Π Α Ν Ε Π Ι Σ Τ Η Μ Ι Ο Π Ε Ι Ρ Α Ι Ω Σ

Σχολή Χρηματοοικονομικής και Στατιστικής

Τμήμα Στατιστικής και Ασφαλιστικής Επιστήμης

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΣΤΗΝ **ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ**

ΜΕΘΟΔΟΙ ΚΑΤΑΣΚΕΥΗΣ ΒΕΛΤΙΣΤΩΝ ΥΠΕΡΚΟΡΕΣΜΕΝΩΝ ΣΧΕΔΙΑΣΜΩΝ ΔΥΟ ΕΠΙΠΕΔΩΝ

Νικόλαος Δημήτριος Δ. Φωτοδήμος

Διπλωματική Εργασία

που υποβλήθηκε στο Τμήμα Στατιστικής και Ασφαλιστικής Επιστήμης του Πανεπιστημίου Πειραιώς ως μέρος των απαιτήσεων για την απόκτηση του Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης στην *Εφαρμοσμένη Στατιστική*

Πειραιάς
Ιούλιος 2018

Η παρούσα Διπλωματική Εργασία εγκρίθηκε ομόφωνα από την Τριμελή Εξεταστική Επιτροπή που ορίσθηκε από τη ΓΣΕΣ του Τμήματος Στατιστικής και Ασφαλιστικής Επιστήμης του Πανεπιστημίου Πειραιώς στην υπ' αριθμ. …….. συνεδρίασή του σύμφωνα με τον Εσωτερικό Κανονισμό Λειτουργίας του Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών στην Εφαρμοσμένη Στατιστική

Τα μέλη της Επιτροπής ήταν:
- Επίκουρος Καθηγητής Ευαγγελάρας Χαράλαμπος (Επιβλέπων)
- Καθηγητής Κούτρας Μάρκος
- Καθηγητής Τσίμπος Κλέων

Η έγκριση της Διπλωματικής Εργασίας από το Τμήμα Στατιστικής και Ασφαλιστικής Επιστήμης του Πανεπιστημίου Πειραιώς δεν υποδηλώνει αποδοχή των γνωμών του συγγραφέα.

UNIVERSITY OF PIRAEUS

School of Finance and Statistics

Department of Statistics and Insurance Science

POSTGRADUATE PROGRAM IN

APPLIED STATISTICS

METHODS FOR CONSTRUCTING OPTIMAL TWO-LEVEL SUPERSATURATED DESIGNS

By

Nikolaos Dimitrios D. Fotodimos

MSc Dissertation

submitted to the Department of Statistics and Insurance Science of the University of Piraeus in partial fulfilment of the requirements for the degree of Master of Science in Applied Statistics

Piraeus, Greece

July 2018

Έχω διαβάσει και κατανοήσει τους κανόνες του ΠΜΣ που περιέχονται στον Οδηγό Συγγραφής ΔΕ και ιδιαίτερα όσα συνιστούν λογοκλοπή. Δηλώνω ότι η παρούσα διπλωματική εργασία αποτελεί προϊόν αποκλειστικά δικής μου προσπάθειας, υπό την καθοδήγηση του επιβλέποντος καθηγητή, ενώ για όλες τις πηγές που χρησιμοποιήθηκαν περιλαμβάνονται οι αντίστοιχες αναφορές.

Ευχαριστίες

Κατά τη διάρκεια των μεταπτυχιακών μου σπουδών, είχα τη στήριξη αρκετών ανθρώπων. Θα ήθελα να ευχαριστήσω αρχικά, τον Επιβλέποντα Επίκουρο Καθηγητή κ. Χαράλαμπο Ευαγγελάρα, ο οποίος μέσω του μαθήματος «Πειραματικοί Σχεδιασμοί» το οποίο διδάσκει, με ενέπνευσε να εμβαθύνω στο συγκεκριμένο επιστημονικό πεδίο. Τον ευχαριστώ επίσης για τη συνεχή καθοδήγησή του καθ’όλη τη διάρκεια της συγγραφής της παρούσας Διπλωματικής Εργασίας. Θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω και τα άλλα 2 μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής (και Συμβουλευτικής) Επιτροπής, τον κ. Μάρκο Κούτρα και τον κ. Κλέωνα Τσίμπο καθώς και τους υπόλοιπους διδάσκοντες του Μεταπτυχιακού Προγράμματος Σπουδών, από τους οποίους είχα τη χαρά και την τιμή να κερδίσω γνώσεις και σοφία, τόσο κατά τη διάρκεια των Προπτυχιακών μου σπουδών στο Τμήμα Στατιστικής και Ασφαλιστικής Επιστήμης, όσο και κατά τη διάρκεια των Μεταπτυχιακών μου σπουδών.

Θερμές ευχαριστίες θα ήθελα επίσης να εκφράσω στους γονείς μου, για την αμέριστη υποστήριξη που μου παρέχουν καθ’όλη τη διάρκεια της ζωής μου.

Περίληψη

Οι πειραματικοί σχεδιασμοί είναι σχεδιασμοί οι οποίοι μας βοηθούν να μελετήσουμε την επίδραση ή τις επιδράσεις που ασκούν κάποιοι ελεγχόμενοι παράγοντες στις μεταβλητές που μας ενδιαφέρουν. Υπάρχουν πολλές πρακτικές εφαρμογές, όπως για παράδειγμα τα βιομηχανικά πειράματα, στα οποία η ελαχιστοποίηση του κόστους είναι μείζονος σημασίας. Όμως, όσο περισσότερες επιδράσεις θέλουμε να μελετήσουμε, τόσο αυξάνεται το κόστος του πειράματος. Για αυτό τον λόγο δημιουργήθηκε η ανάγκη κατασκευής «οικονομικότερων» πειραμάτων, όπου θα μπορούμε να διερευνήσουμε πολλούς παράγοντες, με χρήση ενός σχετικά μικρού αριθμού δοκιμών.

Έτσι, η αναζήτηση αυτή οδήγησε στη χρήση των υπερκορεσμένων σχεδιασμών οι οποίοι δίνουν τη δυνατότητα μελέτης μεγάλου αριθμού παραγόντων, χρησιμοποιώντας σχετικά λίγες πειραματικές εκτελέσεις. Με τον τρόπο αυτό επιτυγχάνεται χαμηλότερο κόστος πειραματισμού. Στην παρούσα μελέτη, θα παρουσιαστούν κάποιες μέθοδοι κατασκευής βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών και κάποια κριτήρια βελτιστοποίησης, όπως επίσης και παραδείγματα κατασκευής βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών.

Abstract

Experimental designs help us study the effect or the effects of some controlled factors on the response variables that are of interest. There are many applications, such as industrial experiments, where cost minimization is very important. However, as the number of the effects of interest increases, the cost of the experiment rises as well. This fact led to the construction of more economic experiments, with which we will be able to investigate a large number of variables, by performing a relatively smaller set of runs.

The aforementioned search led to the use of supersaturated designs that offer the flexibility of studying many variables, using only few experimental runs. In this way, experimental cost is reduced. In this study, methods for constructing optimal supersaturated designs and some optimization criteria will be presented, along with some examples of optimal supersaturated designs.

