς ευχαριστίες μου στον επιβλέποντα μου κύριο **Στέλιο Ξανθόπουλο** για τη βοήθεια του στην ολοκλήρωση αυτής της προσπάθειας.

Του εύχομαι από ψυχής υγεία και ευτυχία τόσο στον ίδιο όσο και στην οικογενειά του.

Δεν θα μπορούσα να μην ευχαριστήσω και τα άλλα μέλη της εξεταστικής επιτροπής για το ενδιαφέρον που μου έδειχναν στην διάρκεια της εξέλιξης της διδακτορικής μου εργασίας και για την διάθεση τους να με βοηθήσουν και να λύσουν οποιαδήποτε απορία μου. Τους εύχομαι από ψυχής υγεία και ευτυχία τόσο στους ίδιους όσο και στις οικογένειές τους.

Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω τους **γονείς** μου για την αστείρευτη αγάπη τους καθώς και για την συμπαράσταση και υποστήριξη που μου παρείχαν καθ΄ όλη την διάρκεια των σπουδών μου και γενικά σε κάθε στιγμή της ζωής μου.

Ως συγγραφέας της παρούσας διατριβής, είμαι αποκλειστικά υπεύθυνη για τυχόν λάθη παραλείψεις ή ασάφειες που ενδεχομένως υπάρχουν στο κείμενο.

Καρλόβασι Σάμου, 2015
Ιφιγένεια Ν. Ευθυμίου

Στους γονείς μου Νίκο και Ανδρούλα
και στα ανίψια μου
Εφραιμιάνα, Αντριάννα και Ιωάννη.

Κεφάλαιο 1

Βασικές Έννοιες

1.1 Εισαγωγή

Παρακάτω δίνονται οι ορισμοί ορισμένων βασικών εννοιών που θα χρησιμοποιήσουμε στην συνεχεια της παρούσας διατριβής.

1.2 Πίνακες $Hadamard$

Ορισμός 1 *Ένας πίνακας H λέγεται* **πίνακας Hadamard** *τάξης n αν είναι ένας $n \times n$ πίνακας με στοιχεία ± 1 που ικανοποιεί τη σχέση*

$$\mathbf{HH^T} = \mathbf{H^TH} = \mathbf{nI_n},$$

όπου H^T είναι ο ανάστροφος του H και I_n είναι ο ταυτοτικός πίνακας τάξης n.

Δηλαδή οι γραμμές και οι στήλες του H είναι **ανά δύο ορθογώνιες** *με την έννοια του* **ευκλείδειου εσωτερικού γινομένου**. *Με H_n θα συμβολίζουμε ένα πίνακα Hadamard τάξης n.*

Η τάξη ενός πίνακα Hadamard είναι απαραίτητα 1, 2 ή πολλαπλάσιο του 4,

Για περισσότερες πληροφορίες για πίνακες Hadamard δείτε A.V. Geramita and J. Seberry (1979).

Παράδειγμα 1 *Οι παρακάτω πίνακες, είναι πίνακες Hadamard τάξης* 2 *και* 4 *αντίστοιχα.*

$$H_2 = \begin{bmatrix} +1 & +1 \\ +1 & -1 \end{bmatrix}$$

πίνακας Hadamard τάξης 2*,*

$$H_4 = \begin{bmatrix} +1 & +1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & +1 & -1 \\ -1 & -1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & +1 \end{bmatrix}$$

πίνακας Hadamard τάξης 4*,*

Οι πίνακες **Hadamard** μελετήθηκαν για πρώτη φορά από τον Sylvester το 1897, ο οποίος στο σύγγραμμα του είχε βρει τέτοιους πίνακες για όλες τις δυνάμεις του 2. Αλλά, το όνομα τους όμως δεν το οφείλουν σ' αυτόν (άλλωστε είναι προφανές) αλλά στο **Γάλλο μαθηματικό Jacque Hadamard (1893)**, ο οποίος κατασκεύασε τους τετραγωνικούς πίνακες τάξης 12 και 20 με στοιχεία ± 1. Στους πίνακες αυτούς, όλες οι γραμμές και οι στήλες είναι ανά δύο ορθογώνιες. Έδειξε ότι, αν $X = (x_{ij})$ είναι ένας τετραγωνικός πίνακας τάξης n τότε:

$$|detX|^2 \leq \prod_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} |X_{ij}|^2$$

όπου με det συμβολίζουμε την ορίζουσα του πίνακα X.

Παρατηρούμε ότι αν $\mathbf{X_{ij} = \pm 1}$ τότε, από την προηγούμενη σχέση, προκύπτει ότι: $|detX|^2 \leq n^n$ ή αλλιώς $|detX| \leq n^{\frac{n}{2}}$.

Άρα, αν ο H είναι ένας Hadamard πίνακας τάξης n τότε

$$|\mathbf{detH}| = \mathbf{n^{\frac{n}{2}}},$$

δηλαδή ισχύει η ισότητα στην παραπάνω ανισότητα του Hadamard.

1.2.1 Ισοδύναμοι Πίνακες

Ορισμός 2 *Δύο πίνακες Hadamard ονομάζονται* **ισοδύναμοι** *αν ο ένας προκύπτει από τον άλλο με εναλλαγή γραμμών ή / και στηλών, ή / και πολλαπλασιασμό γραμμών ή / και στηλών με* -1.

Από έναν πίνακα **Hadamard** $\mathbf{H_n}$ με βάση τον παραπάνω ορισμό (δηλαδή τους ισοδύναμους πίνακες) μπορούμε να έχουμε μέχρι και $(\mathbf{n}!\mathbf{2}^{\mathbf{n}})^{\mathbf{2}}$ ισοδύναμους πίνακες Hadamard.

1.2.2 Κανονικοποιημένος Πίνακας - Normalized Hadamard Matrix

Ορισμός 3 *Ένας πίνακας Hadamard λέγεται* **κανονικοποιημένος** *αν όλα τα στοιχεία της πρώτης γραμμής και της πρώτης στήλης του είναι ίσα με* $+1$. *Τότε, όλες οι υπόλοιπες* $n-1$ *στήλες θα αποτελούνται από ίσο αριθμό* $+1$ *και* -1.

Ένας **κανονικοποιημένος** πίνακας προκύπτει αν πολλαπλασιάσουμε με -1 τις γραμμές και τις στήλες του πίνακα που έχουν πρώτο στοιχείο το -1. Είναι προφανές ότι ο πίνακας που προκύπτει είναι ισοδύναμος με τον αρχικό.

Παράδειγμα 2 *Έστω λοιπόν ο παρακάτω πίνακας Hadamard τάξης* 4. *Θέλουμε να βρούμε τον κανονικοποιημένο πίνακα Hadamard.*

$$H_4 = \begin{bmatrix} +1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 \end{bmatrix}$$

- **Βήμα 1** *Πολλαπλασιάζουμε την 3η γραμμή με* (-1). *Συνεπώς ο πίνακας μας θα γίνει:*

$$\xrightarrow{-r3} = \begin{bmatrix} +1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 \end{bmatrix}$$

- **Βήμα 2** *Πολλαπλασιάζουμε την 2η στήλη με* (-1). *Συνεπώς ο πίνακας μας τώρα θα γίνει:*

$$\stackrel{-C2}{\rightarrow}= \begin{bmatrix} +1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 \end{bmatrix}$$

- **Βήμα 3** *Πολλαπλασιάζουμε την 3η στήλη με* (-1). *Συνεπώς ο πίνακας μας τώρα θα γίνει:*

$$\stackrel{-C3}{\rightarrow}= \begin{bmatrix} +1 & +1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}$$

- **Βήμα 4** *Πολλαπλασιάζουμε την 4η στήλη με* (-1). *Έτσι έχουμε στην 1η γραμμή και στην 1η στήλη όλο μονάδες* $(+1)$.

$$\stackrel{-C4}{\rightarrow}= \begin{bmatrix} +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 \end{bmatrix}$$

Άρα σχηματίστηκε ο **Κανονικοποιημένος Πίνακας Hadamard τάξης** 4.

Ορισμός 4 *Ένας πίνακας Hadamard* H *ονομάζεται* **κανονικός** *(regular) αν το άθροισμα των στοιχείων κάθε γραμμής και στήλης του είναι σταθερό, έστω* K. *Τότε θα ισχύει:*

$$\mathbf{HJ} \equiv \mathbf{JH} \equiv \mathbf{KJ}$$

1.2.3 Ιδιότητες Πινάκων Hadamard

Συνοπτικά, κάποιες ιδιότητες των πινάκων Hadamard είναι:

1. $\mathbf{HH^T{=}H^TH{=}\ nI_n}$
   όπου, H^T είναι ο ανάστροφος του H

2. $\mathbf{|detH|{=}n^{\frac{n}{2}}}$
   όπου, det είναι η ορίζουσα του πίνακα H

3. Οι πίνακες Hadamard μπορούν να μετασχηματιστούν σε νέους πίνακες Hadamard, με πολλαπλασιασμό γραμμών ή / και στηλών με -1, ή αντιμεταθέσεις γραμμών ή / και στηλών. Οι πίνακες που προκύπτουν ονομάζονται **H-ισοδύναμοι.**

4. Κάθε πίνακας είναι **H-ισοδύναμος** (ή ισοδύναμος πίνακας) με έναν πίνακα Hadamard, ο οποίος έχει κάθε στοιχείο της πρώτης γραμμής και της πρώτης στήλης του ίσο με +1.

5. Εάν ο **H** είναι **κανονικοποιημένος** Hadamard τάξεως $4n$ τότε κάθε γραμμή/στήλη, εκτός από την πρώτη, εμφανίζει $2n$ φορές το -1 και $2n$ φορές το +1.

6. Η **τάξη** κάθε πίνακα Hadamard είναι απαραίτητα 1, **2 ή πολλαπλάσιο του** 4.

1.3 Κατασκευές Πινάκων $Hadamard$

Ορισμός 5 *Έστω $X = (x_{ij})$ και $Y = (y_{ij})$ δύο $n \times n$ πίνακες. Τότε το* **γινόμενο Hadamard** *των X και Y, είναι ο πίνακας που συμβολίζεται με $X * Y$ και ορίζεται να είναι το γινόμενο στοιχείο προς στοιχείο, δηλαδή:*

$$X * Y = (x_{ij}y_{ij}).$$

Ορισμός 6 *Έστω $A = (a_{ij})$ ένας $m \times n$ πίνακας και $B = (b_{ij})$ ένας $s \times t$ πίνακας, τότε το* **γινόμενο Kronecker** *των A και B, συμβολίζεται με $A \otimes B$ και είναι ένας $ms \otimes nt$ πίνακας, που δίνεται από τη σχέση:*

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdots & a_{mn}B \end{bmatrix}$$

όπου $a_{ij}B$ είναι το σύνηθες γινόμενο του πίνακα B επί τον πραγματικό αριθμό a_{ij}.

Λήμμα 1 *Αν A, B, C, D είναι $n \times n$ πίνακες τότε ισχύει:*

$$(A \otimes B) * (C \otimes D) = (A * C) \otimes (B * D)$$

όπου $\otimes$ είναι το **γινόμενο Kronecker** *και $*$ είναι το* **γινόμενο Hadamard.**

Απόδειξη
$(A \otimes B) * (C \otimes D) = (a_{ij}B) * (c_{ij}D)$
$= (a_{ij}c_{ij}B * D) = (A * C) \otimes (B * D)$

Λήμμα 2 *Για το* **γινόμενο Kronecker** *ισχύουν οι παρακάτω* **ιδιότητες :**

Αν A, A_1, A_2 είναι $m \times n$ πίνακες και B, B_1, B_2 είναι $p \times q$ πίνακες τότε:

1. $\lambda(A \otimes B) = (\lambda A) \otimes B = A \otimes (\lambda B)$
   για κάθε πραγματικό αριθμό λ.
2. $(A_1 + A_2) \otimes B = (A_1 \otimes B) + (A_2 \otimes B)$
   $= A \otimes (B_1 + B_2)$
   $(A \otimes B_1) + (A \otimes B_2)$
3. $(A_1 \otimes B_1)(A_2 \otimes B_2)$=$(A_1A_2) \otimes (B_1B_2)$
4. $(A \otimes B)^T = A^T \otimes B^T$.

5. $(A \otimes A_1) \otimes A_2 = A \otimes (A_1 \otimes A_2)$.

Θεώρημα 1 *Έστω H_n και T_m δύο πίνακες Hadamard τάξης n. Τότε $H_n \otimes T_m$* **(γινόμενο Kronecker)** *είναι πίνακας Hadamard τάξης nm.*

Απόδειξη Αφού H_n και T_m είναι πίνακες Hadamard τάξης n και m αντίστοιχα. Ορίζουμε $G = H_n \otimes T_m$ όπου $\otimes$ είναι το **γινόμενο Kronecker.** Θα δείξουμε ότι ο G είναι πίνακας Hadamard τάξης $n \times m$. Πράγματι, εφαρμόζοντας τις ιδιότητες του **γινόμενου Kronecker**
έχουμε:
$GG^T = (H_n \otimes T_m)(H_n \otimes T_m)^T$
$=(H_n \otimes T_m)(H_n^T \otimes T_m^T)$
$=(H_n H_n^T \otimes T_m T_m^T)$
$=nI_n \otimes mI_m$
$=nm(I_n \otimes I_m)$
$=nmI_{nm}$
$\Leftrightarrow \mathbf{GG^T} = \mathbf{nmI_{nm}}$.

Τώρα θα παρουσιάσουμε εν συντομία τρεις μεθόδους κατασκευής πινάκων Hadamard.

- **Η μέθοδος Sylvester ή Μέθοδος του Διπλασιασμού.**

  Αν H_n πίνακας Hadamard τάξεως n τότε ο H_{2n} είναι πίνακας Hadamard

  τάξεως $2n$:

$$H_{2n} = \begin{bmatrix} H_n & H_n \\ H_n & -H_n \end{bmatrix}$$

  Εφαρμόζοντας επαναληπτικά τη μέθοδο Sylvester μπορούμε να κατασκευάσουμε πίνακα Hadamard τάξης 2^k, $k = 1, 2, \ldots$.
  Επίσης αν υπάρχει πίνακας Hadamard τάξης n τότε η μέθοδος **Sylvester** μας δίνει πίνακες Hadamard τάξης $2^k n$ για κάθε $k = 1, 2, \ldots$.

- **Η μέθοδος με δύο Κυκλικούς Πίνακες.**

Ορισμός 7 *Αν* $A = (a_{ij})$ *είναι ένας* $n \times n$ *πίνακας, τότε αυτός ονομάζεται* **κυκλικός (circulant)** *αν ισχύει:*

$$\mathbf{a_{ij} = a_{1,j-i+1}}$$

όπου θεωρούμε το $j - i + 1$ $\mathbf{mod\ n}$.

Παράδειγμα 3 *Ο παρακάτω πίνακας* A *είναι ένας* 4×4 *κυκλικός πίνακας*

$$\begin{bmatrix} 5 & 3 & 2 & 4 \\ 4 & 5 & 3 & 2 \\ 2 & 4 & 5 & 3 \\ 3 & 2 & 4 & 5 \end{bmatrix}$$

Θεώρημα 2 *Αν* A *και* B **κυκλικοί πίνακες**, *με στοιχεία* ± 1, *τάξης* n, n *άρτιος, με*

$$\mathbf{AA^T + BB^T = 2nI_n}$$

τότε υπάρχει **πίνακας Hadamard τάξης** $2\mathrm{n}$.

Απόδειξη Ορίζουμε:

$$H = \begin{bmatrix} A & B \\ -B^T & A^T \end{bmatrix}$$

και έχουμε ότι :

$$H^T = \begin{bmatrix} A^T & -B \\ B^T & A \end{bmatrix}$$

Τότε:

$$HH^T = \begin{bmatrix} AA^T + BB^T & 0 \\ 0 & AA^T + BB^T \end{bmatrix}.$$

όπου 0 είναι ο $n \times n$ πίνακας με όλα τα στοιχεία του μηδέν, οπότε σύμφωνα με την παραπάνω σχέση έχουμε:

$$\mathbf{HH^T = 2nI_{2n}}$$

που σημαίνει ότι ο H πράγματι είναι πίνακας Hadamard τάξης $2n$.

Το παραπάνω θεώρημα οφείλεται στον Yang (1971).

- **Η μέθοδος κατασκευής Goethals-Seidel (1970)**.

Θεώρημα 3 *Έστω ότι υπάρχουν* **τέσσερις κυκλικοί πίνακες** A, B, C, D *τάξης* n*, που ικανοποιούν τη σχέση:*

$$\mathbf{AA^T + BB^T + CC^T + DD^T = 4nI_n}.$$

Έστω R **ο πίσω-διαγώνιος πίνακας**, *δηλαδή ο* R *είναι ένας* $n \times n$ *πίνακας με στοιχεία*

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & i + j = n + 1 \\ 0, & \textit{αλλού.} \end{cases}$$

Τότε ο πίνακας

$$GS = \begin{bmatrix} A & BR & CR & DR \\ -BR & A & D^TR & -C^TR \\ -CR & -D^TR & A & B^TR \\ -DR & C^TR & -B^TR & A \end{bmatrix}$$

είναι ένας **πίνακας Hadamard τάξης** $4\mathrm{n}$.

1.4 Απλό Γραμμικό Μοντέλο

Ένα σημαντικό πρόβλημα στη Στατιστική είναι η εύρεση του κατάλληλου μοντέλου που προσαρμόζεται στα δεδομένα του πειράματος ή των παρατηρήσεων. Το Γραμμικό Μοντέλο είναι το απλούστερο και ίσως το σημαντικότερο από τα γνωστά μοντέλα, διότι είναι πολύ απλό, γρήγορο στην εφαρμογή του, και τέλος διότι πολλά άλλα μοντέλα για την μελέτη τους, προϋποθέτουν την κάλη γνώση του γραμμικού μοντέλου.

Το γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης (regression) χρησιμοποιείται για να μελετήσουμε τη σχέση μεταξύ της εξαρτημένης μεταβλητής και διάφορων ανεξάρτητων μεταβλητών (independent variables) .

Πιο συγκεκριμένα, έστω ότι μας δίνονται n ζεύγη παρατηρήσεων (x_1, y_1), $(x_2, y_2), \dots,$ (x_n, y_n). Η x λέγεται **ανεξάρτητη μεταβλητή ή μεταβλητή πρόβλεψης ή ερμηνευτική μεταβλητή** (independent or predictor or explanatory variable), διότι συνήθως η τιμή της προσδιορίζεται ή ελέγχεται από μας ή είναι ευκολότερο να μετρηθεί. Η y λέγεται **εξαρτημένη ή αποκριτική μεταβλητή** (dependent or response variable) διότι η τιμή της εξαρτάται από την τιμή που θα έχει η μεταβλητή x.

Η μορφή του απλού γραμμικού μοντέλου είναι:

$$y_i = b_0 + b_1 x_i + e_i, \quad i = 1, \dots, n, \tag{1.1}$$

όπου:

y_i: είναι η τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής στην i-στή παρατήρηση,

x_i: είναι η τιμή της ανεξάρτητης μεταβλητής στην i-στή παρατήρηση,

e_i: είναι η τιμή του τυχαίου σφάλματος στην i-στή παρατήρηση,

b_0: είναι η τεταγμένη (intersept) της ευθείας παλινδρόμησης,

b_1: είναι η κλίση (slope) της ευθείας παλινδρόμησης.

Τα b_0 και b_1 είναι οι άγνωστες παράμετροι τις τιμές των οποίων θα εκτιμήσουμε από τα δεδομένα και η $y = b_0 + b_1 x$ λέγεται ευθεία παλινδρόμησης. Στο μοντέλο μας οι άγνωστες παράμετροι b_0 και b_1, καθώς και η ανεξάρτητη μεταβλητή x, θεωρούνται σταθερές ενώ τα σφάλματα e_i και κατ' επέκταση η εξαρτημένη μεταβλητή y θεωρούνται τυχαίες μεταβλητές. Δεν είναι προφανές σε πρακτικά προβλήματα ποιές είναι οι ανεξάρτητες και ποιές οι εξαρτημένες μεταβλητές, η επιλογή είναι πρόβλημα του ερευνητή και εξαρτάται από τον τρόπο που γίνεται η συλλογή των δεδομένων.

Παράδειγμα 4 *Ο παρακάτω πίνακας δίνει το βάρος x σε κιλά και το επίπεδο χοληστερίνης y σε ένα δείγμα 10 ασθενών, πριν εφαρμοστεί θεραπευτική αγωγή.*

Ασθενής	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Βάρος x	84	73	65	70	76	69	63	72	79	75
Χολ/νη y	354	190	405	263	451	302	288	385	402	365

Παράδειγμα 5 *Πριν αντικατασταθούν μεταλλικοί σωλήνες από πλαστικό ή από άλλα συνθετικά υλικά, μελετήθηκε η αντοχή 20 πειραματικών τεμαχίων από πολυεστέρα. Έγινε έλξη του υλικού με ταχύτητα X (cm/min) και μετρήθηκε η αντοχή Y σε κιλά ανά τετραγωνικό εκατοστό (kgr/cm^2). Οι μετρήσεις έδωσαν:*

X	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	1	1	1	1	1
Y	5520	5390	5730	4940	5810	6840	5720	6120	6400	6240
X	10.0	10.0	10.0	10.0	10.0	20.0	20.0	20.0	20.0	20.0
y	7100	7150	7260	7650	8210	7960	7950	7470	7720	8460

1.4.1 Εκτιμητές των $\beta_0, \beta_1, \sigma^2$

Για την εκτίμηση των παραμέτρων β_0, β_1 θα χρησιμοποιήσουμε τη *μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων* [1].

Σκοπός είναι να ελαχιστοποιήσουμε το άθροισμα τετραγώνων των αποκλίσεων $y_i - \hat{y}_i$, δηλαδή των n παρατηρηθέντων τιμών y_i από τις εκτιμήσεις

[1] Η μέθοδος αυτή χρησιμοποιείται όταν δεν χρειάζεται να κάνουμε καμία υπόθεση για την κατανομή των e_i και συνεπώς των y_i.

τους $\hat{y}_i$, όπου $\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$. Θέλουμε δηλαδή να ελαχιστοποιήσουμε την ποσότητα

$$\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'\hat{\boldsymbol{\epsilon}} = \sum_{i=1}^{n} \hat{\epsilon}_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i)^2. \tag{1.2}$$

Παίρνοντας μερικές παραγώγους ως προς β_0 και β_1 αντίστοιχα και θέτοντας τη μερική παράγωγο ίση με μηδέν θα προκύψουν οι εκτιμητές ελαχίστων τετραγώνων.

Είναι λοιπόν

$$\frac{\partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}'\hat{\boldsymbol{\epsilon}}}{\partial \hat{\beta}_0} = -2 \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i) = 0 \tag{1.3}$$

και

$$\frac{\partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}'\hat{\boldsymbol{\epsilon}}}{\partial \hat{\beta}_1} = -2 \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i) x_i = 0 \tag{1.4}$$

από όπου προκύπτει

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2} \tag{1.5}$$

και

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}. \tag{1.6}$$

Επιβεβαιώνει κανείς ότι οι εκτιμητές αυτοί πράγματι ελαχιστοποιούν την (1.2) αφού αν υπολογίσει τις δεύτερες μερικές παραγώγους στα σημεία $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$, θα δεί ότι αυτές είναι θετικές.

1.4.2 Ιδιότητες των εκτιμητών

Στην υποενότητα αυτή αναφέρονται βασικές ιδιότητες των εκτιμητών ελαχίστων τετραγώνων. Δίνονται χωρίς απόδειξη, καθώς οι αποδείξεις είναι όμοιες με την περίπτωση του πολλαπλού γραμμικού μοντέλου, το οποίο αναλύεται στην επόμενη ενότητα.

1. $E(\hat{\beta}_0) = \beta_0$,
2. $E(\hat{\beta}_1) = \beta_1$,
3. $Var(\hat{\beta}_0) = \sigma^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2} \right]$,

4. $Var(\hat{\beta}_1) = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}$.

Στις παραπάνω ιδιότητες χρειαζόμαστε μία εκτίμηση της διακύμανσης σ^2. Από τον ορισμό της διακύμανσης $\sigma^2 = E\left(y_i - E(y_i)\right)^2$, αν χρησιμοποιήσουμε για $E(y_i)$ την εκτίμηση του $\hat{y}_i$ θα προκύψει ως εκτιμητής της διακύμανσης σ^2 ο

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{n-2} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i)^2}{n-2} = \frac{SSE}{n-2}. \tag{1.7}$$

Η ποσότητα $SSE = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2$ λέγεται *άθροισμα τετραγώνων των καταλοίπων ή σφαλμάτων.*

Ο λόγος που διαιρέσαμε με $n-2$ είναι γιατί χρησιμοποιήθηκαν 2 βαθμοί ελευθερίας για την εκτίμηση των β_0, β_1 και επιπλέον ο εκτιμητής s^2 είναι αμερόληπτος εκτιμητής του σ^2. Δηλαδή ισχύει ότι

$$E(s^2) = \frac{E(SSE)}{n-2} = \frac{(n-2)\sigma^2}{n-2} = \sigma^2. \tag{1.8}$$

1.4.3 Πολλαπλή Γραμμική Παλινδρόμηση

Όταν έχουμε, όπως στο παρακάτω παράδειγμα, περισσότερες από μια ανεξάρτητες μεταβλητές που θεωρούμε ότι δίνουν περισσότερη πληροφορία για την εξαρτημένη μεταβλητή και πρέπει να περιληφθούν στο μοντέλο, τότε έχουμε Πολλαπλή Γραμμική Παλινδρόμηση.

Παράδειγμα 6 *Ένας παρασκευάστης κρασιού θεώρησε ότι ο βαθμός επιτυχίας y ενός τύπου κρασιού έχει σχέση με την σκληρότητα x_1 του ξύλου του βαρελιού ή/και τη μέση θερμοκρασία x_2 του περιβάλλοντος των βαρελιών. Πήρε παρατηρήσεις από 10 διαφορετικούς συνδυασμούς που έδωσαν:*

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y	35.0	81.7	42.5	98.3	52.7	82.0	34.5	95.4	56.9	84.4
x_1	130	174	134	191	165	194	143	186	139	188
x_2	190	176	205	210	230	192	220	235	240	230

Στο παράδειγμα αυτό οι ανεξάρτητες μεταβλητές είναι δύο, η θερμοκρασία του περιβάλλοντος x_1 και η σκληρότητα του ξύλου του βαρελιού x_2, ενώ η εξαρτημένη μεταβλητή είναι η ποιότητα του κρασιού y.

Αν το μοντέλο μας είναι γραμμικό (πρώτου βαθμού) ως προς τις παραμέτρους, έχουμε **Πολλαπλή Γραμμική Παλινδρόμηση,** αλλιώς έχουμε Μή-Γραμμική Πολλαπλή Παλινδρόμηση. Στην παράγραφο αυτή θα ασχοληθούμε με την Πολλαπλή Γραμμική Παλινδρόμηση (Multiple Linear Regression).

Αν $X_1, X_2, \ldots, X_{p-1}$ είναι οι ανεξάρτητες μεταβλητές, Y η εξαρτημένη μεταβλητή και στην i-στή παρατήρηση οι αντίστοιχες τιμές τους είναι: X_{i1}, $X_{i2}, \ldots$, $X_{i,p-1}$, Y_i με e_i το σφάλμα της παρατήρησης, τότε το μοντέλο μας για n παρατηρήσεις είναι:

$$Y_i = b_0 + b_1 X_{i1} + \ldots + b_{p-1} X_{i,p-1} + e_i \quad i = 1, \ldots, n. \tag{1.9}$$

1.5 Πολλαπλό Γραμμικό Μοντέλο

Στην περίπτωση που θέλουμε να κάνουμε πρόβλεψη της τιμής της *ανεξάρτητης* μεταβλητής (*μεταβλητής απόκρισης*) $\mathbf{y}$ από ένα πλήθος επεξηγηματικών μεταβλητών (*predictors*), $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_k$, μπορεί να χρησιμοποιηθεί το *πολλαπλό γραμμικό μοντέλο.* Το πολλαπλό γραμμικό μοντέλο μπορεί να εκφραστεί ως

$$\mathbf{y} = \beta_0 + \beta_1 \mathbf{x}_1 + \beta_2 \mathbf{x}_2 + \ldots + \beta_k \mathbf{x}_k + \boldsymbol{\epsilon}. \tag{1.10}$$

Στην παραπάνω εξίσωση $\mathbf{y}$ είναι η τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής $\mathbf{Y}$ όταν μετράται από τις τιμές $\mathbf{x}_j$ των επεξηγηματικών μεταβλητών X_j αντίστοιχα και ϵ είναι το τυχαίο σφάλμα. Οι συντελεστές β_j καλούνται συντελεστές παλινδρόμησης και είναι άγνωστες αλλά σταθερές ποσότητες.

Η έννοια "*γραμμικό*", όπως και στο απλό μοντέλο, αφορά τους συντελεστές β_j. Με τα παρακάτω παραδείγματα θα αποσαφηνιστεί η έννοια του γραμμικού μοντέλου καλύτερα.

Παράδειγμα 7 *Ένα μοντέλο που είναι γραμμικό ως προς β_j αλλά όχι ως προς x_j είναι το*

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1^2 + \beta_4 x_2^2 + \beta_5 x_1 x_2 + \epsilon.$$

Παράδειγμα 8 *Το μοντέλο της* (1.10) *είναι γραμμικό ως προς τους συντελεστές β_j.*

Επίσης δίνεται ένα παράδειγμα ενός μοντέλου που δεν είναι γραμμικό.

Παράδειγμα 9 *Το παρακάτω μοντέλο δεν είναι γραμμικό αφού τα β_j δεν είναι γραμμικά.*

$$y = \beta_0 + e^{\beta_1 x_1} + e^{\beta_2 x_2} + \epsilon.$$

Σκοπός της παλινδρόμησης είναι να εκτιμήσει τους συντελεστές β_j για να μπορεί να κάνει πρόβλεψη για τις μελλοντικές παρατηρήσεις. Για την εκτίμηση των παραμέτρων πρέπει να χρησιμοποιηθεί ένα τυχαίο δείγμα n παρατηρήσεων της μεταβλητής y και των αντίστοιχων τιμών για τις επεξηγηματικές μεταβλητές x_j. Όταν έχουμε στη διάθεση μας αυτό το δείγμα, τότε η i μέτρηση της y_i μπορεί να εκφραστεί από την εξίσωση

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \ldots + \beta_k x_{ik} + \epsilon_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{1.11}$$

Τα τυχαία σφάλματα θεωρούμε ότι είναι τυχαίες μεταβλητές που ακολουθούν μία κατανομή με μέση τιμή 0 και διακύμανση σ^2. Αργότερα θα εισάγουμε την υπόθεση *κανονικότητας* για την κατανομή των σφαλμάτων.

Πριν προχωρήσουμε στην εκτίμηση των παραμέτρων β_j, όπως και στο απλό μοντέλο, έτσι και εδώ κάνουμε τις υποθέσεις :

1. $E(\epsilon_i) = 0$ ή ισοδύναμα $E(y_i) = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \ldots + \beta_k x_{ik}, \quad i = 1, 2, \ldots, n,$

2. $Var(\epsilon_i) = \sigma^2$ ή ισοδύναμα $Var(y_i) = \sigma^2$,

3. $Cov(\epsilon_i, \epsilon_j) = 0, \quad \forall i \neq j$ ή ισοδύναμα $Cov(y_i, y_j) = 0$.

Όταν ισχύουν οι παραπάνω υποθέσεις, τότε οι εκτιμητές ελαχίστων τετραγώνων των συντελεστών παλινδρόμησης β_j έχουν πολύ καλές ιδιότητες τις οποίες θα αναλύσουμε παρακάτω.

Αφού εκτιμήσουμε τους συντελεστές παλινδρόμησης, τότε μπορούμε να προσαρμόσουμε στα δεδομένα μας ένα υπερεπίπεδο ώστε το άθροισμα των αποστάσεων των παρατηρήσεων y_i από το υπερεπίπεδο να είναι ελάχιστο. Στην δισδιάστατη περίπτωση προσαρμόζουμε μία ευθεία, στην τρισδιάστατη ένα επίπεδο και σε διαστάσεις μεγαλύτερες του 3 ένα υπερεπίπεδο.

Για να βρούμε τους εκτιμητές ελαχίστων τετραγώνων γράφουμε το μοντέλο σε μορφή πινάκων, για να κάνουμε χρήση θεωρημάτων και ιδιοτήτων πινάκων από τη γραμμική άλγεβρα. Γράφοντας την εξίσωση του μοντέλου για κάθε μία από τις n παρατηρήσεις έχουμε:

$$y_1 = \beta_0 + \beta_1 x_{11} + \beta_2 x_{12} + \ldots + \beta_k x_{1k} + \epsilon_1$$

$$y_2 = \beta_0 + \beta_1 x_{21} + \beta_2 x_{22} + \ldots + \beta_k x_{2k} + \epsilon_2$$
$$y_3 = \beta_0 + \beta_1 x_{31} + \beta_2 x_{32} + \ldots + \beta_k x_{3k} + \epsilon_3$$
$$\vdots$$
$$y_n = \beta_0 + \beta_1 x_{n1} + \beta_2 x_{n2} + \ldots + \beta_k x_{nk} + \epsilon_n.$$

Οι παραπάνω εξισώσεις μπορούν να γραφούν με τη μορφή πινάκων ως

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \ldots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \ldots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \ldots & x_{nk} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}.$$

Από όπου προκύπτει τελικά ότι

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}. \tag{1.12}$$

Στο μοντέλο, ο σταθερός όρος β_0 υπάρχει όταν η πρώτη στήλη στον πίνακα $\mathbf{X}$ είναι ίση με τη στήλη των μονάδων, δηλαδή $\mathbf{X}_1 = \mathbf{1}$ και λέγεται στήλη που αντιστοιχεί στον μέσο όρο (intercept). Καλό είναι να χρησιμοποιούνται μοντέλα που περιέχουν το β_0 αφού αυτό θα έχει ως αποτέλεσμα την βελτίωση των εκτιμήσεων.

Οι υποθέσεις που κάναμε για το μοντέλο μας παραπάνω τώρα μετασχηματίζονται αντίστοιχα ως

1. $E(\boldsymbol{\epsilon}) = \mathbf{0}$ ή $E(\mathbf{y}) = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$,
2. $Var(\mathbf{y}) = \sigma^2\mathbf{I}$.

Στα παραπάνω, το διάνυσμα $\mathbf{y}$ είναι διάστασης $n \times 1$, και ο πίνακας $\mathbf{X}$ διάστασης $n \times (k+1)$. Υποθέτουμε ότι $n > (k+1)$ και ότι ο βαθμός του πίνακα $\mathbf{X}$ είναι $rank(\mathbf{X}) = k+1$. Τα διανύσματα $\boldsymbol{\beta}$ και $\boldsymbol{\epsilon}$ είναι διάστασης $k+1$ και $n \times 1$ αντίστοιχα.

1.5.1 Εκτιμητές Ελαχίστων Τετραγώνων στο πολλαπλό γραμμικό μοντέλο

Όπως και στο απλό γραμμικό μοντέλο, έτσι και στο πολλαπλό, θέλουμε να ελαχιστοποιήσουμε το άθροισμα τετραγώνων των αποκλίσεων $y_i - \hat{y}_i$, δηλαδή των n παρατηρηθέντων τιμών y_i από τις προβλέψεις τους $\hat{y}_i$, όπου τώρα

$$\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{i1} + \hat{\beta}_2 x_{i2} + \ldots + \hat{\beta}_k x_{ik}.$$

Αναζητούμε δηλαδή διάνυσμα $\hat{\boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix}\hat{\beta}_0 & \hat{\beta}_1 & \cdots & \hat{\beta}_k\end{pmatrix}'$ τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιεί την ποσότητα

$$\begin{aligned} SSE = \sum_{i=1}^{n} \hat{\epsilon}_i^2 &= \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 \\ &= \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_{i1} - \hat{\beta}_2 x_{i2} - \ldots - \hat{\beta}_k x_{ik})^2. \end{aligned} \tag{1.13}$$

Το διάνυσμα αυτό προκύπτει από την απόδειξη του παρακάτω θεωρήματος.

Θεώρημα 4 *Έστω* $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$ *με* X *να είναι διάστασης* $n \times (k+1)$ *και βαθμού* $k + 1 < n$. *Τότε οι εκτιμητές ελαχίστων τετραγώνων που ελαχιστοποιούν την* (1.4) *δίνονται από τη σχέση*

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y}. \tag{1.14}$$

Απόδειξη Η (1.14) μπορεί να γραφεί (λόγω ότι $\hat{\boldsymbol{\epsilon}} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}$) ως

$$\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'\hat{\boldsymbol{\epsilon}} = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \tag{1.15}$$

$$= \mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} - (\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})'\mathbf{y} + (\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})'\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} \tag{1.16}$$

$$= \mathbf{y}'\mathbf{y} - 2\mathbf{y}'\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} + \hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{X}'\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}. \tag{1.17}$$

Για να βρούμε το διάνυσμα $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ που ελαχιστοποιεί την (1.13) [2]αρκεί να θέσουμε την μερική παράγωγο ως προς $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ ίση με 0 και να λύσουμε ως προς $\hat{\boldsymbol{\beta}}$. Είναι λοιπόν

$$\frac{\partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}'\hat{\boldsymbol{\epsilon}}}{\partial \hat{\boldsymbol{\beta}}} = -2\mathbf{X}'\mathbf{y} + 2\mathbf{X}'\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$$

απ' όπου προκύπτουν οι *κανονικές εξισώσεις*

$$\mathbf{X}'\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}'\mathbf{y}. \tag{1.18}$$

Λόγω ότι ο βαθμός του πίνακα $\mathbf{X}$ είναι $k + 1$ τότε ο πίνακας $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ είναι μή-ιδιάζων, άρα αντιστρέφεται. Πολλαπλασιάζοντας την (1.9) από αριστερά με $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ έχουμε

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y}.$$

[2]Από την (1.12) καταλήξαμε στην (1.13) επειδή τα στοιχεία $\mathbf{y}'\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ και $(\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})'\mathbf{y}$ έχουν διάσταση 1×1, οπότε έχουμε ισότητα των δύο αυτών πινάκων.

Για να ολοκληρωθεί η απόδειξη πρέπει να δείξουμε ότι ο εκτιμητής της (1.15) όντως είναι αυτός που ελαχιστοποιεί την (1.16). Έστω $\mathbf{b}$ ένας άλλος εκτιμητής. Τότε ο $\mathbf{b}$ θα πρέπει να ελαχιστοποιεί την

$$\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'\hat{\boldsymbol{\epsilon}} = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b})'(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b}).$$

Προσθαφαιρώντας τον όρο $\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ έχουμε

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'\hat{\boldsymbol{\epsilon}} &= (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{X}\mathbf{b})'(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{X}\mathbf{b}) && (1.19)\\
&= (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) + (\hat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{b})'\mathbf{X}'\mathbf{X}(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{b})\\
&\quad +2(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{b})'(\mathbf{X}'\mathbf{y} - \mathbf{X}'\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}). && (1.20)
\end{aligned}$$

Η ποσότητα $\mathbf{X}'\mathbf{y}-\mathbf{X}'\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = 0$ λόγω της (1.19) και η ποσότητα $(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\mathbf{b})'\mathbf{X}'\mathbf{X}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\mathbf{b}) > 0$ αφού είναι τετραγωνική μορφή, θετικά ορισμένη. Επομένως για να ελαχιστοποιείται η ποσότητα $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$ πρέπει να ισχύει $\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{b}$. Άρα ο εκτιμητής της (1.15) είναι **εκτιμητής ελαχίστων τετραγώνων**. □

Αφού έχουμε κάνει τις εκτιμήσεις των παραμέτρων, μπορούμε τώρα να προσαρμόσουμε στα δεδομένα την καμπύλη παλινδρόμησης από $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$. *Να σημειωθεί ότι με* $\hat{\mathbf{y}}$ *εκτιμάμε το* $E(\mathbf{y})$ *και όχι το* $\mathbf{y}$.

1.6 Πολυωνυμικό Μοντέλο

Τα πολυωνυμικά μοντέλα έχουν χρησιμοποιηθεί και εφαρμοστεί από πολλούς ερευνητές όπως τους Engelund et al. 1993 , Unal et al. 1996, Venter et al. 1996, Chen et al. 1996, Simpson et al. 1997 κ.τ.λ, για το σχεδιασμό πολύπλοκων μηχανικών συστημάτων.

Ένα δεύτερης τάξης πολυωνυμικό μοντέλο μπορεί να εκφραστεί ως :

$$\begin{aligned}
Y = \beta_0 + \sum_{i \le m} \beta_i x_i + \sum_{i_1 \le i_2 \le m} \beta_{i_1 i_2} x_{i_1} x_{i_2}\\
+ \ldots + \sum_{i_1 \le \ldots i_k \le m} \beta_{i_1 \ldots i_k} x_{i_1} \ldots x_{i_k} + \epsilon,
\end{aligned}$$

όπου:

x_i: είναι οι ανεξάρτητες μεταβλητές,

β_i: είναι οι γραμμικές επιδράσεις των x_i,

$\beta_{i_1} \ldots_{i_t}$: είναι η αλληλεπίδραση t-τάξης των $x_{i_1}, \ldots, x_{i_t}$.

β_{ii}: αντιστοιχούν στην τετραγωνική επίδραση του παράγοντα x_i

$\beta_{i_1 i_2}$: αντιστοιχεί στην αλληλεπίδραση δεύτερης τάξης των παραγόντων $x_{i_1} x_{i_2}$, για $i_1 \neq i_2$,.

Κατά τη δημιουργία των πολυωνυμικών μοντέλων, είναι δυνατόν να προσδιοριστεί η σημαντικότητα των διαφορετικών παραγόντων σχεδιασμού απευθείας από τους συντελεστές στο κανονικοποιημένο γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης.

Όταν μελετάμε σχεδιασμούς με μεγάλο αριθμό διαστάσεων, είναι σημαντικό να χρησιμοποιούμε γραμμικά μοντέλα ή δεύτερης τάξης πολυωνυμικά μοντέλα για να περιορίσουμε τις μεταβλητές σχεδιασμού κρατώντας στο μοντέλο μας τις πιο σημαντικές από αυτές. Αυτή η τεχνική ονομάζεται και κρησάρισμα.

1.6.1 Πειράματα Κρησαρίσματος

Ένας σχεδιασμός δύο συμβόλων (συνήθως χρησιμοποιούνται τα $+1$ και -1) με n γραμμές (πειραματικές εκτελέσεις) και k-στήλες (παράγοντες) ονομάζεται **σχεδιασμός ή πείραμα Κρησαρίσματος** (screening experiments) με παραμέτρους (n, k, p) αν για κάθε επιλογή p-στηλών του σχεδιασμού, όλες οι πειραματικές εκτελέσεις του πλήρους 2^p παραγοντικού σχεδιασμού, εμφαν'-ιζονται τουλάχιστον μια φορά η καθεμιά. Τότε λέμε ότι ο σχεδιασμός είναι **προβολικότητας** p. Αν κάποιες από τις γραμμές εμφανίζονται i φορές, ενώ οι υπόλοιπες εμφανίζονται j- φορές, τότε ο σχεδιασμός έχει τύπο προβολής (i, j), και στην περίπτωση που κάποιο από τα i ή j είναι μηδέν, τότε ο σχεδιασμός δεν είναι προβολικότητας p. Στην συνέχεια, οι στήλες του σχεδιασμού που αντιστοιχούν στους σημαντικούς παράγοντες επιλέγονται για να σχηματίσουν ένα νέο σχηματισμό (που ονομάζεται προβολή). Ο νέος αυτός σχεδιασμός χρησιμοποιείται για περαιτέρω έρευνα των σημαντικών παραγόντων και των αλληλεπιδράσεων τους. Παραδοσιακά, τέτοιοι σχεδιασμοί προκύπτουν απο πίνακες Hadamard.

1.6.2 Κριτήρια Μεθόδων Κρησαρίσματος

Για να διαλέξουμε μέθοδο κρησαρίσματος, υπάρχουν τρία βασικά κριτήρια. Αυτά είναι:

- η αποδοτικότητα (Efficiency)
- η αποτελεσματικότητα (Effectivity)
- η ανθεκτικότητα. (Robustness)

Αποδοτικές χαρακτηρίζονται οι μέθοδοι που απαιτούν ένα μικρό αριθμό εκτελέσεων του πειράματος. Αξίζει εδώ να επισημάνουμε ότι η αποδοτικότητα είναι ένα ποιοτικό μέτρο, στηριζόμενη στο μέγεθος του προβλήματος, δηλαδή στον αριθμό των παραγόντων.

Το δεύτερο κριτήριο είναι **η αποτελεσματικότητα** (πόσους παράγοντες μπορούμε να εκτιμήσουμε και πόσο καλά τους εκτιμάμε), που είναι δύσκολο να μετρηθεί. Συχνά είναι δύσκολο να μετρήσουμε την αποτελεσματικότητα, εξαιτίας των άγνωστων συντελεστών των παραγόντων, μπορούμε όμως να συγκρίνουμε τις διάφορες μεθόδους στις προσομοιωμένες περιπτώσεις με γνωστούς τους συντελεστές και να βρούμε την αποτελεσματικότερη κάθε φορά.

Τη θέση του τρίτου κριτηρίου κατέχει **η ανθεκτικότητα**. Κάποιες μέθοδοι μπορούν να λειτουργήσουν αν εκπληρώνονται κάποιες συνθήκες. Δεν είναι, όμως, και λίγες οι φορές που οι υποθέσεις αυτές είναι άγνωστο αν πληρούνται. Για το λόγο αυτό αναζητούμε μεθόδους που δουλεύουν καλά ακόμα και αν οι υποθέσεις που απαιτούνται δεν πληρούνται.

Τέλος, θα μπορούσαμε να αναφέρουμε ως **τέταρτο κριτήριο την ευκολία στη χρήση της μεθόδου κρησαρίσματος**, αλλά πρώτα προσπαθούμε να διασφαλίσουμε τα τρία αρχικά κριτήρια.

Παρόλα τα πλεονεκτήματα που έχει η εφαρμογή του πολυωνυμικού μοντέλου, εντούτοις η χρήση του δεν ενδείνυεται πάντοτε, ειδικά σε εξαιρετικά μη-γραμμικές συμπεριφορές των μοντέλων, όπου σε αυτές τις περιπτώσεις μπορούν να χρησιμοποιηθούν μόνο πολυώνυμα υψηλότερης τάξης. Ωστόσο, ενδέχεται και πάλι να προκύψουν αστάθειες (βλ. Barton 1992), ή μπορεί να είναι πολύ δύσκολο να λάβουμε επαρκή δεδομένα για την εκτίμηση του δείγματος και των συντελεστών της πολυωνυμικής εξίσωσης, ιδιαίτερα σε σχεδιασμούς και σε μοντέλα με μεγάλες διαστάσεις.

Κεφάλαιο 2

Κλασσικοί Πειραματικοί Σχεδιασμοί

2.1 Πειραματικοί Σχεδιασμοί

Το πείραμα θεωρείται η βασική ερευνητική μέθοδος όλων των επιστημών. Στο πείραμα μας ενδιαφέρουν οι σχέσεις μεταξύ μεταβλητών, όπου μεταβλητή ορίζεται ο παράγοντας εκείνος για τον οποίο συγκεντρώνονται οι πληροφορίες σε μια έρευνα. Το κύριο χαρακτηριστικό κάθε μεταβλητής είναι ότι μεταβάλλεται (δεν έχει μία μόνο σταθερή τιμή) και ότι μπορεί να μετρηθεί (η εκάστοτε τιμή της μπορεί να εκφρασθεί με αριθμό ή σύμβολο). Ο ερευνητής διατυπώνει το ερευνητικό πρόβλημα και, στη συνέχεια, προβαίνει στη μελέτη του. Η διατύπωση ενός ερευνητικού προβλήματος χρησιμεύει ως βάση για να καθοριστεί η αρχική υπόθεση, γνωστή ως μηδενική (ή στατιστική) υπόθεση (null hypothesis). Η μηδενική υπόθεση εκφράζει πάντοτε την άποψη ότι ο υπό μελέτη παράγοντας δεν ασκεί την αποδιδόμενη σε αυτόν επίδραση και ότι δεν υπάρχουν εξαιτίας του παράγοντα αυτού διατομικές και διομαδικές διαφορές. Για κάθε μηδενική υπόθεση διατυπώνεται μια εναλλακτική ή ερευνητική υπόθεση (alternative ή research hypothesis), η οποία εκφράζει ακριβώς το αντίθετο της μηδενικής υποθέσεως. Η εναλλακτική υπόθεση δηλαδή εκφράζει πάντοτε την άποψη ότι ο υπό μελέτη παράγοντας ασκεί επίδραση στα υποκείμενα.

Η μεταβλητή, η οποία εξαρτάται, ονομάζεται εξαρτημένη μεταβλητή (dependent variable). Η μεταβλητή που είναι ανεξάρτητη και μια αλλαγή σε αυτή μεταβάλλει την εξαρτημένη μεταβλητή ονομάζεται ανεξάρτητη μεταβλη

- τή (independent variable).

Σε ένα πείραμα ο πειραματιστής χειρίζεται (μεταβάλλει συστηματικά) την ανεξάρτητη μεταβλητή και το αποτέλεσμα που μετράται είναι η εξαρτημένη μεταβλητή. Η εξαρτημένη μεταβλητή ονομάζεται έτσι επειδή η τιμή της θεωρείται ότι εξαρτάται από την τιμή της ανεξάρτητης μεταβλητής.

Ο πειραματιστής είναι αυτός που διαμορφώνει και παρέχει τις συνθήκες για την πρόκληση της επιθυμητής διαφοροποίησης. Είναι προφανές ότι απαραίτητη προϋπόθεση για τη χρησιμοποίηση ενός χαρακτηριστικού ή μιας ιδιότητας ως μεταβλητής πρέπει να είναι η δυνατότητά του να παρουσιαστεί με δύο τουλάχιστον μορφές, έστω και αν η μία συνίσταται απλώς στην απουσία αυτής της μεταβλητής.

Για να μπορέσει ο ερευνητής να ελέγξει την επίδραση μιας ανεξάρτητης μεταβλητής (που μπορεί να είναι παρούσα ή απούσα) πάνω στις εξαρτημένες, χωρίζει συνήθως τα υποκείμενα του πειράματος (τα οποία αποτελούν το δείγμα) σε δύο ισοδύναμες ομάδες, την πειραματική (experimental - με τη συνθήκη παρούσα) και την ομάδα ελέγχου (control group - με τη συνθήκη απούσα).

Η διαδικασία την οποία ακολουθεί ο ερευνητής προκειμένου να διερευνήσει τις σχέσεις ανάμεσα στις μεταβλητές του φαινομένου που εξετάζεται ονομάζεται **πειραματικός σχεδιασμός** (experimental design).

Σύμφωνα με τον Kirk (1995), ο όρος ¨Πειραματικός Σχεδιασμός ¨ (experimental design) αναφέρεται: (a) σε μια διαδικασία ή μεθοδολογικό σχέδιο σύμφωνα με το οποίο οι διαθέσιμες πειραματικές μονάδες (π.χ. αντικείμενα ή υποκείμενα) θα ενταχθούν σε διάφορες πειραματικές συνθήκες (αγωγές) και (b) στην κατάλληλη στατιστική ανάλυση των δεδομένων σύμφωνα με το σχέδιο αυτο. Ο Ronald Fisher, στο πρώτο τέταρτο του εικοστού αιώνα, έθεσε τις βάσεις των βιομετρικών πειραματικών σχεδιασμών και όχι μόνον (Fisher 1940, Pearce 1979, Preece 1990, Κίτσος 1994). Σημαντική ήταν επίσης η μετέπειτα συνεισφορά και του Frank Yates(Sprent, 1973), με αποτέλεσμα το 1950, οι **Πειραματικοί Σχεδιασμοί** να αποτελούν ήδη ένα καλά τεκμηριωμένο πεδίο έρευνας της Στατιστικής. Έκτοτε η σχετική θεωρία και μεθοδολογία αποτελεί ερευνητικό αντικείμενο με συνεχή εξέλιξη και επέκταση.

Ο πειραματικός σχεδιασμός περιλαμβάνει γενικά τις μεθόδους συγκέντρωσης και ανάλυσης των δεδομένων της έρευνας. Ειδικότερα, ο σχεδιασμός επεξηγεί και υποδεικνύει το είδος και τον τρόπο πραγματοποίησης των μετρήσεων, τον τρόπο ελέγχου των διαδικασιών του πειράματος, καθώς και τις εφικτές στατιστικές μεθόδους ανάλυσης με βάση τα δεδομένα. Ο πειραματικός σχεδιασμός ορίζει επίσης, σε γενικές γραμμές, τα δυνατά συμπεράσματα που μπορούν να εξαχθούν από τη στατιστική ανάλυση των δεδομένων.

Ο πειραματικός σχεδιασμός που θα χρησιμοποιηθεί σε μια έρευνα έχει δύο βασικούς σκοπούς :

a) να ελέγξει την αποδοχή ή μη μιας μηδενικής υπόθεσης, δηλαδή να βεβαιώσει ή όχι ότι, κάτω από ορισμένες ειδικά προσδιορισμένες συνθήκες, υπάρχει σχέση μεταξύ δύο ή περισσότερων μεταβλητών, και

b) να εντοπίσει και να ελέγξει τις μεταβλητές που, ενώ δεν αποτελούν το επίκεντρο του ενδιαφέροντος του πειράματος, μπορούν να επηρεάσουν τα αποτελέσματα και να δημιουργήσουν πειραματικά σφάλματα.

Πειράματα σχεδιάζονται και εκτελούνται σε όλους σχεδόν τους επιστημονικούς τομείς (Κίτσος 1994, Montgomery 1999) με σκοπό τη μελέτη της επίδρασης, μιας ή περισσοτέρων μεταβλητών πάνω σε κάποιες άλλες, ελέγχοντας ταυτόχρονα και άλλους τοπικούς εξωγενείς, σε σχέση με το υπό εξέταση φαινόμενο, παράγοντες (Wuebben 1968, Pearce 1979). Βέβαια, οι πειραματικές διαδικασίες και μέθοδοι που εφαρμόζονται εξαρτώνται κάθε φορά από τις συνθήκες που επιβάλει το επιστημονικό πεδίο στο πλαίσιο του οποίου διενεργείται το πείραμα. Για παράδειγμα άλλες μέθοδοι εφαρμόζονται στην Γεωπονία και άλλες στο Βιομηχανικό Έλεγχο Ποιότητας (Hamaker, 1995)

2.2 Παραγοντικοί Πειραματικοί Σχεδιασμοί με δύο ή περισσότερα επίπεδα

Αρχικά πρέπει να ορίσουμε τι καλούμε πείραμα.

Ορισμός 8 Πείραμα *είναι μια δοκιμή ή ένα σύνολο δοκιμών στις οποίες σκόπιμες αλλαγές γίνονται στις ανεξάρτητες μεταβλητές μιας διαδικασίας. Οι αλλαγές αυτές μπορούν να βοηθήσουν στην παρατήρηση και αξιολόγηση των αλλαγών στην εξαρτημένη μεταβλητή.*

Μέχρι τώρα έχουμε αναφερθεί σε τύπους πειραματικής διαδικασίας στους οποίους χρησιμοποιείται μια μόνο ανεξάρτητη μεταβλητή. Έτσι, σε ένα πείραμα εξετάζεται η ταυτόχρονη λειτουργία και αλληλεπίδραση δύο ή περισσότερων ανεξάρτητων μεταβλητών. Δύο ανεξάρτητες μεταβλητές μπορεί να αλληλεπιδρούν στον τρόπο με τον οποίο επηρεάζουν την ερευνώμενη συμπεριφορά. Δηλαδή, η επίδραση της μιας ανεξάρτητης μεταβλητής είναι ποσοτικά διαφορετική ως συνάρτηση του επιπέδου της τιμής που παίρνει μια άλλη ανεξάρτητη μεταβλητή. Στα πειράματα όπου εξετάζονται περισσότερες από μία ανεξάρτητες μεταβλητές, χρησιμοποιείται συνήθως **παραγοντικός σχεδιασμός** (factorial design). Ένας παραγοντικός σχεδιασμός περιλαμβάνει το σύνολο των δυνατών συνδυασμών όλων των παραγόντων σε όλες τις κατηγορίες ή επίπεδα τιμών του κάθε παράγοντα. Έτσι, με τους παραγοντικούς σχεδιασμούς μπορούμε να μελετήσουμε τις ξεχωριστές, αλλά και τις συνδυασμένες επιδράσεις πολλών ειδών ανεξάρτητων μεταβλητών σε πολλά είδη εξαρτημένων μεταβλητών. Σε έναν παραγοντικό σχεδιασμό στον οποίο εξετάζονται δύο παράγοντες υπάρχουν τρεις επιδράσεις : δύο κύριες επιδράσεις και μια αλληλεπίδραση. Κύρια επίδραση είναι η επίδραση καθενός από τους δύο παράγοντες, αγνοώντας τις διαφοροποιήσεις στις κατηγορίες του άλλου παράγοντα. Προφανώς, οι κύριες επιδράσεις των δύο παραγόντων θα μπορούσαν να προσδιοριστούν και από δύο ξεχωριστά πειράματα. Αντίθετα, ο έλεγχος των αλληλεπιδράσεων απαιτεί έναν παραγοντικό σχεδιασμό αφού οι αλληλεπιδράσεις μπορούν να προσδιοριστούν μόνο αν εξεταστούν και οι δύο ανεξάρτητες μεταβλητές ταυτόχρονα.

Οι παραγοντικοί σχεδιασμοί χρησιμοποιούνται ευρύτατα σε πειράματα που περιλαμβάνουν αρκετούς παράγοντες, και ζητείται η μελέτη της επίδρασης των παραγόντων αυτών στην **απόκριση (y)**.
Οι απλούστεροι τύποι παραγοντικών σχεδιασμών είναι αυτοί με δύο μόνο επίπεδα (levels) γνωστοί και ως 2^k Παραγοντικοί Σχεδιασμοί.

Ορισμός 9 *Με τον όρο ″**Παραγοντικός Σχεδιασμός**″ εννοούμε τον πειραματικό σχεδιασμό κατά τον οποίο σε κάθε πλήρη δοκιμή ή επανάληψη του πειράματος, εξετάζονται όλοι οι δυνατοί συνδυασμοί των επιπέδων (levels) των παραγόντων.*

Για παράδειγμα, αν υπάρχουν a επίπεδα του παράγοντα A και b επίπεδα του παράγοντα B τότε λέμε ότι είναι ταξινομημένα σε έναν παραγοντικό σχεδιασμό, όταν κάθε επανάληψη του πειράματος περιλαμβάνει όλους τους ab συνδυασμούς των επιπέδων. Συνήθως ένας παραγοντικός σχεδιασμός επαναλαμβάνεται n φορές.

Ορισμός 10 *Αν έχουμε δύο μόνο παράγοντες, έστω A και B, καθένα σε δύο επίπεδα (levels) τότε λέμε ότι έχουμε έναν ″**δύο στην δευτέρα παραγοντικό σχεδιασμό**″ και τον συμβολίζουμε ως εξής : 2^2 παραγοντικό σχεδιασμό. Τα επίπεδα (στάθμες) των παραγόντων μπορούν χάρην ευκολίας να ονομασθούν ″**χαμηλή**″ και ″**υψηλή**″ στάθμη αντίστοιχα.*

Συνήθως συμβολίζουμε την επίδραση ενός παράγοντα με ένα κεφαλαίο Λατινικό γράμμα. Έτσι το A αναφέρεται στην επίδραση του παράγοντα Α, το B αναφέρεται στην επίδραση του παράγοντα Β και το AB αναφέρεται στην αλληλεπίδραση των παραγόντων Α και Β.
Στον 2^2 παραγοντικό σχεδιασμό η **χαμηλή** και **υψηλή** στάθμη των Α και Β συμβολίζεται με $-$ και $+$ αντίστοιχα στους παράγοντες Α και Β.
Έτσι το $-$ στον παράγοντα Α παριστάνει την **χαμηλή** στάθμη του Α,
το $+$ στον παράγοντα Α παριστάνει την **υψηλή** στάθμη του Α,
το $-$ στον παράγοντα Β παριστάνει την **χαμηλή** στάθμη του Β,
και τέλος το $+$ στον παράγοντα Β παριστάνει την **υψηλή** στάθμη του Β.
Οι τέσσερις αγωγές (συνδυασμοί επιπέδων) στο σχεδιασμό συνήθως παριστάνονται με μικρά γράμματα. Επομένως η υψηλή στάθμη οποιουδήποτε παράγοντα σε αγωγή συμβολίζεται με το αντίστοιχο μικρό γράμμα και η χαμηλή στάθμη ενός παράγοντα συμβολίζεται με την απουσία του αντίστοιχου γράμματος. Δηλαδή, η αγωγή a παριστάνει τον παράγοντα Α στην υψηλή στάθμη και τον Β στην χαμηλή στάθμη, η αγωγή b παριστάνει τον παράγοντα Α στην χαμηλή στάθμη και τον Β στην υψηλή στάθμη και το ab παριστάνει και τους δύο παράγοντες στην υψηλή στάθμη. Συνήθως το (1) το χρησιμοποιούμε για να συμβολίζουμε την περίπτωση στην οποία και οι δύο παράγοντες βρίσκονται στην χαμηλή στάθμη.

Παράδειγμα 10 *Έστω ο 2^2 Παραγοντικός Σχεδιασμός με παράγοντες A, B και αλληλεπίδραση AB. Οι επιδράσεις, οι αγωγές και οι στάθμες δίνονται στο παρακάτω πίνακα.*

Επιδράσεις	(1)	a	b	ab
A	-1	$+1$	-1	$+1$
B	-1	-1	$+1$	$+1$
AB	$+1$	-1	-1	$+1$

Παράδειγμα 11 *Ο παρακάτω πίνακας δίνει τα Αλγεβρικά Πρόσημα για τον υπολογισμό των επιδράσεων στον 2^2 παραγοντικό σχεδιασμό.*

Η επίδραση ενός παράγοντα ορίζεται να είναι η αλλαγή που γίνεται στην **απόκριση** (response) από την αλλαγή στο επίπεδο του παράγοντα. Αυτό

ΣΥΝΔΥΑΣΜΟΣ ΑΓΩΓΗΣ	ΠΑΡΑΓΟΝΤΙΚΗ ΕΠΙΔΡΑΣΗ			
	(I)	A	B	AB
(1)	$+$	$-$	$-$	$+$
a	$+$	$+$	$-$	$-$
b	$+$	$-$	$+$	$-$
ab	$+$	$+$	$+$	$+$

συνήθως καλείται **κύρια επίδραση** (main effect) επειδή αναφέρεται στους παράγοντες που είναι πρωταρχικής σημασίας στο πείραμα.
Σε κάποια πειράματα παρατηρούμε μερικές φορές ότι η διαφορά στην απόκριση μεταξύ των επιπέδων ενός παράγοντα δεν είναι η ίδια σ' όλα τα επίπεδα των άλλων παραγόντων. Σε αυτή την περίπτωση, λέμε ότι υπάρχει **αλληλεπίδραση** (interaction) μεταξύ των παραγόντων.
Παρατηρούμε επομένως ότι οι παραγοντικοί σχεδιασμοί 2 ή και περισσότερων επιπέδων έχουν αρκετά πλεονεκτήματα. Αρχικά είναι περισσότερο αποδοτικοί απ' ότι τα πειράματα ενός παράγοντα την φορά τα αποία αλλάζουν ένα παράγοντα κάθε φορά. Επιπλέον, ένας παραγοντικός σχεδιασμός είναι αναγκαίος, όταν υπάρχουν **αλληλεπιδράσεις** (interactions) για να αποφύγουμε τυχόν παραπλανητικά συμπεράσματα. Τέλος οι παραγοντικοί σχεδιασμοί επιτρέπουν, οι επιδράσεις ενός παράγοντα να εκτιμώνται σε αρκετά επίπεδα των άλλων παραγόντων, παρέχοντας μας συμπεράσματα, τα οποία είναι έγκυρα σ'ένα εύρος πειραματικών συνθηκών.

Ορισμός 11 *Ορίζουμε την* **μέση επίδραση** *ενός παράγοντα, σαν την αλλαγή που προξενείται στην απόκριση από την αλλαγή στη στάθμη αυτού του παράγοντα, που προσδιορίζεται κατά μέσο όρο πάνω στις στάθμες του άλλου παράγοντα.*

Η επίδραση του Α στην **χαμηλή** στάθμη του Β ισούται:

$$\frac{a-(1)}{n}.$$

Η επίδραση του Α στην **υψηλή** στάθμη του Β ισούται:

$$\frac{ab-b}{n}.$$

Παίρνοντας τον μέσο όρο των δύο ποσοτήτων έχουμε:

$$A = \frac{ab + a - b - (1)}{2n}. \tag{2.1}$$

Η μέση επίδραση του B βρίσκεται από τον μέσο όρο των επιδράσεων του B στη χαμηλή στάθμη του A που ισούται με: $\frac{b-(1)}{n}$ και της επίδρασης του B στην υψηλή στάθμη του A που ισούται με: $\frac{ab-a}{n}$.
Έχουμε λοιπόν:

$$B = \frac{ab - a + b - (1)}{2n}. \tag{2.2}$$

Τέλος ορίζουμε την **αλληλεπίδραση** AB σαν την μέση διαφορά μεταξύ της επίδρασης του A ή B στη υψηλή στάθμη του B ή A και της επίδρασης του, του A ή B στη χαμηλή στάθμη του B ή A.
Επομένως έχουμε:

$$AB = \frac{ab + (1) - a - b}{2n}. \tag{2.3}$$

Στην συνέχεια θέλουμε να προσδιορίσουμε ποιες μεταβλητές είναι πιθανόν να είναι σημαντικές. Για να το κάνουμε αυτό μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε πίνακα ANOVA.

Στην περίπτωση μας όπου $k = 2$ (2^k σχεδιασμοί) θεωρούμε τα αθροίσματα τετραγώνων για τους παράγοντες A, B και την αλληλεπίδραση AB. Σημειώνουμε ότι από την σχέση (1.1), χρησιμοποιούμε μια **αντίθεση** (contrast)για την εκτίμηση του A. Ορίζουμε:

$$Contrast(A) = ab - b + a - (1) \tag{2.4}$$

Συνήθως την αντίθεση αυτή την ονομάζουμε συνολική επίδραση του A. Αντιστοίχως από τις σχέσεις (2.2) και (2.3) βρίσκουμε την συνολική επίδραση των B και AB.

Ανάλυση Διασποράς μπορούμε να κάνουμε χρησιμοποιώντας πολλαπλή γραμμική παλινδρόμηση όπου ο πίνακας σχεδιασμού X έχει στοιχεία 0 και 1 (ψευδομεταβλητές). Η ειδική μορφή του πίνακα σχεδιασμού επιτρέπει την αντιστροφή του πίνακα πληροφορίας $X^T X$ και την εκτίμηση των άγνωστων παραμέτρων, ευκολότερα με την μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων.

Στα προβλήματα Ανάλυσης Διασποράς έχουμε ένα πείραμα, όπου συμμετέχουν διάφοροι παράγοντες (factors)και το αποτέλεσμα του πειράματος είναι η εξαρτημένη μεταβλητή Y. Κάθε παράγοντας εμφανίζεται σε δύο ή περισσότερες στάθμες (levels). Όταν στο πείραμα έχουμε ένα παράγοντα σε K-στάθμες (επίπεδα), τότε λέμε ότι έχουμε Ανάλυση Διασποράς μ'εναν παράγοντα (One way factor Analysis of Variance), όταν έχουμε δύο παράγοντες έχουμε Ανάλυση Διασποράς με δύο παράγοντες (Two factors Analysis of Variance) κτλ.
Το άθροισμα των τετραγώνων για οποιαδήποτε αντίθεση είναι:

$$SSc = \frac{[\sum_{i=1}^{2^k} c_i Y_i]^2}{n \sum_{i=1}^{2^k} c_i^2} \tag{2.5}$$

και έχει ένα βαθμό ελευθερίας (β.ε).

Στην ειδική περίπτωση όπου $k = 2$, από την εξίσωση (2.5) έχουμε:

$$SSA = \frac{[ab + a - b - (1)]^2}{4n} \tag{2.6}$$

$$SSB = \frac{[ab + b - a - (1)]^2}{4n} \tag{2.7}$$

$$SSAB = \frac{[ab + (1) - a - b]^2}{4n} \tag{2.8}$$

να είναι τα αθροίσματα τετραγώνων για τους παράγοντες A, B, και την αλληλεπίδραση AB αντίστοιχα.
Το συνολικό άθροισμα τετραγώνων βρίσκεται κατά συνήθη τρόπο, ως εξής :

$$SST = \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{k=1}^{n} Y_{ijk}^2 - \frac{Y_{...}^2}{4n} \tag{2.9}$$

όπου $Y_{...} = \sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2}\sum_{k=1}^{n} Y_{ijk}$.

Γενικά, το SST έχει $4n-1$ βαθμούς ελευθερίας. Το άθροισμα των τετραγώνων των σφαλμάτων έχει $4(n-1)$ βαθμούς ελευθερίας και υπολογίζεται ως εξής :

$$SSE = SST - SSA - SSB - SSAB. \tag{2.10}$$

2.2.1 Παραγοντικοί Σχεδιασμοί με Τρία ή Περισσότερα Επίπεδα

Οι πιο δημοφιλείς παραγοντικοί σχεδιασμοί είναι αυτοί των δύο επιπέδων. Παρόλα αυτά όμως χρησιμοποιούνται (σπανιότερα ίσως) και παραγοντικοί σχεδιασμοί με περισσότερα από δύο επίπεδα όπως για παράδειγμα οι παραγοντικοί σχεδιασμοί $3^k, 4^k, \ldots$ κ.τ.λ.

Οι πλήρεις παραγοντικοί σχεδιασμοί **τριών ή περισσοτέρων επιπέδων** είναι πολύ χρήσιμοι στην εύρεση των τετραγωνικών επιδράσεων (quadratic effects), και συμβολίζονται ως εξής : l^k. Αυτό σημαίνει ότι οι k παράγοντες εξετάζονται ο κάθε ένας σε l επίπεδα. Παραδείγματος χάριν στην περίπτωση του 3^k σχεδιασμού ο κάθε ένας από τους k παράγοντες εξετάζεται σε τρία επίπεδα. Όμοια, ίδιο αποτέλεσμα ισχύει και στην περίπτωση περισσοτέρων επιπέδων. Γενικά τα l επίπεδα θα τα συμβολίζουμε αριθμητικά ως $0, 1, 2 \ldots, l$.

Ο λόγος για τον οποίο μπορεί κάποιος ερευνητής να χρησιμοποιήσει στην έρευνα του ένα παραγοντικό σχεδιασμό με τρία ή περισσότερα επίπεδα είναι για να μπορεί να προσαρμόσει την πιθανή κυρτότητα (curvate) στην συνάρτηση απόκρισης και για να μπορέσει επίσης να αντιμετωπίσει την περίπτωση στην οποία μπορεί να εμφανιστούν περισσότερα από δύο ονομαστικά ή ποιοτικά επίπεδα στους k-παράγοντες μας.

Τέλος **οι Παραγοντικοί Σχεδιασμοί με τρια ή περισσότερα επίπεδα** διευκολύνουν την έρευνα του επιστήμονα και του επιτρέπουν την μελέτη τετραγωνικών σχέσεων (quadratic relationship) μεταξύ της συνάρτησης απόκρισης και κάθε ενός από τους παράγοντες του μοντέλου που εξετάζει.

Δυστυχώς όμως, παρόλα τα πλεονεκτήματα που μπορεί να προσφέρουν οι παραγοντικοί σχεδιασμοί με περισσότερα από δύο επίπεδα, από πλευράς κόστους η εκτέλεση τέτοιων σχεδιασμών είναι πολύ δαπανηρή και χρονοβόρα, και έτσι οι σχεδιασμοί αυτοί αποφεύγονται. Έτσι εναλλακτικοί σχεδιασμοί χρησιμοποιούνται σε αυτές τις περιπτώσεις.

2.2.2 2^k Παραγοντικοί Σχεδιασμοί

Η πιο γενική περίπτωση παραγοντικού σχεδιασμού με δύο μόνο στάθμες (επίπεδα) είναι αυτή με k παράγοντες. Αυτές οι στάθμες μπορεί να είναι είτε ποσοτικές μεταβλητές, όπως είναι δύο τιμές της θερμοκρασίας ή του χρόνου, είτε να είναι ποιοτικές, όπως παραδείγματος χάρην δύο μηχανές ή η παρουσία ή η απουσία ενός παράγοντα. Μια πλήρης επανάληψη ενός τέτοιου σχεδιασμού απαιτεί $2 \times 2 \times 2 \times \ldots \times 2$=$2^k$ παρατηρήσεις και ο σχεδιασμός καλείται 2^k παραγοντικός σχεδιασμός.

Ο 2^k παραγοντικός σχεδιασμός είναι ιδιαίτερα χρήσιμος στα αρχικά στάδια της πειραματικής εργασίας, όταν υπάρχουν πολλοί παράγοντες που πρέπει να εξεταστούν. Αυτός μας εφοδιάζει με το μικρότερο αριθμό εκτελέσεων με τις οποίες οι k παράγοντες πρέπει να μελετηθούν σ' έναν πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό.

Το **στατιστικό μοντέλο** για έναν 2^k σχεδιασμό θα περιέχει k κύριες επιδράσεις, $\begin{pmatrix} k \\ 2 \end{pmatrix}$ αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων, $\begin{pmatrix} k \\ 3 \end{pmatrix}$ αλληλεπιδράσεις τριων παραγόντων, ..., και μια αλληλεπίδραση k -παραγόντων. Δηλαδή, για έναν 2^k παραγοντικό σχεδιασμό το πλήρες μοντέλο θα περιέχει $2^k - 1$ επιδράσεις. Ο συμβολισμός που εισάγαμε προηγουμένως για τις αγωγές (συνδυασμούς επιπέδων) χρησιμοποιείται επίσης και εδώ.

Παράδειγμα 12 *Σε εναν 2^5 σχεδιασμό το abd συμβολίζει τις αγωγές (συνδυασμό επιπέδων) με τους παράγοντες A, B και D στην υψηλή στάθμη και τους παράγοντες C και E στην χαμηλή στάθμη. Οι αγωγές (συνδυασμοί επιπέδων) μπορούν να γραφούν στην τυπική διάταξη εισάγοντας τους παράγοντες έναν κάθε φορά, με κάθε νέο παράγοντα να συνδυάζεται με όλους όσους προηγούνται από αυτόν. Για παράδειγμα η τυπική διάταξη για έναν 2^4 σχεδιασμό είναι:*

$(1), a, b, ab, c, ac, bc, abc, d, ad, bd, abd, cd, acd, bcd$ *και* $abcd$.

Για να εκτιμήσουμε μια επίδραση ή να υπολογίσουμε το άθροισμα τετραγώνων για μια επίδραση, πρέπει πρώτα να προσδιορίσουμε την αντίθεση που αντιστοιχεί σ' αυτήν την επίδραση. Αυτό μπορεί να γίνει πάντοτε χρησιμοποιώντας έναν πίνακα με θετικά και αρνητικά πρόσημα. Εντούτοις, για μεγάλες τιμές του k αυτό δεν είναι βολικό και μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε μια εναλλακτική μέθοδο.

Γενικά, προσδιορίζουμε την αντίθεση (contrast) για την αλληλεπίδραση $AB\ldots K$ αναπτύσσοντας το δεξιό μέρος της παρακάτω σχέσης :

$$Contrast_{(AB\ldots K)} = (a \pm 1)(b \pm 1)\ldots(k \pm 1) \tag{2.11}$$

Κατά την ανάπτυξη της σχέσης (2.11) χρησιμοποιείται η συνήθης άλγεβρα όπου στην τελική έκφραση αντικαθιστούμε το 1 με το (1). Το πρόσημο σε κάθε ζευγάρι παρενθέσεων είναι αρνητικό αν ο παράγοντας συμπεριλαμβάνεται στην αλληλεπίδραση και θετικό αν ο παράγοντας δεν περιλαμβάνεται. Ένα παράδειγμα για να εξηγήσουμε την χρήση της σχέσης (2.11) είναι το ακόλουθο.

Παράδειγμα 13 *Θεωρούμε έναν 2^5 παραγοντικό σχεδιασμό. Η αντίθεση για την $ABCD$ θα είναι:*

$$Contrast(ABCD) = (a-1)(b-1)(c-1)(d-1)(e+1) = abcde + cde + bde + ade + bce + ace + abe + e + abcd + cd + bd + ad + bc + ac + ab + (1) - a - b - c - d - abc - abd - acd - bcd - ae - be - ce - abce - de - abde - acde - bcde.$$

Όταν υπολογισθούν οι αντιθέσες για τις αλληλεπιδράσεις, μπορούμε να εκτιμήσουμε τις αλληλεπιδράσεις και να υπολογίσουμε τα **αθροίσματα τετραγώνων** σύμφωνα με τις σχέσεις :

$$AB\ldots K = \frac{2}{n2^k}(ContrastAB\ldots K) \tag{2.12}$$

και

$$SS_{AB\ldots K} = \frac{1}{n2^k}(ContrastAB\ldots K)^2 \tag{2.13}$$

αντίστοιχα, όπου το n συμβολίζει τον αριθμό επαναλήψεων.

Ορισμός 12 *Αν έχουμε μια μόνο επανάληψη ενός 2^k σχεδιασμού τότε αυτός ονομάζεται* **μη-επαναλαμβανόμενος** *(unreplicated) παραγοντικός σχεδιασμός.*

Με μια μόνο επανάληψη δεν μπορούμε να εκτιμήσουμε το σφάλμα. Μια προσέγγιση στην ανάλυση ενός μη-επαναλαμβανόμενου παραγοντικού σχεδιασμού είναι να υποθέσουμε ότι μερικές υψηλής τάξης αλληλεπιδράσεις είναι ασήμαντες και έτσι συνδυάζουμε τα μέσα τετράγωνα αυτών για να εκτιμήσουμε το σφάλμα. Αυτό στηρίζεται στην ″**Αρχή της Σποραδικότητας των Αλληλεπιδράσεων**″ (Sparcity of Interactions Principle) . Δηλαδή, τα περισσότερα συστήματα κυριαρχούνται από μερικές κύριες επιδράσεις και αλληλεπιδράσεις χαμηλής τάξης και οι περισσότερες αλληλεπιδράσεις υψηλής τάξης είναι αμελητέες.

Περισσότερες λεπτομέρειες μπορεί κανείς να βρει στους Σ. Γεωργίου και Σ. Στυλιανού, (2009).

2.2.3 Γραμμικό Μοντέλο για τους 2^2 Παραγοντικούς Σχεδιασμούς

Έστω Y_{ijk} είναι η παρατηρούμενη απόκριση, όταν ο παράγοντας A είναι στο i-στο επίπεδο για $i = 1, \ldots, a$ και ο παράγοντας B είναι στο j-στο επίπεδο για $j = 1, \ldots, b$ για την k-οστή επανάληψη για $k = 1, \ldots, n$. Η σειρά με την οποία παίρνονται οι abn παρατηρήσεις επιλέγεται τυχαία και έτσι αυτός ο σχεδιασμός είναι ένας πλήρως τυχαιοποιημένος σχεδιασμός.