Περιεχόμενα

Κατάλογος Πινάκων		xv
Εισαγωγή		1
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1		2
1.1	Ορισμοί και έννοιες	2
1.1.1	Γενικά για πειραματικούς σχεδιασμούς	2
1.1.2	Παραγοντικοί σχεδιασμοί	3
1.1.3	Κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί	4
1.1.4	Πίνακες Hadamard	7
1.1.5	Πίνακες Paley	9
1.2	Υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί	10
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2		12
2.1	Το κριτήριο του $E(s^2)$ (Booth και Cox, 1962)	12
2.1.1	Κατώτερα όρια του κριτηρίου $E(s^2)$ για ισορροπημένους σχεδιασμούς	13
2.1.2	Κατώτερα όρια του κριτηρίου $E(s^2)$ για μη ισορροπημένους σχεδιασμούς	18
2.2	Συσχέτιση μεταξύ των στηλών (Lin 1995 , Li και Wu 1997)	20
2.3	Μη ορθογώνια ζευγάρια (Li και Wu, 1997)	20
2.4	Άλλα κριτήρια	20
2.4.1	Ελάχιστη απόκλιση ροπής (*Minimum moment aberration*) – (Xu, 2003)	21
2.4.2	Συσχέτιση δύο στηλών	22
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3		24
3.1	Εισαγωγή	24
3.2	Μέθοδος κατασκευής Lin (1993a)	25
3.3	Μέθοδος κατασκευής Wu (1993)	26
3.4	Μέθοδοι κατασκευής μετά το 1993	28
3.5	Αναζήτηση μέσω ηλεκτρονικού υπολογιστή για βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς	30

3.5.1	Ισορροπημένοι υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί	30
3.5.2	Μη ισορροπημένοι υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί	32
3.6	Σύγκριση με άλλους σχεδιασμούς	32
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4		34
4.1	Μέθοδος half Hadamard, Lin (1993)	34
4.1.1	12 εκτελέσεων πίνακας Hadamard	34
4.1.2	20 εκτελέσεων πίνακας Hadamard	38
4.2	Μέθοδος Wu (1993)	43
4.2.1	12 εκτελέσεων πίνακας Hadamard, m=66	43
4.2.2	12 εκτελέσεων πίνακας Hadamard, m=55	45
4.2.3	12 εκτελέσεων πίνακας Hadamard, m=21	47
Βιβλιογραφία		52

Κατάλογος Πινάκων

Πίνακας 1.1	Κατασκευή κλασματικού παραγοντικού σχεδιασμού τριών παραγόντων. Στήλη επιλογής «ABC», πρόσημο επιλογής «-».	5
Πίνακας 1.2	Επιδράσεις που συγχέονται	6
Πίνακας 1.3	Plackett & Burman σχεδιασμός με κυκλική παραγωγή, 12 εκτελέσεων	8
Πίνακας 1.4	Plackett & Burman σχεδιασμός με κυκλική παραγωγή, 12 εκτελέσεων	8
Πίνακας 2.1	Κατώτερα όρια στο $E(s^2)$ για κάποιους επιλεγμένους ισορροπημένους SSD(n, m), n ζυγός αριθμός	18
Πίνακας 3.1	Πίνακας Hadamard τάξης $t = 12$ και ο παραγόμενος υπερκορεσμένος σχεδιασμός	26
Πίνακας 3.2	Τιμές του $E(s^2)$ κάποιων σχεδιασμών των Booth και Cox (1962), του Lin (1992) και του Wu (1992).	33

Εισαγωγή

Η παρούσα Διπλωματική Εργασία αποτελεί μία ανασκόπηση της περιοχής των υπερκορεσμένων σχεδιασμών δύο επιπέδων. Συγκεκριμένα παρουσιάζονται οι κυριότερες μέθοδοι κατασκευής βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών δύο επιπέδων, καθώς και τα κριτήρια αξιολόγησής των. Η δομή της εργασίας αποτελείται από 4 κεφάλαια.

Στο Κεφάλαιο 1 πραγματοποιείται μία εισαγωγή, η οποία αφορά γενικά στους πειραματικούς σχεδιασμούς. Επεξηγούνται κατηγορίες των πειραματικών σχεδιασμών, όπως είναι οι παραγοντικοί σχεδιασμοί και οι κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί, από τους οποίους προέκυψαν οι υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί. Παρουσιάζονται επίσης οι πίνακες Hadamard, από τους οποίους προκύπτουν οι σχεδιασμοί των Plackett & Burman (1946) και οι σχεδιασμοί του Paley (1933).

Στο Κεφάλαιο 2 πραγματοποιείται μία ανασκόπηση των κυριότερων κριτηρίων αξιολόγησης υπερκορεσμένων σχεδιασμών. Το κριτήριο στο οποίο δίνεται η μεγαλύτερη βάση, είναι το κριτήριο του $E(s^2)$ των Booth και Cox (1962). Για το συγκεκριμένο κριτήριο, θα παρουσιαστούν λεπτομερώς τα σημαντικότερα κατώτερα όρια για τους ισορροπημένους σχεδιασμούς, οι οποίοι μας ενδιαφέρουν περισσότερο στην παρούσα εργασία.

Στο Κεφάλαιο 3, το οποίο αποτελεί και την «καρδιά» της συγκεκριμένης εργασίας, πραγματοποιείται ανασκόπηση των κυριότερων μεθόδων κατασκευής βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών δύο επιπέδων. Θα δούμε ότι η έρευνα στο συγκεκριμένο πεδίο είχε ουσιαστικά παγώσει για 30 χρόνια, μέχρι να την ξαναφέρουν στο προσκήνιο, αρχικά ο Lin (1993a) και στη συνέχεια ο Wu (1993). Επίσης παρατηρούμε ότι με την εξέλιξη της τεχνολογίας και την ανάπτυξη των ηλεκτρονικών υπολογιστών, στραφήκαμε από τις θεωρητικές κατασκευαστικές διαδικασίες σε αλγορίθμους αναζήτησης μέσω ηλεκτρονικών υπολογιστών.

Στο Κεφάλαιο 4, το οποίο αποτελεί το τελευταίο κεφάλαιο της παρούσας μελέτης, δίνονται παραδείγματα κατασκευής βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών, χρησιμοποιώντας αρχικά τη μέθοδο του Lin (1993a), ο οποίος από έναν πίνακα Hadamard δημιούργησε έναν σχεδιασμό half Hadamard και στη συνέχεια τη μέθοδο του Wu (1993), ο οποίος χρησιμοποίησε στήλες αλληλεπίδρασης από τους πίνακες Hadamard. Θα δούμε ότι οι συγκεκριμένες μέθοδοι, οδηγούν πάντα σε $E(s^2)$ βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

1.1 Ορισμοί και έννοιες

1.1.1 Γενικά για πειραματικούς σχεδιασμούς

Σκοπός των πειραματικών σχεδιασμών είναι η συστηματική μελέτη των επιδράσεων που ασκούν ελεγχόμενοι παράγοντες σε μία μεταβλητή που μας ενδιαφέρει. Συνήθως μας ενδιαφέρει να μελετήσουμε κύριες επιδράσεις (πρώτου βαθμού) και αλληλεπιδράσεις δεύτερου βαθμού. Όσες περισσότερες επιδράσεις θέλουμε να μελετήσουμε, τόσο αυξάνεται το κόστος του πειράματος.

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε έναν παράγοντα που μελετάται σε m επίπεδα (ή στάθμες). Στην περίπτωση αυτή, οι εκτελέσεις ταυτίζονται με τα επίπεδα του παράγοντα. Κάνουμε τότε μία σειρά από n παρατηρήσεις, από τις οποίες $n_i,\ i=1,2,...,m$ σε κάθε επίπεδο ή στάθμη του παράγοντα. Όταν σε όλες τις εκτελέσεις έχουμε τον ίδιο αριθμό παρατηρήσεων (έχουμε δηλαδή χρησιμοποιήσει τον ίδιο αριθμό πειραματικών μονάδων), ο σχεδιασμός ονομάζεται ισορροπημένος.

Συμβολίζουμε με Y_{ij} την τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής στην $j-$οστή παρατήρηση του $i-$οστού επιπέδου. Είναι φανερό ότι η εξαρτημένη μεταβλητή Y μπορεί να επηρεάζεται ή όχι από τις διαφορετικές στάθμες του παράγοντα. Ένας τρόπος να το ελέγξουμε αυτό είναι να προσαρμόσουμε στα δεδομένα μας το μοντέλο:

$$Y_{ij} = \mu_i + \varepsilon_{ij}$$

όπου μ_i είναι ο μέσος του i επιπέδου και ε_{ij} είναι το αποκαλούμενο σφάλμα μέτρησης και εκφράζει τις επιδράσεις που ασκούνται στην παρατήρηση Y_{ij} και δεν είναι δυνατό να αποδοθούν στον παράγοντα που χρησιμοποιήθηκε. Ύστερα, ελέγχουμε την υπόθεση:

$$H_0 : \mu_1 = \mu_2 = ... = \mu_m$$

Υποθέτουμε γενικά ότι τα m επίπεδα του παράγοντα Α αποτελούν m ομάδες (υποπληθυσμούς) και έστω ότι η μέση τιμή για τον ενιαίο πληθυσμό που αποτελείται από όλους τους m υποπληθυσμούς παριστάνεται με μ . Όπως κάθε τιμή Y_{ij} σε συγκεκριμένη ομάδα (υποπληθυσμό) i διαφέρει κατά κάποια ποσότητα από τον μέσο της ομάδας (επίπεδο) μ_i, έτσι και κάθε μέσος της ομάδας (μ_i) διαφέρει από τον ολικό πληθυσμιακό μέσο μ κατά κάποια ποσότητα a_i . Αυτή η διαφορά καλείται επίδραση και ασκείται στο χαρακτηριστικό που μελετάμε εξαιτίας του ότι ανήκει στην ομάδα i . Η επίδραση του i επιπέδου του παράγοντα συμβολίζεται με $a_i = \mu_i - \mu$, από όπου προκύπτει ότι $\mu_i = a_i + \mu$. Έτσι, μία εναλλακτική μορφή του μοντέλου, είναι η:

$$Y_{ij} = \mu + a_i + \varepsilon_{ij}$$

όπου μ είναι σταθερά, a_i είναι η επίδραση του επιπέδου i, $i = 1, 2, ..., m$ του παράγοντα A και ε_{ij} είναι το σφάλμα της j παρατήρησης ($j = 1, 2, ..., n_i$) στο i επίπεδο ($i = 1, 2, ..., m$). Αν θέλουμε να ελέγξουμε αν οι m διαφορετικές ομάδες (υποπληθυσμοί) είναι πράγματι διαφορετικές, ελέγχουμε την υπόθεση:

$$H_0 : a_1 = a_2 = ... = a_m = 0$$

1.1.2 Παραγοντικοί σχεδιασμοί

Μία κατηγορία των πειραματικών σχεδιασμών είναι οι παραγοντικοί σχεδιασμοί. Με τον όρο πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό (full factorial design) εννοούμε τον σχεδιασμό όπου σε κάθε πλήρη δοκιμή ή επανάληψη του πειράματος, εξετάζονται όλοι οι δυνατοί συνδυασμοί των επιπέδων των παραγόντων. Οι παραγοντικοί σχεδιασμοί χρησιμοποιούνται ευρύτατα σε πειράματα που περιλαμβάνουν αρκετούς παράγοντες, όπου είναι αναγκαία η μελέτη της κοινής επίδρασης των παραγόντων στην απόκριση. Μία σημαντική κατηγορία τέτοιων σχεδιασμών είναι όταν έχουμε m παράγοντες και εξετάζουμε δύο μόνο επίπεδα για τον καθένα. Τα επίπεδα μπορεί να είναι ποσοτικά, όπως είναι δύο τιμές της θερμοκρασίας, της πίεσης ή του χρόνου, ή μπορεί να είναι ποιοτικά, όπως είναι δύο μηχανές ή δύο χειριστές μηχανών. Μία πλήρης επανάληψη ενός τέτοιου σχεδιασμού απαιτεί $2 \times 2 ... \times 2 = 2^m$ παρατηρήσεις και λέγεται 2^m πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός. Οι 2^m πλήρεις παραγοντικοί σχεδιασμοί είναι πολύ αποδοτικοί, γιατί επιτρέπουν τη διερεύνηση πολλών παραγόντων με χρήση ενός σχετικά μικρού αριθμού δοκιμών. Επίσης, λόγω της ύπαρξης μόνο δύο επιπέδων, οι συμβολισμοί και οι υπολογισμοί είναι απλούστεροι σε σχέση με εκείνους των παραγοντικών πειραμάτων. Ο 2^m πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός είναι ιδιαίτερα χρήσιμος στα αρχικά στάδια της πειραματικής εργασίας όταν υπάρχουν πολλοί παράγοντες που πρέπει να εξεταστούν, από τη στιγμή που είναι αυτός που μας εφοδιάζει με το μικρότερο αριθμό εκτελέσεων με τις οποίες οι m παράγοντες πρέπει να μελετηθούν σε έναν πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό. Καθώς μεγαλώνει ο αριθμός των παραγόντων σε έναν 2^m πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό, ο αριθμός των εκτελέσεων που απαιτούνται για μία πλήρη επανάληψη του σχεδιασμού, αυξάνει πάρα πολύ γρήγορα. Για παράδειγμα, μία πλήρης επανάληψη του 2^6 σχεδιασμού απαιτεί 64 εκτελέσεις. Σε αυτόν τον σχεδιασμό μόνο 6 από τους 63 βαθμούς ελευθερίας αντιστοιχούν στις κύριες επιδράσεις και μόνο 15 βαθμοί ελευθερίας αντιστοιχούν στις αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων. Οι υπόλοιποι 42 βαθμοί ελευθερίας αντιστοιχούν στις αλληλεπιδράσεις τριών και περισσότερων παραγόντων.

1.1.3 Κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί

Αν μπορούμε να υποθέσουμε ότι ορισμένες υψηλής τάξης αλληλεπιδράσεις είναι αμελητέες, τότε μπορούμε να πάρουμε πληροφορία για τις κύριες επιδράσεις και τις αλληλεπιδράσεις χαμηλής τάξης εκτελώντας μόνο ένα υποσύνολο των εκτελέσεων (κλάσμα) του πλήρους παραγοντικού πειράματος. Ένας τέτοιος σχεδιασμός ονομάζεται κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός (fractional factorial design). Το ένα δεύτερο (1/2) κλάσμα ενός 2^m παραγοντικού σχεδιασμού συμβολίζεται με 2^{m-1}. Αυτό σημαίνει ότι στον 2^{m-1} σχεδιασμό, πραγματοποιείται μελέτη των μισών εκτελέσεων. Για παράδειγμα, αν έχουμε ένα πείραμα με τρεις παράγοντες, ο καθένας εκ των οποίων σε δύο επίπεδα και οι πειραματικές συνθήκες δεν επιτρέπουν τη μελέτη και των $2^3 = 8$ εκτελέσεων, τότε η μελέτη θα γίνει σε τέσσερις από τις εκτελέσεις, δηλαδή στις μισές. Επειδή ο σχεδιασμός θα περιέχει $2^{3-1} = 4$ εκτελέσεις, καλείται ένα ½ κλάσμα του 2^3 σχεδιασμού ή ένας 2^{3-1} κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός. Στον Πίνακα 1.1 παρουσιάζεται η κατασκευή ενός κλασματικού 2^{3-1} πειραματικού σχεδιασμού. Από τον πίνακα αλγεβρικών προσήμων του πλήρους παραγοντικού πειράματος με 3 παράγοντες των δύο επιπέδων ο καθένας, επιλέγουμε τη στήλη «ABC» και κρατάμε τις γραμμές που η συγκεκριμένη στήλη επιλογής έχει το ίδιο επίπεδο. Ο 2^{3-1} σχεδιασμός σχηματίστηκε επιλέγοντας μόνο εκείνες τις εκτελέσεις που έχουν αρνητικό πρόσημο στη στήλη «ABC». Επομένως, μπορούμε να πούμε ότι η στήλη «ABC» «γεννά» τον σχεδιασμό αυτό και για αυτό το λόγο ονομάζεται γεννήτορας (generator) αυτού του συγκεκριμένου κλάσματος. Στην παρούσα μελέτη, θα αναφερόμαστε σε έναν γεννήτορα σαν μία λέξη. Επίσης, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι η στήλη της λέξης στον πίνακα προσήμων του κλασματικού σχεδιασμού θα είναι είτε ίση με τη στήλη I είτε ίση με $-I$. Τη σχέση αυτή (στο συγκεκριμένο παράδειγμα $I = -ABC$) την ονομάζουμε ορίζουσα σχέση (defining relation) για το σχεδιασμό μας. Γενικά, ορίζουσα σχέση ενός κλασματικού παραγοντικού σχεδιασμού καλείται το σύνολο όλων των στηλών του πίνακα αλγεβρικών προσήμων του σχεδιασμού που αντιστοιχούν σε επιδράσεις και ταυτίζονται με τη μοναδιαία στήλη I, η οποία περιέχει μόνο «+1» ή μόνο «-1».