Οι παρατηρήσεις μπορούν να περιγραφούν από το γραμμικό στατιστικό μοντέλο που είναι της μορφής :

$$\begin{gathered} Y_{ijk} = \mu + \tau_i + \beta_j + (\tau\beta)_{ij} + \varepsilon_{ijk} \\ i = 1, \ldots, a,\ j = 1, \ldots, b,\ k = 1, \ldots, n, \end{gathered} \tag{2.14}$$

όπου:

μ: είναι η επίδραση του γενικού μέσου,

τ_i: είναι η επίδραση του i-στου επιπέδου του παράγοντα A,

β_j: είναι η επίδραση του j-στου επιπέδου του παράγοντα B,

$(\tau\beta)_{ij}$: είναι η αλληλεπίδραση μεταξύ των παραγόντων A και B,

ε_{ijk}: είναι η συνιστώσα του τυχαίου σφάλματος.

Και οι δύο παράγοντες αρχικά υποτίθεται ότι είναι σταθεροί και επομένως ορίζουμε τις επιδράσεις των αγωγών σαν τις αποκλίσεις από τον γενικό μέσο. Για την μονοσήμαντη εκτίμηση των παραμέτρων τ_i και β_j υποθέτουμε ότι:

$$\sum_{i=1}^{a} \tau_i = 0 \tag{2.15}$$

$$\sum_{j=1}^{b} \beta_j = 0 \tag{2.16}$$

Παρόμοια και οι αλληλεπιδράσεις είναι σταθερές και υποθέτουμε ότι:

$$\sum_{i=1}^{a} (\tau\beta)_{ij} = 0. \tag{2.17}$$

και

$$\sum_{j=1}^{b} (\tau\beta)_{ij} = 0. \tag{2.18}$$

Αφού υπάρχουν n επαναλήψεις του πειράματος, υπάρχουν συνολικά abn παρατηρήσεις.

Συνεχίζοντας, έστω τώρα $Y_{i..}$ συμβολίζει το άθροισμα όλων των παρατηρήσεων το i-επίπεδο του παράγοντα A, $Y_{.j.}$ συμβολίζει το άθροισμα όλων των παρατηρήσεων το j-επίπεδο του παράγοντα B, $Y_{ij.}$ συμβολίζει το άθροισμα όλων των παρατηρήσεων στο (i, j) κελί και $Y_{...}$ συμβολίζει το γενικό άθροισμα όλων των παρατηρήσεων.

Ορίζουμε:

$\bar{Y}_{i..}$, $\bar{Y}_{.j.}$, $\bar{Y}_{ij.}$, και $\bar{Y}_{...}$ να είναι ο μέσος όρος της i-γραμμής , της j-στήλης, του (i, j) κελιού και ο γενικός μέσος αντίστοιχα. Τα αθροίσματα και οι μέσοι δίνονται από τις παρακάτω σχέσεις :

$Y_{i..} = \sum_{j=1}^{b} \sum_{k=1}^{n} Y_{ijk}$

$\bar{\mathbf{Y}}_{\mathbf{i}..} = \frac{\mathbf{Y_{i..}}}{\mathbf{bn}}, \quad i = 1, \ldots, a$

$Y_{.j.} = \sum_{i=1}^{a} \sum_{k=1}^{n} Y_{ijk}$

$\bar{\mathbf{Y}}_{.\mathbf{j}.} = \frac{\mathbf{Y_{.j.}}}{\mathbf{an}}, \quad j = 1, \ldots, b$

$Y_{ij.} = \sum_{k=1}^{n} Y_{ijk}$

$\bar{\mathbf{Y}}_{\mathbf{ij}.} = \frac{\mathbf{Y_{ij.}}}{\mathbf{n}}, \quad i = 1, \ldots, a, \ j = 1, \ldots, b,$

$Y_{...} = \sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{b} \sum_{k=1}^{n} Y_{ijk}$

$\bar{\mathbf{Y}}_{...} = \frac{Y_{...}}{abn}$

Το **συνολικό διορθωμένο** (corrected) **άθροισμα τετραγώνων** μπορεί να γραφεί και ως εξής :

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n}[Y_{ijk} - \bar{Y_{...}}]^2 &= \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n}[(\bar{Y_{i..}} - \bar{Y_{...}}) + (\bar{Y_{.j.}} - \bar{Y_{...}}) \\
&+ (\bar{Y_{ij.}} - \bar{Y_{i..}} - \bar{Y_{.j.}} - \bar{Y_{...}}) + (Y_{ijk} - \bar{Y_{ij.}})]^2 \\
&= bn\sum_{i=1}^{a}(\bar{Y_{i..}} - \bar{Y_{...}})^2 + an\sum_{j=1}^{b}(\bar{Y_{.j.}} - \bar{Y_{...}})^2 \\
&+ n\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}(\bar{Y_{ij.}} - \bar{Y_{i..}} - \bar{Y_{.j.}} - \bar{Y_{...}})^2 \\
&+ \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n}(Y_{ijk} - \bar{Y_{ij.}})^2
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Μπορούμε να γράψουμε την εξίσωση (2.19) και ως εξής :

$$SST = SSA + SSB + SSAB + SSE. \tag{2.20}$$

Ο αριθμός των βαθμών ελευθερίας (β.ε) που αντιστοιχεί σε κάθε άθροισμα τετραγώνων δίνονται στο πίνακα 2.1.

Πίνακας 2.1: β.ε

Επίδραση	**Βαθμοί Ελευθερίας**
A	$a-1$
B	$b-1$
Αλληλεπίδραση AB	$(a-1)(b-1)$
Σφάλμα	$ab(n-1)$
Σύνολο	$abn-1$

Επισημαίνουμε ότι τα:

SST: είναι το συνολικό άθροισμα τετραγώνων,

SSA: είναι το άθροισμα τετραγώνων που οφείλεται στον παράγοντα A,

SSB: είναι το άθροισμα τετραγώνων που οφείλεται στον παράγοντα B,

SSAB: είναι το άθροισμα τετραγώνων που οφείλεται στην αλληλεπίδραση μεταξύ των παραγόντων A και B,

SSE: είναι το άθροισμα τετραγώνων που οφείλεται στο σφάλμα (error).

Τώρα χρειάζεται να βρούμε τα μέσα τετράγωνα. Κάθε άθροισμα τετραγώνων διαιρούμενο με τους β.ε του, δίνει το αντίστοιχο μέσο τετράγωνο. Συνεπώς:

$$MSA = \frac{SSA}{a-1},$$

$$MSB = \frac{SSB}{b-1},$$

$$MSAB = \frac{SSAB}{(a-1)(b-1)},$$

$$MSE = \frac{SSE}{ab(n-1)}.$$

Και έτσι δημιουργήσαμε τον πίνακα ανάλυσης διασποράς (ANOVA) για έναν παραγοντικό σχεδιασμό με δύο παράγοντες :

Πίνακας 2.2: Πίνακας ANOVA για έναν παραγοντικό σχεδιασμό με δύο παράγοντες

Πηγή Μεταβολής	**Άθρ. Τετρ.**	**Βαθμοί Ελευθερίας**	**Μέσα Τετράγωνα**	**Fo - Στατιστικό**
Αγωγές του A	SSA	$a-1$	$MSA = \frac{SSA}{(a-1)}$	$F_o = \frac{MSA}{MSE}$
Αγωγές του B	SSB	$b-1$	$MSB = \frac{SSB}{(b-1)}$	$F_o = \frac{MSB}{MSE}$
Αλληλεπίδραση	$SSAB$	$(a-1)(b-1)$	$MSAB = \frac{SSAB}{(a-1)(b-1)}$	$F_o = \frac{MSAB}{MSE}$
Σφάλμα	SSE	$ab(n-1)$	$MSE = \frac{SSE}{ab(n-1)}$	$-$
Ολική	SST	$abn-1$	$-$	$-$

Για να υπολογίσουμε τα αθροίσματα τετραγώνων στη σχέση (2.20) είναι πιο εύκολο να χρησιμοποιήσουμε τους παρακάτω ισοδύναμους τύπους. Το **συνολικό άθροισμα τετραγώνων** δίνεται από τη σχέση:

$$\mathbf{SST} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n} Y_{ijk}^2 - \frac{Y_{\dots}^2}{abn} \tag{2.21}$$

Τα αθροίσματα τετραγώνων για τις κύριες επιδράσεις είναι:

$$\mathbf{SSA} = \sum_{i=1}^{a} \frac{Y_{i..}^2}{bn} - \frac{Y_{...}^2}{abn} \tag{2.22}$$

και

$$\mathbf{SSB} = \sum_{j=1}^{b} \frac{Y_{.j.}^2}{bn} - \frac{Y_{...}^2}{abn}. \tag{2.23}$$

Το άθροισμα τετραγώνων για την αλληλεπίδραση AB είναι:

$$\mathbf{SSAB} = SSsubtotal - SSA - SSB - SSAB, \tag{2.24}$$

όπου subtotal είναι το υπό-άθροισμα.

$$\mathbf{SSsubtotal} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b} \frac{Y_{ij.}^2}{n} - \frac{Y_{...}^2}{abn}. \tag{2.25}$$

Τέλος το **άθροισμα τετραγώνων** για το σφάλμα το υπολογίζουμε ως εξής :

$$\mathbf{SSE} = SST - SSA - SSB - SSAB. \tag{2.26}$$

Παράδειγμα 14 *Έστω ότι σε μια χημική αντίδραση θέλουμε να μελετήσουμε την συγκέντρωση του χημικού αντιδραστηρίου και την ποσότητα του καταλύτη. Ονομάζουμε παράγοντα Α την συγκέντρωση του χημικού αντιδραστηρίου με επίπεδα* 15% *και* 25% *και παράγοντα Β την ποσότητα του καταλύτη με επίπεδα* $1kg$ *και* $2kg$*. Το πείραμα επαναλαμβάνεται τρεις φορές οπότε προκύπτουν οι παρακάτω παρατηρήσεις :*

Αρχικά θέλουμε να εκτιμήσουμε τις κύριες επιδράσεις και τις αλληλεπιδράσεις των παραγόντων.
Επομένως :

Παράγοντες A	B	**Συνδυασμοί Επιπέδων**	**Επαναλήψεις** **I**	**II**	**III**	**Σύνολο**
$-$	$-$	A χαμηλό, B χαμηλό	28	25	27	80
$+$	$-$	A υψηλό, B χαμηλό	36	32	32	100
$-$	$+$	A χαμηλό, B υψηλό	18	19	23	60
$+$	$+$	A υψηλό, B υψηλό	31	30	29	90

Η **κύρια επίδραση του παράγοντα A** *είναι:*

$$A = \frac{ab + a - b - (1)}{2n} = \frac{90 + 100 - 60 - 80}{6} = \frac{190 - 140}{6} = \mathbf{8.33}$$

Η **κύρια επίδραση του B** *είναι:*

$$B = \frac{ab - a + b - (1)}{2n} = \frac{90 + 60 - 100 - 80}{6} = \frac{150 - 180}{6} = -\mathbf{5.00}$$

Τέλος **η αλληλεπίδραση των AB** *είναι:*

$$AB = \frac{ab + (1) - a - b}{2n} = \frac{90 + 80 - 100 - 60}{6} = \frac{170 - 160}{6} = \mathbf{1.67}$$

όπου το n συμβολίζει τον αριθμό των επαναλήψεων.

Αντιθέσεις - Contrast

Στα 2^k πειράματα σαν αντιθέσεις ορίζουμε τη συνολική επίδραση (total effects) των παραγόντων και των αλληλεπιδράσεων τους.
Επομένως :

$$Contrast(A) = ab - b + a - (1)$$

$$Contrast(B) = ab + b - a - (1)$$

$$Contrast(AB) = ab + (1) - b - a.$$

Τα αθροίσματα τετραγώνων των παραγόντων και των αλληλεπιδρασεών τους θα είναι:

$$SSA = \frac{[ab + a - b - (1)]^2}{4n} = \frac{[90 + 100 - 80 - 60]^2}{12} = \frac{2500}{12} \Rightarrow \mathbf{SSA = 208.33}$$

$$SSB = \frac{[ab + b - a - (1)]^2}{4n} = \frac{[90 + 60 - 100 - 80]^2}{12} = \frac{900}{12} \Rightarrow \mathbf{SSB = 75}$$

$$SSAB = \frac{[ab + (1) - a - b]^2}{4n} = \frac{[90 + 80 - 100 - 60]^2}{12} = \frac{100}{12} \Rightarrow \mathbf{SSAB = 8.33}$$

Το **συνολικό άθροισμα τετραγώνων** *ισούται:*

$$\begin{aligned} SST &= \sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2}\sum_{k=1}^{n} Y_{ijk}^2 - \frac{Y^2 \ldots}{4n} \\ &= \frac{(28)^2 + (25)^2 + (27)^2 + (36)^2 + (32)^2 + (32)^2}{1} \\ &+ \frac{(18)^2 + (19)^2 + (23)^2 + (31)^2 + (30)^2 + (29)^2}{1} \\ &= \frac{[28 + 25 + 27 + 36 + \ldots + 30 + 29]^2}{12} = 9398 - 9075 = 323 \end{aligned}$$

$\Rightarrow \mathbf{SST = 323}$.

Τέλος το **άθροισμα των τετραγώνων των σφαλμάτων** *ισούται:*

$SSE = SST - SSA - SSB - SSAB \Rightarrow$

$SSE = 323 - 208.33 - 75 - 8.33 = 323 - 291.66$

$\Rightarrow \mathbf{SSE = 31.34}.$

Στην συνέχεια θα παρουσιάσουμε τον πίνακα Ανάλυσης Διασποράς (ANOVA) και θα συμπεράνουμε από τα αποτελέσματα που θα βρούμε, ποιές επιδράσεις και αλληλεπιδράσεις είναι σημαντικές.

Πίνακας 2.3: Πίνακας Ανάλυσης Διασποράς (ANOVA)

Πηγή Μεταβολής	**Άθροισμα Τετραγώνων**	**Βαθμοί Ελευθερίας**	**Μέσα Τετράγωνα**	F_o - **Στατιστικό**
Αγωγές του A	SSA=208.33	1	MSA =208.33	F_o=53.15
Αγωγές του B	SSB=75	1	MSB=75	F_o=19.13
Αλληλεπίδραση AB	$SSAB$=8.33	1	$MSAB$=8.33	F_o=2.13
Σφάλμα	SSE=31.34	$4(n-1)$=8	MSE=3.92	–
Ολική	SST=323	$4n-1$=11	–	–

Για τον παράγοντα A έχουμε:
$F_{a,v_1,v_2} = F_{0.01,1,8} = 11.26 < |F_o| = |53.15|$.
Άρα ο παράγοντας Α είναι στατιστικά σημαντικός.

Ομοίως για τον παράγοντα B έχουμε:
$F_{a,v_1,v_2} = F_{0.01,1,8} = 11.26 < |F_o| = |-19.13|$.
Άρα ο παράγοντας Β είναι στατιστικά σημαντικός.

Τέλος για την αλληλεπίδραση AB έχουμε:
$F_{a,v_1,v_2} = F_{0.01,1,8} = 11.26 > |F_o| = |2.13|$.
Άρα η αλληλεπίδραση ΑΒ **δεν** *είναι στατιστικά σημαντική.*

2.2.4 Γραμμικό Μοντέλο για τους 2^k Παραγοντικούς Σχεδιασμούς

Ισχύουν ακριβώς τα ίδια με το γραμμικό μοντέλο για παραγοντικούς σχεδιασμούς με 2 παράγοντες απλά τώρα εδώ δεν έχουμε δύο κύριες επιδράσεις και μια αλληλεπίδραση αλλά το στατιστικό μοντέλο για έναν 2^k παραγοντικό σχεδιασμό θα περιέχει k-κύριες επιδράσεις, $\binom{k}{2}$ αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων, $\binom{k}{3}$ αλληλεπιδράσεις τριών παραγόντων, $\ldots$ και μια αλληλεπίδραση k- παραγόντων. Τέλος οι βαθμοί ελευθερίας (β.ε.) για το σφάλμα θα είναι $2^k(n-1)$ ενώ για το σύνολο (ολικό) θα είναι $n2^k - 1$ όπου n είναι ο αριθμός των επαναλήψεων και k οι παράγοντες.

2.2.5 Ομοιομορφία (Uniformity)

Η **ομοιομορφία** είναι μια σημαντική ιδιότητα των Παραγοντικών Σχεδιασμών για πειράματα με τη χρήση του υπολογιστή (computer experiments). Η ιδιότητα αυτή προτάθηκε από τους Fang, Li and Sudjianto το (2006). Χρησιμοποιήθηκαν διάφορα κριτήρια ομοιομορφίας για την ταξινόμηση των Ομοιόμορφων Σχεδιασμών (uniform design) σύμφωνα με τους Fang and Wang (1994), Fang, Lin, Winker and Zhang (2000).

Συγκεκριμένα οι Fang and Mukerjee το (2000) ανακάλυψαν ότι υπάρχει μια στενή σχέση μεταξύ του Κριτηρίου Ελάχιστης Απόκλισης (Minimum Aber-

ration) και του Κριτηρίου της Ομοιομορφίας (Uniformity) για τους Κανονικούς Παραγοντικούς Σχεδιασμούς δύο-επιπέδων.
Αυτή η σχέση μελετήθηκε και από άλλους ερευνητές όπως για παράδειγμα από τους Ma and Fang το (2001), που κατάφεραν να αποδείξουν ότι η παραπάνω σχέση ισχύει γενικά για όλους τους Παραγοντικούς Σχεδιασμούς δύο επιπέδων.

2.3 Κλασματικοί Παραγοντικοί Σχεδιασμοί με δύο επίπεδα

Σ'εναν 2^k **παραγοντικό σχεδιασμό**, καθώς αυξάνει ο αριθμός των παραγόντων, ο αριθμός των εκτελέσεων που απαιτούνται για μια πλήρη επανάληψη του σχεδιασμού αυξάνει πάρα πολύ γρήγορα.

Παράδειγμα 15 *Μια πλήρης επανάληψη του 2^6 σχεδιασμού απαιτεί 64 εκτελέσεις. Σ' αυτόν τον σχεδιασμό από τους 63 βαθμούς ελευθερίας (β.ε) μόνο οι 6 αντιστοιχούν στις κύριες επιδράσεις και μόνο 15 βαθμοί ελευθερίας αντιστοιχούν στις αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων. Οι υπόλοιποι 42 β.ε. αντιστοιχούν στις αλληλεπιδράσεις τριών και περισσοτέρων παραγόντων.*

Υποθέτωντας ότι ορισμένες υψηλής τάξης αλληλεπιδράσεις είναι ασήμαντες, μπορούμε να πάρουμε πληροφορίες για τις κύριες επιδράσεις και τις αλληλεπιδράσεις χαμηλής τάξης εκτελώντας μόνο ένα κλάσμα του πλήρους παραγοντικού πειράματος.

Η κυριότερη χρήση των κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών είναι σε πειράματα κρησαρίσματος (screening experiments).

Ορισμός 13 *Ένας σχεδιασμός θα καλείται* **κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός** *(fractional factorial designs) δύο επιπέδων και θα συμβολίζεται με 2^{k-p} εάν:*

- *Κάθε παράγοντας του έχει 2 επίπεδα*
- *Οι παράγοντες είναι ανά δύο ορθογώνιοι.*
- *Έχει k-παράγοντες (στήλες).*

- *Έχει 2^{k-p} εκτελέσεις (γραμμές) (runs).*

- *Μπορεί να εκτιμά μέχρι k-κύριες επιδράσεις (main effects).*

- *Έχει p ανεξάρτητες ορίζουσες σχέσεις.*

Παρατήρηση 1 Ορθογώνιος Σχηματισμός *(Orthogonal Array) $OA(n, k, s, t)$ ονομάζεται ο σχεδιασμός ο οποίος είναι ένας $n \times k$ πίνακας με στοιχεία ± 1 στον οποίο όλες οι s^t γραμμές οποιονδήποτε t στηλών του $(x_1, x_2, \ldots, x_t)$ εμφανίζονται ίσο πλήθος φορών. Με n συμβολίζουμε τον αριθμό των εκτελέσεων, k είναι ο αριθμός των παραγόντων, s ο αριθμός των επιπέδων και t η ισχύς του πίνακα.*

Παράδειγμα 16 *Ο παρακάτω 4×3 πίνακας είναι ένας ορθογώνιος σχηματισμός με παραμέτρους $n = 4$, $k = 3$, $s = 2$ και $t = 2$.*

$$OA : \begin{bmatrix} +1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 \\ -1 & +1 & -1 \\ -1 & -1 & +1 \end{bmatrix}$$

Ορισμός 14 Κανονικοί σχεδιασμοί *καλούνται οι κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί που παράγονται από ορίζουσες σχέσεις (defining relations).*

Παρατήρηση 2 Ορίζουσα Σχέση *(Defining Relation) για έναν κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό θα καλείται το σύνολο όλων των στηλών του σχεδιασμού που είναι ίσες με την* **μοναδιαία στήλη** *I.*

Ορισμός 15 Κανονικοί Κλασματικοί Παραγοντικοί Σχεδιασμοί *ή γνωστοί συνήθως και ως 2^{n-p} κανονικοί σχεδιασμοί είναι οι κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί που έχουν p ορίζουσες σχέσεις (defining relations).*

Ένα παράδειγμα για να κατανοήσουμε τους κανονικούς κλασματικούς παραγοντικούς σχεδιασμούς είναι το ακόλουθο.

Παράδειγμα 17 *Έστω ότι θέλουμε να κατασκευάσουμε έναν 2^{3-1} κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό, όπου το 3 συμβολίζει τις στήλες του πίνακα που θέλουμε να κατασκευάσουμε και το $2^{3-1} = 4$ συμβολίζει τις γραμμές του πίνακα. Ονομάζουμε τους παράγοντες A, B, C. Εχουμε ότι $n-p = 2$ και έτσι κατασκευάζουμε τον πλήρη 2^2 σχεδιασμό για τους πρώτους δύο παράγοντες τους A, B. Για τον τρίτο παράγοντα ορίζουμε την ορίζουσα σχέση $C = AB$ ($I = ABC$).*

Για πειράματα με υπολογιστές απαιτείται η εξέταση παραγόντων σε πολλά επίπεδα και έτσι οι παραπάνω σχεδιασμοί που αναφέραμε δεν είναι κατάλληλοι. Αυτό είχε σαν επακόλουθο να αναπτυχθούν οι σχεδιασμοί που παρουσιάζονται στα επόμενα κεφάλαια. Σε αυτούς τους σχεδιασμούς δεν υπάρχει τυχαιοποίηση ή σφάλμα και δεν χρειάζονται επαναλήψεις για να προκύψουν εκτίμησεις του σφάλματος. Βασικό είναι ότι στα πειράματα αυτά κάθε ίδια εκτέλεση του πειράματος δίνει ακριβώς το ίδιο αποτέλεσμα.

Κεφάλαιο 3

Σχεδιασμοί Λατινικών Υπερκύβων

3.1 Εισαγωγή

Στα πειράματα με υπολογιστές (Computer Experiments) και πιο συγκεκριμένα οι σχεδιασμοί ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων (Orthogonal Latin hypercube designs), εμφανίζονται στην βιβλιογραφία μόνο για πειράματα με πλήθος δοκιμών να είναι δύναμη του 2. Αυτό, γίνεται γιατί η κατασκευή τους είναι εξαιρετικά δύσκολο πρόβλημα λόγω των περιορισμών που πρέπει να ικανοποιούν. Στην διατριβή αυτή δίνονται νέες μέθοδοι και διαδικασίες κατασκευής σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων και ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων και κατασκευάζονται ορθογώνιοι σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων (OLHD) οι οποίοι έχουν ευέλικτο αριθμό εκτελέσεων. Για την ανάλυση τέτοιων σχεδιασμών χρησιμοποιούνται διάφορα μοντέλα (όπως το Πολυωνυμικό Μοντέλο και το Μοντέλο Kriging) ενώ για την κατασκευή τους αναπτύχθηκαν κατάλληλοι αλγόριθμοι που υλοποιήθηκαν σε γλώσσα προγραμματισμού Matlab .

3.2 Kriging Μοντέλο

3.2.1 Εισαγωγή

Το μοντέλο Kriging είναι εμπνευσμένο από το έργο του Krige, γεωλόγου από τη Νότια Αφρική ο οποίος είχε προτείνει καινοτόμες ιδέες για την εκτίμηση των παραμέτρων, αλλά ποτέ δεν τυποποίησε τη μέθοδο του. Στη συνέχεια, ο George Matheron (1971) ανέπτυξε την Θεωρία Περιφερειοποιημένων Μεταβλητών (Theory of Regionalized Variable) με βάση το έργο που επιτέλεσε ο Krige και έτσι ονόμασε την μέθοδο του, μέθοδο Kriging προς τιμήν του.

Μια παραλλαγή της μεθόδου αυτής που ονομάστηκε Ordinary Kriging εφαρμόστηκε για πρώτη φορά σε ντετερμινιστικές προσομοιώσεις σε ηλεκτρονικούς υπολογιστές από τους Sacks et al (1989) και την ονόμασαν "Σχεδιασμός και Ανάλυση Πειραμάτων σε Υπολογιστές ". Από τότε χρησιμοποιούνται ευρέως στα προσεγγιστικά μοντέλα με χρήση υπολογιστών.

Το μοντέλο Kriging είναι ευέλικτο και αρκετά ανθεκτικό σε προσεγγιστικές σύνθετες πολυδιάστατες συναρτήσεις, καθιστώντας έτσι την εφαρμογή του πολύ χρήσιμη σε αυτές τις περιπτώσεις.

3.2.2 Περιγραφή Μοντέλου

Η απλούστερη μορφή του Kriging μοντέλου δίνεται από τη σχέση:

$$y(x) = \mu + Z(x)$$

όπου :
x: είναι ένα m-διάστατο διάνυσμα (αγωγή του σχεδιασμού),
μ: είναι μια άγνωστη σταθερά (ο μέσος όρος)
$Z(x)$: είναι μια πολυδιάστατη τυχαία μεταβλητή δηλ, ένας στοχαστικός όρος με μέση τιμή μηδέν και διακύμανση σ^2.

Η συσχέτιση μεταξύ $Z(x^i)$ και $Z(x^j)$ συνδέεται στενά με την απόσταση μεταξύ των δύο αντίστοιχων γραμμών, x^i και x^j.

Η σταθμισμένη απόσταση μεταξύ των σημείων x^i και x^j δίνεται από τη σχέση:

$$d(x^i, x^j) = \sum \theta_k \left| x_k^i - x_k^j \right|^2$$

όπου:
$\theta_k (0 \leq \theta_k \leq \infty)$ είναι ένα άγνωστο διάνυσμα συντελεστών συσχέτισης που ψάχνουμε για να μεγιστοποιήσει ή να ελαχιστοποιήσει την πιθανοφάνεια μας.

Η συσχέτιση μεταξύ των σημείων x^i και x^j ορίζεται ως η συσχέτιση των Z_x^i και Z_x^j :

$$Corr[Z(x^i), Z(x^j)] = exp[-d(x^i, x^j)].$$

Η εκτιμήτρια του Kriging μοντέλου δίνεται από τη σχέση:

$$\hat{y}(x) = \hat{\mu} + r'R^{-1}(y - 1\hat{\mu})$$

όπου:
$\hat{\mu}$: είναι η εκτιμώμενη τιμή του μ,
R: είναι ο $n \times n$ πίνακας συσχετίσεων με (i, j) στοιχείο:

$$Corr[Z(x^i), Z(x^j)].$$

r: είναι το διάνυσμα του οποίου το ι-οστό στοιχείο ισούται:

$$r_i(x) = Corr[Z(x), Z(x^i]$$

και
$y : y = [y(x^1) \dots y(x^n)]$.

Το kriging μοντέλο υπολογίζει τις τιμές της συνάρτησης $y(x)$ σε τιμές που δεν υπάρχουν στον σχεδιασμό δηλ, διαφορετικές τιμές του x από αυτές του σχεδιασμού. Για να διακρίνουμε την πραγματική τιμή από την εκτιμώμενη τιμή θα χρησιμοποιούμε τον συμβολισμό ˆ (καπέλο) όπου υποδηλώνει τις εκτιμώμενες τιμές όπως π.χ. y είναι η πραγματική τιμή της απόκρισης και $\hat{y}$ είναι η εκτιμώμενη τιμή της απόκρισης.

Το μέσο τετραγωνικό σφάλμα ορίζεται ως το τετράγωνο της αναμενόμενης τιμής των διαφορών μεταξύ της πραγματικής απόκρισης και της προσεγγιστικής απόκρισης σε οποιοδήποτε σημείο. Από μαθηματική άποψη αυτή εκφράζεται ως :

$$MSE = E[y(x) - y(\hat{x})]^2.$$

Επειδή το kriging μοντέλο περνάει από τα σημεία, το μοντέλο θα έχει μηδενικό MSE σε ένα σημείο δείγματος. Εάν ελαχιστοποιήσουμε το MSE,τότε η kriging predictor ισούται:

$$\hat{y} = f\hat{\mu} + r^T(x)R^{-1}(y - f\hat{\mu})$$

όπου:
y: είναι το διάνυσμα των αποκρίσεων (αντικειμενικές τιμές), στους χώρους

των δειγμάτων $(x^1, \ldots, x^n)$ και
f: είναι ένα διάνυσμα μήκους n, με όλα τα στοιχεία του μονάδες.

Στην παραπάνω σχέση, το διάνυσμα συσχέτισης, $r(x)$, είναι η συσχέτιση μεταξύ της τιμής σε μια νέα θέση της μεταβλητής x και οι τιμές στους χώρους του δείγματος. Για να χρησιμοποιήσουμε αυτό το μοντέλο, θα πρέπει να υπολογίσουμε τα $\hat{\mu}$ και θ_k, αφού r και R εξαρτώνται από το θ_k.

Το διάνυσμα συσχέτισης ορίζεται ως :

$$r(x)^T = [R(x, x^1), \ldots, R(x, x^n)].$$

Τις άγνωστες παραμέτρους θ_k μπορούμε να τις υπολογίσουμε χρησιμοποιώντας την εκτίμηση μέγιστης πιθανοφάνειας (MLE). Αυτή η προσέγγιση χρησιμοποιεί την πιθανοφάνεια του υποτιθέμενου Gaussian υπολογιστικού μοντέλου με τις kriging παραμέτρους θ_k των δοθέντων y παρατηρήσεων. Η πιθανοφάνεια ορίζεται ως :

$$L(\theta_k|y) = e^{\frac{-(y-f\hat{\mu})^T R(\theta_k)^{-1}(y-f\hat{\mu})}{2\hat{\sigma^2}}} \sqrt{(2\pi\hat{\sigma^2})^{n_s}\,|R(\theta_k)\,|}.$$

Συνήθως, για χάριν ευκολίας, χρησιμοποιούμε τη λογαριθμική πιθανοφάνεια (log-likelihood) που απλοποιεί τη παραπάνω σχέση.

$$l(\theta_k|y) = \frac{-(y-f\hat{\mu})^T R(\theta_k)^{-1}(y-f\hat{\mu})}{2\hat{\sigma^2}} - \frac{n_s ln(2\pi\hat{\sigma}^2 + ln(|R(\theta_k)\,|)}{2}.$$

Με την εύρεση των παραγώγων και θέτοντας τις ίσες με μηδέν, παίρνουμε τις ακόλουθες σχέσεις ως προς $\hat{\mu}$ και $\hat{\sigma^2}$:

$$\hat{\mu} = (f^T R^{-1} f)^{-1} f^T R^{-1} y,$$

$$\hat{\sigma^2} = \frac{1}{n_s} \frac{(y-f\hat{\mu})^T R^{-1}(y-f\hat{\mu})}{2\hat{\sigma^2}}.$$

Τέλος, τις παραμέτρους συσχέτισης, θ_k, μπορούμε να τις υπολογίσουμε μεγιστοποιώντας την λογαριθμική συνάρτηση πιθανοφάνειας γνωστή και ως μέθοδος εκτίμησης μέγιστης πιθανοφάνειας (MLE) το οποίο μπορεί να αναχθεί σε:
Μεγιστοποίηση της συνάρτησης $-\frac{n_s ln(\hat{\sigma^2} + ln(|R|)}{2}$.

ως προς θ_k
με τους περιορισμούς $0 \leq \theta_k \prec \infty$.

Αυτό είναι ένα $n-$ διάστατο πρόβλημα βελτιστοποίησης και είναι καλά ορισμένο. Παρατηρήστε ότι ένα Kriging μοντέλο μπορεί να κατασκευαστεί για οποιαδήποτε τιμή του θ_k. Αυτή η βελτιστοποίηση διασφαλίζει ότι θα γίνει η καλύτερη επιλογή από τις θ_k τιμές που έχουμε να επιλέξουμε.

Κεφάλαιο 4

Ορθογώνιοι Σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων

Οι σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων (LHDs) χρησιμοποιούνται ευρέως στο σχεδιασμό πειραμάτων με υπολογιστές. Τα τελευταία χρόνια ολοένα και περισσότεροι ερευνητές προσελκύονται για να τους μελετήσουν. Πολλοί ερευνητές έχουν ασχοληθεί με τους σχεδιασμούς αυτούς δίνοντας νέες μεθόδους και διαδικασίες κατασκευής OLHDs και NOLHDs .

Πιο συγκεκριμένα, κάνοντας μια ιστορική αναδρομή μπορεί να παρατηρήσει κανείς ότι οι McKay et al (1979) ήταν οι πρώτοι που εισήγαγαν και μελέτησαν τις ιδιότητες των σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων ως εναλλακτική λύση για ανεξάρτητα και ισόνομα κατανεμημένη δειγματοληψία.

Ακολούθησαν το 1994 και 1998 αντιστοίχως οι Owen (1994) και Tang (1998) που χρησιμοποίησαν ορθογώνιους σχηματισμούς και υπολογιστικούς αλγορίθμους για να κατασκευάσουν νέους σχεδιασμούς Λατινικών υπερκύβων (LHDs) και έκαναν συγκρίσεις με τους κλασσικούς LHDs.

Στους OLHDs που κατασκευάστηκαν από τους Ye (1998), ο αριθμός εκτελέσεων n είναι της μορφής $n = 2^k$ ή $2^k + 1$ και ο αντίστοιχος αριθμός παραγόντων είναι $m = 2k - 2$, όπου $k \geq 2$.

Ο Butler (2001) κατασκεύασε ορθογώνιους LHDs για μια κλάση μοντέλων τριγωνομετρικής παλινδρόμησης.

Οι Steinberg and Lin (2006) πρότειναν μια μέθοδο για την κατασκευή σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων με 2^k εκτελέσεις και 2^{k-1} παράγοντες υπό τον περιορισμό όμως ότι το $k = 2^m$.

Ο Georgiou (2009) διερεύνησε τη σχέση μεταξύ των γενικευμένων Ορθογώνιων σχεδιασμών και των Ορθογώνιων LHDs.

Πρόσφατα, οι Georgiou (2009),Georgiou and Stylianou (2011) και Georgiou and Stylianou (2012) παρουσίασαν μεθόδους για την κατασκευή OLHDs και σχεδιασμούς για πειράματα με υπολογιστές χρησιμοποιώντας γενικευμένους ορθογώνιους σχεδιασμούς, ορθογώνιους σχεδιασμούς και διανύσματα με μηδενική συνάρτηση αυτοσυσχέτισης. Σε αυτούς τους σχεδιασμούς ο αριθμός των εκτελέσεων τους δεν είναι απαραίτητα δύναμη του 2, αλλά οι κατασκευές τους απαιτούν περαιτέρω μελέτη και έρευνα.

Οι Sun Liu and Lin (2009) κατασκεύασαν σχεδιασμούς της μορφής $OLHD(2^{c+1}, 2^c)$. Επίσης, οι Lin et al. (2010) έδωσαν κάποιες μεθόδους πολλαπλασιασμού για την κατασκευή νέων μεγάλων OLHDs χρησιμοποιώντας γνωστούς σχεδιασμούς και το γινόμενο Kronecker, ενώ οι Sun Liu and Lin (2010) έδειξαν πώς μπορεί κανείς να κατασκευάσει $OLHD(2^{c+1}r, 2^c)$ χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα των Sun Liu and Lin (2009).

Οι Pang, Liu and Lin (2009) ανάπτυξαν ορθογώνιους LHDs μέσω των μέσων των εκ περιτροπής παραγοντικών σχεδιασμών. (by means rotating factorial designs.)

Συνεχίζοντας, οι Bingham, Sitter and Tang (2009), Lin et al. (2010) και Sun Liu and Lin (2010) πρότειναν μεθόδους κατασκευής ορθογώνιων και σχεδόν ορθογώνιων LHDs.

Πρόσφατα, οι Georgiou (2009), και Yang and Liu (2012) πρότειναν ευέλικτες μεθόδους για την κατασκευή ορθογώνιων LHDs με ιδιότητες όπως ότι όλες οι γραμμικές επιδράσεις ειναι αμοιβαία ορθογώνιες.

Να σημειώσουμε ότι και οι Cioppa and Lucas (2007) κατασκεύασαν σχεδιασμούς με παρόμοιες ιδιότητες.

Το 2009 οι Lin, Mukerjee and Tang (2009) πρότειναν και αυτοί με την σειρά τους μια εξαιρετική μέθοδο για την κατασκευή ορθογώνιων ή σχεδόν ορθογώνιων σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων. Η μέθοδός τους χρησιμοποιεί έναν μικρότερης τάξης σχεδιασμό (LHD) ο οποίος παράγει έναν σχεδιασμό μεγαλύτερης τάξης κατάλληλο για πειράματα με υπολογιστές.

Οι Lin et al. (2010) πρότειναν μια μέθοδο για την κατασκευή νέων σχεδιασμών για πειράματα με υπολογιστές χρησιμοποιώντας το γινόμενο Kronecker σε μικρής τάξης σχεδιασμών που πληρούν συγκεκριμένες ιδιότητες. Υπό ορισμένες παραδοχές σχετικά με τους (parent) σχεδιασμούς, οι σχεδιασμοί που δημιουργούνται από τη μέθοδο τους είναι ορθογώνιοι ή σχεδόν ορθογώνιοι LHDs.

Ακόμη, οι Viana et al (2010) πρότειναν μια μέθοδο κατασκευής βέλτιστων και σχεδόν βέλτιστων LHDs χωρίς να χρησιμοποιήσουν την μέθοδο βελτιστο - ποίησης.

Ολοκληρώνοντας αυτή την σύντομη ιστορική ανασκόπηση, πρέπει να αναφέρουμε ότι οι Hernandez et al (2012) πρότειναν μεθόδους και αλγορίθμους για την κατασκευή σχεδιασμών Λατινικών Υπερκύβων που είναι OLHDs ή σχεδόν OLHDs (NOLHDs) με συσχέτιση μεταξύ οποιονδήποτε ανά δύο στηλών μικρότερη από 0,05. Ομοίως και οι Yang and Liu (2012) πρότειναν μεθόδους για την κατασκευή ορθογώνιων και σχεδόν ορθογώνιων σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων, όπου οι σχεδόν ορθογώνιοι σχεδιασμοί έχουν μικρή συσχέτιση (ελάχιστη ή την μικρότερη δυνατή μη μηδενική συσχέτιση) ανάμεσα σε δύο οποιεσδήποτε στήλες (βλέπε Theorems 4,5 and Table 1 in Yang and Liu (2012)).

Οι OLHDs που κατασκευάστηκαν μέχρι τώρα είχαν αριθμό εκτελέσεων που ήταν δύναμη του 2 (η δύναμη του 2 συν μια μονάδα) (Cioppa and Lucas (2007); Sun Liu and Lin (2009); Ye (1998); Lin et al. (2010)).