Ένα $1/2$ κλάσμα του 2^m σχεδιασμού μπορεί να κατασκευαστεί γράφοντας έναν βασικό σχεδιασμό που αποτελείται από τις εκτελέσεις ενός πλήρους 2^{m-1} παραγοντικού σχεδιασμού με $m-1$ παράγοντες και στη συνέχεια προσθέτοντας τον $m-$ οστό παράγοντα, αναγνωρίζοντας τα επίπεδά του με βάση το γεννήτορα που θέλουμε να χρησιμοποιήσουμε (ή αντίστοιχα την ορίζουσα σχέση του). Το $1/4$ κλάσμα του 2^m παραγοντικού έχει 2 γεννήτορες και μπορεί να κατασκευαστεί δημιουργώντας έναν πλήρη 2^{m-2} βασικό σχεδιασμό και να προσθέσουμε 2 στήλες με βάση τους γεννήτορες που επιλέχθηκαν. Με την ίδια λογική, μπορούμε να κατασκευάσουμε και μικρότερα κλάσματα. Γενικά, το 2^{m-p} κλάσμα του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού, θα έχει p το πλήθος γεννήτορες και συνολικά 2^{p-1} ορίζουσες σχέσεις.

Πίνακας 1.1

Κατασκευή κλασματικού παραγοντικού σχεδιασμού τριών παραγόντων. Στήλη επιλογής «ABC», πρόσημο επιλογής «-».

Πίνακας αλγεβρικών προσήμων πλήρους παραγοντικού πειράματος με 3 παράγοντες των δύο επιπέδων ο καθένας

I	A	B	C	AB	AC	BC	ABC
+	−	−	−	+	+	+	−
+	+	−	−	−	−	+	+
+	−	+	−	−	+	−	+
+	+	+	−	+	−	−	−
+	−	−	+	+	−	−	+
+	+	−	+	−	+	−	−
+	−	+	+	−	−	+	−
+	+	+	+	+	+	+	+

Πίνακας αλγεβρικών προσήμων κλασματικού παραγοντικού σχεδιασμού με 3 παράγοντες των δύο επιπέδων ο καθένας

I	A	B	C	AB	AC	BC	ABC
+	−	−	−	+	+	+	−
+	+	+	−	+	−	−	−
+	+	−	+	−	+	−	−
+	−	+	+	−	−	+	−

Τελικός σχεδιασμός

A	B	C
−	−	−
+	+	−
+	−	+
−	+	+

Κάθε κλασματικός σχεδιασμός χαρακτηρίζεται από την ή τις ορίζουσες σχέσεις του. Γνωρίζοντας τις ορίζουσες σχέσεις, βρίσκουμε εύκολα τις επιδράσεις αυτές που συγχέονται. Για να τις προσδιορίσουμε, γράφουμε σε μία στήλη όλες τις παραγοντικές επιδράσεις και στη συνέχεια σε μία δεύτερη στήλη, γράφουμε το αποτέλεσμα του πολλαπλασιασμού με την ορίζουσα σχέση, λαμβάνοντας υπόψη ότι $FF = I$. Οι γραμμές του πίνακα που φτιάχνονται είναι η απάντηση. Τα παραπάνω παρουσιάζονται στον Πίνακα 1.2 που ακολουθεί.

Πίνακας 1.2

Επιδράσεις που συγχέονται

Επίδραση	$I=-ABC$	Επιδράσεις που συγχέονται
A	$A(-ABC)=-BC$	$A, \quad -BC$
B	$B(-ABC)=-AC$	$B, \quad -AC$
C	$C(-ABC)=-AB$	$C, \quad -AB$
AB	$AB(-ABC)=-C$	$AB, \quad -C$
AC	$AC(-ABC)=-B$	$AC, \quad -B$
BC	$BC(-ABC)=-A$	$BC, \quad -A$
ABC	$ABC(-ABC)=-I$	$ABC, \quad -I$

Οι επιδράσεις που συγχέονται σε έναν κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό, λέγονται συχνά ταυτόσημες επιδράσεις. Ο προσδιορισμός του συνόλου των ταυτόσημων επιδράσεων καλείται και προσδιορισμός της δομής των ταυτόσημων επιδράσεων. Ο 2^{3-1} σχεδιασμός με ορίζουσα σχέση την $I=-ABC$ που κατασκευάσαμε, ονομάζεται σχεδιασμός με διακριτική ικανότητα (resolution) III. Σε έναν τέτοιο σχεδιασμό, οι κύριες επιδράσεις είναι ταυτόσημες με αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων. Γενικά, ένας σχεδιασμός έχει διακριτική ικανότητα R, αν καμία επίδραση $m-$ παραγόντων δεν είναι ταυτόσημη με άλλη επίδραση που περιέχει λιγότερους από $R-m$ παράγοντες. Για τη διακριτική ικανότητα ενός σχεδιασμού συνήθως χρησιμοποιούμε τη Ρωμαϊκή αρίθμηση. Επομένως, το ½ κλάσμα του 2^3 σχεδιασμού με ορίζουσα σχέση την $I=-ABC$ (ή την $I=ABC$) είναι ένας 2_{III}^{3-1} σχεδιασμός. Η διακριτική ικανότητα ενός κλασματικού παραγοντικού σχεδιασμού με δύο επίπεδα, είναι ίση με το μήκος της μικρότερης λέξης που χρησιμοποιείται σε ορίζουσα σχέση σαν γεννήτορας. Συνήθως θέλουμε να χρησιμοποιήσουμε κλασματικούς σχεδιασμούς που έχουν την υψηλότερη δυνατή διακριτική ικανότητα. Αυτό συμβαίνει καθώς η υψηλή διακριτική ικανότητα βάζει λιγότερους περιορισμούς στις υποθέσεις που απαιτούνται όσον αφορά στο ποιες αλληλεπιδράσεις είναι αμελητέες, με σκοπό να πάρουμε μία μοναδική ερμηνεία για τα δεδομένα. Οποιοσδήποτε κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός με διακριτική ικανότητα R περιέχει πλήρεις παραγοντικούς σχεδιασμούς (ενδεχομένως επαναλαμβανόμενους παραγοντικούς σχεδιασμούς) σε οποιοδήποτε υποσύνολο $R-1$ παραγόντων. Αυτή είναι μία σημαντική και χρήσιμη παρατήρηση. Για παράδειγμα, αν ένας πειραματιστής εξετάζει αρκετούς παράγοντες που ενδεχομένως τον ενδιαφέρουν, αλλά πιστεύει ότι μόνο $R-1$ από αυτούς θα έχουν σημαντικές επιδράσεις, τότε ένας κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός με διακριτική ικανότητα R είναι η κατάλληλη επιλογή του σχεδιασμού. Αν η εικασία του πειραματιστή είναι σωστή, τότε ο κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός θα προβάλλεται σε έναν πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό στους $R-1$ σημαντικούς παράγοντες.

Οι κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί είναι μεταξύ των τύπων σχεδιασμών που χρησιμοποιούνται ευρύτερα σε πολλά πρακτικά προβλήματα και αποτελούν ιδιαίτερα χρήσιμες επιλογές όταν δεν έχουμε πόρους για να εκτελέσουμε πλήρη παραγοντικά πειράματα. Η κυριότερη χρήση των κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών είναι σε πειράματα κρησαρίσματος. Αυτά είναι πειράματα στα οποία εξετάζονται πολλοί παράγοντες και αναζητούμε αυτούς που έχουν μεγάλες επιδράσεις (συνήθως με περιορισμένο αριθμό πειραματικών δοκιμών). Οι παράγοντες που αναγνωρίζονται σαν σημαντικοί, ερευνώνται τότε περισσότερο λεπτομερειακά στα επόμενα πειράματα.