Σ' αυτό το κεφάλαιο, παρουσιάζεται συνοπτικά μια καινούρια μέθοδος για την κατασκευή ορθογώνιων σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων (OLHDs) με 12, 16, 20 και 24 παράγοντες και με ευέλικτο αριθμό πειραματικών εκτελέσεων. Αποδεικνύεται ότι αν υπάρχει ένας OLH(n,m), τότε υπάρχει και ένας OLH(24n,12m), ένας OLH(32n, 16m), ένας OLH(40n, 20m), ένας OLH(48n, 24m), ένας OLH(24n + 1, 12m), ένας OLH(32n + 1, 16m), ένας OLH(40n + 1, 20m) και ένας OLH(48n + 1, 24m). Κατασκευάζονται OLHDs με την ιδιότητα ότι κάθε τετραγωνική επίδραση ή οποιαδήποτε αλληλεπίδραση δύο παραγόντων είναι ορθογώνια ως προς όλες τις κύριες επιδράσεις του σχεδιασμού.

Τέλος, προτείνονται νέες μέθοδοι πολλαπλασιασμού και άλλες κατασκευές πολλών άπειρων οικογενειών ορθογώνιων σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων με πολλούς παράγοντες. Οι κλάσεις των OLHD που προκύπτουν είναι νέες αφού σχεδιασμοί με αυτές τις παραμέτρους δεν μπορούν να κατασκευαστούν από άλλες γνωστές μεθόδους της βιβλιογραφίας.

4.1 Εισαγωγή

Θα χρειαστούμε τους παρακάτω ορισμούς για καλύτερη κατανόηση και επεξήγηση των μέθοδων και διαδικασιών που θα προτείνουμε.

Ορισμός 16 *Ένας πειραματικός σχεδιασμός με n γραμμές και m στήλες είναι ένας $n \times m$ πίνακας $X = [x_1, x_2, \ldots, x_m]$, όπου x_j είναι ο j-οστός παράγοντας (διάνυσμα στήλη) και x_{ij} είναι το επίπεδο του παράγοντα j στην ι-οστή πειραματική εκτέλεση (γραμμή).*

Ορισμός 17 *Ένας σχεδιασμός $X = L(n, m)$ είναι LHD με n γραμμές και m στήλες (παράγοντες) αν κάθε στήλη του σχεδιασμού περιλαμβάνει n ομοιόμορφα κατανεμημένα επίπεδα.*

Συνήθως στην ανάλυση παλινδρόμησης ένα πολυωνυμικό μοντέλο βαθμού k με m παράγοντες είναι της μορφής :

$$Y = \beta_0 + \sum_{i \leq m} \beta_i x_i + \sum_{i_1 \leq i_2 \leq m} \beta_{i_1 i_2} x_{i_1} x_{i_2} + \ldots + \sum_{i_1 \leq \ldots i_k \leq m} \beta_{i_1 \ldots i_k} x_{i_1} \ldots x_{i_k} + \epsilon,$$

όπου:

x_i είναι οι ανεξάρτητες μεταβλητές,

β_i είναι οι γραμμικές επιδράσεις των x_i,

$\beta_{i_1} \ldots {}_{i_t}$ είναι οι επιδράσεις τάξης t των αλληλεπιδράσεων των $x_{i_1}, \ldots, x_{i_t}$.

Εδώ τα β_{ii} αντιστοιχούν στην τετραγωνική επίδραση του παράγοντα x_i, ενώ το $\beta_{i_1 i_2}$ για $i_1 \neq i_2$ αντιστοιχεί στη δεύτερης τάξης αλληλεπιδράσεων των παραγόντων x_{i_1} και x_{i_2}.

Είναι επιθυμητό να περιλαμβάνουμε ορθογώνιες ανεξάρτητες μεταβλητές σε ένα μοντέλο παλινδρόμησης έτσι ώστε να είναι ασυσχέτιστες οι εκτιμήσεις των συντελεστών παλινδρόμησης. Οι OLHDs μπορούν να μας εξασφαλίσουν ανεξάρτητη εκτίμηση των γραμμικών επιδράσεων των μεταβλητών, όπου ένας LHD σχεδιασμός καλείται ορθογώνιος αν και μόνο αν κάθε ζεύγος ανά δύο των παραγόντων έχουν μηδενική συσχέτιση.

Για να μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τους LHDs που κατασκευάσαμε σε ένα μοντέλο δεύτερης τάξης για κρησάρισμα, θα πρέπει οι LHDs να ικανοποιούν τις εξής ιδιότητες : α) Κάθε στήλη να είναι ορθογώνια ως προς τις άλλες στήλες του σχεδιασμού. β) Κάθε στήλη να είναι ορθογώνια με οποιαδήποτε στήλη που αντιστοιχεί σε τετραγωνική επίδραση ή αλληλεπίδραση δύο παραγόντων.

Ορισμός 18 *Περιοδική Συνάρτηση Αυτοσυσχέτισης (PAF) : Έστω* $A = \{A_j : A_j = (a_{j0}, a_{j1}, ..., a_{j(n-1)}),\ j = 1, \ldots, \ell\}$*, ένα σύνολο από* ℓ *διανυσμάτα μήκους* n*. Η περιοδική συνάρτηση αυτοσυσχέτισης* $P_A(s)$ *(θα την συμβολίζουμε ως PAF) ορίζεται, μειώνοντας* $i + s$ *modulo* n*, ως εξής :*

$$P_A(s) = \sum_{j=1}^{\ell} \sum_{i=0}^{n-1} a_{ji} a_{j,i+s}, \quad s = 0, 1, ..., n-1. \tag{4.1}$$

Το σύνολο των διανυσμάτων A *θα λέμε ότι έχει μηδενική PAF αν*

$$P_A(s) = 0, \forall s = 1, 2, \ldots, n-1$$

και γενικότερα θα λέμε ότι έχει σταθερή PAF αν

$$P_A(s) = \gamma, \forall s = 1, 2, \ldots, n-1$$

για κάποιον ακέραιο αριθμό γ*.*

Έχουμε ότι $P_A(s) = P_A(n-s)$ και έτσι $s = 1, 2, \ldots, [n/2]$, όπου $[x]$ είναι το ακέραιο μέρος του x. Σύνολα διανυσμάτων με σταθερή PAF χρησιμοποιούνται για να κατασκευάσουμε LHDs που ικανοποιούν τις ιδιότητες α) και β). Παρακάτω, με R_k ορίζουμε τον πίσω διαγώνιο ταυτοτικό πίνακα τάξης k.

Ορισμός 19 *Ένας κυκλικός πίνακας ορίζεται ως ένας τετραγωνικός πίνακας* $B = (b_{ij})$ *τάξης* n *με την πρώτη του γραμμή* $b_1 = (b_{1,0}, b_{1,1}, \ldots, b_{1,n-1})$ *και κάθε επόμενη γραμμή του να είναι κυκλική μεταθέση των προηγούμενων γραμμών,* $b_{ij} = b_{1,j-i+1}$*, όπου* $j - i + 1$ *λαμβάνεται modulo* n*,* $i = 2, 3, \ldots, n$ *και* $j = 0, 1, \ldots, n-1$*.*

Στα ακόλουθα λήμματα χρησιμοποιούνται κυκλικοί πίνακες για την κατασκευή ορθογώνιων πινάκων.

Λήμμα 3 *(Geramita and Seberry, 1979, Theorem 4.49) . Έαν υπάρχουν τέσσερις κυκλικοί πίνακες A, B, C, D τάξης n που ικανοποιούν την σχέση*

$$AA^T + BB^T + CC^T + DD^T = fI_n,$$

τότε ο Goethal-Seidel σχεδιασμός

$$GS = GS(A,B,C,D) = \begin{pmatrix} A & BR_n & CR_n & DR_n \\ -BR_n & A & -D^TR_n & C^TR_n \\ -CR_n & D^TR_n & A & -B^TR_n \\ -DR_n & -C^TR_n & B^TR_n & A \end{pmatrix}$$

είναι ένας ορθογώνιος πίνακας τάξης $4n$.

Πόρισμα 1 *Έστω ότι υπάρχουν τέσσερα διανύσματα A, B, C και D μήκους n με μηδενική περιοδική συνάρτηση αυτοσυσχέτισης, τότε μπορούμε να τα χρησιμοποιήσουμε ως πρώτες γραμμές για την κατασκευή κυκλικών πινάκων και μετά να χρησιμοποιήσουμε αυτούς στον Goethals-Seidel σχεδιασμό για να κατασκευάσουμε έναν ορθογώνιο πίνακα τάξης $4n$.*

(Kharaghani (2000)). Ένα σύνολο $\{A_1, A_2, \ldots, A_{2k}\}$ από τετραγωνικούς πίνακες θα λέμε οτι είναι amicable αν

$$\sum_{i=1}^{k} \left(A_{2i-1}A_{2i}^T - A_{2i}A_{2i-1}^T\right) = 0. \tag{4.2}$$

Λήμμα 4 *(Kharaghani, 2000, Theorem 1) . Έστω $\{A_i\}_{i=1}^8$ να είναι ένα amicable σύνολο από κυκλικούς πίνακες τάξης n, που ικανοποιούν $\sum_{i=1}^8 A_iA_i^T = fI_n$. Τότε ο σχηματισμός Kharaghani*

$$H = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 & A_4R_n & A_3R_n & A_6R_n & A_5R_n & A_8R_n & A_7R_n \\ -A_2 & A_1 & A_3R_n & -A_4R_n & A_5R_n & -A_6R_n & A_7R_n & -A_8R_n \\ -A_4R_n & -A_3R_n & A_1 & A_2 & -A_8^TR_n & A_7^TR_n & A_6^TR_n & -A_5^TR_n \\ -A_3R_n & A_4R_n & -A_2 & A_1 & A_7^TR_n & A_8^TR_n & -A_5^TR_n & -A_6^TR_n \\ -A_6R_n & -A_5R_n & A_8^TR_n & -A_7^TR_n & A_1 & A_2 & -A_4^TR_n & A_3^TR_n \\ -A_5R_n & A_6R_n & -A_7^TR_n & -A_8^TR_n & -A_2 & A_1 & A_3^TR_n & A_4^TR_n \\ -A_8R_n & -A_7R_n & -A_6^TR_n & A_5^TR_n & A_4^TR_n & -A_3^TR_n & A_1 & A_2 \\ -A_7R_n & A_8R_n & A_5^TR_n & A_6^TR_n & -A_3^TR_n & -A_4^TR_n & -A_2 & A_1 \end{pmatrix}$$

είναι ένας ορθογώνιος πίνακας τάξης $8n$.

Παρατήρηση 3 *Οπως και στο πόρισμα 1, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε οκτώ amicable διανύσματα μήκους n με μηδενική PAF για την δημιουργία οκτώ κατάλληλων κυκλικών πινάκων για το Λήμμα 4 .*

Στους Lin et al. (2010) κατασκευάστηκε ένας OLHD συνενώνοντας δυο ορθογώνιους πίνακες με αμοιβαία αποκλειόμενο σύνολο επιπέδων. Εστω S το σύνολο όλων των n επιπέδων ενός LHD σχεδιασμού με n εκτελέσεις, και έστω $S = S_1 \bigcup S_2$ με $S_1 \bigcap S_2 = \emptyset$, όπου n_1 και n_2 τα επίπεδα των S_1 και S_2, αντίστοιχα.

Υποθέτουμε ότι υπάρχει ένας $n_1 \times m$ ορθογώνιος πίνακας D_1 με S_1 επίπεδα και έστω ένας $n_2 \times m$ ορθογώνιος πίνακας D_2 με S_2 επίπεδα όπου, τόσο για τον σχεδιασμό D_1 όσο και για τον D_2, κάθε επίπεδο εμφανίζεται ακριβώς μια φορά σε κάθε στήλη. Τότε ο πίνακας :

$$L = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \end{bmatrix}$$

είναι ένας $n \times m$ OLHD με $n = n_1 + n_2$. Σημειώστε ότι ο D_1 και D_2 δεν είναι απαραίτητο να είναι LHD . Στην ίδια εργασία είχαν δείξει, ότι εάν υπάρχει ένας $OLHD(n, m)$ τότε υπάρχει και ο $OLHD(2an, am)$ για $a = 1, 2, 4, 8$. Χρησιμοποιώντας αυτήν την προσέγγιση οι Lin et al. (2010) κατασκεύασαν OLHDs με $n = 16k$ εκτελέσεις και $m = 12$ παράγοντες για $k = 2, 3, 4, \ldots$.(Δείτε Table 3 in Lin et al. (2010)).

Χρησιμοποιώντας κυκλικούς πίνακες, επεκτείναμε τα παραπάνω αποτελέσματα των Lin et al. (2010). Πιο συγκεκριμένα, θα δείξουμε ότι υπάρχει ένας OLHD με n εκτελέσεις και m παράγοντες για $(n, m) \in [(24k, 12), (32k, 16), (40k, 20), (48k, 24)]$, για όλα τα $k = 1, 2, 3, \ldots$. Επιπρόσθετα, θα δείξουμε ότι εαν υπάρχει ένας $OLHD(n, m)$, τότε υπάρχει και ένας $OLHD(2an, am)$ όχι μόνο για $a = 1, 2, 4, 8$ αλλά και για $a = 12, 16, 20$, και 24.

4.2 Αξιολόγηση Πειραμάτων Με Υπολογιστές

Ακόμα κι αν οι παράγοντες ενός LHDs κυμαίνονται ομοιόμορφα στο διάστημα $[-1, 1]$, αυτό δεν εξασφαλίζει καλή κάλυψη του χώρου (good space filling) για ένα δεδομένο αριθμό εκτελέσεων. Επιπλέον, αυτή η ομοιομορφία δεν εγγυάται ότι ο σχεδιασμός έχει μικρές συσχετίσεις μεταξύ όρων μεγαλύτερης τάξης, όπως για παράδειγμα με αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων ή καθαρές τετραγωνικές επιδράσεις. Οι Steinberg and Lin (2006), και Georgiou (2009) όρισαν γενικά κριτήρια αξιολόγησης υπολογισμού πινάκων συσχετίσεων για την εκτίμηση του γραμμικού μοντέλου (πρώτης τάξης) όταν μπορεί να υπάρχουν ενεργές επιδράσεις δεύτερης τάξης. Ας υποθέσουμε ότι ο πίνακας X είναι ένας LHD με n εκτελέσεις και m παράγοντες. Έστω X_1 ο πίνακας παλινδρόμησης για την εκτίμηση του γραμμικού μοντέλου (πρώτης τάξης), που περιλαμβάνει ένα διάνυσμα στήλης με μονάδες και τις m στήλες του X. Έστω X_{int} ο $n \times \big(m(m-1)/2\big)$ πίνακας με όλες τις αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων και X_{quad} ο $n \times m$ πίνακας με όλους τους καθαρά τετραγωνικούς όρους (Steinberg and Lin, (2006)). Οι πίνακες ανάμιξης για την εκτίμηση του γραμμικού μοντέλου (πρώτης τάξης) υπό την ύπαρξη σημαντικών αλληλεπιδράσεων δύο παραγόντων ή καθαρών τετραγωνικών επιδράσεων δίδονται από τη σχέση:

$$T = A_{int} = (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T X_{int} \tag{4.3}$$

και

$$Q = A_{quad} = (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T X_{quad} \tag{4.4}$$

αντίστοιχα.

Η σχέση (4.3) χρησιμοποιείται όταν το μοντέλο έχει παραμέτρους δεύτερης τάξης $b_{i_1 i_2}$ για $i_1 \neq i_2$ ενώ $b_{ii} = 0$ και η σχέση (4.4) όταν το μοντέλο έχει μόνο τετραγωνικές επιδράσεις b_{ii} ενώ οι υπόλοιπες ισούνται με $b_{i_1 i_2} = 0$ για $i_1 \neq i_2$.

Για την αξιολόγηση της απόδοσης ενός σχεδιασμού Λατινικού υπερκύβου ως προς τις αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων έχουμε τα εξής μέτρα (Georgiou (2009)):

$$ave(|t|) = E(|t|) = \frac{2\sum_{i=1}^{m+1}\sum_{j=1}^{m(m-1)/2}|t_{ij}|}{m(m^2-1)} \quad \text{και} \quad \max t = \max_{i,j}|t_{ij}|$$

Για την αξιολόγηση της απόδοσης ενός σχεδιασμού Λατινικού υπερκύβου ως προς τους τετραγωνικούς όρους έχουμε τα εξής μέτρα:

$$ave(|q|) = E(|q|) = \frac{\sum_{i=1}^{m+1}\sum_{j=1}^{m}|q_{ij}|}{m(m+1)} \quad \text{και} \quad \max q = \max_{i,j}|q_{ij}|$$

Ένας σχεδιασμός D_1 θα λέγεται ότι είναι καλύτερος από έναν σχεδιασμό D_2 ανν η τιμή του κριτηρίου που μας ενδιαφέρει στον D_1 είναι μικρότερη από την τιμή του ίδιου κριτηρίου στον D_2.

Το ακόλουθο Λήμμα παρέχει ένα κάτω φράγμα για τα κριτήρια $E(|q|)$ και $\max_{i,j}|q_{ij}|$.

Λήμμα 5 *(Georgiou, 2009) Έστω X ένας ορθογώνιος σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου με στοιχεία από τον μοναδιαίο κύβο, $[-1,1]^{n\times m}$, με n αγωγές και m παράγοντες με*

$$\left(\frac{-n+1}{n-1}, \frac{-n+3}{n-1}, \ldots, \frac{n-3}{n-1}, \frac{n-1}{n-1}\right).$$

επίπεδα.

Έστω ο πίνακας $X_1 = [1_n\ X]$ για μοντέλο παλινδρόμησης πρώτης τάξης,ο οποίος συμπεριλαμβάνει μια στήλη όλο μονάδες και όλες τις στήλες του πίνακα X. Τότε ο πίνακας $(X_1^T X_1)^{-1}$ είναι ένας διαγώνιος πίνακας τάξης $m+1$ και η διαγώνιος του είναι $(n^{-1}, \gamma^{-1}, \gamma^{-1}, \ldots, \gamma^{-1})$, όπου

$$\gamma = \frac{n(n+1)}{3(n-1)}. \tag{4.5}$$

Λήμμα 6 *(Georgiou, 2009, Lemma 2) Έστω X είναι όπως το ορίσαμε στο Λήμμα 5. Τότε*

$$E(|q|) \geq \frac{\gamma}{n(m+1)} = LB_{Eq} \ \ \textit{και} \ \max|q_{ij}| \geq \frac{\gamma}{n} = LB_{maxq},$$

όπου γ δίνεται από την σχέση (4.5).

Ένα άλλο χρήσιμο κριτήριο προτάθηκε από τους Morris and Mitchell (1995). Αυτό το κριτήριο βασίζεται στην αποστάση μεταξύ των σημείων και μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως μέτρο για το πόσο καλός είναι ένας σχεδιασμός ως προς την ιδιότητα του να καλύπτει τον χώρο (space-filling). Η Τετραγωνική απόσταση (Rectangular distance) $d_R(s,u)$ δυο σημείων (γραμμών) s και u ενός πίνακα σχεδιασμού X δίνεται απο την σχέση :

$$d_R(s,u) = \sum_{i=1}^{m} |s_i - u_i|,$$

ενώ η Ευκλείδεια απόσταση $d_E(s,u)$ είναι

$$d_E(s,u) = \left(\sum_{i=1}^{m} (s_i - u_i)^2\right)^{1/2}.$$

Για συγκεκριμένο σχεδιασμό και για δοθείσα απόσταση (Τετραγωνική ή Ευκλείδεια), ορίζουμε ένα διάνυσμα $D = (D_1, \ldots, D_\ell)$ στο οποίο τα στοιχεία του είναι οι διαφορετικές αποστάσεις μεταξύ των σημείων, ταξινομημένα από το μικρότερο στο μεγαλύτερο. Η τιμή του δείκτη μπορεί να είναι τόσο μεγάλη όσο $n(n-1)/2$. Δηλ μπορούμε να έχουμε μέχρι και $n(n-1)/2$ διαφορετικές αποστάσεις. Έστω ότι J_i είναι ο αριθμός των ζευγών των γραμμών ενός σχεδιασμού που έχουν απόσταση D_i. Τότε, ο σχεδιασμός X θα καλείται *maximin σχεδιασμός* αν μεγιστοποιεί διαδοχικά τα D_i και ελαχιστοποιεί τα J_i με την ακόλουθη σειρά : $(D_1,\ J_1,\ D_2,\ J_2,\ \ldots,\ D_\ell,\ J_\ell)$. Μια συνάρτηση η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να συγκρίνει ανταγωνιστικούς σχεδιασμούς είναι απαραίτητη. Η συνάρτηση θα πρέπει να οριστεί με τέτοιο τρόπο ώστε να δίνει στον maximin σχεδιασμό την υψηλότερη τιμή. Μια οικογένεια τέτοιων συναρτήσεων, συναρτήσει του p, είναι η ακόλουθη :

$$\Phi_p = \left(\sum_{i=1}^{\ell} J_i D_i^{-p} \right)^{1/p},$$

όπου p ένας θετικός ακέραιος. Για αρκετα μεγάλο p, ο σχεδιασμός που ελαχιστοποιεί την Φ_p είναι maximin σχεδιασμός. Κατά την αξιολόγηση των σχεδιασμών στα παραδειγματα που ακολουθούν, δίνουμε τα διανύσματα γραμμής D και J. Αυτό δίνει τη δυνατότητα στον αναγνώστη να υπολογίσει Φ_p για κάθε τιμή του p. Ως παράδειγμα, στα δοθείσα αριθμητικά αποτελέσματα παρουσιάζουμε τις τιμές των Φ_p για $p = 100$, που λαμβάνονται με τη χρήση και των δύο αποστάσεων, της Τετραγωνικής και της Ευκλείδειας απόστασης. Στα D και J έχουμε εκχωρήσει ένα δείκτη E ή R για να τους διακρίνουν, ομοίως και στο Φ_p.

Παρατήρηση 4 Ένα απλό κάτω φράγμα για το $E(|t|)$ και $max|t_j|$ είναι μηδέν, αφού μπορούν να κατασκευαστούν LHDs με όλες τις αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων, να είναι ορθογώνιες σε κάθε στήλη του LHD . □

Ένα σχεδιασμός που ικανοποιεί οποιοδήποτε από τα κατώτερα όρια που αναφέρονται στο Λήμμα 6 λέγεται ότι είναι *βέλτιστος* ως προς τις τετραγωνικές επιδράσεις. Επιπλέον, κάθε σχεδιασμός με $E(|t|) = 0$ ή $max|t_{ij}| = 0$ λέγεται *βέλτιστος* ως προς τις αλληλεπιδράσεις (interaction-optimal). Σημειώστε ότι αν ένας σχεδιασμός έχει βέλτιστες αλληλεπιδράσεις για $max|t_j|$, τότε είναι επίσης βέλτιστος και ως προς το $E(|t|)$, αλλά δεν ισχύει το αντίστροφο. Στην περίπτωση μη-ορθογώνιων σχεδιασμών, απαιτείται περαιτέρω έρευνα για να βρούμε κάτω φράγμα το οποίο πιθανώς να εξαρτάται από τον αριθμό των n εκτελέσεων και τον αριθμό των m παραγόντων που αποτελούν το σχεδιασμό.

4.3 Γενική Κατασκευή

Με τη χρήση κατάλληλων διανυσμάτων με περιοδική συνάρτηση αυτοσυσχέτισης ίση με μηδέν κατασκευάζουμε νέες άπειρες οικογένειες ορθογώνιων σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων (OLHDs). Η εύρεση τέτοιων διανυσμάτων είναι πολύ ευκολότερη από την αναζήτηση ενός ολόκληρου σχεδιασμού. Η ιδέα είναι να χρησιμοποιήσουμε ορθογώνιους πίνακες και πλήρης fold-over πίνακες για να κατασκευάσουμε τον επιθυμητό OLHD. Στο Θεώρημα 5 τέθηκαν οι απαιτούμενες συνθήκες ώστε τα διανύσματα που τις ικανοποιούν να μπορούν να δημιουργήσουν OLHDs. Η κατασκευή αυτή είναι γενική και μπορεί να οδηγήσει σε OLHDs με πολλές διαφορετικές παραμέτρους.

Θεώρημα 5 *Έστω D_b ένας ορθογώνιος $n \times n$ πίνακας με απόλυτη τιμή κάθε στήλης του στοιχείο προς στοιχείο να είναι μια μετάθεση του $(b+1, b+3, \ldots, b+2n-1)$, όπου b ένας οποιοσδήποτε φυσικός αριθμός. Τότε ύπαρχει ένας OLHD με $2nk$ γραμμές και n στήλες για κάθε $k = 1, 2, \ldots$.*

Απόδειξη Εξ ορισμού, εχουμε ότι ο D_b είναι ορθογώνιος σχεδιασμός, και έτσι:

$$D_b^T D_b = z_b I_n, \text{ όπου} z_b = \sum_{i=1}^{n} (b + 2i - 1)^2 = \frac{n(4n^2 + 6bn + 3b^2 - 1)}{3}.$$

Για $k = 1, 2, \ldots$ ορίζουμε

$$X_k = \left(D_0^T, \quad D_{2n}^T, \quad \cdots, \quad D_{2n(k-1)}^T, \quad -D_0^T, \quad -D_{2n}^T, \quad \cdots, \quad -D_{2n(k-1)}^T \right)^T.$$

Είναι εύκολο να εξακριβωθεί ότι τα επίπεδα της κάθε στήλης του X_k είναι μια μετάθεση των $(1, 3, 5, \ldots, 2nk - 1, -1, -3, -5, \ldots, -2nk - 1)$. Οι στήλες του X_k είναι ανά δύο ορθογώνιες αφού οι στήλες του D_b είναι ανά δύο ορθογώνιες για κάθε φυσικό αριθμό b. Έτσι έχουμε:

$$\begin{aligned} X_k^T X_k &= \left(\sum_{\ell=0}^{k-1} D_{2n\ell}^T D_{2n\ell} \right) I_n = \left(2 \sum_{j=1}^{nk} (2j - 1)^2 \right) I_n \\ &= \left(\frac{2nk(2nk - 1)(2nk + 1)}{3} \right) I_n \end{aligned}$$

Και έτσι ο πίνακας X_k είναι ο επιθυμητός OLHD που ψάχναμε. □

Για κάθε κατάλληλο σύνολο τεσσάρων ή οκτώ διανυσμάτων, το Θεώρημα 5 παρέχει μια νέα μέθοδο πολλαπλασιασμού και άπειρες οικογένειες OLHDs. Για να παρουσιάσουμε ορισμένες μεθόδους πολλαπλασιασμού και να δώσουμε άπειρες οικογένειες LHDs με ευέλικτο μέγεθος εκτελέσεων, θα περιγράψουμε μια απλή διαδικασία - αλγόριθμο για την εύρεση κατάλληλων συνόλων τέτοιων διανυσμάτων. Αυτά τα διανύσματα μπορούν στη συνέχεια να χρησιμοποιηθούν στον Goethals-Seidel ή Kharaghani σχηματισμό για να πάρουμε ορθογώνιο πίνακα που απαιτείται στο Θεώρημα 5.

4.3.1 Αλγόριθμος

Έχουμε αναπτύξει και εφαρμόσει ένα απλό αλγόριθμο για την αναζήτηση κατάλληλων διανυσμάτων. Για την εύρεση ενός $OLHD(8h, 4h)$, χρειαζεται να βρούμε τέσσερα διανύσματα A_1, A_2, A_3, A_4 μήκους n που ικανοποιούν τη σχέση (4.1). Έστω S_n το σύνολο όλων των μεταθέσεων των n συμβόλων. Ο αλγόριθμος μας μπορεί να περιγραφεί ως εξής :

1. Επέλεξε μια μετάθεση π από το S_{4n}. Έστω $v = (v_1, v_2, \ldots, v_{4n}) = \pi(1 + b, 3 + b, \ldots, 8n + b - 1)$ είναι το αντίστοιχο διάνυσμα για την μετάθεση του π και b είναι μια απροσδιόριστη μεταβλητή.

2. Ορίζουμε $A_1 = (a_1 v_1,\ a_2 v_2,\ \ldots,\ a_n v_n)$, $A_2 = (a_{n+1} v_{n+1},\ a_{n+2} v_{n+2},\ \ldots,\ a_{2n} v_{2n})$, $A_3 = (a_{2n+1} v_{2n+1},\ a_{2n+2} v_{2n+2},\ \ldots,\ a_{3n} v_{3n})$, και $A_4 = (a_{3n+1} v_{3n+1},\ a_{3n+2} v_{3n+2},\ \ldots,\ a_{4n} v_{4n})$.

3. Χρησιμοποιώντας τα διανύσματα A_1, A_2, A_3, και A_4 στην σχέση (4.1), δημιούργησε ένα σύστημα $[n/2]$ εξισώσεων (για $s = 1, 2, \ldots, [n/2]$).

4. Επίλυσε αυτό το σύστημα για τον προσδιορισμό των a_i έχοντας τον εξής περιορισμό $a_i \in \{-1, 1\}$, $i = 1, 2, \ldots, 4n$.

5. Εαν δεν υπάρχει λύση στο Βήμα 4, τότε πήγαινε στο Βήμα 1 και συνέχισε.

Με βάση την σχέση (4.1), για κάθε λύση τέτοιων διανυσμάτων μήκους n υπάρχουν $2^4 4! n^4$ ισοδύναμες λύσεις (2^4 πιθανοί πολλαπλασιασμοί των τεσσάρων διανυσμάτων με -1, $4!$ μεταθέσεις των τεσσάρων διανυσμάτων και n κυκλικές μεταθέσεις για κάθε διάνυσμα). Αυτό υποδηλώνει ότι υπάρχει ένας μεγάλος αριθμός λύσεων στο χώρο αναζήτησης και θα ήταν εύκολο να βρει κανείς έστω μια πιθανή λύση. Αν θέλετε να αναζητήσετε διανύσματα που είναι κατάλληλα για την κατασκευή ενός $OLHD(8n+1, 4n)$, αντικαθιστούμε το αντίστοιχο διάνυσμα v στο Βήμα 1 με $u = (1, 2, \ldots, 4n)$ και εφαρμόζουμε τον αλγόριθμο με τον ίδιο τρόπο.

Η επιλογή της μετάθεσης π στο Βήμα 1 μπορεί να είναι είτε τυχαία ή κάποιος μπορεί να επιλέξει να κάνει μια εξαντλητική αναζήτηση (για αυτή την μέθοδο) επιλέγοντας όλες τις μεταθέσεις του S_{4n} μια προς μια. Αυτό βέβαια απαιτεί πολυ χρόνο και συγκεκριμένα υπάρχουν $(4n)!$ μεταθέσεις για να ελεγχθούν. Για να βρούμε έναν $OLHD(16n, 8n)$ ή $OLHD(16n+1, 8n)$, πρέπει κανείς να ψάξει για διανύσματα, A_1, A_2, A_3, A_4 μήκους $2n$ που να ικανοποιούν την σχέση (4.1) ή διανύσματα A_1, A_2, A_3, A_4 A_5, A_6, A_7, A_8 μήκους n που να ικανοποιούν και τις δύο σχέσεις την (4.1) και την (4.2) αντίστοιχα. Ο αλγόριθμος που χρησιμοποιείται σε αυτή την περίπτωση θα είναι παρόμοιος.

4.3.2 Αποτελέσματα και Παραδείγματα

Χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα που βρέθηκαν από την εφαρμογή του αλγορίθμου, παρουσιάζουμε την κατασκευή του OLHD με $m = 12, 16, 20, 24$ παράγοντες και ευέλικτο αριθμό εκτελέσεων. Οι σχεδιασμοί αυτοί παρουσιάζονται αναλυτικότερα μέσα από παραδείγματα στην ενότητα αυτή. Τα παραδείγματα που παραθέτουμε σε αυτή την ενότητα είναι χρήσιμα για την κατανόηση της μεθόδου κατασκευής και θα την ξαναεφαρμόσουμε και στην ενότητα 4.4 αφού πρώτα παρουσιάσουμε νέες τεχνικές πολλαπλασιασμού.

Το Πόρισμα 2 περιγράφει πώς μπορεί κανείς να κατασκευάσει έναν $OLHD(24k, 12)$ από το Θεώρημα 5. Ένα σύνολο από τέσσερα διανύσματα μήκους 3 παρέχονται και δίνονται οι απαιτούμενοι υπολογισμοί. Για να πάρουμε τον κατάλληλο ορθογώνιο πίνακα χρησιμοποιήσαμε τα τέσσερα διανύσματα στον σχηματισμό Goethal-Seidel καθώς και την απόδειξη του Θεωρήματος 5. Αξιοσημείωτο είναι ότι, οι σχεδιασμοί αυτοί δεν μπορούν να κατασκευαστούν χρησιμοποιώντας οποιαδήποτε άλλη μέθοδο στην βιβλιογραφία.

Πόρισμα 2 *Υπάρχει Ορθογώνιος σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου (OLHD) με $n = 24k$ εκτελέσεις και $m = 12$ παράγοντες για κάθε $k = 1, 2, \ldots$.*

Απόδειξη Έστω

$$\left.\begin{array}{ll} A_1=(b+15,-(b+5),b+19) & A_2=(b+17,-(b+21),b+23) \\ A_3=(b+1,b+3,-(b+7)) & A_4=(b+9,b+11,b+13) \end{array}\right\} \quad (4.6)$$

όπου b είναι ένας οποιοσδήποτε πραγματικός αριθμός. Είναι εύκολο να δείξουμε ότι

$$P_{A_1}(0)+P_{A_2}(0)+P_{A_3}(0)+P_{A_4}(0)=12b^2+288b+2300$$

και

$$P_{A_1}(s)+P_{A_2}(s)+P_{A_3}(s)+P_{A_4}(s)=0 \;\; for \;\; s=1,2.$$

Για $k \in \{1,2,\ldots\}$ $b=24(k-1)$ ορίζουμε $D_b=GS(A_1,A_2,A_3,A_4)$ να είναι ο Goethal-Seidel σχηματισμός που παρουσιάσαμε στο πόρισμα 1, όπου τα διανύσματα A_1,A_2,A_3,A_4 είναι αυτά που δόθηκαν στην εξίσωση (4.6). Είναι προφανές ότι:

$$D_b^T D_b = z_b I_{12},$$

όπου $z_b=12b^2+288b+2300$. Το αποτέλεσμα προκύπτει από το Θεώρημα 5. □

Παράδειγμα 18 Για $k=1$, $b=24(k-1)\Rightarrow b=0$. Χρησιμοποιώντας το Goethal-Seidel σχηματισμό και $b=0$, έχουμε έναν 12×12 ορθογώνιο πίνακα D_0. Εφαρμόζοντας την μέθοδο που περιγράφεται στην απόδειξη του Θεωρήματος 5 έχουμε έναν ορθογώνιο σχεδιασμό Λατινικού υπερκύβου

$$X_1=\begin{bmatrix} D_0 \\ -D_0 \end{bmatrix}$$

με 24 πειραματικές εκτελέσεις (παρατηρήσεις) και 12 παράγοντες, όπου ο D_0

αναλυτικά είναι:

$$D_0 = \begin{bmatrix} 15 & -5 & 19 & 23 & -21 & 17 & -7 & 3 & 1 & 13 & 11 & 9 \\ 19 & 15 & -5 & -21 & 17 & 23 & 3 & 1 & -7 & 11 & 9 & 13 \\ -5 & 19 & 15 & 17 & 23 & -21 & 1 & -7 & 3 & 9 & 13 & 11 \\ -23 & 21 & -11 & 15 & -5 & 19 & -11 & -13 & -9 & 1 & -7 & 3 \\ 21 & -11 & -23 & 19 & 15 & -5 & -13 & -9 & -11 & 3 & 1 & -7 \\ -11 & -23 & 21 & -5 & 19 & 15 & -9 & -11 & -13 & -7 & 3 & 1 \\ 7 & -3 & -1 & 11 & 13 & 9 & 15 & -5 & 19 & 21 & -23 & -17 \\ -3 & -1 & 7 & 13 & 9 & 11 & 19 & 15 & -5 & -17 & 21 & -23 \\ -1 & 7 & -3 & 9 & 11 & 13 & -5 & 19 & 15 & -23 & -17 & 21 \\ -13 & -11 & -9 & -1 & 7 & -3 & -21 & 23 & 17 & 15 & -5 & 19 \\ -11 & -9 & -13 & -3 & -1 & 7 & 17 & -21 & 23 & 19 & 15 & -5 \\ -9 & -13 & -11 & 7 & -3 & -1 & 23 & 17 & -21 & -5 & 19 & 15 \end{bmatrix}.$$

Ο σχεδιασμός αυτός έχει $E(|t|) = \max|t_{ij}| = 0$, $E(|q|) = \frac{25}{897} = LB_{Eq}$, $\max|q_{ij}| = \frac{25}{69} = LB_{maxq}$, $D_R = \left[\frac{164}{23}, 8, \frac{188}{23}, \frac{192}{23}, \frac{200}{23}, \frac{204}{23}, \frac{208}{23}, \frac{212}{23}, \frac{216}{23}, \frac{288}{23}\right]$, $J_R = [24, 24, 48, 24, 48, 24, 24, 24, 24, 12]$, $\Phi_{100}^R = 12.837$, $D_E = [2.949, 4.170]$, $J_E = [264, 12]$ και $\Phi_{100}^E = 4.275$. □

Παράδειγμα 19 Για $k = 2$, $b = 24(k-1) \Rightarrow b = 24$. Χρησιμοποιώντας το Goethal-Seidel σχηματισμό και $b = 24$, έχουμε έναν 12×12 ορθογώνιο πίνακα D_{24}. Εφαρμόζοντας την μέθοδο που περιγράφεται στην απόδειξη του Θεωρήματος 5 έχουμε έναν ορθογώνιο σχεδιασμό Λατινικού υπερκύβου

$$X_2 = \begin{bmatrix} D_0 \\ D_{24} \\ -D_0 \\ -D_{24} \end{bmatrix}$$

με 48 πειραματικές εκτελέσεις (παρατηρήσεις) και 24 παράγοντες, όπου ο D_0

είναι στο Παράδειγμα 4 και ο D_{24} αναλυτικά είναι:

$$D_{24} = \begin{bmatrix} 39 & -29 & 43 & 47 & -45 & 41 & -31 & 27 & 25 & 37 & 35 & 33 \\ 43 & 39 & -29 & -45 & 41 & 47 & 27 & 25 & -31 & 35 & 33 & 37 \\ -29 & 43 & 39 & 41 & 47 & -45 & 25 & -31 & 27 & 33 & 37 & 35 \\ -47 & 45 & -41 & 39 & -29 & 43 & -35 & -37 & -33 & 25 & -31 & 27 \\ 45 & -41 & -47 & 43 & 39 & -29 & -37 & -33 & -35 & 27 & 25 & -31 \\ -41 & -47 & 45 & -29 & 43 & 39 & -33 & -35 & -37 & -31 & 27 & 25 \\ 31 & -27 & -25 & 35 & 37 & 33 & 39 & -29 & 43 & 45 & -47 & -41 \\ -27 & -25 & 31 & 37 & 33 & 35 & 43 & 39 & -29 & -41 & 45 & -47 \\ -25 & 31 & -27 & 33 & 35 & 37 & -29 & 43 & 39 & -47 & -41 & 45 \\ -37 & -35 & -33 & -25 & 31 & -27 & -45 & 47 & 41 & 39 & -29 & 43 \\ -35 & -33 & -37 & -27 & -25 & 31 & 41 & -45 & 47 & 43 & 39 & -29 \\ -33 & -37 & -35 & 31 & -27 & -25 & 47 & 41 & -45 & -29 & 43 & 39 \end{bmatrix}.$$

Ο σχεδιασμός αυτός έχει : $E(|t|) = \max|t_{ij}| = 0$, $E(|q|) = \frac{49}{1833} = LB_{Eq}$, $\max|q_{ij}| = \frac{49}{141} = LB_{maxq}$, $D_R = \left[\frac{164}{47}, \frac{184}{47}, 4, \frac{192}{47}, \frac{200}{47}, \frac{204}{47}, \frac{208}{47}, \frac{212}{47}, \frac{216}{47}, \frac{288}{47}, \frac{360}{47}, \frac{364}{47}, \frac{368}{47}, \frac{392}{47}, \frac{396}{47}, \frac{400}{47}, \frac{408}{47}, \frac{412}{47}, \frac{416}{47}, \frac{420}{47}, \frac{424}{47}, \frac{428}{47}, \frac{432}{47}, \frac{436}{47}, \frac{440}{47}, \frac{444}{47}, \frac{448}{47}, \frac{452}{47}, \frac{456}{47}, \frac{464}{47}, \frac{468}{47}, \frac{472}{47}, \frac{476}{47}, \frac{480}{47}, \frac{488}{47}, \frac{492}{47}, \frac{496}{47}, \frac{500}{47}, \frac{504}{47}, \frac{576}{47}, \frac{864}{47}\right]$, $J_R = [24, 24, 48, 24, 48, 24, 24, 24, 24, 36, 8, 8, 8, \ 8, 8, 8, 8, 8, 20, 36, 48, \ 60, 72, 60, 48, 36, 20, 32, 8, 8, 8, \ 32, 48, 24, 48, 24, 32, 32, 32, 24, 12]$, $\Phi_{100}^R = 18.846$, $D_E = [1.443, 1.769, 2.041, 2.603, 2.620, 2.636, 2.733, 2.749, 2.765, 2.796, \ 2.812, 2.827, 2.843, 2.858, 2.873, \ 2.888, 2.903, 2.918, 2.933, 2.948, \ 2.962, 2.977, 3.006, 3.020, 3.035, \ 3.119, 3.133, 3.147, 3.681, 3.821, 5.403]$, $J_E = [264, 24, 12, 8, 8, 8, 8, \ 8, 8, 8, 8, 20, 36, 48, \ 60, 72, 60, 48, 36, 20, 8, 8, 8, 8, 8, 8, 8, 8, \ 24, 264, 12]$, και $\Phi_{100}^E = 5.539$. □

Χρησιμοποιώντας παρόμοια επιχειρήματα όπως αυτά στο Πόρισμα 2 παρουσιάζουμε μια μέθοδο κατασκευής για OLHD $(32k, 16)$. Ένα σύνολο οκτώ διανυσμάτων μήκους 2 παρουσιάζονται σε αυτή την ενότητα και, δεδομένου ότι σε αυτή τη ρύθμιση έχουμε οκτώ διανύσματα που πληρούν τις επιθυμητές ιδιότητες, εφαρμόζουμε τον Kharaghani σχηματισμό και με τη βοήθεια του Θεωρήματος 2 έχουμε τα εξής αποτελέσματα.