Ένας σχεδιασμός κρησαρίσματος, θεωρείται κορεσμένος, αν το πλήθος των εκτελέσεών του ταυτίζεται με το πλήθος των παραμέτρων που θέλουμε να μελετήσουμε. Στην περίπτωση κορεσμένων σχεδιασμών δύο επιπέδων, ο αριθμός των παραγόντων (m) ισούται με τον αριθμό των πειραματικών εκτελέσεων (n) μείον ένα (m=n-1). Πρωταρχικός σκοπός ενός κορεσμένου σχεδιασμού είναι να αναγνωρίσει τις σημαντικές κύριες επιδράσεις και όχι τις αλληλεπιδράσεις. Το μοντέλο που χρησιμοποιούμε για m παράγοντες είναι το $E(Y) = \mu + \sum_{i=1}^{m} a_i X_i$. Είναι αδύνατο να εκτιμήσουμε τη διακύμανση του σφάλματος χωρίς να κάνουμε επιπρόσθετες υποθέσεις, όπως την υπόθεση της σποραδικότητας των επιδράσεων (Box and Meyer, 1986).

Μία μεγάλη κατηγορία κορεσμένων σχεδιασμών κρησαρίσματος προκύπτει από τους Πίνακες Hadamard, όπως θα δούμε στην παρακάτω ενότητα.

1.1.4 Πίνακες Hadamard

Ένας πίνακας Hadamard, είναι ένας $n \times n$ ορθογώνιος πίνακας από 1 και -1, όπου το n πρέπει να είναι πολλαπλάσιο του 4. Χωρίς απώλεια της γενικότητας, μία από τις στήλες του, αποτελείται από 1. Καθώς η στήλη αυτή δε μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη μελέτη παραγόντων, για τους σκοπούς του σχεδιασμού αφαιρείται από τον πίνακα. Ονομάζουμε τον εναπομείναντα $n \times (n-1)$ πίνακα, σχεδιασμό Hadamard.

Οι Plackett & Burman (1946) έδωσαν σχεδιασμούς Hadamard για διάφορες τιμές του n και συζήτησαν τη χρήση τους σε παραγοντικά πειράματα. Θα αναφερόμαστε σε αυτούς τους σχεδιασμούς, ως PB σχεδιασμούς. Οι μικρότεροι από αυτούς για n=12, 20, 24 και 28 είναι οι πιο δημοφιλείς μεταξύ των πειραματιστών. Πολλοί από τους PB σχεδιασμούς μπορούν να επιτευχθούν με κυκλική παραγωγή της πρώτης γραμμής. Μπορούμε να πάρουμε σαν παράδειγμα, τον σχεδιασμό 12 εκτελέσεων, ο οποίος έχει τα εξής σημεία στην πρώτη γραμμή: $(++-+++---+-)$. Οι γραμμές 2 έως 11 αποκτώνται από την κυκλική μετατόπιση των σημείων στην πρώτη γραμμή. Δηλαδή το τελευταίο «-» της πρώτης γραμμής γίνεται το πρώτο σημείο της δεύτερης γραμμής και τα υπόλοιπα 10 εναπομείναντα σημεία της πρώτης γραμμής μετατοπίζονται στη δεύτερη γραμμή, με τη σειρά που ήδη έχουν και ούτω καθεξής. Όταν η παραπάνω διαδικασία συμπληρώσει και την $11^{η}$ γραμμή, προσθέτουμε τη γραμμή των «-1» ως τη $12^{η}$ και τελευταία γραμμή. Ο παραγόμενος σχεδιασμός φαίνεται στον παρακάτω πίνακα.

Πίνακας 1.3

Plackett & Burman σχεδιασμός με κυκλική παραγωγή, 12 εκτελέσεων

+	+	−	+	+	+	−	−	−	+	−
−	+	+	−	+	+	+	−	−	−	+
+	−	+	+	−	+	+	+	−	−	−
−	+	−	+	+	−	+	+	+	−	−
−	−	+	−	+	+	−	+	+	+	−
−	−	−	+	−	+	+	−	+	+	+
+	−	−	−	+	−	+	+	−	+	+
+	+	−	−	−	+	−	+	+	−	+
+	+	+	−	−	−	+	−	+	+	−
−	+	+	+	−	−	−	+	−	+	+
+	−	+	+	+	−	−	−	+	−	+
−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−

Ομοίως, ο 20 εκτελέσεων PB σχεδιασμός μπορεί να κατασκευαστεί με κυκλική παραγωγή από την πρώτη του γραμμή: (+−++−−−−+−+−++++−−+) . Ο παραγόμενος σχεδιασμός φαίνεται στον παρακάτω πίνακα.

Πίνακας 1.4

Plackett & Burman σχεδιασμός με κυκλική παραγωγή, 20 εκτελέσεων

+	−	+	+	−	−	−	−	+	−	+	−	+	+	+	+	−	−	+
+	+	−	+	+	−	−	−	−	+	−	+	−	+	+	+	+	−	−
−	+	+	−	+	+	−	−	−	−	+	−	+	−	+	+	+	+	−
−	−	+	+	−	+	+	−	−	−	−	+	−	+	−	+	+	+	+
+	−	−	+	+	−	+	+	−	−	−	−	+	−	+	−	+	+	+
+	+	−	−	+	+	−	+	+	−	−	−	−	+	−	+	−	+	+
+	+	+	−	−	+	+	−	+	+	−	−	−	−	+	−	+	−	+
+	+	+	+	−	−	+	+	−	+	+	−	−	−	−	+	−	+	−
−	+	+	+	+	−	−	+	+	−	+	+	−	−	−	−	+	−	+
+	−	+	+	+	+	−	−	+	+	−	+	+	−	−	−	−	+	−
−	+	−	+	+	+	+	−	−	+	+	−	+	+	−	−	−	−	+
+	−	+	−	+	+	+	+	−	−	+	+	−	+	+	−	−	−	−
−	+	−	+	−	+	+	+	+	−	−	+	+	−	+	+	−	−	−
−	−	+	−	+	−	+	+	+	+	−	−	+	+	−	+	+	−	−
−	−	−	+	−	+	−	+	+	+	+	−	−	+	+	−	+	+	−
−	−	−	−	+	−	+	−	+	+	+	+	−	−	+	+	−	+	+
+	−	−	−	−	+	−	+	−	+	+	+	+	−	−	+	+	−	+
+	+	−	−	−	−	+	−	+	−	+	+	+	+	−	−	+	+	−
−	+	+	−	−	−	−	+	−	+	−	+	+	+	+	−	−	+	+
−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−	−

1.1.5 Πίνακες Paley

Οι πίνακες Paley είναι μία οικογένεια των πινάκων Hadamard και έχουν κατασκευαστεί από τον Paley (1933). Υποθέτουμε ότι το n είναι πολλαπλάσιο του 4 έτσι ώστε το $n-1$ να είναι μία περιττή δύναμη πρώτου αριθμού. Έστω ότι το $q=n-1$ και έστω ότι τα $a_1=0,\ a_2,...,a_q$ υποδηλώνουν τα στοιχεία του $GF(q)$. Ορίζουμε μία συνάρτηση $\chi: GF(q)\rightarrow\{0,1,-1\}$ ως

$$\chi(\beta)=\begin{cases}1, \text{ αν το } \beta=y^2 \text{ για κάποιο } y\in GF(q),\\ 0, \text{ αν το } \beta=0,\\ -1, \text{ διαφορετικά}\end{cases}$$

Έστω A είναι ο $q\times q$ πίνακας $\left[a_{ij}\right]$, όπου $a_{ij}=\chi(\alpha_i-\alpha_j)$ για $i, j=1,2,...,q$ και

$$\mathrm{P}_n=\begin{bmatrix}1 & -1_q^T\\ 1_q & \mathrm{A}+\mathrm{I}_\mathrm{q}\end{bmatrix},$$

όπου ο I_q είναι ο πίνακας ταυτότητας τάξης q. Τότε, ο P_n είναι ένας πίνακας Hadamard. Για την απόδειξη μπορείτε να ανατρέξετε στο βιβλίο των Hedayat, Sloane και Stufken (1999). Ο πίνακας P_n είναι γνωστός ως πίνακας του Paley πρώτου είδους.