Πόρισμα 3 *Υπάρχει Ορθογώνιος σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου OLHD με $n = 32k$ πειραματικές εκτελέσεις και $m = 16$ παράγοντες για κάθε $k = 1, 2, \ldots$.*

Απόδειξη Έστω

$$\left.\begin{array}{l} A_1 = (b+1, b+3), \quad A_2 = (b+5, -(b+7)), \quad A_3 = (b+9, -(b+11)), \\ A_4 = (b+13, b+15), A_5 = (b+17, -(b+19)), A_6 = (b+21, b+23), \\ A_7 = (b+25, b+27), A_8 = (b+29, -(b+31)) \end{array}\right\}, \tag{4.7}$$

όπου b είναι ένας οποιοσδήποτε πραγματικός αριθμός. Η υπόλοιπη απόδειξη είναι παρόμοια με αυτήν του πορίσματος 2 (χρησιμοποιώντας τον Kharaghani σχηματισμό) και παραλείπεται. □

Στο ακόλουθο παράδειγμα δείχνουμε πώς μπορεί κανείς να κατασκευάσει έναν OLHD με $n = 32k$ εκτελέσεις και $m = 16$ παράγοντες για $k = 1$. Σχεδιασμοί με τέτοιες παραμέτρους προτάθηκαν παλαιότερα στην βιβλιογραφία αλλά κατασκευάστηκαν από μια διαφορετική μέθοδο (βλέπε, για παράδειγμα, Sun Liu and Lin (2010)).

Παράδειγμα 20 Αν $k = 1$ και $b = 32(k-1)$, τότε $b = 0$. Χρησιμοποιώντας τα οκτώ διανύσματα της σχέσης (4.7) με $b = 0$, έχουμε έναν 16×16 ορθογώνιο πίνακα D_0. Εφαρμόζοντας την μέθοδο που περιγράφεται στην απόδειξη του Θεωρήματος 5 έχουμε έναν ορθογώνιο σχεδιασμό Λατινικού υπερκύβου OLHD

$$X_1 = \begin{bmatrix} D_0 \\ -D_0 \end{bmatrix}$$

με 32 πειραματικές εκτελέσεις (παρατηρήσεις) και 16 παράγοντες, όπου ο D_0 αναλυτικά είναι:

$$\begin{bmatrix}
1 & 3 & 17 & -19 & 23 & 21 & -7 & 5 & 27 & 25 & -11 & 9 & -31 & 29 & 15 & 13 \\
3 & 1 & -19 & 17 & 21 & 23 & 5 & -7 & 25 & 27 & 9 & -11 & 29 & -31 & 13 & 15 \\
-17 & 19 & 1 & 3 & -7 & 5 & -23 & -21 & -11 & 9 & -27 & -25 & 15 & 13 & 31 & -29 \\
19 & -17 & 3 & 1 & 5 & -7 & -21 & -23 & 9 & -11 & -25 & -27 & 13 & 15 & -29 & 31 \\
-23 & -21 & 7 & -5 & 1 & 3 & 17 & -19 & 31 & -29 & 15 & 13 & 27 & 25 & 11 & -9 \\
-21 & -23 & -5 & 7 & 3 & 1 & -19 & 17 & -29 & 31 & 13 & 15 & 25 & 27 & -9 & 11 \\
7 & -5 & 23 & 21 & -17 & 19 & 1 & 3 & 15 & 13 & -31 & 29 & 11 & -9 & -27 & -25 \\
-5 & 7 & 21 & 23 & 19 & -17 & 3 & 1 & 13 & 15 & 29 & -31 & -9 & 11 & -25 & -27 \\
-27 & -25 & 11 & -9 & -31 & 29 & -15 & -13 & 1 & 3 & -17 & 19 & -23 & -21 & -7 & 5 \\
-25 & -27 & -9 & 11 & 29 & -31 & -13 & -15 & 3 & 1 & 19 & -17 & -21 & -23 & 5 & -7 \\
11 & -9 & 27 & 25 & -15 & -13 & 31 & -29 & -17 & 19 & 1 & 3 & -7 & 5 & 23 & 21 \\
-9 & 11 & 25 & 27 & -13 & -15 & -29 & 31 & 19 & -17 & 3 & 1 & 5 & -7 & 21 & 23 \\
31 & -29 & -15 & -13 & -27 & -25 & 11 & -9 & 23 & 21 & 7 & -5 & 1 & 3 & 17 & -19 \\
-29 & 31 & -13 & -15 & -25 & -27 & -9 & 11 & 21 & 23 & -5 & 7 & 3 & 1 & -19 & 17 \\
-15 & -13 & 31 & -29 & -11 & 9 & 27 & 25 & 7 & -5 & -23 & -21 & -17 & 19 & 1 & 3 \\
-13 & -15 & -29 & 31 & 9 & -11 & 25 & 27 & -5 & 7 & -21 & -23 & 19 & -17 & 3 & 1
\end{bmatrix}.$$

Ο σχεδιασμός αυτός έχει : $E(|t|) = \max|t_{ij}| = 0$, $E(|q|) = \frac{11}{527} = LB_{Eq}$, $\max|q_{ij}| = \frac{11}{31} = LB_{maxq}$, $D_R = \left[\frac{272}{31}, \frac{336}{31}, \frac{352}{31}, \frac{368}{31}, \frac{384}{31}, \frac{512}{31}\right]$,
$J_R = [32, 192, 128, 64, 64, 16]$, $\Phi_{100}^R = 0.118$, $D_E = [3.370, 4.765]$,
$J_E = [480, 16]$ και $\Phi_{100}^E = 0.316$.

Ένας σχεδιασμός με τον ίδιο αριθμό πειραματικών εκτελέσεων και παραγόντων Sun Liu and Lin (2010). Ο σχεδιασμός τους έχει τα ίδια αποτελέσματα με τα δικά μας σε όλα τα κριτήρια εκτός των D_R και J_R τιμών, οι οποίες είναι $D_R = \left[\frac{272}{31}, \frac{288}{31}, \frac{320}{31}, \frac{384}{31}, \frac{512}{31}\right]$ και $J_R = [32, 64, 128, 256, 16]$.

Σημειώστε ότι ο σχεδιασμός μας είναι καλύτερος από το σχεδιασμό των Sun Liu and Lin (2010). σε σχέση με την ορθογώνια απόσταση, δεδομένου ότι έχουν ίσες D_1 και J_1 ως προς τον σχεδιασμό μας, αλλά το D_2 είναι από το αντίστοιχο D_2 του σχεδιασμού μας. $\square$

Πόρισμα 4 *Υπάρχει ορθογώνιος σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου OLHD με $n = 40k$ εκτελέσεις και $m = 20$ παράγοντες για κάθε $k = 1, 2, \ldots$.*

Απόδειξη Έστω

$$\left.\begin{array}{l} A_1 = (b+21, b+5, -(b+27), b+29, b+23), \\ A_2 = (b+25, b+31, b+33, b+35, -(b+37)), \\ A_3 = (b+39, b+1, -(b+3), -(b+7), -(b+9)), \\ A_4 = (b+11, b+13, -(b+15), b+17, -(b+19)) \end{array}\right\}, \tag{4.8}$$

όπου b μπορεί να είναι ένας οποιοσδήποτε πραγματικός αριθμός. Η υπόλοιπη απόδειξη είναι παρόμοια με αυτήν του πορίσματος 2 και παραλείπεται. $\square$

Παράδειγμα 21 Αν $k = 1$ και $b = 40(k-1)$, τότε $b = 0$. Χρησιμοποιώντας το πόρισμα 1 με τα διανύσματα της σχέσης (4.8) και $b = 0$, έχουμε έναν 20×20 ορθογώνιο πίνακα D_0. Εφαρμόζοντας την μέθοδο που περιγράφεται στην απόδειξη του Θεωρήματος 5 έχουμε έναν ορθογώνιο σχεδιασμό Λατινικού υπερκύβου OLHD

$$X_1 = \begin{bmatrix} D_0 \\ -D_0 \end{bmatrix}$$

με 40 πειραματικές εκτελέσεις (παρατηρήσεις) και 20 παράγοντες, όπου D_0 κατασκευάστηκε χρησιμοποιώντας τα διανύσματα της σχέσης (4.8) με $b = 0$ στο Πορισμα 1. Ο σχεδιασμός αυτός έχει $E(|t|) = \max|t_{ij}| = 0$, $E(|q|) = \frac{41}{2457} = LB_{Eq}$, $\max|q_{ij}| = \frac{41}{117} = LB_{maxq}$, $D_R = \left[\frac{160}{13}, \frac{484}{39}, \frac{164}{13}, \frac{512}{39}, \frac{172}{13}, \frac{40}{3}, \frac{524}{39}, \frac{176}{13}, \frac{532}{39}, \frac{536}{39}, \frac{548}{39}, \frac{184}{13}, \frac{556}{39}, \frac{560}{39}, \frac{188}{13}, \frac{568}{39}, \frac{44}{3}, \frac{192}{13}, \frac{580}{39}, \frac{584}{39}, \frac{196}{13}, \frac{200}{13}, \frac{800}{39}\right]$, $J_R = [40, 40, 40, 64, 32, 40, 40, 40, 16, 8, 8, 36, 64, 32, 72, 40, 20]$, $\Phi_{100}^R = 0.085$, $D_E = [3.744,\ 5.295]$, $J_E = [760,\ 20]$, και $\Phi_{100}^E = 0.285$. $\square$

Πόρισμα 5 *Υπάρχει ορθογώνιος σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου OLHD με $n = 48k$ εκτελέσεις και $m = 24$ παράγοντες για κάθε $k = 1, 2, \ldots$.*

Απόδειξη Έστω

$$\left.\begin{array}{ll} A_1 = (b+1, b+27, b+3), & A_2 = (b+5, b+7, -(b+9))), \\ A_3 = (b+11, -(b+13), -(b+15)), & A_4 = (b+17, b+19, -(b+21)), \\ A_5 = (b+23, -(b+25), b+29), & A_6 = (b+31, b+33, -(b+35)), \\ A_7 = (b+37, b+39, b+41), & A_8 = (b+43, b+45, -(b+47)) \end{array}\right\}, \quad (4.9)$$

όπου b μπορεί να είναι ένας οποιοσδήποτε πραγματικός αριθμός. Η υπόλοιπη απόδειξη είναι παρόμοια με αυτήν του πορίσματος 2 (χρησιμοποιώντας τον σχηματισμό Kharaghani) και παραλείπεται. □

Παράδειγμα 22 Αν $k = 1$ και $b = 48(k-1)$, τότε $b = 0$. Χρησιμοποιώντας τα οκτώ διανύσματα της σχέσης (4.9) με $b = 0$, έχουμε έναν 24×24 ορθογώνιο πίνακα D_0. Εφαρμόζοντας την μέθοδο που περιγράφεται στην απόδειξη του Θεωρήματος 5 έχουμε έναν ορθογώνιο σχεδιασμό Λατινικού υπερκύβου OLHD

$$X_1 = \begin{bmatrix} D_0 \\ -D_0 \end{bmatrix}$$

με 48 πειραματικές εκτελέσεις (παρατηρήσεις) και 24 παράγοντες, όπου ο D_0 κατασκευάστηκε χρησιμοποιώντας τα διανύσματα της σχέσης (4.9) με $b = 0$ και τον σχηματισμό Kharaghani.

Ο σχεδιασμός αυτός έχει $E(|t|) = \max|t_{ij}| = 0$, $E(|q|) = \frac{49}{3525} = LB_{Eq}$, $\max|q_{ij}| = \frac{49}{141} = LB_{maxq}$, $D_R = \left[\frac{612}{47}, \frac{652}{47}, \frac{736}{47}, \frac{772}{47}, \frac{780}{47}, \frac{784}{47}, \frac{788}{47}, \frac{804}{47}, \frac{808}{47}, \frac{812}{47}, \frac{828}{47}, \frac{832}{47}, \frac{836}{47}, \frac{860}{47}, \frac{1152}{47}\right]$, $J_R = [48, 48, 288, 144, 48, 48, 48, 48, 48, 48, 48, 48, 48, 144, 24]$, $\Phi_{100}^R = 0.080$, $D_E = [4.084, 5.776]$, $J_E = [1104, 24]$, και $\Phi_{100}^E = 0.263$. □

Το πόρισμα 6 είναι η πρώτη μας κατασκευή με περιττό αριθμό πειραματικών εκτελέσεων $(n = 24k+1)$. Οι κατασκευές αυτές είναι ενδιαφέρουσες, δεδομένου ότι, με τη χρήση τους, μπορεί κανείς να αποκτήσει μια κατασκευή για OLHD με $n-1$ πειραματικές εκτελέσεις. Παρόμοια προσέγγιση έδωσαν και οι Ye (1998)[Section 2.2]) για την δική τους μέθοδο.

Πόρισμα 6 *Υπάρχει ορθογώνιος σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου OLHD με $n = 24k+1$ πειραματικές εκτελέσεις και $m = 12$ παράγοντες για κάθε $k = 1, 2, \ldots$.*

Απόδειξη Έστω

$$\left.\begin{array}{ll} A_1 = (b+7, -(b+2), b+9), & A_2 = (b+8, -(b+10), b+11), \\ A_3 = (b, b+1, -(b+3)), & A_4 = (b+4, b+5, b+6) \end{array}\right\}, \quad (4.10)$$

όπου b μπορεί να είναι ένας οποιοσδήποτε πραγματικός αριθμός. Είναι εύκολο να δειχθεί ότι

$$P_{A_1}(0) + P_{A_2}(0) + P_{A_3}(0) + P_{A_4}(0) = 12b^2 + 132b + 506$$

$$P_{A_1}(s) + P_{A_2}(s) + P_{A_3}(s) + P_{A_4}(s) = 0 \;\; gia \;\; s = 1, 2.$$

Για $b \in \{1, 2, \ldots\}$, έστω $D_b = GS(A_1, A_2, A_3, A_4)$ ο πίνακας που παράγεται από τον Goethal-Seidel σχηματισμό χρησιμοποιώντας το Πόρισμα 1 και τα διανύσματα από την σχέση (4.10). Τότε $D_b^T D_b = z_b I_{12}$, όπου $z_b = 12b^2 + 132b + 506$. Για κάποιο $k \in \{1, 2, \ldots\}$, έστω $\left[D_1^T, D_{13}^T, \ldots, D_{12k-11}^T, 0_{1\times 12}^T, -D_1^T, -D_{13}^T, \ldots, -D_{12k-11}^T\right]^T$, όπου $0_{1\times 12}$ είναι ο μηδενικός πίνακας διαστάσεων 1×12. Θα πρέπει να δείξουμε ότι ο X_k είναι ο επιθυμητός OLHD με $m = 12$ παράγοντες $n = 24k + 1$ πειραματικές εκτελέσεις.

ι) Για $b \in \{1, 2, \ldots\}$ έχουμε κάθε στήλη του πίνακα $\begin{bmatrix} D_b \\ -D_b \end{bmatrix}$ να είναι μετάθεση των $(b, b+1, b+2, \ldots, b+11, -b, -b-1, -b-2, \ldots, -b-11)$. Έτσι, για $k \in \{1, 2, \ldots\}$, κάθε στήλη του πίνακα X_k είναι μετάθεση των $(0,\, 1,\, 2,\, 3,\, 4,\, 5,\, 6,\, \ldots,\, 12k,\, -1,\, -2,\, -3,\, -4,\, -5,\, -6,\, \ldots,\, -12k)$.

ιι) Οι στήλες του πίνακα X_k είναι ανά δύο ορθογώνιες αφού και οι στήλες του D_b είναι ανά δύο ορθογώνιες. Έτσι

$$\begin{aligned} X_k^T X_k &= 2\sum_{\ell=0}^{k-1} D_{12\ell+1}^T D_{12\ell+1} = 2\sum_{\ell=1}^{12k} \ell^2 I_{12} \\ &= 2\sum_{\ell=0}^{k-1} \big(12(12\ell+1)^2 + 132(12\ell+1) + 506\big)\, I_{12} \\ &= \big(4k(12k+1)(24k+1)\big) I_{12}. \end{aligned}$$

Από τα ι) και ιι) καταλήγουμε ότι για $k \in \{1, 2, \ldots,\}$, ο πίνακας X_k είναι ο επιθυμητός OLHD με $24k + 1$ πειραματικές εκτελέσεις και 12 παράγοντες. □

Παράδειγμα 23 Για $k = 1$ και $b = 12k - 11 \Rightarrow b = 1$. Χρησιμοποιώντας τα διανύσματα της σχέσης (4.7) με $b = 1$, έχουμε έναν 12×12 ορθογώνιο πίνακα D_1. Εφαρμόζοντας την μέθοδο που περιγράφεται στην απόδειξη του Πορίσματος 6 έχουμε έναν ορθογώνιο σχεδιασμό Λατινικού υπερκύβου OLHD

$$X_1 = \begin{bmatrix} D_1 \\ 0_{1\times 12} \\ -D_1 \end{bmatrix}$$

με 25 πειραματικές εκτελέσεις (παρατηρήσεις) και 12 παράγοντες, όπου ο D_1 αναλυτικά είναι:

$$D_1 = \begin{bmatrix}
8 & -3 & 10 & 12 & -11 & 9 & -4 & 2 & 1 & 7 & 6 & 5 \\
10 & 8 & -3 & -11 & 9 & 12 & 2 & 1 & -4 & 6 & 5 & 7 \\
-3 & 10 & 8 & 9 & 12 & -11 & 1 & -4 & 2 & 5 & 7 & 6 \\
-12 & 11 & -9 & 8 & -3 & 10 & -6 & -7 & -5 & 1 & -4 & 2 \\
11 & -9 & -12 & 10 & 8 & -3 & -7 & -5 & -6 & 2 & 1 & -4 \\
-9 & -12 & 11 & -3 & 10 & 8 & -5 & -6 & -7 & -4 & 2 & 1 \\
4 & -2 & -1 & 6 & 7 & 5 & 8 & -3 & 10 & 11 & -12 & -9 \\
-2 & -1 & 4 & 7 & 5 & 6 & 10 & 8 & -3 & -9 & 11 & -12 \\
-1 & 4 & -2 & 5 & 6 & 7 & -3 & 10 & 8 & -12 & -9 & 11 \\
-7 & -6 & -5 & -1 & 4 & -2 & -11 & 12 & 9 & 8 & -3 & 10 \\
-6 & -5 & -7 & -2 & -1 & 4 & 9 & -11 & 12 & 10 & 8 & -3 \\
-5 & -7 & -6 & 4 & -2 & -1 & 12 & 9 & -11 & -3 & 10 & 8
\end{bmatrix}.$$

Ο σχεδιασμός αυτός έχει $E(|t|) = \max|t_{ij}| = 0$, $E(|q|) = \frac{1}{36} = LB_{Eq}$, $\max|q_{ij}| = \frac{13}{36} = LB_{maxq}$, $D_R = \left[\frac{13}{2}, \frac{22}{3}, \frac{49}{6}, \frac{25}{3}, \frac{17}{2}, \frac{53}{6}, 9, \frac{55}{6}, \frac{28}{3}, \frac{19}{2}, 13\right]$, $J_R = [24, 24, 24, 48, 24, 48, 24, 24, 24, 24, 12]$, $\Phi_{100}^R = 0.159$, $D_E = [2.125, 3.005, 4.249]$, $J_E = [24, 264, 12]$, και $\Phi_{100}^E = 0.486$. □

Πόρισμα 7 *Υπάρχει ορθογώνιος σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου OLHD με*

ι. $n = 32k + 1$ *πειραματικές εκτελέσεις και* $m = 16$ *παράγοντες,*

ιι. $n = 40k + 1$ *πειραματικές εκτελέσεις και* $m = 20$ *παράγοντες,*

ιιι. $n = 48k + 1$ *πειραματικές εκτελέσεις και* $m = 24$ *παράγοντες,*

για κάθε $k = 1, 2, \ldots$.

Απόδειξη Έστω

$$\iota.\ \begin{cases} A_1 = (b+1, b+2), & A_2 = (b+3, -(b+4)), \\ A_3 = (b+5, -(b+6)), & A_4 = (b+7, b+8), \\ A_5 = (b+9, -(b+10)), & A_6 = (b+11, b+12), \\ A_7 = (b+13, b+14), & A_8 = (b+15, -(b+16)) \end{cases}$$

$$\iota\iota.\ \begin{cases} A_1 = (b+11, b+3, -(b+14), b+15, b+12), \\ A_2 = (b+13, b+16, b+17, b+18, -(b+19)), \\ A_3 = (b+20, b+1, -(b+2), -(b+4), -(b+5)), \\ A_4 = (b+6, b+7, -(b+8), b+9, -(b+10)), \end{cases}$$

$$\iota\iota\iota.\ \begin{cases} A_1 = (b+1, b+14, b+2), & A_2 = (b+3, b+4, -(b+5)), \\ A_3 = (b+6, -(b+7), -(b+8)), & A_4 = (b+9, b+10, -(b+11)), \\ A_5 = (b+12, -(b+13), b+15), & A_6 = (b+16, b+17, -(b+18)), \\ A_7 = (b+19, b+20, b+21), & A_8 = (b+22, b+23, -(b+24)), \end{cases}$$

όπου b μπορεί να είναι ένας οποιοσδήποτε πραγματικός αριθμός. Η υπόλοιπη απόδειξη είναι παρόμοια με αυτήν του πορίσματος 6 χρησημοποιώντας τον Kharaghani σχηματισμό για τις περιπτώσεις *ι* και *ιιι* και παραλείπεται.
□

4.4 Τεχνικές Πολλαπλασιασμού - Συγκρίσεις

Χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα της ενότητας 4.3, παίρνουμε διάφορες τεχνικές πολλαπλασιασμού και νέες άπειρες οικογένειες των OLHDs.

Λήμμα 7 *(Lin et al., 2010, (Theorem 3)).Υποθέτουμε ότι έχουμε έναν OLHD(n,m) με n πολλαπλάσιο του 4, και έστω ένας πίνακας Hadamard τάξης n. Τότε μπορούν να κατασκευαστούν:*
(ι) Οι ορθογώνιοι σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων OLHD(2an, am), για $a = 1, 2, 4, 8$.
(ιι) Οι ορθογώνιοι σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων OLHD(2an + 1, am), για $a = 1, 2, 4, 8$.

Η τεχνική πολλαπλασιασμού στο παραπάνω Λήμμα των Lin et al. (2010) γίνεται πολλαπλασιάζοντας τον αριθμό των εκτελέσεων με 2^c και τον αριθμό των παραγόντων του σχεδιασμού με 2^{c-1} για $c = 1, 2, 3, 4$.

Θεώρημα 6 *[Georgiou, S.D. and Efthimiou, I. (2014)].Υποθέτουμε ότι έχουμε ένα OLHD(n,m) με n πολλαπλάσιο του 4, και έστω ένας πίνακας Hadamard τάξης n. Τότε μπορούν να κατασκευαστούν:*
(ι) Οι ορθογώνιοι σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων OLHD(2an, am), για $a = 12, 16, 20, 24$.
(ιι) Οι ορθογώνιοι σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων OLHD(2an + 1, am), για $a = 12, 16, 20, 24$.

Απόδειξη Η απόδειξη παρέχει μια λεπτομερή διαδικασία για την κατασκευή αυτών των OLHDs. Η κατασκευή των σχεδιασμών της περίπτωσης (i) μπορεί να δοθεί χρησιμοποιώντας το γίνομενο Kronecker όπως δίνεται στο Θεώρημα 1 των Lin et al. (2010), για την κατασκευή των απαιτούμενων πινάκων A, B, C, και D για κάθε περίπτωση. Επιλέγουμε τον πίνακα B να είναι ο $OLHD(n, m)$ πίνακας. Ο πίνακας D λήφθηκε παίρνοντας m στήλες ενός πίνακα Hadamard τάξης n. Ο πίνακας C επιλέγεται να είναι ο $OLHD(2a, a)$ που κατασκευάστηκε, για $a = 12$ στο Παράδειγμα 18, για $a = 16$ στο Παράδειγμα 20, για $a = 20$ στο Παράδειγμα 21, και για $a = 24$ στο Παράδειγμα 22. Σημειώνεται ότι ο πίνακας C μπορεί να γραφεί ως foldover κατασκευή ως εξής :

$$C = \begin{bmatrix} D_0 \\ -D_0 \end{bmatrix}.$$

Τώρα, έστω $A = \begin{bmatrix} S_0 \\ S_0 \end{bmatrix}$, όπου S_0 λήφθηκε παίρνοντας a στήλες ενός πίνακα Hadamard τάξης $2a$. Επιλέγοντας με αυτό τον τρόπο τους πίνακες A, B, C, και D ικανοποιούνται οι προϋποθέσεις (i), (ii), (iii) και (iv) στο Θεώρημα 1 των Lin et al. (2010). Αυτό αποδεικνύει την περίπτωση (i) του Θεωρήματος 2. Η απόδειξη για την περίπτωση (ii) είναι παρόμοια. □

Σημειώνεται ότι αν κάποιος εφαρμόσει επανειλημμένα το Θεώρημα 5, μπορεί να κατασκευάσει άπειρες οικογένειες OLHDs .

4.5 Ιδιότητες των Σχεδιασμών

Σε αυτή την ενότητα θα διερευνήσουμε τις ιδιότητες των κατασκευασμένων σχεδιασμών και θα κάνουμε κάποιες συγκρίσεις με γνωστούς σχεδιασμούς από τη βιβλιογραφία. Συγκεκριμένα, θα συγκρίνουμε τους σχεδιασμούς που κατασκευάσαμε με αυτούς των Lin et al. (2010), Sun Liu and Lin (2009) και Sun Liu and Lin (2010) σε σχέση με τον αριθμό των παραγόντων που μπορούν να εξετάσουν, την ορθογωνιότητα τους και την ιδιότητα να καλύπτουν (γεμίζουν) τον χώρο.

Πόρισμα 8 *Έστω $X = (x_1, \ldots, x_a)$ ένας LHD με $n = 2ak$ ή $n = 2ak + 1$ πειραματικές εκτελέσεις και $m = a$ παράγοντες, $a = 12, 16, 20, 24$ όπως τους παρασουσιάσαμε στην παραπάνω ενότητα. Τότε,*

ι. Κάθε τετραγωνική επίδραση ενός παράγοντα ή αλληλελεπίδραση δύο παραγόντων είναι ορθογώνια ως προς τις κύριες επιδράσεις του σχεδιασμού.

ιι. Ο πίνακας X είναι ένας βέλτιστος LHD ως προς τις τετραγωνικές επιδράσεις (ως προς τα κριτήρια $max|q_{ij}|$ και $E(|q|)$ επιτυγχάνουμε το βέλτιστο).

ιιι. Ο πίνακας X είναι ένας βέλτιστος LHD ως προς τις αλληλεπιδράσεις (ως προς τα κριτήρια $max|t_{ij}|$ και $E(|t|)$ επιτυγχάνουμε το βέλτιστο).

Σημειώνεται ότι το Πορισμα 8 ισχύει και για τους σχεδιασμούς που κατασκευάστηκαν από τους Lin et al (2010), και για τους σχεδιασμούς που κατασκευάστηκαν από τους Sun Liu and Lin (2009) και Sun Liu and Lin (2010).

Στον πίνακα 4.1 συγκρίνουμε τον αριθμό παραγόντων OLHDs ίδιου αριθμού πειραματικών εκτελέσεων. Στην πρώτη στήλη του πίνακα αυτού δίνεται ο αριθμός των εκτελέσεων, ενώ στη δεύτερη στήλη δίνεται ο αριθμός των παραγόντων που μπορούν να εξετάσουν οι σχεδιασμοί μας. Στις στήλες LBST Factors και SLL Factors παρουσιάζουμε τον αριθμό των παραγόντων των σχεδιασμών που κατασκευάστηκαν από τους Lin et al (2010), και Sun Liu and Lin (2010) αντίστοιχα. Στις τελευταίες τρεις στήλες αυτού του πίνακα παρουσιάζονται οι παράμετροι που απαιτούνται για την κατασκευή των δικών μας σχεδιασμών. Σημειώνεται ότι οι σχεδιασμοί μέχρι 96 εκτελέσεις, που παρουσιάζονται στο πίνακα 4.1, μπορούν να κατασκευαστούν και με τις μεθόδους που παρουσιάζονται στην ενότητα 5.1 και επίσης μπορούν να κατασκευαστούν και με fold-over δομή. Τα αποτελέσματα δείχνουν ότι ο σχεδιασμός που έχει fold-over δομή είναι πολύ καλύτερος από τους σχεδιασμούς που κατασκευάζονται από το Θεώρημα 6 ή από τους σχεδιασμούς των Lin et al (2010).

Στον πίνακα 4.1 παρουσιάζονται τρεις γνωστοί σχεδιασμοί από την βιβλιογραφία οι οποίοι έχουν ίδιο αριθμό εκτελέσεων και παραγόντων. Αυτοί είναι οι $OLHD(32, 16)$, που παρουσιάσαμε στο Παράδειγμα 20, ο $OLHD(94, 24)$ που κατασκευάστηκε με διαφορετικές μεθόδους σε αυτή τη διατριβή (βλέπε από πόρισμα 8, για $k = 2$ και το Θεώρημα 6 και το Θεώρημα 3 των Lin et al (2010)),και ο $OLHD(192, 48)$ που κατασκευάστηκε απο το Θέωρημα 6 αυτής της διατριβής και το Θεώρημα 3 των Lin et al (2010).

Παράδειγμα 24 *Στον πίνακα 4.2 υπολογίζουμε όλα τα κριτήρια που χρησιμοποιούνται σε αυτή τη διατριβή για τους σχεδιασμούς OLHD(96, 24) που κατασκευάζονται απο τις τρεις μεθόδους που συγκρίνουμε. Τα αποτελέσματα δείχνουν ότι ο σχεδιασμός που έχει fold-over δομή είναι πολύ καλύτερος από τους σχεδιασμούς που κατασκευάζονται με την μέθοδο του γινομένου Kronecker τόσο ως προς την ορθογωνιότητα αλλά και ως προς τα κριτήρια κάλυψης του χώρου.*

Παράδειγμα 25 *Στον πίνακα 4,3 υπολογίζουμε όλα τα κριτήρια που χρησιμοποιούνται σε αυτή τη διατριβή για τους σχεδιασμούς OLHD(192, 48) που κατασκευάζονται απο τις τρεις μεθόδους που συγκρίνουμε. Τα αποτελέσματα δείχνουν ότι ο σχεδιασμός που έχει fold-over δομή είναι πολύ καλύτερος από τους σχεδιασμούς που κατασκευάζονται με την μέθοδο του γινομένου Kronecker, τόσο ως προς την ορθογωνιότητα αλλά και ως προς τα κριτήρια κάλυψης του χώρου (space-filling.)*

Πίνακας 4.1: OLHDs που κατασκευάστηκαν από το Θεώρημα 6.

	Παράγοντες			Κατασκευή		
Εκτελέσεις	Εδώ	LBST	SLL	n	m	a
24	12	8	4	1	1	12
32	16	12	16	1	1	16
40	20	–	4	1	1	20
48	24	12	8	1	1	24
64	16	32	32	2	1	16
80	20	12	8	2	1	20
96	24	24	16	2	1	24
128	32	48	64	4	2	16
160	40	24	16	4	2	20
192	48	48	32	8	4	12
256	64	192	128	8	4	16
320	80	48	32	8	4	20
384	144	48	64	8	6	24
512	128	–	256	16	8	16
576	144	–	32	12	6	24
640	160	96	64	20	10	16
768	192	96	128	16	8	24
768	288	96	128	16	12	24
960	240	24	32	20	10	24
1024	256	384	512	32	16	16
1152	288	96	64	24	12	24
1280	320	192	128	32	16	20
1536	384	192	64	32	16	24
1600	400	–	32	40	20	20
1920	480	48	64	40	20	24
2304	576	192	128	48	24	24
4608	1152	192	256	96	48	24
9216	2304	384	512	192	96	24

Πίνακας 4.2: Ιδιότητες του OLHD(96,24).

	Cor. for $48k$, $k=2$	Θεώρημα 6	Th. 3,(Linetal2010)
$E(\|t\|)$	0	0	$\frac{1647481}{317917500}=0.0052$
$\max\|t_{ij}\|$	0	0	$\frac{109557}{875425}=0.1251$
$E(\|q\|)$	$\frac{97}{7125}=0.0136$	$\frac{97}{7125}=0.0136$	$\frac{446648}{21885625}=0.0204$
$\max\|q_{ij}\|$	$\frac{97}{285}=0.3404$	$\frac{97}{285}=0.3404$	$\frac{97}{285}=0.3404$
D_E	$[2.021, 2.475, \ldots]$	$[0.103, 3.994, \ldots]$	$[2.304, 2.308, 2.320, \ldots]$
J_E	$[1104, 48, 24, \ldots]$	$[48, 2, 2, \ldots]$	$[2, 2, 2, \ldots]$
Φ_{100}^E	0.531	10.079	0.473
D_R	$\left[\frac{612}{95}, \frac{652}{95}, \frac{736}{95}, \ldots\right]$	$\left[\frac{45}{95}, \frac{1208}{95}, \frac{1212}{95}, \ldots\right]$	$\left[\frac{528}{95}, \frac{544}{95}, \frac{112}{19}, \ldots\right]$
J_R	$[48, 48, 208, \ldots]$	$[48, 2, 20, \ldots]$	$[4, 4, 4, \ldots]$
Φ_{100}^R	0.161	2.057	0.191

Πίνακας 4.3: Ιδιότητες του OLHD(192,48).

	Θεώρημα 6	Th. 3, (Linetal2010)
$E(\|q\|)$	$\frac{9370175}{1035002451}=0.0091$	$\frac{3037011}{345000817}=0.0088$
$\max\|q_{ij}\|$	$\frac{193}{573}=0.3368$	$\frac{193}{573}=0.3368$
$E(\|t\|)$	$\frac{2906492}{2316434057}=0.0013$	$\frac{606716585}{389160921576}=0.0016$
$\max\|t_{ij}\|$	$\frac{257600}{7040833}=0.0366$	$\frac{441333}{7040833}=0.0627$
D_E	$[3.867, 3.920, 3.921, \ldots]$	$[3.247, 3.253, 3.262, \ldots]$
J_E	$[2, 4, 2, \ldots]$	$[1, 1, 1, \ldots]$
Φ_{100}^E	0.265	0.318
D_R	$\left[\frac{2280}{191}, \frac{2328}{191}, \frac{2376}{191}, \ldots\right]$	$\left[\frac{1824}{191}, \frac{1840}{191}, \frac{1856}{191}, \ldots\right]$
J_R	$[2, 2, 20, \ldots]$	$[4, 8, 4, \ldots]$
Φ_{100}^R	0.085	0.107

Κεφάλαιο 5

Σχεδόν Ορθογωνίοι Σχεδιασμοί Λατινικών Υπερκύβων

Τα αποτελέσματα του κεφαλαίου αυτού δημοσιεύθηκαν στην εργασία μας Efthimiou, Georgiou and Liu (2014), στο επιστημονικό περιοδικό Metrika χρησιμοποιώντας κυκλικούς πίνακες και κατάλληλες προυποθέσεις, επέκτειναν τα παραπάνω αποτελέσματα των Lin et al (2010) για $a = 12, 16, 20,$ και 24.

Σε αυτή την ενότητα τροποποιήσαμε τα αποτελέσματα των Georgiou and Efthimiou (2014), για να κατασκευάσουμε NOLHDs.

Η γενική μορφή των διανυσμάτων με μηδενική PAF που χρησιμοποιήθηκαν σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζονται στους Πίνακες 5.1 και 5.2. Πιο συγκεκριμένα, δείξαμε ότι υπάρχει ένας NOLHD με n αγωγές και m παράγοντες για $(n, m) \in \{(24k + 2, 12), (32k + 2, 16), (40k + 2, 20), (48k + 2, 24), (24k + 3, 12), (32k + 3, 16), (40k + 3, 20), (48k + 3, 24)\}$, για όλα $k = 1, 2, 3, \ldots$.

5.1 Γενική Κατασκευή

Στην ενότητα αυτή παρέχουμε μεθόδους για την κατασκευή ορθογώνιων σχεδιασμών Λατινικών Υπερκύβων με μικρή συσχέτιση. Αυτό είναι ιδιαίτερα ενδιαφέρον, όταν δεν μπορούν να υπάρξουν ορθογώνιοι σχεδιασμοί Λατινικών Υπερκύβων. Επιπλέον, αυτοί οι σχεδιασμοί Λατινικού υπερκύβου με μικρή συσχέτιση ικανοποιούν τις ιδιότητες (a') και (b).

Για να μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τους LHDs με μικρή συσχέτιση που κατασκευάσαμε σε ένα μοντέλο δεύτερης τάξης για κρησάρισμα, θα

Πίνακας 5.1: Διανύσματα με μηδενική PAF για NOLHDs με περιττό αριθμό εκτελέσεων, οπου με Α.Π. συμβολίζουμε τον αριθμό των παραγόντων στον σχεδιασμό

Α. Π.	**Διανύσματα**
12	$A_1 = (b+15, -(b+5), b+19)$, $A_2 = (b+17, -(b+21), b+23)$, $A_3 = (b+1, b+3, -(b+7))$, $A_4 = (b+9, b+11, b+13)$
16	$A_1 = (b+1, b+3)$, $A_2 = (b+5, -(b+7))$, $A_3 = (b+9, -(b+11))$, $A_4 = (b+13, b+15)$, $A_5 = (b+17, -(b+19))$, $A_6 = (b+21, b+23)$, $A_7 = (b+25, b+27)$, $A_8 = (b+29, -(b+31))$
20	$A_1 = (b+21, b+5, -(b+27), b+29, b+23)$, $A_2 = (b+25, b+31, b+33, b+35, -(b+37))$, $A_3 = (b+39, b+1, -(b+3), -(b+7), -(b+9))$, $A_4 = (b+11, b+13, -(b+15), b+17, -(b+19))$
24	$A_1 = (b+1, b+27, b+3)$, $A_2 = (b+5, b+7, -(b+9))$, $A_3 = (b+11, -(b+13), -(b+15))$, $A_4 = (b+17, b+19, -(b+21))$, $A_5 = (b+23, -(b+25), b+29)$, $A_6 = (b+31, b+33, -(b+35))$, $A_7 = (b+37, b+39, b+41)$, $A_8 = (b+43, b+45, -(b+47))$

πρέπει οι LHDs να ικανοποιούν τις εξής ιδιότητες :
$a')$ Κάθε στήλη να είναι σχεδόν ορθογώνια ως προς τις άλλες στήλες του σχεδιασμού.
$b)$ Κάθε στήλη να είναι ορθογώνια με οποιαδήποτε στήλη που αντιστοιχεί σε τετραγωνική επίδραση ή αλληλεπίδραση δύο παραγόντων.

Η ακόλουθη μέθοδος είναι εμπνευσμένη από ένα θεώρημα των Liu and Dean (2004) όπου οι συγγραφείς πρόσθεσαν μια γραμμή με μονάδες σε k κυκλικούς σχεδιασμούς για να κατασκευαστούν οι επιθυμητοί υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί. Επεκτείνοντας αυτή την ιδέα, μπορούμε να κατασκευάσουμε σχεδόν ορθογώνιους σχεδιασμούς Λατινικού υπερκύβου προσθέτοντας μια γραμμή σε κατάλληλους πίνακες που κατασκευάζονται χρησιμοποιώντας διανύσματα με μηδενική PAF.

Θεώρημα 7 *Έστω A,B,C,D είναι τέσσερα διανύσματα γραμμής μήκους l με μηδενική PAF και $n = 4l$. Εάν οι απόλυτες τιμές των στοιχείων του διανύσματος γραμμής (A, B, C, D) είναι μια μετάθεση των*

(i) $(b+1, b+3, \ldots, b+2n-1)$, τότε για $b = 2, 2n+2, \ldots, 2n(k-1)+2$ υπάρχει ένας σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου με μικρή συσχέτιση (NOLHD) $L(2nk+2, n)$, για κάθε $k = 1, 2, \ldots$. Η συσχέτιση r_{uv}, δύο οποιονδήποτε

Πίνακας 5.2: Διανύσματα με μηδενική PAF για NOLHDs με άρτιο αριθμό εκτελέσεων, οπου με Α.Π. συμβολίζουμε τον αριθμό των παραγόντων στον σχεδιασμό

Α.Π.	**Διανύσματα**
12	$A_1 = (b+7, -(b+2), b+9)$, $A_2 = (b+8, -(b+10), b+11)$, $A_3 = (b, b+1, -(b+3))$, $A_4 = (b+4, b+5, b+6)$
16	$A_1 = (b+1, b+2)$, $A_2 = (b+3, -(b+4))$, $A_3 = (b+5, -(b+6))$, $A_4 = (b+7, b+8)$, $A_5 = (b+9, -(b+10))$, $A_6 = (b+11, b+12)$, $A_7 = (b+13, b+14)$, $A_8 = (b+15, -(b+16))$
20	$A_1 = (b+11, b+3, -(b+14), b+15, b+12)$, $A_2 = (b+13, b+16, b+17, b+18, -(b+19))$, $A_3 = (b+20, b+1, -(b+2), -(b+4), -(b+5))$, $A_4 = (b+6, b+7, -(b+8), b+9, -(b+10))$
24	$A_1 = (b+1, b+14, b+2)$, $A_2 = (b+3, b+4, -(b+5))$, $A_3 = (b+6, -(b+7), -(b+8))$, $A_4 = (b+9, b+10, -(b+11))$, $A_5 = (b+12, -(b+13), b+15)$, $A_6 = (b+16, b+17, -(b+18))$, $A_7 = (b+19, b+20, b+21)$, $A_8 = (b+22, b+23, -(b+24))$

στηλών u και v, του σχεδιασμού Λατινικού υπερκύβου που κατασκευάσαμε είναι $r_{uv} = 3/(nk+1)(2nk+1)(2nk+3)$.

(ii) $(b, b+1\ldots, b+n-1)$, τότε για $b = 2, n+2, \ldots, n(k-1)+2$ υπάρχει ένας σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου με μικρή συσχέτιση (NOLHD) $L(2nk+3, n)$, για κάθε $k = 1, 2, \ldots$. Η συσχέτιση r_{uv}, δύο οποιονδήποτε στηλών u και v, του σχεδιασμού Λατινικού υπερκύβου που κατασκευάσαμε είναι $r_{uv} = 6/(nk+1)(nk+2)(2nk+3)$.

Απόδειξη (i) Τα τέσσερα διανύσματα που χρησιμοποιήσαμε στο Πόρισμα 1 μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να κατασκευάσουμε ορθογώνιους τετραγωνικούς πίνακες D_b τάξης n με n διαφορετικά επίπεδα και έτσι

$$D_b^T D_b = z_b I_n, \text{ όπου } z_b = \sum_{i=1}^{n} (b+2i-1)^2 = \frac{n(4n^2+6bn+3b^2-1)}{3}.$$

Για $k = 1, 2, \ldots$ ορίζουμε

$$T_k = \left(D_2^T, \quad D_{2n+2}^T, \quad \cdots, \quad D_{2n(k-1)+2}^T\right)^T$$

και

$$X_k = \begin{bmatrix} T_k \\ 1_n \\ -1_n \\ -T_k \end{bmatrix},$$

όπου 1_n είναι $1 \times n$ διάνυσμα με όλα του τα στοιχεία να είναι μονάδες.

Είναι εύκολο να εξακριβωθεί ότι τα επίπεδα της κάθε στήλης του X_k είναι μια μετάθεση των $(1, 3, 5, \ldots, 2nk - 1, -1, -3, -5, \ldots, -2nk - 1)$. Οι στήλες του X_k είναι ανά δύο ορθογώνιες αφού οι στήλες του D_b είναι ανά δύο ορθογώνιες για κάθε φυσικό αριθμό b. Έτσι έχουμε:

$$\begin{aligned} X_k^T X_k &= 2\left(\sum_{\ell=0}^{k-1} D_{2n\ell+2}^T D_{2n\ell+2}\right) I_n + 2J_n = 2\left(\sum_{i=1}^{nk+1} (2i-1)^2 - 1\right) I_n + 2J_n \\ &= \left(\frac{2(nk+1)(2nk+1)(2nk+3)}{3} - 2\right) I_n + 2J_n. \end{aligned}$$

Κάθε στήλη του πίνακα X_k είναι μια μετάθεση των $(1, 3, 5, \ldots, 2nk + 1, -1, -3, -5, \ldots, -(2nk + 1))$, με $X_k^T X_k = 2(\sum_{i=1}^{nk+1}(2i - 1)^2 - 1)I_n + 2J_n$, όπου I_n είναι ο ταυτοτικός πίνακας τάξης n και J_n είναι ο $n \times n$ πίνακας με όλα τα στοιχεία του μονάδες. Και έτσι, ο πίνακας X_k, για $k = 1, 2, \ldots$, είναι ο επιθυμητός NOLHD που ψάχναμε. Για δύο οποιεσδήποτε στήλες u, v του πίνακα X_k με $u \neq v$, έχουμε ότι $r_{uv} = 3/(nk + 1)(2nk + 1)(2nk + 3)$.

(ii) Τα τέσσερα διανύσματα που χρησιμοποιήσαμε στο Πόρισμα 1 μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να κατασκευάσουμε ορθογώνιους τετραγωνικούς πίνακες D_b τάξης n με n διαφορετικά επίπεδα και έτσι

$$D_b^T D_b = z_b I_n, \text{ όπου } z_b = \sum_{i=0}^{n-1} (b+i)^2 = \frac{n(2n^2 - 3n + 6bn + 6b^2 - 6b + 1)}{6}.$$

Για $k = 1, 2, \ldots$ ορίζουμε

$$T_k = \begin{pmatrix} D_2^T, & D_{n+2}^T, & \cdots, & D_{n(k-1)+2}^T \end{pmatrix}^T$$

και

$$X_k = \begin{bmatrix} T_k \\ 1_n \\ 0_n \\ -1_n \\ -T_k \end{bmatrix}.$$

Είναι εύκολο να εξακριβωθεί ότι τα επίπεδα κάθε στήλης του X_k είναι μια μετάθεση των $(1, 2, 3, \ldots, nk+1, 0, -1, -2, -3, \ldots, -(nk+1))$. Οι στήλες του πίνακα X_k έχουν εσωτερικό γινόμενο ίσο με 2 αφού οι στήλες του D_b είναι ανά δύο ορθογώνιες για κάθε $b = 2, \ldots, n(k-1)+2$. Επομένως, εχουμε

$$\begin{aligned} X_k^T X_k &= 2\left(\sum_{\ell=0}^{k-1} D_{n\ell+2}^T D_{n\ell+2}\right) I_n + 2J_n = 2\left(\sum_{i=1}^{nk+1} i^2 - 1\right) I_n + 2J_n \\ &= \left(\frac{(nk+1)(nk+2)(2nk+3)}{3} - 2\right) I_n + 2J_n. \end{aligned}$$

Κάθε στήλη του πίνακα X_k είναι μια μετάθεση των $(0, 1, 2, 3 \ldots, nk+1, -1, -2, -3 \ldots, -(nk+1)$, με $X_k^T X_k = 2(\sum_{i=1}^{nk+1} i^2 - 2)I_n + 2J_n$. Και έτσι, ο πίνακας X_k για $k = 1, 2, \ldots$, είναι ο επιθυμητός NOLHD που ψάχναμε. Για δύο οποιεσδήποτε στήλες u, v του πίνακα X_k με $u \neq v$ έχουμε ότι $r_{uv} = 6/(nk+1)(nk+2)(2nk+3)$.

Θεώρημα 8 *Έστω $A_1, A_2, \ldots$ οκτώ διανυσματα γραμμής μήκους l με μηδενική PAF και $n = 8l$. Εάν οι απόλυτες τιμές των στοιχείων του διανύσματος γραμμής $(A_1,A_2,A_3,A_4,A_5,A_6,A_7,A_8)$ είναι μια μετάθεση των*

(ι) $(b+1, b+3, \ldots, b+2n-1)$, τότε για $b = 2, 2n+2, \ldots, 2n(k-1)+2$ υπάρχει ένας σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου με μικρή συσχέτιση $L(2nk+2, n)$. Η συσχέτιση r_{uv}, δύο οποιονδήποτε στηλών u και v, του σχεδιασμού Λατινικού υπερκύβου που κατασκευάσαμε είναι: $r_{uv} = 3/(nk+1)(2nk+1)(2nk+3)$.

(ιι) $(b, b+1 \ldots, b+n-1)$, τότε για $b = 2, n+2, \ldots, n(k-1)+2$ υπάρχει ένας σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου με μικρή συσχέτιση $L(2nk+3, n)$. Η συσχέτιση r_{uv}, δύο οποιονδήποτε στηλών u και v, του σχεδιασμού Λατινικού υπερκύβου που κατασκευάσαμε είναι: $r_{uv} = 6/(nk+1)(nk+2)(2nk+3)$.

Απόδειξη Η απόδειξη είναι παρόμοια με την απόδειξη του Θεωρήματος 7 και έτσι παραλείπεται.

Παρατήρηση 5 *Οι σχεδιασμοί που κατασκευάσαμε σε αυτή την ενότητα ικανοποιούν τις παρακάτω ιδιότητες : α') Κάθε στήλη να είναι σχεδόν ορθογώνια ως προς τις άλλες στήλες του σχεδιασμού. β) Κάθε στήλη να είναι ορθογώνια με οποιαδήποτε στήλη που αντιστοιχεί σε τετραγωνική επίδραση ή αλληλεπίδραση δύο παραγόντων.*

5.1.1 Αποτελέσματα και Παραδείγματα

Χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα που βρέθηκαν από την εφαρμογή της γενικής κατασκευής, παρουσιάζουμε την κατασκευή του NOLHD με $m = 12, 16, 20, 24$ παραγόντες και ευέλικτο αριθμό εκτελέσεων. Οι σχεδιασμοί αυτοί παρου- σιάζονται σε αυτή την ενότητα. Τα παραδείγματα που παρουσιάζονται στην ενότητα αυτή είναι χρήσιμα για την κατανόηση της μεθόδου κατασκευής. Η απόδειξη του Θεωρήματος 7 περιγράφει πώς μπορεί κανείς να κατασκευάσει NOLHD $L(2nk+2, n)$ με $2nk+2$ εκτελέσεις και n παράγοντες, για κάθε $k = 1, 2, \ldots$.. Το σύνολο των τεσσάρων διανυσμάτων που χρειαζόμαστε δίνονται στους πίνακες 5.1 και 5.2. Για να πάρουμε τους απαιτούμενους ορθογώνιους πίνακες, χρησιμοποιούμε είτε τέσσερα διανύσματα στον Goethal-Seidel σχηματισμό (και ακολουθούμε την απόδειξη του θεωρήματος 7) ή οκτώ διανύσματα στον Kharaghani σχηματισμό (και ακολουθούμε την απόδειξη του θεωρήματος 8).

Σημειώνεται ότι τέτοιοι σχεδιασμοί δεν μπορούν να κατασκευαστούν χρησιμοποιώντας οποιαδήποτε άλλη μέθοδο στην βιβλιογραφία. Χρησιμοποιώντας τα διανύσματα που δίνονται στους Πίνακες 5.1 και 5.2 με τις κατασκευές τους όπως τις περιγράψαμε στα Θεωρήματα 7 και 8 προκύπτει το ακόλουθο πόρισμα.

Πόρισμα 9 *Υπάρχει ένας NOLHD με*

i. $n = 24k + 2$, $n = 24k + 3$ *εκτελέσεις και* $m = 12$ *παράγοντες,*

ii. $n = 32k + 2$, $n = 32k + 3$ *εκτελέσεις και* $m = 16$ *παράγοντες,*

iii. $n = 40k + 2$, $n = 40k + 3$ *εκτελέσεις και* $m = 20$ *παράγοντες,*

iv. $n = 48k + 2$, $n = 48k + 3$ *εκτελέσεις και* $m = 24$ *παράγοντες,*

για κάθε $k = 1, 2, \ldots$

Στο επόμενο παράδειγμα θα δείξουμε πώς μπορεί κανείς να κατασκευάσει έναν $NOLHD(26, 12)$.

Παράδειγμα 26 Για $k = 1$, $b = 24(k-1) + 2 \Rightarrow b = 2$. Χρησιμοποιώντας το πόρισμα 1 και τα τέσσερα διανύσματα μήκους 3 όπως παρουσιάζονται στο πίνακα 5.1 και $b = 2$, έχουμε έναν 12×12 ορθογώνιο πίνακα D_2. Εφαρμόζοντας την μέθοδο που περιγράφεται στην απόδειξη του Θεωρήματος 7(i)

για $n = 4l$ και $l = 3$ έχουμε έναν σχεδόν ορθογώνιο σχεδιασμό Λατινικού Υπερκύβου ($NOLHD$)

$$X_1 = \begin{bmatrix} D_0 \\ -D_0 \end{bmatrix}$$

με 26 πειραματικές εκτελέσεις (παρατηρήσεις) και 12 παράγοντες, όπου D_2 είναι ο πίνακας

$$D_2 = \begin{bmatrix}
17 & -7 & 21 & 25 & -23 & 19 & -9 & 5 & 3 & 15 & 13 & 11 \\
21 & 17 & -7 & -23 & 19 & 25 & 5 & 3 & -9 & 13 & 11 & 15 \\
-7 & 21 & 17 & 19 & 25 & -23 & 3 & -9 & 5 & 11 & 15 & 13 \\
-25 & 23 & -19 & 17 & -7 & 21 & -13 & -15 & -11 & 5 & -9 & 3 \\
23 & -19 & -25 & 21 & 17 & -7 & -15 & -11 & -13 & -9 & 3 & 5 \\
-19 & -25 & 23 & -7 & 21 & 17 & -11 & -13 & -15 & 3 & 5 & -9 \\
9 & -5 & -3 & 13 & 15 & 11 & 17 & -7 & 21 & 23 & -25 & -19 \\
-5 & -3 & 9 & 15 & 11 & 13 & 21 & 17 & -7 & -25 & -19 & 23 \\
-3 & 9 & -5 & 11 & 13 & 15 & -7 & 21 & 17 & -19 & 23 & -25 \\
-15 & -13 & -11 & -5 & 9 & -3 & -23 & 25 & 19 & 17 & -7 & 21 \\
-13 & -11 & -15 & 9 & -3 & -5 & 25 & 19 & -23 & 21 & 17 & -7 \\
-11 & -15 & -13 & -3 & -5 & 9 & 19 & -23 & 25 & -7 & 21 & 17
\end{bmatrix}.$$

Η συσχέτιση, r_{uv} δύο οποιοδήποτε στηλών u και v, του σχεδιασμού Λατινικού υπερκύβου που κατασκευάσαμε είναι $r_{uv} = 3/8775 \Rightarrow r_{uv} = 3.419 \times 10^{-4} = 0.0003419$. Παρόλο που ο σχεδιασμός δεν είναι ορθογώνιος εντούτοις η ιδιότητα (β) ικανοποιείται. Δηλαδή, κάθε στήλη είναι ορθογώνια με οποιαδήποτε στήλη που αντιστοιχεί σε τετραγωνική επιδραση ή αλληλεπίδραση δύο παραγόντων. $\square$

Στο επόμενο παράδειγμα θα δείξουμε πώς μπορεί κανείς να κατασκευάσει έναν $NOLHD(50, 12)$.

Παράδειγμα 27 Για $k = 1$, $b = 24(k-1) + 2 \Rightarrow b = 26$. Χρησιμοποιώντας το πόρισμα 1 και τα τέσσερα διανύσματα μήκους 3 όπως παρουσιάζονται στο πίνακα 5.1 και $b = 26$, έχουμε έναν 12×12 ορθογώνιο πίνακα D_{26}. Εφαρμόζοντας την μέθοδο που περιγράφεται στην απόδειξη του Θεωρήματος 7(ι) για $n = 4l$ και $l = 3$ έχουμε έναν σχεδόν ορθογώνιο σχεδιασμό Λατινικού

Υπερκύβου $(NOLHD)$

$$X_2 = \begin{bmatrix} D_2 \\ D_{26} \\ 1_{1\times 12} \\ -1_{1\times 12} \\ -D_2 \\ -D_{26} \end{bmatrix}$$

με 50 πειραματικές εκτελέσεις (παρατηρήσεις) και 12 παράγοντες, όπου D_{26} είναι ο πίνακας

$$D_{26} = \begin{bmatrix}
41 & -31 & 45 & 49 & -47 & 43 & -33 & 29 & 27 & 39 & 37 & 35 \\
45 & 41 & 31 & -47 & 43 & 49 & 29 & 27 & -33 & 37 & 35 & 39 \\
-31 & 45 & 41 & 43 & 49 & -47 & 27 & -33 & 29 & 35 & 39 & 37 \\
-49 & 47 & -43 & 41 & -31 & 45 & -37 & -39 & -35 & 29 & -33 & 27 \\
47 & -43 & -49 & 45 & 41 & -31 & -39 & -35 & -37 & -33 & 27 & 29 \\
-43 & -49 & 47 & -31 & 45 & 41 & -35 & -37 & -39 & 27 & 29 & -33 \\
33 & -29 & -27 & 37 & 39 & 35 & 41 & -31 & 45 & 47 & -49 & -43 \\
-29 & -27 & 33 & 39 & 35 & 37 & 45 & 41 & -31 & -49 & -43 & 47 \\
-27 & 33 & -29 & 35 & 37 & 39 & -31 & 45 & 41 & -43 & 47 & -49 \\
-39 & -37 & -35 & -29 & 33 & -27 & -47 & 49 & 43 & 41 & -31 & 45 \\
-37 & -35 & -39 & 33 & -27 & -29 & 49 & 43 & -47 & 45 & 41 & -31 \\
-35 & -39 & -37 & -27 & -29 & 33 & 43 & -47 & 49 & -31 & 45 & 41
\end{bmatrix}.$$

Η συσχέτιση, r_{uv} δύο οποιοδήποτε στηλών u και v, του σχεδιασμού Λατινικού υπερκύβου που κατασκευάσαμε είναι $r_{uv} = 3/62475 \Rightarrow r_{uv} = 4.802 \times 10^{-5} = 0.00004802$. Παρόμοια με το παράδειγμα 26 η ιδιότητα (β) ισχύει και εδώ. □

Στο επόμενο παράδειγμα θα δείξουμε πώς μπορεί κανείς να κατασκευάσει έναν $NOLHD(27, 12)$.

Παράδειγμα 28 Για $k = 1$, $b = 12k - 10 \Rightarrow b = 2$. Χρησιμοποιώντας το πόρισμα 1 και τα τέσσερα διανύσματα μήκους 3 όπως παρουσιάζονται στο πίνακα 5.2 και $b = 2$, έχουμε έναν 12×12 ορθογώνιο πίνακα D_2. Εφαρμόζοντας την μέθοδο που περιγράφεται στην απόδειξη του Θεωρήματος 7(ii) για $n = 4l$ και $l = 3$ έχουμε έναν σχεδόν ορθογώνιο σχεδιασμό Λατινικού

Υπερκύβου $(NOLHD)$

$$X_2 = \begin{bmatrix} D_2 \\ D_{26} \\ 1_{1\times 12} \\ -1_{1\times 12} \\ -D_2 \\ -D_{26} \end{bmatrix}$$

με 27 πειραματικές εκτελέσεις (παρατηρήσεις) και 12 παράγοντες, όπου D_2 είναι ο πίνακας

$$D_2 = \begin{bmatrix} 9 & -4 & 11 & 13 & -12 & 10 & -5 & 3 & 2 & 8 & 7 & 6 \\ 11 & 9 & -4 & -12 & 10 & 13 & 3 & 2 & -5 & 7 & 6 & 8 \\ -4 & 11 & 9 & 10 & 13 & -12 & 2 & -5 & 3 & 6 & 8 & 7 \\ -13 & 12 & -10 & 9 & -4 & 11 & -7 & -8 & -6 & 3 & -5 & 2 \\ 12 & -10 & -13 & 11 & 9 & -4 & -8 & -6 & -7 & -5 & 2 & 3 \\ -10 & -13 & 12 & -4 & 11 & 9 & -6 & -7 & -8 & 2 & 3 & -5 \\ 5 & -3 & -2 & 7 & 8 & 6 & 9 & -4 & 11 & 12 & -13 & -10 \\ -3 & -2 & 5 & 8 & 6 & 7 & 11 & 9 & -4 & -13 & -10 & 12 \\ -2 & 5 & -3 & 6 & 7 & 8 & -4 & 11 & 9 & -10 & 12 & -13 \\ -8 & -7 & -6 & -3 & 5 & -2 & -12 & 13 & 10 & 9 & -4 & 11 \\ -7 & -6 & -8 & 5 & -2 & -3 & 13 & 10 & -12 & 11 & 9 & -4 \\ -6 & -8 & -7 & -2 & -3 & 5 & 10 & -12 & 13 & -4 & 11 & 9 \end{bmatrix}.$$

Η συσχέτιση, r_{uv} δύο οποιοδήποτε στηλών u και v, του σχεδιασμού Λατινικού υπερκύβου που κατασκευάσαμε είναι $r_{uv} = 6/4914 \Rightarrow r_{uv} = 1.221 \times 10^{-3} = 0.001221$. Κάθε στήλη είναι ορθογώνια με οποιαδήποτε στήλη που αντιστοιχεί σε τετραγωνική επιδραση ή αλληλεπίδραση δύο παραγόντων. $\square$

5.2 Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο, προτείναμε ορισμένες μεθόδους κατασκευής για NOLHDs με 12, 16, 20, και 24 παράγοντες με ευέλικτο πλήθος εκτελέσεων. Η κατασκευή τέτοιων σχεδιασμών είναι αρκετά σημαντική, αφού δεν υπάρχουν OLHDs ίδιων παραμέτρων. Η μέθοδος είναι μία τροποποίηση της προηγούμενης μεθόδου που προτείνεται σε αυτή τη διατριβή για την κατασκευή των

OLHDs, αλλά τα αποτελέσματα που λήφθηκαν για τους NOLHDs είναι νέα και πολύ χρήσιμα σε ειδικές πειραματικές καταστάσεις. Περαιτέρω έρευνα απαιτείται για την επίτευξη καλών μη-ορθογώνιων σχέδιασμών με άλλες παραμέτρους και σε άλλες περιπτώσεις, όταν δεν υπάρχουν OLHDs.

Κεφάλαιο 6

Εμφωλευμένοι (Τεμαχισμένοι) Σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων

6.1 Εισαγωγή

Οι Εμφωλευμένοι (Τεμαχισμένοι) σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων (Sliced Latin Hypercube Designs) είναι μια ειδική κατηγορία σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων, οι οποίοι μπορούν να διαμεριστούν σε πολλούς σχεδιασμούς Λατινικών υπερκύβων μικροτέρων διαστάσεων (slices). Οι σχεδιασμοί αυτοί είναι πολύ χρήσιμοι και έχουν πολλές εφαρμογές όπως για παράδειγμα στα πειράματα με υπολογιστές που περιλαμβάνουν ποιοτικούς και ποσοτικούς παράγοντες ή εξετάζουν παράγοντες σε πολλαπλά στρώματα. Τόσο η ορθογωνιότητα όσο και η ομοιομορφία είναι σημαντικές ιδιότητες τέτοιων σχεδιασμών.

Οι Εμφωλευμένοι σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων (LHDs) προτάθηκαν για πρώτη φορά από τον Qian (2012). Ένας Εμφωλευμένος σχεδιασμός Λατινικών υπερκύβων πρέπει να ικανοποιεί τις εξής ιδιότητες : (α) Κάθε στήλη να είναι ορθογώνια ως προς τις άλλες στήλες του σχεδιασμού (β) Κάθε στήλη να είναι ορθογώνια με οποιαδήποτε στήλη που αντιστοιχεί σε τετραγωνική επίδραση ή αλληλεπίδραση δύο παραγόντων,(βλ., Ye (1998), Sun, Liu και Lin (2010), Yang και Liu (2012)).

Οι Johnson, Moore και Ylvisaker (1990) εισήγαγαν το κριτήριο της απόστασης maximin,η οποία μεγιστοποιεί την ελάχιστη απόσταση μεταξύ των αποστάσεων. Οι Morris και Mitchell (1995) εφάρμοσαν το κριτήριο αυτό για την βελτιστοποίηση των NLHDs. Ωστόσο, οι NLHDs που προτάθηκαν από τον (Qian, 2012) ικανοποιούν μόνο την μια ιδιότητα, αυτή της ομοιομορφίας αλλά όχι και της ορθογωνιότητας. Πρόσφατα, οι Yang, Lin, Qian και Lin (2013) πρότειναν διάφορες μεθόδους για την κατασκευή ορθογώνιων τεμαχισμένων σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων (NLHDs) .

Σ' αυτό το κεφάλαιο, παρουσιάζεται μια νέα μέθοδος για την κατασκευή ορθογώνιων και σχεδόν ορθογώνιων Εμφωλευμένων σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων (NLHDs) χρησιμοποιώντας για την κατασκευή τους διανύσματα με μηδενική συνάρτηση περιοδικής αυτοσυσχέτισης (PAF).

Οι σχεδιασμοί που προκύπτουν ικανοποιούν τις ιδιότητες που παραθέσαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο (a) και (b) και (a') και (b) και έχουν ευέλικτο αριθμό πειραματικών εκτελέσεων και με 2, 4, 8, 12, 16, 20 και 24 παράγοντες, οι οποίοι δεν μπορούν να ληφθούν από τους Yang, Liu kai Lin (2014) .

Ορισμός 20 *Ένας LHD σχεδιασμός $X = L(n, m)$ καλείται* **Εμφωλευμένος σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου** *αν τα επίπεδα είναι παρόμοια αλλά όχι τα ίδια για διαφορετικά επίπεδα κάποιου άλλου παράγοντα.*

6.2 Γενική Κατασκευή

Σε αυτή την ενότητα παρουσιάζουμε ορισμένες προσεγγίσεις για την κατασκευή Εμφωλευμένων σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων (NLHDs) χρησιμοποιώντας μια ειδική κατηγορία ορθογώνιων πινάκων τάξης $2l$, $4l$ και $8l$. Οι σχεδιασμοί που προκύπτουν έχουν ευέλικτο αριθμό πειραματικών εκτελέσεων και ικανοποιούν τις ιδιότητες (a) και (b).

Θα παρουσιάσουμε δύο αλγορίθμους για την κατασκευή των σχεδιασμών μας με m παράγοντες και ευέλικτο πλήθος πειραματικών εκτελέσεων. Για μια δοθείσα θετική σταθερά a, αν οι απόλυτες τιμές των διανυσμάτων είναι μια μετάθεση των $(b+(2p-1)a : p = 1, 2, \ldots, m)$, τότε θα χρησιμοποιούμε τον NOL Αλγόριθμο 1 για να κατασκευάσουμε τους ορθογώνιους Εμφωλευμένους LHDs με m παράγοντες, ενώ εαν οι απόλυτες τιμές των διανυσμάτων είναι μια μετάθεση των $b + pa : p = 1, 2, \ldots, m$, θα χρησιμοποιούμε τον NOL Αλγόριθμο 2.

Σημειώνεται ότι οι Εμφωλευμένοι LHDs που κατασκευάζονται από τους δύο αλγορίθμους μπορεί να έχουν τον ίδιο αριθμό εκτελέσεων και τον ίδιο αριθμό παραγόντων. Χρησιμοποιούμε τα ίδια διανύσματα με αυτά του προηγούμενου κεφαλαίου με μηδενική συνάρτηση περιοδικής αυτοσυσχέτισης (PAF). Για χάρην ευκολίας χρησιμοποιούμε το r για μια σταθερά 2, 4 ή 8 σε αυτή και στις υπόλοιπες ενότητες του κεφαλαίου.

6.2.1 Αλγόριθμοι

Nested orthogonal LHDs Αλγόριθμος 1 (NOL Αλγόριθμος 1)

Βήμα 1: Θεωρούμε ένα θετικό ακέραιο a, και έστω A_1^b , A_2^b, A_3^b, $\ldots$, A_r^b όπου r διανύσματα γραμμής μήκους l με μηδενική PAF. Οι απόλυτες τιμές των διανυσμάτων A_2^b, A_3^b, $\ldots$, A_r^b είναι μια μετάθεση των
$(b+(2p-1)a : p = 1, 2, \ldots, m)$, όπου $m = rl$.

Βήμα 2: Για $j = 0, 1, \ldots, k-1$ με k να είναι ένας θετικός ακέραιος, και έστω

$$E_j = \left(D_{2amj}^T, D_{2amj\pm1}^T, \ldots, D_{2amj\pm(a-1)}^T, D_{2amj+a}^T\right)^T,$$

όπου D_b είναι ένας ορθόγωνιος τετραγωνικός πίνακας τάξης m που κατασκευάζεται από τα διανύσματα A_2^b, A_3^b, ..., A_r^b και χρησιμοποιώντας το Πόρισμα 10, ορίζουμε:

$$L_1 = \left(-E_{k-1}^T, \ldots, -E_0^T, 0_m, E_0^T, \ldots, E_{k-1,}^T\right)^T,$$

$$L_{2a} = \left(-D_{2am(k-1)}^T, \ldots, -D_{2am}^T, -D_0^T, D_0^T, D_{2am}^T, \ldots, D_{2am(k-1)}^T\right)^T,$$

και

$$L_{2b} = \left(-D_{2am(k-1)+a}^T, \ldots, -D_{2am+a}^T, -D_a^T, 0_m, D_a^T, D_{2am+a}^T, \ldots, D_{2am(k-1)+a}^T\right)^T.$$

Βήμα 3: Έστω
$F_1 = (L_1; L_{2a})$ και $F_2 = (L_1; L_{2b})$.

Nested orthogonal LHDs Αλγόριθμος 2 (NOL Αλγόριθμος 2)

Βήμα 1: Θεωρούμε ένα θετικό ακέραιο a, και έστω A_1^b , A_2^b, A_3^b, ..., A_r^b όπου r διανύσματα γραμμής μήκους l με μηδενική PAF. Οι απόλυτες τιμές των διανυσμάτων A_2^b, A_3^b, ..., A_r^b είναι μια μετάθεση των $(b + pa : p = 1, 2, \ldots, m)$, όπου $m = rl$.

Βήμα 2: Για $j = 0, 1, \ldots, k-1$ με k να είναι ένας θετικός ακέραιος, και έστω

$$E_j = \left(D_{amj}^T, D_{amj-1}^T, \ldots, D_{amj-(a-1),}^T\right)^T,$$

όπου D_b είναι ένας ορθόγωνιος τετραγωνικός πίνακας τάξης m που κατασκευάζεται από τα διανύσματα A_2^b, A_3^b, ..., A_r^b, και χρησιμοποιώντας το Πόρισμα 10 ορίζουμε:

$$L_1 = \left(-E_{k-1}^T, \ldots, -E_0^T, 0_m, E_0^T, \ldots, E_{k-1,}^T\right)^T,$$

$$L_{2a} = \left(-D^T_{am(k-1)}, \ldots, -D^T_{am}, -D^T_0, 0_m, D^T_0, D^T_{am}, \ldots, D^T_{am(k-1)}\right)^T,$$

και

$$L_{2b} = \left(-D^T_{am(k-1)-\frac{a}{2}}, \ldots, -D^T_{am-\frac{a}{2}}, -D^T_{-\frac{a}{2}}, D^T_{-\frac{a}{2}}, D^T_{am-\frac{a}{2}}, \ldots, D^T_{am(k-1)-\frac{a}{2}}\right)^T.$$

Βήμα 3: Έστω
$G_1 = (L_1; L_{2a})$ και $G_2 = (L_1; L_{2b})$.

6.2.2 Γενικό Θεώρημα

Με τη χρήση κατάλληλων διανυσμάτων με περιοδική συνάρτηση αυτοσυσχέτισης PAF ίση με μηδέν κατασκευάζουμε νέους Εμφωλευμένους σχεδιασμούς Λατινικών υπερκύβων (NLHDs).

Θεώρημα 9 (i) *Για τους σχεδιασμούς που κατασκευάστηκαν από τον Αλγόριθμο* 1*,* F_1 *είναι ο NLHD* $L((4amk+1, 2mk), m)$ *και* F_2 *είναι ο SHLD* $L((4amk+1, 2mk+1), m)$*, όπου* L_1*,* L_{2a} *και* L_{2b} *είναι ορθογώνιοι LHDs με* m *παράγοντες και* $4amk+1$*,* $2mk$*, και* $2mk+1$ *γραμμές, αντίστοιχα.*

(ii) *Για τους σχεδιασμούς που κατασκευάστηκαν από τον Αλγόριθμο* 2*,* G_1 *είναι ο SLHD* $L((2amk+1, 2mk+1), m)$ *και* G_2 *είναι ο NHLD* $L((2amk+1, 2mk), m)$*, όπου* L_1*,* L_2 *και* L_{2b} *είναι ορθογώνιοι LHDs με* m *παράγοντες και* $2amk+1$*,* $2mk+1$*, και* $2mk$ *γραμμές, αντίστοιχα.*

Απόδειξη Χωρίς βλάβη της γενικότητας θεωρούμε $r = 4$, τέσσερα διανύσματα A^b_1 , A^b_2, A^b_3,A^b_4. Για $r = 2$ ή 8 η απόδειξη είναι παρόμοια.

(i) Είναι προφανές ότι $L_{2a} \subset L_1$ και $L_{2b} \subset L_1$ (από τους ορισμούς των L_1, L_{2a} και L_{2b} και από τον Αλγόριθμο 1). Στην συνέχεια θα δείξουμε ότι τα στοιχεία κάθε στήλης των πινάκων L_1, L_{2a} και L_{2b} ισαπέχουν.

Είναι εύκολο να επαληθεύσουμε ότι, για $j = 0, \ldots, k-1$, οι απόλυτες τιμές των στοιχείων κάθε στήλης του E_j είναι $(2jam+1, 2jam+2, \ldots, 2(j+1)am)$. Αυτό δείχνει ότι τα στοιχεία κάθε στήλης του πίνακα L_1 είναι $(0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm2kma)$. Από τον ορισμό του πίνακα D_b, γνωρίζουμε ότι τα στοιχεία κάθε στήλης των πινάκων L_{2a} και L_{2b} είναι $(\pm a, \pm 3a, \ldots, \pm(2mk-1)a)$ και

$(0, \pm 2a, \pm 4a, \ldots, \pm 2amk)$, αντίστοιχα. Έτσι και οι δύο πίνακες (L_1, L_{2a}) και (L_1, L_{2b}) είναι LHDs. Η ορθογωνιότητα των πινάκων L_1, L_{2a} και L_{2b} μπορεί εύκολα να αποδειχθεί αφού το σύνολο των διανυσμάτων (A_1^b, A_2^b, A_3^b, A_4^b) που χρησιμοποιουμε έχει μηδενική PAF.

(ii) Η απόδειξη είναι παρόμοια με αυτή της περίπτωσης (i) και έτσι παραλείπεται.

6.3 Κατασκευές νέων σχεδιασμών

Πόρισμα 10 *(i) Αν ορίσουμε $L_1' = (L_{2a}^T, L_{2b}^T)^T$ όπου L_{2a} και L_{2b} όπως δόθηκαν από τον Αλγόριθμο 1, τότε (L_1', L_{2a}) είναι ο ορθογώνιος Εμφωλευμένος LHD $L((4mk+1, 2mk), m)$ και (L_1', L_{2a}) είναι ο ορθογώνιος Εμφωλευμένος LHD $L((4mk+1, 2mk+1), m)$.*

(ii) Αν ορίσουμε $L_1' = (L_{2a}^T, L_{2b}^T)^T$ όπου L_{2a} και L_{2b} όπως δόθηκαν από τον Αλγόριθμο 2, τότε (L_1', L_{2a}) είναι ο ορθογώνιος Εμφωλευμένος LHD $L((4mk+1, 2mk+1), m)$ και (L_1', L_{2a}) είναι ο ορθογώνιος Εμφωλευμένος LHD $L((4mk+1, 2mk), m)$.

Παρατήρηση 6 *Σημειώνεται ότι ο Αλγόριθμος 2 λειτουργεί επίσης για κάθε θετικό ακέραιο a. Το γεγονός ότι το a είναι ένας θετικός ακέραιος, μας εξασφαλίζει ότι όλα τα επίπεδα των παραγόμενων σχεδιασμών είναι επίσης ακέραιοι. Στην πραγματικότητα, οι Αλγόριθμοι 1 και 2 είναι σε θέση να παράγουν πολλούς νέους Ορθογώνιους Εμφωλευμένους LHDs που δεν μπορούν να κατασκευαστούν από καμία μέθοδο στην βιβλιογραφία.*

Τα ακόλουθα δύο παραδείγματα δείχνουν πώς μπορεί κανείς να κατασκευάσει σχεδιασμούς με $m = 12$ και $m = 20$ παράγοντες, αντιστοίχως.

6.4 Παραδείγματα

Στο επόμενο παράδειγμα θα δείξουμε πώς μπορεί κανείς να κατασκευάσει δύο NLHD $L(193, 48), 12))$ και $L(193, 49), 12))$.