Έστω S είναι ένα σύνολο από s σύμβολα. Συνήθως ορίζουμε τα πιθανά σύμβολα με $0,1,...,s-1$. Τότε, μία $n\times m$ διάταξη A με στοιχεία από το σύνολο S, ορίζεται ως ορθογώνια διάταξη (Orthogonal Array -OA) με s επίπεδα, δύναμη $t\,(0\le t\le m)$ και δείκτη λ, αν κάθε $n\times t$ υποδιάταξη της διάταξης A περιέχει κάθε $t-$ακολουθία, η οποία βασίζεται στο σύνολο S, ακριβώς λ φορές, όσες και οι γραμμές. Οι ακέραιοι n,m,s,t,λ αναφέρονται ως οι παράμετροι της ορθογώνιας διάταξης. Ορίζεται μία τέτοια διάταξη ως $OA(n,m,s,t)$. Δεν είναι απαραίτητο να αναφερθεί και το λ, καθώς καθορίζεται από τις άλλες παραμέτρους.

Είναι γνωστό ότι ένας πίνακας Hadamard τάξης n είναι ισοδύναμος με μία ορθογώνια διάταξη $OA(n,2^{n-1},2)$. Χωρίς απώλεια της γενικότητας, μπορούμε να υποθέσουμε ότι όλες οι καταχωρήσεις της πρώτης στήλης ενός πίνακα Hadamard είναι ίσες με 1. Τότε, μία ορθογώνια διάταξη $OA(n,2^{n-1},2)$ μπορεί να αποκτηθεί διαγράφοντας την πρώτη στήλη. Θα ονομάσουμε την ορθογώνια διάταξη που αποκτήθηκε διαγράφοντας την πρώτη στήλη ενός P_n, σχεδιασμό του Paley, και θα το υποδηλώσουμε με D_n. Για $n=12$, ο σχεδιασμός D_{12} του Paley είναι ο 12 εκτελέσεων Plackett-Burman σχεδιασμός.

Θεώρημα 1.1

Έστω ότι ο D_n είναι ένας σχεδιασμός του Paley μεγέθους *n*, $n \geq 12$. Τότε, ο D_n δεν έχει ορίζουσες σχέσεις μήκους 3 ή 4.

Σημειώστε ότι ο σχεδιασμός του Paley μεγέθους 8 είναι ένας κανονικός σχεδιασμός ανάλυσης 3 και έτσι το παραπάνω θεώρημα δεν ισχύει για $n = 8$.

1.2 Υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί

Οι υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί επίσης, αποτελούν μια σημαντική κατηγορία των κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών. Αυτό συμβαίνει επειδή οι υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να ερευνήσουν έναν μεγάλο αριθμό παραγόντων, χρησιμοποιώντας μόνο μερικές πειραματικές εκτελέσεις και έτσι πραγματοποιούν ένα χαμηλότερο κόστος σε σχέση με τους παραδοσιακούς παραγοντικούς σχεδιασμούς. Θεωρούμε έναν κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό υπερκορεσμένο, αν ο αριθμός των πειραματικών εκτελέσεων (n) δεν επαρκεί για να εκτιμηθούν όλες οι κύριες επιδράσεις. Σε κάποια βιομηχανικά πειράματα, πρέπει να μελετηθεί μεγάλος αριθμός παραγόντων. Μόνο μερικοί από αυτούς τους παράγοντες αναμένεται να είναι σημαντικοί. Υπό την υπόθεση της σποραδικότητας των επιδράσεων (effect sparsity assumption – e.s.a.), η χρήση υπερκορεσμένων σχεδιασμών μπορεί να παρέχει την χαμηλού κόστους αναγνώριση των λίγων, πιθανώς σημαντικών παραγόντων.

Οι υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί μπορούν να διασπαστούν σε δύο μεγάλες κατηγορίες. Η πρώτη κατηγορία αποτελείται από υπερκορεσμένους σχεδιασμούς με μόνο δύο επίπεδα (two-level SSDs). Αυτοί οι σχεδιασμοί μελετήθηκαν για πολλά χρόνια και οι ιδιότητές τους προσέλκυσαν την περισσότερη προσοχή των ερευνητών. Η δεύτερη κατηγορία αποτελείται από υπερκορεσμένους σχεδιασμούς πολλών επιπέδων (multi-level SSDs). Οι παράγοντες των σχεδιασμών πολλών επιπέδων αποτελούνται από s επίπεδα (s>2). Οι υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί μικτών επιπέδων (mixed-level SSDs) είναι μία γενίκευση των υπερκορεσμένων σχεδιασμών πολλών επιπέδων. Οι υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί μικτών επιπέδων περιέχουν παράγοντες με διαφορετικό αριθμό επιπέδων στον ίδιο πίνακα του σχεδιασμού. Αρκετές μέθοδοι έχουν προταθεί στη βιβλιογραφία για την κατασκευή και την ανάλυση υπερκορεσμένων σχεδιασμών δύο, πολλών ή μικτών επιπέδων.

Στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας, θα πραγματοποιηθεί ανασκόπηση της βιβλιογραφίας σχετικά με τη μεθοδολογία κατασκευής βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών δύο επιπέδων και θα παρουσιαστούν τόσο τα κριτήρια αξιολόγησης, όσο και οι κυριότερες μέθοδοι κατασκευής τέτοιων σχεδιασμών, με χρονολογική σειρά.

Ο Satterthwaite (1959) ήταν ο πρώτος που πρότεινε τη χρήση των υπερκορεσμένων σχεδιασμών για πειράματα κρησαρίσματος υπό την υπόθεση της σποραδικότητας των επιδράσεων. Συγκεκριμένα, πρότεινε τη χρήση τυχαίων σχεδιασμών για πειράματα με περισσότερους παράγοντες από παρατηρήσεις. Πρότεινε την κατασκευή του πίνακα σχεδιασμού τυχαία, οδηγώντας στους επονομασμένους «τυχαία ισορροπημένους σχεδιασμούς», οι οποίοι θεωρούνται οι «γονείς» των υπερκορεσμένων σχεδιασμών όπως τους γνωρίζουμε σήμερα. Η έννοια των υπερκορεσμένων σχεδιασμών μελετήθηκε περαιτέρω από τον Watson (1961).

Όπως προαναφέρθηκε, ένας σχεδιασμός δύο επιπέδων θεωρείται υπερκορεσμένος, αν ο αριθμός των παραγόντων είναι μεγαλύτερος από τον αριθμό των πειραματικών εκτελέσεων μείον ένα (m>n-1). Σε αυτή την περίπτωση, χρησιμοποιούμε συνήθως τα σύμβολα 1 και -1 για να δηλώσουμε το υψηλό και το χαμηλό επίπεδο κάθε παράγοντα, αντίστοιχα. Οι σχεδιασμοί αυτοί προτάθηκαν πρώτα από τον Box (1959) και μελετήθηκαν στην εργασία των Booth και Cox (1962). Οι Booth και Cox (1962) ήταν μεταξύ των πρώτων ερευνητών στη μελέτη των υπερκορεσμένων σχεδιασμών με συστηματικό τρόπο. Συγκεκριμένα, χρησιμοποίησαν έναν απλό αλγόριθμο και με τη βοήθεια ηλεκτρονικού υπολογιστή προσπαθούσαν να εντοπίσουν «καλούς» σχεδιασμούς, σε σχέση με το $E(s^2)$ κριτήριο που εισήγαγαν. Το κριτήριο $E(s^2)$ είναι μέτρο αποτελεσματικότητας υπερκορεσμένων σχεδιασμών και είναι ο μέσος όρος των τετραγώνων των εκτός διαγώνιων στοιχείων του πίνακα πληροφορίας, αγνοώντας τον σταθερό όρο. Το γραμμικό μοντέλο για *m* παράγοντες, είναι το $E(Y) = \mu + \sum_{i=1}^{m} a_i X_i$. Για να είναι ένας σχεδιασμός $E(s^2)$-βέλτιστος, πρέπει η κύρια επίδραση κάθε παράγοντα να είναι ορθογώνια προς τον σταθερό όρο (οι παράγοντες είναι ισορροπημένοι) και μεταξύ όλων των σχεδιασμών που ικανοποιούν αυτή τη συνθήκη, θα πρέπει να ελαχιστοποιείται το $E(s^2)$. Αυτή είναι μια φυσική προσέγγιση, αφού εντοπίζει τον πιο «σχεδόν ορθογώνιο σχεδιασμό». Οι ορθογώνιοι σχεδιασμοί χαίρουν πολλών επιθυμητών ιδιοτήτων, συμπεριλαμβανομένης της αποτελεσματικής εκτίμησης παραμέτρων. Η ισορροπία παραγόντων σε έναν $E(s^2)$-βέλτιστο σχεδιασμό έχει ως συνέπεια ότι ο σταθερός όρος είναι η παράμετρος η οποία είναι υπολογισμένη με τον πιο ακριβή τρόπο.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