Παράδειγμα 29 *Θα κατασκευάσουμε Ορθογώνιους Εμφωλευμένους LHDs $L((48ak+1, 24k), 12)$, $L((48ak+1, 24k+1), 12)$, $L((48k+1, 24k), 12)$ και*

$L((48k+1, 24k+1), 12)$ *για κάθε* $k = 1, 2, \ldots$, *αντίστοιχα και με* $m = 12$ *παράγοντες.*

Ορίζουμε $a = 2$ *και* $k = 2$ *από τον Αλγόριθμο* 1 *έχουμε* b=-1, 0, 1, 2, 47, 48, 49, 50. *Χρησιμοποιώντας το Goethal-Seidel σχηματισμό, με τα ακόλουθα τέσσερα διανύσματα με μηδενική PAF*

$$\begin{cases} A_1^b = (b+15a, -(b+5a), b+19a), \\ A_2^b = (b+17a, -(b+21a), b+23a), \\ A_3^b = (b+a, b+3a, -(b+7a)), \\ A_4^b = (b+9a, b+11a, b+13a), \end{cases}$$

έχουμε οκτώ 12×12 *ορθογώνιους πίνακες* D_{-1}, D_0, D_1, D_2, D_{47}, D_{48}, D_{49}, D_{50}. *Εφαρμόζοντας τη μέθοδο που περιγράφεται στο Θεωρήμα* 6 *έχουμε δύο Εμφωλευμένους σχεδιασμούς Λατινικού υπερκύβου* (L_1, L_{2a}), *και* (L_1, L_{2b}), $L = ((193, 48), 12)$ *και* $L = ((193, 49), 12)$ *αντίστοιχα όπου:*

$$L_1 = \begin{bmatrix} -D_{48} \\ -D_0 \\ D_0 \\ D_{48} \\ -D_{50} \\ -D_2 \\ D_2 \\ D_{50} \\ -D_{-1} \\ D_{-1} \\ -D_1 \\ D_1 \\ -D_{47} \\ D_{47} \\ -D_{49} \\ D_{49} \end{bmatrix}$$

$$L_{2a} = \begin{bmatrix} -D_{48} \\ -D_0 \\ D_0 \\ D_{48} \end{bmatrix}$$

είναι ένας ορθογώνιος LHD $L(48, 12)$

$$L_{2b} = \begin{bmatrix} -D_{50} \\ -D_2 \\ D_2 \\ D_{50} \end{bmatrix}$$

είναι ένας ορθογώνιος LHD $L(49, 12)$ *με* 193 *αγωγές και* 12 *παράγοντες, όπου ο* D_0 *αναλυτικά είναι*

$$\begin{bmatrix}
30 & -10 & 38 & 46 & -42 & 34 & -14 & 6 & 2 & 26 & 22 & 18 \\
38 & 30 & -10 & -42 & 34 & 46 & 6 & 2 & -14 & 22 & 18 & 26 \\
-10 & 38 & 30 & 34 & 46 & -42 & 2 & -14 & 6 & 18 & 26 & 22 \\
-46 & 42 & -22 & 30 & -10 & 38 & -22 & -26 & -18 & 2 & -14 & 6 \\
42 & -22 & -46 & 38 & 30 & -10 & -26 & -18 & -22 & 6 & 2 & -14 \\
-22 & -46 & 42 & -10 & 38 & 30 & -18 & -22 & -26 & -14 & 6 & 2 \\
14 & -6 & -2 & 22 & 26 & 18 & 30 & -10 & 38 & 42 & -46 & -34 \\
-6 & -2 & 14 & 26 & 18 & 22 & 38 & 30 & -10 & -34 & 42 & -46 \\
-2 & 14 & -6 & 18 & 22 & 26 & -10 & 38 & 30 & -46 & -34 & 42 \\
-26 & -22 & -18 & -2 & 14 & -6 & -42 & 46 & 34 & 30 & -10 & 38 \\
-22 & -18 & -26 & -6 & -2 & 14 & 34 & -42 & 46 & 385 & 30 & -10 \\
-18 & -26 & -22 & 14 & -6 & -2 & 46 & 34 & -42 & -10 & 38 & 30
\end{bmatrix}.$$

D_{-1} *αναλυτικά είναι*

$$\begin{bmatrix}
29 & -9 & 37 & 45 & -41 & 33 & -13 & 5 & 1 & 25 & 21 & 17 \\
37 & 29 & -9 & -41 & 33 & 45 & 5 & 1 & -13 & 21 & 17 & 25 \\
-9 & 37 & 29 & 33 & 45 & -41 & 1 & -13 & 5 & 17 & 25 & 21 \\
-45 & 41 & -33 & 29 & -9 & 37 & -21 & -25 & -17 & 5 & -13 & 1 \\
41 & -33 & -45 & 37 & 29 & -9 & -25 & -17 & -21 & -13 & 1 & 5 \\
-33 & -45 & 41 & -9 & 37 & 29 & -17 & -21 & -25 & 1 & 5 & -13 \\
13 & -5 & -1 & 21 & 25 & 17 & 29 & -9 & 37 & 41 & -45 & -33 \\
-5 & -1 & 13 & 25 & 17 & 21 & 37 & 29 & -9 & -45 & -33 & 41 \\
-1 & 13 & -5 & 17 & 21 & 25 & -9 & 37 & 29 & -33 & 41 & -45 \\
-25 & -21 & -17 & -5 & 13 & -1 & -41 & 45 & 33 & 29 & -9 & 37 \\
-21 & -17 & -25 & 13 & -1 & -5 & 45 & 33 & -41 & 37 & 29 & -9 \\
-17 & -25 & -21 & -1 & -5 & 13 & 33 & -41 & 45 & -9 & 37 & 29
\end{bmatrix}.$$

D_1 *αναλυτικά είναι*

$$\begin{bmatrix}
31 & -11 & 39 & 47 & -43 & 35 & -15 & 7 & 3 & 27 & 23 & 19 \\
39 & 31 & -11 & -43 & 35 & 47 & 7 & 3 & -15 & 23 & 19 & 27 \\
-11 & 39 & 31 & 35 & 47 & -43 & 3 & -15 & 7 & 19 & 27 & 23 \\
-47 & 43 & -35 & 31 & -11 & 39 & -23 & -27 & -19 & 7 & -15 & 3 \\
43 & -35 & -47 & 39 & 31 & -11 & -27 & -19 & -23 & -15 & 3 & 7 \\
-35 & -47 & 43 & -11 & 39 & 31 & -19 & -23 & -27 & 3 & 7 & -15 \\
15 & -7 & -3 & 23 & 27 & 19 & 31 & -11 & 39 & 43 & -47 & -35 \\
-7 & -3 & 15 & 27 & 19 & 23 & 39 & 31 & -11 & -47 & -35 & 43 \\
-3 & 15 & -7 & 19 & 23 & 27 & -11 & 39 & 31 & -35 & 43 & -47 \\
-27 & -23 & -19 & -7 & 15 & -3 & -43 & 47 & 35 & 31 & -11 & 39 \\
-23 & -19 & -27 & 15 & -3 & -7 & 47 & 35 & -43 & 39 & 31 & -11 \\
-19 & -27 & -23 & -3 & -7 & 15 & 35 & -43 & 47 & -11 & 39 & 31
\end{bmatrix}.$$

D_2 *αναλυτικά είναι*

$$\begin{bmatrix}
32 & -12 & 40 & 48 & -44 & 36 & -16 & 8 & 4 & 28 & 24 & 20 \\
40 & 32 & -12 & -44 & 36 & 48 & 8 & 4 & -16 & 24 & 20 & 28 \\
-12 & 40 & 32 & 36 & 48 & -44 & 4 & -16 & 8 & 20 & 28 & 24 \\
-48 & 44 & -36 & 32 & -12 & 40 & -24 & -28 & -20 & 8 & -16 & 4 \\
44 & -36 & -48 & 40 & 32 & -12 & -28 & -20 & -24 & -16 & 4 & 8 \\
-36 & -48 & 44 & -12 & 40 & 32 & -20 & -24 & -28 & 4 & 8 & -16 \\
16 & -8 & -4 & 24 & 28 & 20 & 32 & -12 & 40 & 44 & -48 & -36 \\
-8 & -4 & 16 & 28 & 20 & 24 & 40 & 32 & -12 & -48 & -36 & 44 \\
-4 & 16 & -8 & 20 & 24 & 28 & -12 & 40 & 32 & -36 & 44 & -48 \\
-285 & -24 & -20 & -8 & 16 & -4 & -44 & 48 & 36 & 32 & -12 & 40 \\
-24 & -20 & -28 & 16 & -4 & -8 & 48 & 36 & -44 & 40 & 32 & -12 \\
-20 & -28 & -24 & -4 & -8 & 16 & 36 & -44 & 48 & -12 & 40 & 32
\end{bmatrix}.$$

Ομοίως με τον ίδιο τρόπο κατασκευάζουμε και τους υπόλοιπους 12×12 *ορθογώνιους πίνακες* $D_{47}, D_{48}, D_{49}, D_{50}$ *αντίστοιχα.*

Παράδειγμα 30 *Θα κατασκευάσουμε Ορθογώνιους Εμφωλευμένους LHDs με* $m = 20$ *παράγοντες. Ορίζουμε* $a = 2$ *και* $k = 1$ *από τον Αλγόριθμο* 2 *έχουμε* $b = -1, 0$. *Χρησιμοποιώντας το Goethal-Seidel σχηματισμό, με τα ακόλουθα τέσσερα διανύσματα με μηδενική PAF*

$$\begin{cases}
A_1^b = (b + 11a, b + 3a, -(b + 14a), b + 15a, b + 12a), \\
A_2^b = (b + 13a, b + 16a, b + 17a, b + 18a, -(b + 19a)), \\
A_3^b = (b + 20a, b + a, -(b + 2a), -(b + 4a), -(b + 5a)), \\
A_4^b = (b + 6a, b + 7a, -(b + 8a), b + 9a, -(b + 10a)),
\end{cases}$$

τότε σύμφωνα με τον Αλγόριθμο 2 *και τη μέθοδο που περιγράφεται στο Θεωρήμα* 6 *έχουμε δύο Εμφωλευμένους σχεδιασμούς Λατινικού υπερκύβου* (L_1, L_{2a}), *και* (L_1, L_{2b}), *με* $L = ((81, 40), 20)$ *και* $L = ((81, 41), 20)$ *αντίστοιχα όπου:*

$$L_1 = \begin{bmatrix} L_{2a} \\ L_{2b} \end{bmatrix}$$

$$L_{2a} = \begin{bmatrix} -D_0 \\ 0_{20} \\ D_0 \end{bmatrix}$$

$$L_{2b} = \begin{bmatrix} -D_{-1} \\ D_{-1} \end{bmatrix}$$

6.5 Σχεδόν Ορθογώνιοι Εμφωλευμένοι Σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων

Για ορισμένες παραμέτρους, οι ορθογώνιοι Εμφωλευμένοι LHD μπορεί να μην υπάρχουν. Σε αυτή την περίπτωση, ένας σχεδόν ορθογώνιος Εμφωλευμένος LHD θεωρείται μια καλή επιλογή.
Σε αυτή την ενότητα θα προτείνουμε μεθόδους κατασκευής σχεδόν ορθογώνιων Εμφωλευμένων LHD με μικρή συσχέτιση. Αυτό είναι ιδιαίτερα ενδιαφέρον, όταν δεν μπορούν να υπάρξουν ορθογώνιοι Εμφωλευμένοι σχεδιασμοί Λατινικών Υπερκύβων. Οι σχεδιασμοί που προκύπτουν έχουν ευέλικτο αριθμό πειραματικών εκτελέσεων και ικανοποιούν τις ιδιότητες (a') και (b) που προαναφέραμε πιο πάνω και χρησιμοποιώντας r διανύσματα με μηδενική συνάρτηση αυτοσυσχέτισης PAF .

Θα παρουσιάσουμε δύο αλγορίθμους για την κατασκευή των σχεδιασμών μας με m παράγοντες και ευέλικτο πλήθος πειραματικών εκτελέσεων.

6.5.1 Αλγόριθμοι

Nested nearly orthogonal LHDs Αλγόριθμος 1 (NNOL Αλγόριθμος 1)

Βήμα 1: Θεωρούμε ένα θετικό ακέραιο $a \geq 2$, και έστω A_1^b , A_2^b, A_3^b, $\ldots$, A_r^b όπου r διανύσματα γραμμής μήκους l με μηδενική PAF. Οι απόλυτες τιμές των διανυσμάτων $A_2^b, A_3^b, \ldots, A_r^b$ είναι μια μετάθεση των $(b + (2p-1)a : p = 1, 2, \ldots, m)$, όπου $m = rl$.

Βήμα 2: Για $j = 0, 1, \ldots, k-1$ με k να είναι ένας θετικός ακέραιος, και έστω

$$E_j = \left(D^T_{2amj}, D^T_{2amj\pm1}, \ldots, D^T_{2amj\pm(a-1)}, D^T_{2amj+a}, D^T_{2amj+(a+1)}\right)^T,$$

όπου D_b είναι ένας ορθόγωνιος τετραγωνικός πίνακας τάξης m που κατασκευάζεται από τα διανύσματα $A_2^b, A_3^b, \ldots, A_r^b$ και χρησιμοποιώντας το Πόρισμα 10, ορίζουμε:

$$L_1 = \left(-E^T_{k-1}, \ldots, -E^T_0, -1_m, 0_m, 1_m, E^T_0, \ldots, E^T_{k-1},\right)^T,$$

$$L_{2a} = \left(-D^T_{2am(k-1)}, \ldots, -D^T_{2am}, -D^T_0, D^T_0, D^T_{2am}, \ldots, D^T_{2am(k-1)}\right)^T,$$

και

$$L_{2b} = \left(-D^T_{2am(k-1)+a}, \ldots, -D^T_{2am+a}, -D^T_a, 0_m, D^T_a, D^T_{2am+a}, \ldots, D^T_{2am(k-1)+a}\right)^T.$$

Βήμα 3: Έστω
$W_1 = (L_1; L_{2a})$ και $W_2 = (L_1; L_{2b})$.

Nested nearly orthogonal LHDs Αλγόριθμος 2 (NNOL Αλγόριθμος 2)

Βήμα 1: Θεωρούμε ένα θετικό ακέραιο a, και έστω A_1^b , $A_2^b, A_3^b, \ldots, A_r^b$ όπου r διανύσματα γραμμής μήκους l με μηδενική PAF. Οι απόλυτες τιμές των διανυσμάτων $A_2^b, A_3^b, \ldots, A_r^b$ είναι μια μετάθεση των $b + pa : p = 1, 2, \ldots, m$, όπου $m = rl$.

Βήμα 2: Για $j = 0, 1, \ldots, k-1$ με k να είναι ένας θετικός ακέραιος, και έστω

$$E_j = \left(D^T_{amj+1}, D^T_{amj}, D^T_{amj-1}, \ldots, D^T_{amj-(a-2)},\right)^T,$$

όπου D_b είναι ένας ορθόγωνιος τετραγωνικός πίνακας τάξης m που κατασκευάζεται από τα διανύσματα A^b_2, A^b_3, ..., A^b_r, και χρησιμοποιώντας το Πόρισμα 10 ορίζουμε:

$$L_1 = \left(-E^T_{k-1}, \ldots, -E^T_0, -1_m, 0_m, 1_m, E^T_0, \ldots, E^T_{k-1},\right)^T,$$

$$L_{2a} = \left(-D^T_{am(k-1)}, \ldots, -D^T_{am}, -D^T_0, 0_m, D^T_0, D^T_{am}, \ldots, D^T_{am(k-1)}\right)^T,$$

και

$$L_{2b} = \left(-D^T_{am(k-1)-\frac{a}{2}}, \ldots, -D^T_{am-\frac{a}{2}}, -D^T_{-\frac{a}{2}}, D^T_{-\frac{a}{2}}, D^T_{am-\frac{a}{2}}, \ldots, D^T_{am(k-1)-\frac{a}{2}}\right)^T.$$

Βήμα 3: Έστω
$W_1 = (L_1; L_{2a})$ και $W_2 = (L_1; L_{2b})$.

6.5.2 Γενικό Θεώρημα

Με τη χρήση κατάλληλων διανυσμάτων με περιοδική συνάρτηση αυτοσυσχέτισης PAF ίση με μηδέν κατασκευάζουμε νέους σχεδόν Ορθογώνιους Εμφωλευμένους σχεδιασμούς Λατινικών υπερκύβων (NNLHDs).

Θεώρημα 10 (i) *Για τους σχεδιασμούς που κατασκευάστηκαν από τον Αλγόριθμο* 1, W_1 *είναι ο σχεδόν Ορθογώνιος NNLHD* $L((4amk+3, 2mk), m)$ *και* W_2 *είναι ο NNLHD* $L((4amk+3, 2mk+1), m)$, *όπου* L_1 *είναι σχεδόν ορθογώνιος LHD με μικρή αυτοσυσχέτιση ίση με* $r_{uv} = 6/(2amk+1)(2amk+2)(4amk+3)$ *δύο οποιονδήποτε στηλών* u *και* v, *του σχεδιασμού Λατινικού υπερκύβου που κατασκευάσαμε,* L_{2a} *και* L_{2b} *είναι ορθογώνιοι LHDs με* m *παράγοντες και* $2mk$ *και* $2mk+1$ *γραμμές, αντίστοιχα.*

(ii) *Για τους σχεδιασμούς που κατασκευάστηκαν από τον Αλγόριθμο* 2, W_1 *είναι ο NNLHD* $L((2amk+3, 2mk+1), m)$ *και* W_2 *είναι ο NNLHD* $L((2amk+3, 2mk), m)$, *όπου* L_1, *είναι σχεδόν ορθογώνιος LHD με μικρή αυτοσυσχέτιση ίση με* $r_{uv} = 6/(amk+1)(amk+2)(2amk+3)$. *δύο οποιονδήποτε στηλών* u *και* v, *του σχεδιασμού Λατινικού υπερκύβου που κατασκευάσαμε,*L_2 *και* L_{2b} *είναι ορθογώνιοι LHDs με* m *παράγοντες και* $2mk+1$ *και* $2mk$ *γραμμές, αντίστοιχα.*

Απόδειξη Παρόμοια με την απόδειξη του Θεωρήματος 9 θεωρούμε $r = 4$, τέσσερα διανύσματα A_1^b , A_2^b, A_3^b,A_4^b για να αποδείξουμε το θεώρημα.

(i) Είναι προφανές ότι $L_{2a} \subset L_1$ και $L_{2b} \subset L_1$ (ισχύει από τους ορισμούς των L_1, L_{2a} και L_{2b} από τον NNOL Αλγόριθμο 1). Στην συνέχεια θα δείξουμε ότι τα στοιχεία κάθε στήλης των πινάκων L_1, L_{2a} και L_{2b} ισαπέχουν.

Από τον ορισμό των D_b και E_J γνωρίζουμε ότι τα στοιχεία κάθε στήλης των πινάκων L_1, L_{2a} και L_{2b} είναι:

$$(0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm(2amk+1)),$$

$$(\pm a, \pm 3a, \ldots, \pm(2m-1)a, \pm(2am+a), \ldots, \pm(4am-a) \ldots, \pm(2amk-a)),$$

και

$$(0, \pm 2a, \pm 4a, \ldots, \pm 2am, \pm(2am+2a), \ldots, \pm 4am, \ldots, \pm 2amk),$$

αντίστοιχα. Έτσι και οι δύο πίνακες (L_1, L_{2a}) και (L_1, L_{2b}) είναι Εμφωλευμένοι LHDs.

Από την ορθογωνιότητα του D_b έχουμε:

$$\begin{aligned} L_1^T L_1 &= 2\left(\sum_{j=0}^{k-1} E_j^T E_j\right) + 2J_m = 2\left(\sum_{i=1}^{2amk+1} i^2 - 1\right) I_m + 2J_m \\ &= \left(\frac{(2amk+1)(2amk+2)(4amk+3)}{3} - 2\right) I_m + 2J_m. \end{aligned},$$

όπου I_m είναι ο ταυτοτικός πίνακας τάξης m και J_m είναι ο $m \times m$ πίνακας με όλα τα στοιχεία του μονάδες.

Με απλούς υπολογισμούς καταλήγουμε ότι:

$r_{uv} = 6/(2amk+1)(2amk+2)(4amk+3)$, για δύο οποιεσδήποτε στήλες u, v του πίνακα L_1.

Έτσι, ο πίνακας L_1, είναι σχεδόν ορθογώνιος LHD. Από τον ορισμό του D_b γνωρίζουμε ότι:

$$
\begin{aligned}
L_{2a}^T L_{2a} &= \left(\frac{2a^2mk(2mk+1)(2mk-1)}{3}\right) I_m \ , \\
L_{2b}^T L_{2b} &= \left(\frac{2a^2mk(2mk+1)(2mk+2)}{3}\right) I_m \ .
\end{aligned}
$$

Επομένως αποδείξαμε την σχεδόν ορθογωνιότητα του πίνακα L_1, και την ορθογωνιότητα των πινάκων L_{2a} και L_{2b}.

(ii) Η απόδειξη είναι παρόμοια με αυτή της περίπτωσης (i). Δηλαδή, είναι προφανές ότι $L_{2a} \subset L_1$ και $L_{2b} \subset L_1$ (ισχύει από τους ορισμούς των L_1, L_{2a} και L_{2b} από τον NNOL Αλγόριθμο 2).

Από τον ορισμό του D_b γνωρίζουμε ότι τα στοιχεία κάθε στήλης του πινάκα L_1 είναι: $(0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm(amk+1))$, επομένως η $r_{uv} = 6/(amk+1)(amk+2)(2amk+3)$, για δύο οποιεσδήποτε στήλες u, v του πίνακα L_1. Ακολουθώντας την αποδειξη της περίπτωσης (i) γνωρίζουμε ότι $(L_1; L_{2a})$ είναι ο επιθυμητός σχεδόν Ορθογώνιος Εμφωλευμένος σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου $L((2amk+3, 2mk+1), m)$ και $(L_1; L_{2b})$ είναι ο NNLHD $L((2amk+3, 2mk), m)$, όπου L_1, είναι σχεδόν ορθογώνιος LHD με μικρή αυτοσυσχέτιση ίση με $r_{uv} = 6/(amk+1)(amk+2)(2amk+3)$. Έτσι ολοκληρώθηκε η απόδειξη.

Παρατήρηση 7 *Σημειώνεται ότι ο Αλγόριθμος* 2 *λειτουργεί επίσης για κάθε θετικό περιττό ακέραιο* $a > 2$. *Το γεγονός ότι το* a *είναι ένας θετικός ακέραιος, μας εξασφαλίζει ότι όλα τα επίπεδα των παραγόμενων σχεδιασμών είναι επισης ακέραιοι. Στην πραγματικότητα, οι Αλγόριθμοι* 1 *και* 2 *είναι σε θέση να παράγουν πολλούς νέους σχεδόν Ορθογώνιους Εμφωλευμένους σχεδιασμούς LHDs που δεν κατασκευάζονται από μεθόδους της βιβλιογραφίας.*

6.6 Συμπεράσματα

Συνοψίζοντας, σε αυτό το κεφάλαιο προτείναμε νέες διαδικασίες για την κατασκευή Εμφωλευμένων σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων (SLHDs) με ευέλικτο πλήθος αγωγών. Επιπρόσθετα, κατασκευάσαμε χρήσιμους Εμφωλευμένους σχεδιασμούς Λατινικών υπερκύβων ορθογώνιους και σχεδόν ορθογώνιους με ευέλικτο αριθμό πειραματικών εκτελέσεων που έχουν πολλές εφαρμογές όπως για παράδειγμα σε πειράματα με υπολογιστές που περιλαμβάνουν ποιοτικούς και ποσοτικούς παράγοντες ή σε πειράματα με υπολογιστές σε πολλαπλά επίπεδα.

Βιβλιογραφία

Γεωργίου Σ. και Στυλιανού Σ. (2009). Σημειώσεις Μεταπτυχιακού Μαθήματος «Σχεδιασμός και Ανάλυση Πειραμάτων».

Κίτσος, Χ. (1994). Στατιστική Ανάλυση Πειραματικών Σχεδιασμών. Εκδόσεις Νέων τεχνολογιών, Αθήνα.

Barton, R. R. (1992). Metamodels for simulation input-output relations. *ACM*, 289-299.

Bingham, D., Sitter, R.R. & Tang, B. (2009). Orthogonal and nearly orthogonal designs for computer experiments. *Biometrika* **96**, 51–65.

Butler, N.A. (2001). Optimal and orthogonal Latin hypercube designs for computer experiments. *Biometrika* **88**, 847–857.

Butler, N.A. (2005). Supersaturated Latin Hypercube Designs. *Commun. Stat. Theory* **34**, 417–428.

Cioppa, T.M. and Lucas, T.W. (2007). Efficient nearly orthogonal and spaced-filling Latin hypercubes. *Technometrics* **49**, 45–55.

Efthimiou I , Georgiou, S.D. and Liu, M.Q. (2015). Construction of nearly orthogonal Latin hypercube designs. *Metrika* **78**, 45–57.

Fang K. T., Lin D.K. J., Winker P. and Zhang Y. (2000). Uniform Design: Theory and Application. *Technometrics* **42**, 237–248.

Fang K.T. and Mukerjee R. (2000). A Connection Between Uniformity and Aberration in Regular Fractions of Two-Levels Factorials. *Biometrika* **87**, 193–198.

Fang K.T. and Ma C.X. (2001). A Note on Generalized Aberration in Factorial Designs. China. *Metrika* **53**, 85–93.

Fang, K.T., Li, R. and Sudjianto, A. (2006). Design and Modeling for Computer Experiments. CRC press, New York.

Fang, K.T. and Wang, Y. (1994). Number-theoretic Methods in Statistics. Chapman and Hall, London.

Fisher, R.A. (1940). The Precision Of Discriminant Functions. *Annals of Eugenics* **10**, 422–429.

Georgiou, S.D. Efthimiou I.N. (2014). Some classes of orthogonal Latin hypercube designs. *Statist. Sinica* **24**, 101–120.

Georgiou, S.D. (2009). Orthogonal Latin hypercube designs from generalized orthogonal designs. *J. Statist. Plann. Inference* **139**, 1530–1540.

Georgiou S.D. and S. Stylianou (2011). Block-circulant matrices for constructing optimal Latin hypercube designs. *J.Statist. Plann. Inference* **141**, 1933–1943.

Georgiou S.D. and S. Stylianou (2012). Corrigendum to: Block-circulant matrices for constructing optimal Latin hypercube designs. *J.Statist. Plann. Inference* **142**, 1623-1623.

Geramita, A.V. and Seberry, J. (1979). *Orthogonal Designs: Quadratic Forms and Hadamard Matrices* Marcel Dekker, New York-Basel.

Hamada, M. and Wu, C.F.J. (1992). Analysis of designed experiments with complex aliasing. *J. Qual. Technol.* **24**, 130–137.

Hamada, H., (1955). Experimental Design in Industry. *Biometrics* **11(3)**, 257–286.

Hernandez, A.S., Carlyle, M., and Lucas, T.W. (submited) (2012). Breaking Barriers to Design Dimensions in Nearly Orthogonal Latin Hypercubes.

Johnson, M. E., Moore, L. M. and Ylvisaker, D. (1990). Minimax and maximin distance designs. *J. Statist. Plann. Inference* **26**, 131–148.

Kharaghani, H. (2000). Arrays for orthogonal designs, *J.Combin. Designs* **8**, 166–173.

Kirk R., (1995). Experimental Design: Procedures for the Behavioral Sciences. Pacific Grove: Brooks/Cole Publishing Company.

Lin, C.D., Bingham, D., Sitter,R.R., and Tang, B. (2010). A new and flexible method for constructing designs for computer experiments. *Annal of Statistics* **38**, 1460–1477.

Lin, C.D., Mukerjee, R. and Tang (2009). Construction of orthogonal and nearly orthogonal Latin hypercubes. *Biometrika* **96**, 243–247.

Liu, Y.F. and Dean, A.M. (2004). k-circulant supersaturated designs. *Technometrics*, **46**, 32–43.

Matheron, G., (1971). The Theory of Regionalized Variables and its Applications., Ecole des Mines, Fontainebleau.

McKay, M.D., Beckman, R.J. and Conover, W.J. (1979). A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. *Technometrics* **21**, 239–245.

Montgomery D.C. and E.A. Peck. (1992). Introduction to Linear Regression Analysis, 2nd Edition. Wiley, New York,

Montgomery D.C. (1999). Experimental Design for product and Progress Design and Development. *The Statistician* **48(2)**, 159–177.

Montgomery D.C. (2000). Design and Analysis of Experiments. 5th edition John Wiley and Sons, New York, NY.

Morris, M.D. and Mitchell, T.J. (1995). Exploratory designs for computer experiments. *J. Statist. Plann. Inference* **43**, 381–402.

Owen, Art B. (1994). Controlling correlations in Latin hypercube samples. *J. Amer. Statist. Assoc.* **89**, 1517–1522.

Pang, F., Liu, M.-Q. and Lin, D.K.J. (2009). A construction method for orthogonal Latin hypercube designs with prime power levels. *Statist. Sinica* **19**, 1721–1728.

Pearce, S. (1979). Experimental Design: R. A. Fisher and Some Modern Rivals. *The Statistician* **28(3)**, 153–161.

Preece, D. A. (1990). R. A. Fisher and Experimental Design: A Review *Biometrics* **46(4)**, 925–935.

Qian P.Z.G. (2012). Sliced Latin Hypercube Designs. *J. Statist. Plann. Inference* **107:497**, 393-399.

Qian, P.Z.G. (2009), Nested Latin Hypercube Designs,*Biometrika* **96**, 957-970.

Qian, P.Z.G., and Wu, C. F. J. (2009), Sliced Space-Filling Designs, *Biometrika* **96**, 945-956.

Sacks, J., Welch, W.J., Mitchell, T.J. and Wynn, H.P. (1989). Design and analysis of computer experiments. *Statist. Sinica.* **4**, 409–423.

Sprent, P. (1973) Frank Yates and Experimental Design-Reflections Inspired by his Selected Papers. *The Statistician* **22(2)**, 151–158

Steinberg M. and Lin, Dennis K.J. (2006). A construction method for orthogonal Latin hypercube designs. *Biometrika* **93**, 279–288.

Sun, F., Liu, M.-Q. and Lin, Dennis K.J. (2009). Construction of orthogonal Latin hypercube designs. *Biometrika* **96**, 971–974.

Sun, F., Liu, M.-Q. and Lin, Dennis K.J. (2010). Construction of orthogonal Latin hypercube designs with flexible run sizes. *J. Statist. Plann. Inference* **140**, 3236–3242.

Tang, B. (1993). Orthogonal array-based Latin hypercubes. *J. Amer. Statist. Assoc.* **88**, 1392–1397.

Tang, B. (1998). Selecting hypercubes using correlation criteria. *Statist. Sinica* **8**, 965–977.

Viana, F.A.C., Venter, G., and Balabanov, V. (2010). An Algorithm for Fast Optimal Latin Hypercube Design of Experiments. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **82**, 135–156.

Welch, W.J., Buck, R.J., Sacks, J., Wynn, H.P., Mitchell, T.J. and Morris, M.D. (1992). Screening, predicting and computer experiments. *Technometrics* **34**, 15–25.

Wuebben Paul (1968). Experimental Design, Measurement, and Human Subjects: A Neglected Problem of Control *American Sociological Association* **31**, 89–101.

Yang, J.Y. and Liu, M.Q. (2012). Construction of Orthogonal and nearly orthogonal Latin hypercube designs from orthogonal designs. *Statist. Sinica.* **22**, 433–442.

Yang Jian-Feng , C. Devon Lin, Peter Z. G. Qian and Dennis K. J. Lin (2013). Construction of Sliced Orthogonal Latin hypercube designs. *Statist. Sinica* **23**, 1117–1130.

Yang Jinyu, Min-Qian Liu and Dennis K. J. Lin (2014). Construction of Nested Orthogonal Latin hypercube designs. *Statist. Sinica* **24**, 211–219.

Ye, Kenny Q. (1998). Orthogonal column Latin hypercubes and their application in computer experiments. *J. Amer. Statist. Assoc.* **93**, 1430–1439.

Yin, Y.H. and Liu, M.Q. (2013). Orthogonal Latin hypercube designs for Fourier polynomial models. *J. Statist. Plann. Inference* **143**, 307–314.

Παράρτημα Α΄

Αλγόριθμοι -Πρόγραμμα σε γλώσσα *Matlab*

Α΄.1 Πρόγραμμα για την κατασκεύη OLHD kai NOLHD

Τα παρακάτω πρόγραμματα χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή ορθογώνιων (OLHD) και σχεδόν ορθογώνιων σχεδιασμών Λατινικών Υπερκύβων (NOLHD). Παρουσιάζονται οι αναγκαίες υπορουτίνες για την κατασκευή και υπολογισμό των κριτηρίων που αναφέραμε παραπάνω.

```
function d = de( s,u )
d=sqrt(sum((s-u).*(s-u)));
end
```

```
function d = dr( s,u )
d=sum(abs(s-u));
end
```

```
function [ D,J ] = Euclid_D_J( X )
```

```
mx=max(abs(X(:)));
[n,m]=size(X);
DEtemp=[];
for i=1:n-1
  for j=i+1:n
    dtemp=de(X(i,:),X(j,:));
    DEtemp=[DEtemp dtemp];
  end;
end;
DE=unique(DEtemp);

JE=[];
for i=1:length(DE)
  JE=[JE sum(DEtemp==DE(i))];
end;

DE=DE./mx;

D=DE;
J=JE;

end
```

A′.2 Πρόγραμμα για την κατασκευή Goeithal-Seidel Matrix

```
function  GS = GS_matrix(X,Y,Z,W)

n=length(X);
R=backunit_matrix(X);
A=circ_matrix(X);
B=circ_matrix(Y);
C=circ_matrix(Z);
D=circ_matrix(W);
GS=[A,B*R,C*R,D*R;-B*R,A,-D'*R,C'*R;-C*R,D'*R,A,-B'*R;-D*R,-C'*R,B'*R,A];

end

%paradeigma 1:estw
%X=[5 11 -7];
%Y=[9 13 15];
%Z=[-17 -19 21]; kai
%W=[-23 1 -3]; na vreite ton  GS_matrix(X,Y,Z,W)


%GS =
% 11    -7     5     9    15    13   -17    21   -19   -23   -3   1
%  5    11    -7    15    13     9    21   -19   -17    -3    1 -23
% -7     5    11    13     9    15   -19   -17    21     1  -23  -3
% -9   -15   -13    11    -7     5     3    23    -1    21  -17 -19
%-15   -13    -9     5    11    -7    23    -1     3   -17  -19  21
%-13    -9   -15    -7     5    11    -1     3    23   -19   21 -17
% 17   -21    19    -3   -23     1    11    -7     5   -15   -9 -13
%-21    19    17   -23     1    -3     5    11    -7    -9  -13 -15
% 19    17   -21     1    -3   -23    -7     5    11   -13  -15  -9
% 23     3    -1   -21    17    19    15     9    13    11   -7   5
%  3    -1    23    17    19   -21     9    13    15     5   11  -7
% -1    23     3    19   -21    17    13    15     9    -7    5  11


%paradeigma 2:estw
%A=[1];
%B=[3];
%C=[5]; kai
```

```
%D=[7]; na vreite ton  GS_matrix(A,B,C,D)

%GS=   1     3     5     7
    % -3     1    -7     5
    % -5     7     1    -3
    % -7    -5     3     1

 %paradeigma 3:estw
%X=[1,-1];
%Y=[1,-1];
%Z=[1,1]; kai
%W=[1,1];
%Na vreite ton  GS_matrix(A,B,C,D)

   % GS =

% -1     1     1    -1     1     1     1     1
%  1    -1    -1     1     1     1     1     1
% -1     1    -1     1    -1    -1     1     1
%  1    -1     1    -1    -1    -1     1     1
% -1    -1     1     1    -1     1    -1     1
%  -1   -1     1     1     1    -1     1    -1
%  -1   -1    -1    -1     1    -1    -1     1
%  -1   -1    -1    -1    -1     1     1    -1
```

Α΄.3 Πρόγραμμα για την κατασκευή Kharaghani Array

```
function  DKharaghaniarray8 = Kharaghaniarray8_matrix( A,B,C,D,E,F,G,H)

n=length(A);
R=backunit_matrix(A);
X=circ_matrix(A);
Y=circ_matrix(B);
Z=circ_matrix(C);
W=circ_matrix(D);
K=circ_matrix(E);
L=circ_matrix(F);
M=circ_matrix(G);
N=circ_matrix(H);
```

```
DKharaghaniarray8=[X,Y,W*R,Z*R,L*R,K*R,N*R,M*R;
-Y,X,Z*R,-W*R,K*R,-L*R,M*R,-N*R;-W*R,-Z*R,X,Y,-N'*R,M'*R,L'*R,-K'*R;
-Z*R,W*R,-Y,X,M'*R,N'*R,-K'*R,-L'*R;-L*R,-K*R,N'*R,-M'*R,X,-Y,-W'*R,Z'*R;
-K*R,L*R,-M'*R,-N'*R,-Y,X,Z'*R,W'*R;-N*R,-M*R,-L'*R,-K'*R,W'*R,-Z'*R,X,Y;
-M*R,-N*R,K'*R,L'*R,-Z'*R,-W'*R,-Y,X];
end


%PARADEIGMA:
%A=[1];B=[3]; C=[5]; D=[7]; E=[9]; F=[11];G=[13];H=[15];
%DKharaghaniarray8 =

  %   1     3     7     5    11     9    15    13
   % -3     1     5    -7     9   -11    13   -15
    %-7    -5     1     3   -15    13    11    -9
    %-5     7    -3     1    13    15    -9   -11
  % -11    -9    15   -13     1    -3    -7     5
   % -9    11   -13   -15    -3     1     5     7
   %-15   -13   -11    -9     7    -5     1     3
  % -13   -15     9    11    -5    -7    -3     1
```