Στο παρόν κεφάλαιο, θα πραγματοποιήσουμε μία ανασκόπηση των κριτηρίων αξιολόγησης υπερκορεσμένων σχεδιασμών, με στόχο την ανάδειξη του βέλτιστου, για συγκεκριμένο πλήθος εκτελέσεων n και παραγόντων m. Σημαντικότερο κριτήριο είναι το κριτήριο $E(s^2)$, το οποίο δόθηκε από τους Booth και Cox, το 1962. Θα παρουσιάσουμε επίσης και κάποια αποτελέσματα σχετικά με το κατώτερο όριο, για την τιμή του συγκεκριμένου κριτηρίου, η οποία καθορίζει και τον βέλτιστο σχεδιασμό.

2.1 Το κριτήριο του $E(s^2)$ (Booth και Cox, 1962)

Σημειώνουμε ως D=SSD(n,m) μία τάξη όλων των υπερκορεσμένων σχεδιασμών δύο επιπέδων με m παράγοντες και n εκτελέσεις. Έχουν συζητηθεί δύο διαφορετικές περιπτώσεις:

- όταν το n είναι ζυγός αριθμός και ο υπερκορεσμένος σχεδιασμός είναι ισορροπημένος
- όταν το n είναι περιττός αριθμός και ο υπερκορεσμένος σχεδιασμός είναι μη ισορροπημένος

Είναι πράγματι πιθανό ο υπερκορεσμένος σχεδιασμός να είναι μη ισορροπημένος για n ζυγό αριθμό, αλλά τέτοιοι σχεδιασμοί δεν αποτελούν το αντικείμενο συζήτησης στην παρούσα διπλωματική εργασία.

Οι Booth και Cox (1962) πρότειναν το δημοφιλές κριτήριο $E(s^2)$ για την επιλογή ενός αποτελεσματικού υπερκορεσμένου σχεδιασμού. Για έναν σχεδιασμό d∈D, το κριτήριο ορίζεται ως εξής:

$$E(s^2{}_d) = \sum_{1 \le i < j \le m} s_{ij}^2 \Big/ \binom{m}{2}$$

Ένας σχεδιασμός d^*∈D θεωρείται $E(s^2)$-βέλτιστος, αν το $E(s^2{}_{d^*}) = \min_{d \in D}\{E(s^2{}_d)\}$. Αυτό το κριτήριο ελαχιστοποίησης του $E(s^2)$ μετρά την απόκλιση από την ορθογωνιότητα μέσω της συνολικής ζευγαρωτής συσχέτισης, μεταξύ των m παραγόντων του σχεδιασμού. Οι Booth και Cox (1962), πρότειναν μία μέθοδο κατασκευής υπερκορεσμένων σχεδιασμών, η οποία δίνει πιθανώς μικρότερο βαθμό μη ορθογωνιότητας μεταξύ των παραγόντων.

Ένα δεύτερο κριτήριο που πρότειναν οι Booth και Cox (1962), προοριζόταν να ελαχιστοποιεί τη μέγιστη, σε απόλυτο μέγεθος τιμή, των μη διαγώνιων στοιχείων του X^TX, $\max_{i \ne j}|s_{ij}|$. Ένας συνδυασμός των δύο αυτών κριτηρίων οδηγεί σε πολύ καλούς σχεδιασμούς, και έτσι το παραπάνω κριτήριο γίνεται το πιο χρησιμοποιημένο στη βιβλιογραφία για την κατασκευή υπερκορεσμένων σχεδιασμών δύο επιπέδων.

Συγγραφείς που ακολούθησαν τους Booth και Cox (1962), ονόμασαν έναν σχεδιασμό $E(s^2)$-βέλτιστο, αν ελαχιστοποιεί το $E(s^2)$ μεταξύ όλων των σχεδιασμών που είναι ισορροπημένοι κατά παράγοντα. Ας σημειωθεί ότι η ιδιότητα της ισορροπίας του παράγοντα υπήρξε ένα χαρακτηριστικό της $E(s^2)$-βελτιστοποίησης, καθώς οι Booth και Cox (1962) επέβαλαν πρώτοι αυτόν τον περιορισμό. Πράγματι, ενσωματώνεται σε αλγόριθμους που είναι διαθέσιμοι για αναγνώριση των $E(s^2)$-βέλτιστων σχεδιασμών. Η έρευνα επικεντρώθηκε στη διερεύνηση της ελάχιστης τιμής που μπορεί να πάρει το κριτήριο $E(s^2)$ και στη συνέχεια στην κατασκευή σχεδιασμών που επιτυγχάνουν την τιμή αυτή για δοθέντα n και m, καθώς το κριτήριο της $E(s^2)$-βελτιστοποίησης είναι το πιο ευρέως μελετημένο κριτήριο και αρκετοί συγγραφείς, συμπεριλαμβανομένων των Nguyen (1996), Tang και Wu (1997), Cheng (1997), Butler et al. (2001) και Bulutoglu και Cheng (2004), παρήγαγαν κατώτερα όρια και εισήγαγαν μεθόδους κατασκευής $E(s^2)$-βέλτιστων σχεδιασμών. Παρά όλες αυτές τις ισχυρές συνεισφορές, η κατασκευή $E(s^2)$-βέλτιστων σχεδιασμών παραμένει ένα δύσκολο πρόβλημα γενικά, και ο στόχος απόκτησης ενός ολοκληρωμένου καταλόγου $E(s^2)$-βέλτιστων σχεδιασμών, φαίνεται δύσκολο να επιτευχθεί.

Από τους Booth και Cox (1962) και έπειτα, αρκετοί συγγραφείς έχουν εξερευνήσει την κατασκευή βέλτιστων και αποτελεσματικών υπερκορεσμένων σχεδιασμών, ειδικά αφ' ότου οι Lin (1993a) και Wu(1993) ανέκαμψαν το ενδιαφέρον στην περιοχή.

2.1.1 Κατώτερα όρια του κριτηρίου $E(s^2)$ για ισορροπημένους σχεδιασμούς

Ένα κατώτερο όριο (Lower Bound – LB) της τιμής του κριτηρίου $E(s^2)$ δίνεται από τον Nguyen (1996) και επίσης ανεξάρτητα και από τους Tang και Wu (1997). Το όριο αυτό είναι:

$$E(s^2) \geq \frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)} = LB \tag{2.1}$$

και εφαρμόζεται στους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς μόνο όταν το m είναι πολλαπλάσιο του (n-1). Ο Cheng (1997) έδειξε ότι διαγράφοντας ή προσθέτοντας μία ή δύο ορθογώνιες (ή σχεδόν ορθογώνιες, για $n \equiv 2 \bmod 4$) στήλες, τότε ο σχεδιασμός παραμένει $E(s^2)$-βέλτιστος. Αν το n=8, τότε το παραπάνω αποτέλεσμα ισχύει επίσης, όταν προσθέτουμε ή διαγράφουμε τρεις στήλες. Βελτιώσεις για το κατώτερο όριο δόθηκαν από τους Butler et al. (2001), Liu και Hickernell (2002), Bulutoglu και Cheng (2004) και τέλος από τους Ryan και Bulutoglu (2007). Το καλύτερο διαθέσιμο όριο που γνωρίζουμε σήμερα, το παρείχαν οι Das et al. (2008), και το οποίο αναφέρεται στο θεώρημα 2.4.