Α΄.4 Πρόγραμμα για την κατασκευή Amicability

```
syms b real
syms c real
A=[b+15, -(b+5), b+19];
A=[A;b+17, -(b+21), b+23];
A=[A;b+1, b+3,-(b+7)];
A=[A;b+9, b+11, b+13];
A=[A;c+15,-(c+5), c+19];
A=[A;c+17, -(c+21), c+23];
A=[A;c+1, c+3, -(c+7)];
A=[A;c+9, c+11, c+13];

A=[A; b+19, -(b+9), -(b+1)];
A=[A; b+21, -(b+23), -(b+3)];
A=[A; b+5, -(b+7), -(b+11)];
A=[A; b+13, b+15, b+17];
A=[A; c+19, -(c+9), -(c+1)];
A=[A; c+21, -(c+23), -(c+3)];
A=[A; c+5, -(c+7), -(c+11)];
```

```
A=[A; c+13, c+15, c+17];

A=[A; b+3, -(b+19), -(b+9)];
A=[A; b+5, b+7, -(b+11) ];
A=[A; b+13, -(b+15), b+17];
A=[A; b+21, b+23, b+1];
A=[A; c+3, -(c+19), -(c+9)];
A=[A; c+5, c+7, -(c+11) ];
A=[A; c+13, -(c+15), c+17];
A=[A; c+21, c+23, c+1];




A=[A; b+3, -(b+21), b+9];
A=[A; b+5, -(b+7), - (b+11)];
A=[A; b+13, b+15, b+17];
A=[A; b+19, -(b+23), -(b+1)];
A=[A; c+3, -(c+21), c+9];
A=[A; c+5, -(c+7), - (c+11)];
A=[A; c+13, c+15, c+17];
A=[A; c+19, -(c+23), -(c+1)];




A=[A; b+21, b+15, -(b+3)];
A=[A; b+23, b+1, -(b+5)];
A=[A; b+7, b+9, b+11];
A=[A; b+13, b+17, -(b+19)];
A=[A; c+21, c+15, -(c+3)];
A=[A; c+23, c+1, -(c+5)];
A=[A; c+7, c+9, c+11];
A=[A; c+13, c+17, -(c+19)];




A=[A; b+19, -(b+9), -(b+3)];
A=[A; b+21, b+23, b+1];
A=[A; b+5, b+7, -(b+11)];
A=[A; b+13, -(b+15), b+17];
A=[A; c+19, -(c+9), -(c+3)];
A=[A; c+21, c+23, c+1];
A=[A; c+5, c+7, -(c+11)];
```

```
A=[A; c+13, -(c+15), c+17];



A=[A; b+21, b+15, -(b+5)];
A=[A; b+23, b+1, b+3];
A=[A; b+7, -(b+9), b+11];
A=[A; b+13, -(b+17), -(b+19)];
A=[A; c+21, c+15, -(c+5)];
A=[A; c+23, c+1, c+3];
A=[A; c+7, -(c+9), c+11];
A=[A; c+13, -(c+17), -(c+19)];



A=[A; b+19, -(b+5), -(b+7)];
A=[A; b+21, b+23, b+1];
A=[A; b+3, b+9, -(b+11)];
A=[A; b+13, -(b+15), b+17];
A=[A; c+19, -(c+5), -(c+7)];
A=[A; c+21, c+23, c+1];
A=[A; c+3, c+9, -(c+11)];
A=[A; c+13, -(c+15), c+17];



A=[A; b+19, -(b+7), -(b+5)];
A=[A; b+21, b+23, b+1];
A=[A; b+3, b+9, -(b+1)];
A=[A; b+13, -(b+15), b+17];
A=[A; c+19, -(c+7), -(c+5)];
A=[A; c+21, c+23, c+1];
A=[A; c+3, c+9, -(c+1)];
A=[A; c+13, -(c+15), c+17];



A=[A; b+5, -(b+21), -(b+15)];
A=[A; b+7, -(b+9), b+11];
A=[A; b+13, -(b+17), -(b+19)];
A=[A; b+23, b+1, b+3];
A=[A; c+5, -(c+21), -(c+15)];
```

```
A=[A; c+7, -(c+9), c+11];
A=[A; c+13, -(c+17), -(c+19)];
A=[A; c+23, c+1, c+3];


A=[A; b+5, -(b+23), -(b+15)];
A=[A; b+7, b+9, b+11];
A=[A; b+13, b+17, -(b+19)];
A=[A; b+21, b+1, -(b+3)];
A=[A; c+5, -(c+21), -(c+15)];
A=[A; c+7, -(c+9), c+11];
A=[A; c+13, -(c+17), -(c+19)];
A=[A; c+23, c+1, c+3];


A=[A; b+9, b+5, -(b+19)];
A=[A; b+11, b+13, b+15];
A=[A; b+17, -(b+21), -(b+23)];
A=[A; b+1, -(b+3), b+7];
A=[A; c+9, c+5, -(c+19)];
A=[A; c+11, c+13, c+15];
A=[A; c+17, -(c+21), -(c+23)];
A=[A; c+1, -(c+3), c+7];


A=[A; b+15, b+19, -(b+5)];
A=[A; b+17, -(b+21), b+23];
A=[A; b+1, b+3, -(b+7)];
A=[A; b+9, b+11, b+13];
A=[A; c+15, c+19, -(c+5)];
A=[A; c+17, -(c+21), c+23];
A=[A; c+1, c+3, -(c+7)];
A=[A; c+9, c+11, c+13];

A=[A; b+19, -(b+1), -(b+9)];
A=[A; b+21, -(b+23), -(b+3)];
A=[A; b+5, -(b+7), -(b+11)];
A=[A; b+13, b+15, b+17];
A=[A; c+19, -(c+1), -(c+9)];
A=[A; c+21, -(c+23), -(c+3)];
A=[A; c+5, -(c+7), -(c+11)];
A=[A; c+13, c+15, c+17];
```

```
A=[A; b+19, -(b+3), -(b+9)];
A=[A; b+21, b+23, b+1];
A=[A; b+5, b+7, -(b+11)];
A=[A; b+13, -(b+15), b+17];
A=[A; c+19, -(c+3), -(c+9)];
A=[A; c+21, c+23, c+1];
A=[A; c+5, c+7, -(c+11)];
A=[A; c+13, -(c+15), c+17];
```

```
A=[A; b+5, -(b+17), -(b+19)];
A=[A; b+7, -(b+9), b+11];
A=[A; b+13, -(b+15), -(b+21)];
A=[A; b+23, b+1, b+3];
A=[A; c+5, -(c+17), -(c+19)];
A=[A; c+7, -(c+9), c+11];
A=[A; c+13, -(c+15), -(c+21)];
A=[A; c+23, c+1, c+3];
```

```
A=[A; b+5, b+19, -(b+17)];
A=[A; b+7, -(b+9), b+11];
A=[A; b+13, -(b+15), -(b+21)];
A=[A; b+23, b+1, b+3];
A=[A; c+5, c+19, -(c+17)];
A=[A; c+7, -(c+9), c+11];
A=[A; c+13, -(c+15), -(c+21)];
A=[A; c+23, c+1, c+3];
```

```
A=[A; b+3, b+9, -(b+19)];
A=[A; b+5, b+7, -(b+11)];
A=[A; b+13, -(b+15), b+17];
```

```
A=[A; b+21, b+23, b+1];
A=[A; c+3, c+9, -(c+19)];
A=[A; c+5, c+7, -(c+11)];
A=[A; c+13, -(c+15), c+17];
A=[A; c+21, c+23, c+1];
```

```
A=[A; b+15, b+19, -(b+5)];
A=[A; b+17, -(b+21), b+23];
A=[A; b+1, b+3, -(b+7)];
A=[A; b+9, b+11, b+13];
A=[A; c+15, c+19, -(c+5)];
A=[A; c+17, -(c+21), c+23];
A=[A; c+1, c+3, -(c+7)];
A=[A; c+9, c+11, c+13];
```

```
A=[A; b+5, -(b+15), -(b+21)];
A=[A; b+7, -(b+9), b+11];
A=[A; b+13, -(b+17), -(b+19)];
A=[A; b+23, b+1, b+3];
A=[A; c+5, -(c+15), -(c+21)];
A=[A; c+7, -(c+9), c+11];
A=[A; c+13, -(c+17), -(c+19)];
A=[A; c+23, c+1, c+3];
```

```
A=[A; b+3, b+9, -(b+21)];
A=[A; b+5, -(b+7), -(b+11)];
A=[A; b+13, b+15, b+17];
A=[A; b+19, -(b+23), -(b+1)];
A=[A; c+3, c+9, -(c+21)];
A=[A; c+5, -(c+7), -(c+11)];
A=[A; c+13, c+15, c+17];
A=[A; c+19, -(c+23), -(c+1)];
```

```
A=[A; b+21, -(b+3), b+15];
A=[A; b+23, b+1, -(b+5)];
A=[A; b+7, b+9, b+11];
A=[A; b+13, b+17, -(b+19)];
A=[A; c+21, -(c+3), c+15];
A=[A; c+23, c+1, -(c+5)];
A=[A; c+7, c+9, c+11];
A=[A; c+13, c+17, -(c+19)];
```

```
A=[A; b+5, -(b+15), -(b+23)];
A=[A; b+7, b+9, b+11];
A=[A; b+13, b+17, -(b+19)];
A=[A; b+21, b+1, -(b+3)];
A=[A; c+5, -(c+15), -(c+23)];
A=[A; c+7, c+9, c+11];
A=[A; c+13, c+17, -(c+19)];
A=[A; c+21, c+1, -(c+3)];
```

```
A=[A; b+9, -(b+19), b+5];
A=[A; b+11, b+13, b+15];
A=[A; b+17, -(b+21), -(b+23)];
A=[A; b+1, -(b+3), b+7];
A=[A; c+9, -(c+19), c+5];
A=[A; c+11, c+13, c+15];
A=[A; c+17, -(c+21), -(c+23)];
A=[A; c+1, -(c+3), c+7];
```

```
A=[A; b+15, -(b+5), b+19];
A=[A; b+21, -(b+17), -(b+23)];
A=[A; b+1, b+3, -(b+7)];
```

```
A=[A; b+9, b+11, b+13];
A=[A; c+15, -(c+5), c+19];
A=[A; c+21, -(c+17), -(c+23)];
A=[A; c+1, c+3, -(c+7)];
A=[A; c+9, c+11, c+13];



A=[A; b+19, -(b+9), -(b+1)];
A=[A; b+23, -(b+21), b+3];
A=[A; b+5, -(b+7), -(b+11)];
A=[A; b+13, b+15, b+17];
A=[A; c+19, -(c+9), -(c+1)];
A=[A; c+23, -(c+21), c+3];
A=[A; c+5, -(c+7), -(c+11)];
A=[A; c+13, c+15, c+17];



A=[A; b+3, -(b+19), b+9];
A=[A; b+7, b+5, -(b+11)];
A=[A; b+13, -(b+15), b+17];
A=[A; b+21, b+23, b+1];
A=[A; c+3, -(c+19), c+9];
A=[A; c+7, c+5, -(c+11)];
A=[A; c+13, -(c+15), c+17];
A=[A; c+21, c+23, c+1];



A=[A; b+3, -(b+21), b+9];
A=[A; b+7, -(b+5), b+11];
A=[A; b+13, b+15, b+17];
A=[A; b+19, -(b+23), -(b+1)];
A=[A; c+3, -(c+21), c+9];
A=[A; c+7, -(c+5), c+11];
A=[A; c+13, c+15, c+17];
A=[A; c+19, -(c+23), -(c+1)];



A=[A; b+21, b+15, -(b+3)];
A=[A; b+1, b+23, -(b+5)];
```

```
A=[A; b+7, b+9, b+11];
A=[A; b+13, b+17, -(b+19)];
A=[A; c+21, c+15, -(c+3)];
A=[A; c+1, c+23, -(c+5)];
A=[A; c+7, c+9, c+11];
A=[A; c+13, c+17, -(c+19)];




A=[A; b+19, -(b+9), -(b+3)];
A=[A; b+23, b+21, b+1];
A=[A; b+5, b+7, -(b+11)];
A=[A; b+13, -(b+15), b+17];
A=[A; c+19, -(c+9), -(c+3)];
A=[A; c+23, c+21, c+1];
A=[A; c+5, c+7, -(c+11)];
A=[A; c+13, -(c+15), c+17];


A=[A; b+21, b+15, -(b+5)];
A=[A; b+1, b+23, b+3];
A=[A; b+7, -(b+9), b+11];
A=[A; b+13, -(b+17), -(b+19)];
A=[A; c+21, c+15, -(c+5)];
A=[A; c+1, c+23, c+3];
A=[A; c+7, -(c+9), c+11];
A=[A; c+13, -(c+17), -(c+19)];




A=[A; b+19, -(b+5), -(b+7)];
A=[A; b+23, b+21, b+1];
A=[A; b+3, b+9, -(b+11)];
A=[A; b+13, -(b+15), b+17];
A=[A; c+19, -(c+5), -(c+7)];
A=[A; c+23, c+21, c+1];
A=[A; c+3, c+9, -(c+11)];
A=[A; c+13, -(c+15), c+17];




A=[A; b+19, -(b+7), -(b+5)];
```

```
A=[A; b+23, b+21, b+1];
A=[A; b+3, b+9, -(b+11)];
A=[A; b+13, -(b+15), b+17];
A=[A; c+19, -(c+7), -(c+5)];
A=[A; c+23, c+21, c+1];
A=[A; c+3, c+9, -(c+11)];
A=[A; c+13, -(c+15), c+17];
```

```
A=[A; b+5, -(b+21), -(b+15)];
A=[A; b+9, -(b+7), -(b+11)];
A=[A; b+13, -(b+17), -(b+19)];
A=[A; b+23, b+1, b+3];
A=[A; c+5, -(c+21), -(c+15)];
A=[A; c+9, -(c+7), -(c+11)];
A=[A; c+13, -(c+17), -(c+19)];
A=[A; c+23, c+1, c+3];
```

```
A=[A; b+5, -(b+23), -(b+15)];
A=[A; b+9, b+7, b+11];
A=[A; b+13, b+17, -(b+19)];
A=[A; b+21, b+1, -(b+3)];
A=[A; c+5, -(c+23), -(c+15)];
A=[A; c+9, c+7, c+11];
A=[A; c+13, c+17, -(c+19)];
A=[A; c+21, c+1, -(c+3)];
```

```
A=[A; b+9, b+5, -(b+19)];
A=[A; b+13, b+11, b+15];
A=[A; b+17, -(b+21), -(b+23)];
A=[A; b+1, -(b+3), b+7];
A=[A; c+9, c+5, -(c+19)];
A=[A; c+13, c+11, c+15];
A=[A; c+17, -(c+21), -(c+23)];
A=[A; c+1, -(c+3), c+7];
```

```
A=[A; b+15, b+19, -(b+5)];
A=[A; b+21, -(b+17), -(b+23)];
A=[A; b+1, b+3, -(b+7)];
A=[A; b+9, b+11, b+13];
A=[A; c+15, c+19, -(c+5)];
A=[A; c+21, -(c+17), -(c+23)];
A=[A; c+1, c+3, -(c+7)];
A=[A; c+9, c+11, c+13];
```

```
A=[A; b+19, -(b+1), -(b+9)];
A=[A; b+23, -(b+21), b+3];
A=[A; b+5, -(b+7), -(b+11)];
A=[A; b+13, b+15, b+17];
A=[A; c+19, -(c+1), -(c+9)];
A=[A; c+23, -(c+21), c+3];
A=[A; c+5, -(c+7), -(c+11)];
A=[A; c+13, c+15, c+17];
```

```
A=[A; b+19, -(b+3), -(b+9)];
A=[A; b+23, b+21, b+1];
A=[A; b+5, b+7, -(b+11)];
A=[A; b+13, -(b+15), b+17];
A=[A; c+19, -(c+3), -(c+9)];
A=[A; c+23, c+21, c+1];
A=[A; c+5, c+7, -(c+11)];
A=[A; c+13, -(c+15), c+17];
```

```
A=[A; b+5, -(b+17), -(b+19)];
A=[A; b+9, -(b+7), -(b+11)];
```

```
A=[A; b+13, -(b+15), -(b+21)];
A=[A; b+23, b+1, b+3];
A=[A; c+5, -(c+17), -(c+19)];
A=[A; c+9, -(c+7), -(c+11)];
A=[A; c+13, -(c+15), -(c+21)];
A=[A; c+23, c+1, c+3];
```

```
A=[A; b+5, -(b+19), -(b+17)];
A=[A; b+9, -(b+7), -(b+11)];
A=[A; b+13, -(b+15), -(b+21)];
A=[A; b+23, b+1, b+3];
A=[A; c+5, -(c+19), -(c+17)];
A=[A; c+9, -(c+7), -(c+11)];
A=[A; c+13, -(c+15), -(c+21)];
A=[A; c+23, c+1, c+3];
```

```
A=[A; b+3, b+9, -(b+19)];
A=[A; b+7, b+5, -(b+11)];
A=[A; b+13, -(b+15), b+17];
A=[A; b+21, b+23, b+1];
A=[A; c+3, c+9, -(c+19)];
A=[A; c+7, c+5, -(c+11)];
A=[A; c+13, -(c+15), c+17];
A=[A; c+21, c+23, c+1];
```

```
A=[A; b+5, -(b+15), -(b+21)];
A=[A; b+9, -(b+7), -(b+11)];
A=[A; b+13, -(b+17), -(b+19)];
A=[A; b+23, b+1, b+3];
A=[A; c+5, -(c+15), -(c+21)];
A=[A; c+9, -(c+7), -(c+11)];
A=[A; c+13, -(c+17), -(c+19)];
A=[A; c+23, c+1, c+3];
```

```
A=[A; b+3, b+9, -(b+21)];
A=[A; b+7, -(b+5), b+11];
A=[A; b+13, b+15, b+17];
A=[A; b+19, -(b+23), -(b+1)];
A=[A; c+3, c+9, -(c+21)];
A=[A; c+7, -(c+5), c+11];
A=[A; c+13, c+15, c+17];
A=[A; c+19, -(c+23), -(c+1)];


A=[A; b+21, -(b+3), b+15];
A=[A; b+1, b+23, -(b+5)];
A=[A; b+7, b+9, b+11];
A=[A; b+13, b+17, -(b+19)];
A=[A; c+21, -(c+3), c+15];
A=[A; c+1, c+23, -(c+5)];
A=[A; c+7, c+9, c+11];
A=[A; c+13, c+17, -(c+19)];


A=[A; b+21, -(b+5), b+15];
A=[A; b+1, b+23, b+3];
A=[A; b+7, -(b+9), b+11];
A=[A; b+13, -(b+17), -(b+19)];
A=[A; c+21, -(c+5), c+15];
A=[A; c+1, c+23, c+3];
A=[A; c+7, -(c+9), c+11];
A=[A; c+13, -(c+17), -(c+19)];


A=[A; b+5, -(b+15), -(b+23)];
A=[A; b+9, b+7, b+11];
A=[A; b+13, b+17, -(b+19)];
A=[A; b+21, b+1, -(b+3)];
A=[A; c+5, -(c+15), -(c+23)];
```

```
A=[A; c+9, c+7, c+11];
A=[A; c+13, c+17, -(c+19)];
A=[A; c+21, c+1, -(c+3)];
```

```
for i=1:47
    i
A1=A(i,:);
A2=A(i+1,:);
A3=A(i+2,:);
A4=A(i+3,:);
A5=A(i+4,:);
A6=A(i+5,:);
A7=A(i+6,:);
A8=A(i+7,:);
B=sum(A1.^2);
B=B+sum(A2.^2);
B=B+sum(A3.^2);
B=B+sum(A4.^2);
B=B+sum(A5.^2);
B=B+sum(A6.^2);
B=B+sum(A7.^2);
B=B+sum(A8.^2);
C=[B,B,B];
v=Kharaghaniarray8_matrix(A1,A2,A3,A4,A5,A6,A7,A8);
v1=simplify(v'*v)
if isequal(v1,diag(C))
'ok'
end;

end;
```

Α′.5 Πρόγραμμα για την κατασκευή Is LHD

```
function  ok= IsLHD(L)
 L=sort(L);
 [n,m]=size(L); %dilwnw tis diastaseis tou pinaka L.
 x=L(:,1); %pare thn 1h sthlh tou pinaka L kai taksinomise kata auksousa
           %seira ta stoixeia ths.
 ok=true;
 i=2;
 while (i<=m)&&(ok) %edw elegxoume an oles oi stiles einai ises metaksu tous.
   ok = isequal(x,L(:,i));
   i=i+1;
 end;
 i=2;
 d=x(i)-x(i-1);
 while (ok)&&(i<n) %elegxoume an isapexoun ta stoixeia ths 1hs sthlhs, ean
                   %isxuei vevaia h prwth proupothesi (dld to prwto while).
   i=i+1;
   ok=(d==x(i)-x(i-1));
 end;
end

%Genika edw elegxoume tis 2 idiothtes pou prepei na isxuoun gia na exoume
%LHD sxediasmo:
%(1)na exei n diaforetika stoixeia.(oses oi grammes).
%(2)Isapexoun ta stoixeia kathe sthlhs.
```

Α′.6 Πρόγραμμα για την κατασκευή OLHD

```
% einai h kataskeuh foldover gia D24_12.
b=0;
A1=[b+15,-b-5,b+19];
A2=[b+17,-b-21,b+23];
A3=[b+1,b+3,-b-7];
A4=[b+9,b+11,b+13];
Do=GS_matrix(A1,A2,A3,A4);
X1=foldover(Do);
```

```
D24_12=X1
X1=D24_12;
[avet,maxt,aveq,maxq,DR,JR,DE,JE,F_R,F_E]=RunCriteriaOurPaperEG2012(X1);

% einai h kataskeuh  foldover gia D32_16 twn SLL(c=4, r=1).
b=0;
A1=[1 3];
A2=[5 -7];
A3=[9 -11];
A4=[13 15];
A5=[17 -19];
A6=[21 23];
A7=[25 27];
A8=[29 -31];
Do=Kharaghaniarray8_matrix(A1,A5,A2,A6,A3,A7,A4,A8);
X1=foldover(Do);
D32_16=X1
X1=D32_16;
[avet,maxt,aveq,maxq,DR,JR,DE,JE,F_R,F_E]=RunCriteriaOurPaperEG2012(X1);
[Leven,Lodd] = SUN_LIN_LIU( 4,1 );
X=Leven;
[avet,maxt,aveq,maxq,DR,JR,DE,JE,F_R,F_E]=RunCriteriaOurPaperEG2012(X);

% einai h kataskeuh  foldover gia D40_20.
b=0;
A1=[b+21 b+5 -b-27 b+29 b+23];
A2=[b+25 b+31 b+33 b+35 -b-37];
A3=[b+39 b+1 -b-3 -b-7 -b-9];
A4=[b+11 b+13 -b-15 b+17 -b-19];
Do=GS_matrix(A1,A2,A3,A4);
X1=foldover(Do);
D40_20=X1
X1=D40_20;
[avet,maxt,aveq,maxq,DR,JR,DE,JE,F_R,F_E]=RunCriteriaOurPaperEG2012(X1);


%einai h kataskeuh  foldover gia D48_24.
b=0;
A1=[1,27,3];
A2=[5,7,-9];
A3=[11,-13,-15];
A4=[17,19,-21];
A5=[23,-25,29];
A6=[31,33,-35];
A7=[37,39,41];
```

```
A8=[43,45 -47];
Do=Kharaghaniarray8_matrix(A1,A5,A2,A6,A3,A7,A4,A8);
X1=foldover(Do);
D48_24=X1
X1=D48_24;
[avet,maxt,aveq,maxq,DR,JR,DE,JE,F_R,F_E]=RunCriteriaOurPaperEG2012(X1);


%Twra kanoume thn kataskeuh me foldover tou D96_24 twn EG2012
b=0;
A1=[1,27,3];
A2=[5,7,-9];
A3=[11,-13,-15];
A4=[17,19,-21];
A5=[23,-25,29];
A6=[31,33,-35];
A7=[37,39,41];
A8=[43,45 -47];
Do=Kharaghaniarray8_matrix(A1,A5,A2,A6,A3,A7,A4,A8);
X1=foldover(Do);

b=24;
A1=[1,27,3];
A2=[5,7,-9];
A3=[11,-13,-15];
A4=[17,19,-21];
A5=[23,-25,29];
A6=[31,33,-35];
A7=[37,39,41];
A8=[43,45 -47];
D24=Kharaghaniarray8_matrix(A1,A5,A2,A6,A3,A7,A4,A8);
X2=foldover(D24);
X=[X1;X2];
D96_24=X
X=D96_24;
[avet,maxt,aveq,maxq,DR,JR,DE,JE,F_R,F_E]=RunCriteriaOurPaperEG2012(X);



%Twra kanoume thn kataskeuh me kronecker tou D96_24 twn EG2012

b=0;
A1=[b+15,-b-5,b+19];
A2=[b+17,-b-21,b+23];
A3=[b+1,b+3,-b-7];
```

```
A4=[b+9,b+11,b+13];
Do=GS_matrix(A1,A2,A3,A4);
So=Do./abs(Do);
C=[Do;-Do];
A=[So;So];


g=4;
H=hadamard(g);
D=H(:,2:3);
B=[1,-3;3,1;-1,3;-3,-1];
L96_24=kron(A,B)+ g*kron(C,D);
ok=IsOrthogonalLHD(L96_24);
[n,m]=size(L96_24);
if ok
  fprintf(1,'%s%d%s%d\n','orthogonal LHD of size ',n,'x',m);
elseif IsLHD(L96_24)
      fprintf(1,'%s%d%s%d\n','LHD but not orthogonal LHD of size ',n,'x',m);
else
    fprintf(1,'%s%d%s%d%s\n','Matrix of size ',n,'x',m,' is not a LHD');
end;
X=L96_24;
[avet,maxt,aveq,maxq,DR,JR,DE,JE,F_R,F_E]=RunCriteriaOurPaperEG2012(X);




%Twra kanoume thn kataskeuh me kronecker tou D96_24 twn LBST

So=hadamard(4);
A=[So;So];
g=12;
H=hadamard(g);
D=H(:,2:7);

B=[-5.5 -5.5 -1.5 -5.5 -3.5 -3.5;
   -4.5 -2.5 -2.5 5.5 4.5 0.5;
-3.5 4.5 5.5 -4.5 -0.5 1.5;
-2.5 0.5 0.5 0.5 0.5 5.5;
-1.5 2.5 -0.5 1.5 5.5 -4.5;
-0.5 5.5 2.5 3.5 -2.5 -1.5;
0.5 1.5 -5.5 2.5 -5.5 -2.5;
1.5 -1.5 1.5 -1.5 1.5 2.5;
2.5 -4.5 3.5 4.5 -4.5 3.5;
3.5 -0.5 -4.5 -3.5 3.5 4.5;
```

```
4.5 3.5 -3.5 -2.5 -1.5 -0.5;
5.5 -3.5 4.5 -0.5 2.5 -5.5];

C=[-3.5 1.5 -0.5 -2.5;
   -2.5 -2.5 0.5 3.5;
   -1.5 3.5 -1.5 2.5;
   -0.5 -0.5 1.5 -3.5;
    0.5 -3.5 -2.5 -1.5;
    1.5 -1.5 3.5 1.5;
    2.5 2.5 2.5 -0.5;
    3.5 0.5 -3.5 0.5];

L96_24=kron(A,B)+ g*kron(C,D);
ok=IsOrthogonalLHD(L288_76);
[n,m]=size(L96_24);
if ok
  fprintf(1,'%s%d%s%d\n','orthogonal LHD of size ',n,'x',m);
elseif IsLHD(L96_24)
      fprintf(1,'%s%d%s%d\n','LHD but not orthogonal LHD of size ',n,'x',m);
else
    fprintf(1,'%s%d%s%d%s\n','Matrix of size ',n,'x',m,' is not a LHD');
end;
X=L96_24;
[avet,maxt,aveq,maxq,DR,JR,DE,JE,F_R,F_E]=RunCriteriaOurPaperEG2012(X);



%Twra kanoume thn kataskeuh me Foldover tou D192_48 twn EG2012

b=0;
A1=[1,27,3];
A2=[5,7,-9];
A3=[11,-13,-15];
A4=[17,19,-21];
A5=[23,-25,29];
A6=[31,33,-35];
A7=[37,39,41];
A8=[43,45 -47];
Do=Kharaghaniarray8_matrix(A1,A5,A2,A6,A3,A7,A4,A8);
X1=foldover(Do);

b=24;
A1=[1,27,3];
A2=[5,7,-9];
A3=[11,-13,-15];
```

```
A4=[17,19,-21];
A5=[23,-25,29];
A6=[31,33,-35];
A7=[37,39,41];
A8=[43,45 -47];
D24=Kharaghaniarray8_matrix(A1,A5,A2,A6,A3,A7,A4,A8);
X2=foldover(D24);

b=48;
A1=[1,27,3];
A2=[5,7,-9];
A3=[11,-13,-15];
A4=[17,19,-21];
A5=[23,-25,29];
A6=[31,33,-35];
A7=[37,39,41];
A8=[43,45 -47];
D48=Kharaghaniarray8_matrix(A1,A5,A2,A6,A3,A7,A4,A8);
X3=foldover(D48);
b=72;
A1=[1,27,3];
A2=[5,7,-9];
A3=[11,-13,-15];
A4=[17,19,-21];
A5=[23,-25,29];
A6=[31,33,-35];
A7=[37,39,41];
A8=[43,45 -47];
D72=Kharaghaniarray8_matrix(A1,A5,A2,A6,A3,A7,A4,A8);
X4=foldover(D72);

X=[X1;X2;X3;X4];
D192_48=X
X=D192_48;
[avet,maxt,aveq,maxq,DR,JR,DE,JE,F_R,F_E]=RunCriteriaOurPaperEG2012(X);



%Twra kanoume thn kataskeuh me kronecker tou D192_48 twn EG2012

b=0;
A1=[b+15,-b-5,b+19];
A2=[b+17,-b-21,b+23];
A3=[b+1,b+3,-b-7];
A4=[b+9,b+11,b+13];
```

```
Do=GS_matrix(A1,A2,A3,A4);
So=Do./abs(Do);
C=[Do;-Do];
A=[So;So];

g=8;
H=hadamard(g);
D=H(:,2:5);
B=[1 3 5 7;  -3 1 7 -5; -5 -7 1 3;
-7 5 -3 1; -1 -3 -5 -7; 3 -1 -7 5;
5 7 -1 -3; 7 -5 3 -1;];
L192_48=kron(A,B)+ g*kron(C,D);
ok=IsOrthogonalLHD(L192_48);
[n,m]=size(L192_48);
if ok
  fprintf(1,'%s%d%s%d\n','orthogonal LHD of size ',n,'x',m);
elseif IsLHD(L192_48)
      fprintf(1,'%s%d%s%d\n','LHD but not orthogonal LHD of size ',n,'x',m);
else
    fprintf(1,'%s%d%s%d%s\n','Matrix of size ',n,'x',m,' is not a LHD');
end;

X=L192_48;
[avet,maxt,aveq,maxq,DR,JR,DE,JE,F_R,F_E]=RunCriteriaOurPaperEG2012(X);



%Twra kanoume thn kataskeuh me kronecker tou D912_48 twn LBST
```

Α΄.7 Πρόγραμμα για την κατασκευή Example 3

```
E= [1 3 5 7; -3 1 7 -5; -5 -7 1 3; -7 5 -3 1;]
X= foldover(E);

%[A B] mas dinei ton suntheto pinaka
%[A B]
% h [A; B; C] mas dinei ton
%[A]
%[B]
%[C]
```

```
% h [A B; C D] mas dinei ton
%[A B]
%[C D]

X1=addonecolumn(X);
% opou to B(:) simainei prosthese to nx1 dianusma-sthlh  B ston pinaka Q
% kai etsi kataskeuasame ton  nx(m+1) pinaka X1.
Xquad= quad(X);
% einai o pinakas me stoixeia ta tetragwna twn stoixeiwn tou X.
Aquad=round14(inv(X1'*X1)* X1'*Xquad)

% oi allilepidraseis tou pinaka  Q
Xint=int_matrix(X);

Aint=round14(inv(X1'*X1)* X1'*Xint)
T=Aint;
Q=Aquad;
avet=mean(abs(T(:)))
maxt=max(abs(T(:)))
aveq=mean(abs(Q(:)))
maxq=max(abs(Q(:)))



[DR,JR]=Rec_D_J(X)
[DE,JE]=Euclid_D_J(X)
%D=(D1,D2,...,Dl) einai h apostasi stin opoia ta stoixeia tou pinaka Q
% einai oi diaforetikes times metaksu ton eswterikwn simeiwn apostasis
%taksinomontas ta apo tin mikroteri timi stin megaluteri.
%to JR kai JE mas deixnoun poses fores emfanizontai ta antistoixa DR kai
%DE.
F_R= (sum(JR.*DR.^(-100)))^(1/100)

F_E= (sum(JE.*DE.^(-100)))^(1/100)
% me F_(p) sumbolizoume thn oikogeneia sunarthsewn me anaprosarmogh ths
% timhs p, opou p=thetiko akeraio. Gia arketa megalo p o sxediasmos pou
%elaxistopoiei thn  F_(p) tha einai kai o zitoumenos maxmin sxediasmos.
```

Α΄.8 Πρόγραμμα για την κατασκευή Example 4

```
E= [1 3 7 5 11 9 15 13; -3 1 5 -7 9 -11 13 -15; -7 -5 1 3 -15 13 11 -9;
    -5 7 -3 1 13 15 -9 -11; -11 -9 15 -13 1 3 -7 5; -9 11 -13 -15 -3 1 5 7;
    -15 -13 -11 9 7 -5 1 3; -13 15 9 11 -5 -7 -3 1;]
X= foldover(E);

%[A B] mas dinei ton suntheto pinaka
%[A B]
% h [A; B; C] mas dinei ton
%[A]
%[B]
%[C]
% h [A B; C D] mas dinei ton
%[A B]
%[C D]

X1=addonecolumn(X);
% opou to B(:) simainei prosthese to nx1 dianusma-sthlh  B ston pinaka Q
% kai etsi kataskeuasame ton  nx(m+1) pinaka X1.
Xquad= quad(X);
% einai o pinakas me stoixeia ta tetragwna twn stoixeiwn tou X.
Aquad=round14(inv(X1'*X1)* X1'*Xquad)


% oi allilepidraseis tou pinaka  Q
Xint=int_matrix(X);

Aint=round14(inv(X1'*X1)* X1'*Xint)
T=Aint;
Q=Aquad;
avet=mean(abs(T(:)))
maxt=max(abs(T(:)))
aveq=mean(abs(Q(:)))
maxq=max(abs(Q(:)))



[DR,JR]=Rec_D_J(X)
[DE,JE]=Euclid_D_J(X)

%D=(D1,D2,...,Dl) einai h apostasi stin opoia ta stoixeia tou pinaka Q
% einai oi diaforetikes times metaksu ton eswterikwn simeiwn apostasis
%taksinomontas ta apo tin mikroteri timi stin megaluteri.
%to JR kai JE mas deixnoun poses fores emfanizontai ta antistoixa DR kai
%DE.
```

```
F_R= (sum(JR.*DR.^(-100)))^(1/100)

F_E= (sum(JE.*DE.^(-100)))^(1/100)
% me F_(p) sumbolizoume thn oikogeneia sunarthsewn me anaprosarmogh ths
% timhs p, opou p=thetiko akeraio. Gia arketa megalo p o sxediasmos pou
%elaxistopoiei thn  F_(p) tha einai kai o zitoumenos maxmin sxediasmos.
```

Α΄.9 Πρόγραμμα για την κατασκευή Example 5

```
E= [1 2 3 4; -2 1 -4 3; -3 4 1 -2; -4 -3 2 1;]
X= foldoverzero(E);

%[A B] mas dinei ton suntheto pinaka
%[A B]
% h [A; B; C] mas dinei ton
%[A]
%[B]
%[C]
% h [A B; C D]  mas dinei ton
%[A B]
%[C D]

X1=addonecolumn(X);
% opou to B(:) simainei prosthese to nx1 dianusma-sthlh  B ston pinaka Q
% kai etsi kataskeuasame ton  nx(m+1) pinaka X1.
Xquad= quad(X);
% einai o pinakas me stoixeia ta tetragwna twn stoixeiwn tou X.
Aquad=round14(inv(X1'*X1)* X1'*Xquad)


% oi allilepidraseis tou pinaka  Q
Xint=int_matrix(X);

Aint=round14(inv(X1'*X1)* X1'*Xint)
T=Aint;
Q=Aquad;
avet=mean(abs(T(:)))
maxt=max(abs(T(:)))
aveq=mean(abs(Q(:)))
```

```
maxq=max(abs(Q(:)))



[DR,JR]=Rec_D_J(X)
[DE,JE]=Euclid_D_J(X)
%D=(D1,D2,...,Dl) einai h apostasi stin opoia ta stoixeia tou pinaka Q
% einai oi diaforetikes times metaksu ton eswterikwn simeiwn apostasis
%taksinomontas ta apo tin mikroteri timi stin megaluteri.
%to JR kai JE mas deixnoun poses fores emfanizontai ta antistoixa DR kai
%DE.
F_R= (sum(JR.*DR.^(-100)))^(1/100)

F_E= (sum(JE.*DE.^(-100)))^(1/100)
% me F_(p) sumbolizoume thn oikogeneia sunarthsewn me anaprosarmogh ths
% timhs p, opou p=thetiko akeraio. Gia arketa megalo p o sxediasmos pou
%elaxistopoiei thn  F_(p) tha einai kai o zitoumenos maxmin sxediasmos.
```

Α΄.10 Πρόγραμμα για την κατασκευή NOHLD

```
b=2;
A1=[b+15,-b-5,b+19];
A2=[b+17,-b-21,b+23];
A3=[b+1,b+3,-b-7];
A4=[b+9,b+11,b+13];
Tk=GS_matrix(A1,A2,A3,A4);
So=Tk./abs(Tk);
C=[Tk; -Tk];
A=[So;So];


g=4;
H=hadamard(g);
D=H(:,2:3);
B=[1,-3;3,1;-1,3;-3,-1];
L96_24=kron(A,B)+ g*kron(C,D);
ok=IsOrthogonalLHD(L96_24);
[n,m]=size(L96_24);
if ok
  fprintf(1,'%s%d%s%d\n','orthogonal LHD of size ',n,'x',m);
elseif IsLHD(L96_24)
```

```
      fprintf(1,'%s%d%s%d\n','LHD but not orthogonal LHD of size ',n,'x',m);
else
    fprintf(1,'%s%d%s%d%s\n','Matrix of size ',n,'x',m,' is not a LHD');
end;
X=L96_24;
[avet,maxt,aveq,maxq,DR,JR,DE,JE,F_R,F_E]=RunCriteriaOurPaperEG2012(X);


%Twra kanoume thn kataskeuh me kronecker tou D192_48 twn EG2012

b=2;
A1=[b+15,-b-5,b+19];
A2=[b+17,-b-21,b+23];
A3=[b+1,b+3,-b-7];
A4=[b+9,b+11,b+13];
Do=GS_matrix(A1,A2,A3,A4);
So=Tk./abs(Tk);
C=[Tk;-Tk];
A=[So;So];



g=8;
H=hadamard(g);
D=H(:,2:5);
B=[1 3 5 7;  -3 1 7 -5; -5 -7 1 3;
-7 5 -3 1; -1 -3 -5 -7; 3 -1 -7 5;
5 7 -1 -3; 7 -5 3 -1;];
L192_48=kron(A,B)+ g*kron(C,D);
ok=IsOrthogonalLHD(L192_48);
[n,m]=size(L192_48);
if ok
  fprintf(1,'%s%d%s%d\n','orthogonal LHD of size ',n,'x',m);
elseif IsLHD(L192_48)
      fprintf(1,'%s%d%s%d\n','LHD but not orthogonal LHD of size ',n,'x',m);
else
    fprintf(1,'%s%d%s%d%s\n','Matrix of size ',n,'x',m,' is not a LHD');
end;

X=L192_48;
[avet,maxt,aveq,maxq,DR,JR,DE,JE,F_R,F_E]=RunCriteriaOurPaperEG2012(X);
```

Ευρετήριο

Defining Relation, 57
Effectivity , 34
Efficiency, 34
Multiple Linear Regression, 28
Orthogonal Array, 57
Response , 39
Robustness , 34
Uniformity , 56

Minimum Aberration , 56

Αλληλεπίδραση, 39, 40
Ανάλυση Διασποράς, 42
Ανθεκτικότητα, 34
Αντίθεση, 41
Αποδοτικότητα, 34
Αποτελεσματικότητα, 34

Γινόμενο Kronecker , 20, 21
Γραμμικό Μοντέλο, 24, 28
Γραμμικό μοντέλο, 46

Ιδιότητες Πίνακων Hadamard , 19
Ισοδύναμοι Πίνακες, 17

Κύρια Επίδραση, 40
Κανονικός Πίνακας, 18
Κανονικοποιημένος Πίνακας, 17
Κλασματικός Παραγοντικός Σχεδιασμός, 56
Κλασματικοί Παραγοντικοί Σχεδιασμοί με δύο επίπεδα, 56

Μέση Επίδραση, 40
Μη-Γραμμική Πολλαπλή Παλινδρόμηση, 28

Ομοιομορφία, 55
Ορίζουσα Σχέση, 57
Ορθογώνιες Στήλες, 15
Ορθογώνιος Σχηματισμός, 57

Πίνακας ANOVA , 50
Πίνακας Hadamard, 15
Παραγοντικός Σχεδιασμός, 38
Πολλαπλή Γραμμική Παλινδρόμηση, 28

Χαμηλή Στάθμη, 40

Σχεδιασμός ή Πείραμα Κρησαρίσματος, 33

Υψηλή Στάθμη, 40