Αρχικά όμως θα δούμε τις βελτιώσεις που πραγματοποιήθηκαν για το κατώτερο όριο που είδαμε στην εξίσωση (2.1). Οι Butler et al. (2001), βελτίωσαν το κατώτερο όριο που δόθηκε από τον Nguyen (1996). Οι Butler et al. (2001) πρότειναν ένα κατώτερο όριο που δόθηκε στην εξίσωση (2.1), το οποίο είναι εφικτό όταν ένας ή δύο ορθογώνιοι (ή σχεδόν ορθογώνιοι για $n \equiv 2 \bmod 4$) παράγοντες προστίθενται ή διαγράφονται από τον E(s^2)-βέλτιστο σχεδιασμό για $m = q(n-1)$. Ωστόσο, εκτός από την περίπτωση που το n=6 ή n=8, οι σχεδιασμοί που προκύπτουν από την προσθήκη τριών ή περισσότερων ορθογώνιων παραγόντων στον σχεδιασμό για $m = q(n-1)$ παράγοντες, δεν επιτυγχάνουν το κατώτερο όριό τους. Το κατώτερο όριο που δόθηκε από τους Butler et al. (2001), δίνεται στο θεώρημα 2.1.

Θεώρημα 2.1 (Butler et al., 2001)

Για έναν υπερκορεσμένο σχεδιασμό με n εκτελέσεις και $m = q(n-1)+r$ παράγοντες ($|r| < n/2$, q θετικός αριθμός για $n \equiv 0 \bmod 4$, q ζυγός αριθμός για $n \equiv 2 \bmod 4$), ένα κατώτερο όριο στην τιμή του E(s^2) είναι το ακόλουθο:

$$E(s^2) \geq \frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)} + \frac{n}{m(m-1)}\left\{D(n,r) - \frac{|r|^2}{n-1}\right\} = LB_{BU}$$

όπου

$$D(n,r) = \begin{cases} n+2|r|-3 & \text{για } |r| \equiv 1 \bmod 4, \\ 2n-4 & \text{για } |r| \equiv 2 \bmod 4,\ n \equiv 0 \bmod 4, \\ 2n-4+8/n & \text{για } |r| \equiv 2 \bmod 4,\ n \equiv 2 \bmod 4, \\ n+2|r|+1 & \text{για } |r| \equiv 3 \bmod 4, \\ 4|r| & \text{για } |r| \equiv 0 \bmod 4, \end{cases}$$

Για $r = 0$, το $LB_{BU} = LB$. Αλλά το όριο που δόθηκε στην εξίσωση (2.1), δεν είναι εφαρμόσιμο στην περίπτωση όπου $n \equiv 2 \bmod 4$ και το q είναι περιττός αριθμός.

Οι Bulutoglu και Cheng (2004) έδωσαν το ακόλουθο βελτιωμένο όριο στο E(s^2) για ισορροπημένους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς, το οποίο είναι πολύ γενικό και περιλαμβάνει όλες τις περιπτώσεις. Στην πραγματικότητα, οι Bulutoglu και Cheng (2004) ήταν οι πρώτοι που πρότειναν ένα κατώτερο όριο στο E(s^2) για οποιαδήποτε $m > n-1$.

Θεώρημα 2.2 (Bulutoglu και Cheng, 2004)

Υποθέτουμε ότι το $m(> n-1)$ είναι ένας θετικός ακέραιος. Τότε, υπάρχει ένα μοναδικό q, τέτοιο ώστε το $-2n+2 < m-q(n-1) < 2n-2$ και το $(m+q) \equiv 2 \bmod 4$. Έστω $g(q) = (m+q)^2 n - q^2 n^2 - mn^2$.

- Αν το $n \equiv 0 \bmod 4$, τότε το $E(s^2) \ge h(q)$
  όπου

$$h(q)=\begin{cases} \dfrac{g(q)+2n^2-4n}{m(m-1)} & \text{όταν } |m-q(n-1)|<n-1, \\ \dfrac{g(q)-2n^2+4n+4n|m-q(n-1)|}{m(m-1)} & \text{όταν } n-1<|m-q(n-1)|\le \dfrac{3}{2}n-2, \\ \dfrac{g(q)+4n^2-4n}{m(m-1)} & \text{όταν } |m-q(n-1)|\ge \dfrac{3}{2}n-2, \end{cases}$$

- Αν το $n \equiv 2 \bmod 4$ και το q είναι ζυγός αριθμός, τότε το $E(s^2) \ge \max(h(q),4)$
  όπου

$$h(q)=\begin{cases} \dfrac{g(q)+2n^2-4n+8}{m(m-1)} & \text{όταν } |m-q(n-1)|<n-1, \\ \dfrac{g(q)-2n^2+20n+(4n-8)|m-q(n-1)|-24}{m(m-1)} & \text{όταν } n-1<|m-q(n-1)|\le \dfrac{3}{2}n-3, \\ \dfrac{g(q)+4n^2-4n}{m(m-1)} & \text{όταν } |m-q(n-1)|\ge \dfrac{3}{2}n-3, \end{cases}$$

- Αν το $n \equiv 2 \bmod 4$ και το q είναι περιττός αριθμός, τότε το $E(s^2) \ge \max(h(q),4)$΄
  όπου

$$h(q)=\begin{cases} \dfrac{g(q)+2n^2-4n}{m(m-1)} & \text{όταν } |m-q(n-1)|<n-1, \\ \dfrac{g(q)-2n^2+4n+4n|m-q(n-1)|}{m(m-1)} & \text{όταν } n-1<|m-q(n-1)|\le \dfrac{3}{2}n-1, \\ \dfrac{g(q)+4n^2-12n+8|m-q(n-1)|+8}{m(m-1)} & \text{όταν } |m-q(n-1)|\ge \dfrac{3}{2}n-1, \end{cases}$$

Θα υποδείξουμε τα κατώτερα όρια των Bulutoglu και Cheng (2004) ως LB_{BC}. Στη συνέχεια, θα περιγράψουμε μερικά ακόμα πιο βελτιωμένα όρια που ελήφθησαν από τους Ryan και Bulutoglu (2007).

Θεώρημα 2.3 (Ryan και Bulutoglu, 2007)

Έστω $m(> n-1)$ είναι ένας θετικός ακέραιος. Τότε, υπάρχει μοναδικός θετικός ακέραιος q (που εξαρτάται από τα n και m), τέτοιος ώστε το $-2n+2 < m-q(n-1) < 2n-2$ και το $(m+q) \equiv 2 \bmod 4$. Ορίζουμε το $g=(m+q)^2 n - q^2 n^2 - mn^2$

❖ Αν το $n \equiv 0 \bmod 4$, τότε

$$E(s^2) \geq \begin{cases} \dfrac{g+2n^2-4n}{m(m-1)} & \text{αν } |m-q(n-1)| < n-1, \\ \dfrac{g-2n^2+4n+4n|m-q(n-1)|}{m(m-1)} & \text{αν } n-1 < |m-q(n-1)| \leq \dfrac{3}{2}n-2, \\ \dfrac{g+4n^2-4n}{m(m-1)} & \text{αν} |m-q(n-1)| \geq \dfrac{3}{2}n-2, \end{cases}$$

❖ Αν το $n \equiv 2 \bmod 4$, τότε

$$E(s^2) \geq 4 + 64 \frac{\left[m(m-1)(h-4)/64\right]^+}{m(m-1)}$$

όπου για q ζυγό αριθμό,

$$h = \begin{cases} \dfrac{g+2n^2-4n+8}{m(m-1)} & \text{αν } |m-q(n-1)| < n-1, \\ \dfrac{g-2n^2+20n+(4n-8)|m-q(n-1)|-24}{m(m-1)} & \text{αν } n-1 < |m-q(n-1)| \leq \dfrac{3}{2}n-3, \\ \dfrac{g+4n^2-4n}{m(m-1)} & \text{αν } |m-q(n-1)| \geq \dfrac{3}{2}n-3, \end{cases}$$

και για q περιττό αριθμό,

$$h = \begin{cases} \dfrac{g+2n^2-4n}{m(m-1)} & \text{αν } |m-q(n-1)| < n-1, \\ \dfrac{g-2n^2+4n+4n|m-q(n-1)|}{m(m-1)} & \text{αν } n-1 < |m-q(n-1)| \leq \dfrac{3}{2}n-1, \\ \dfrac{g+4n^2-12n+8|m-q(n-1)|+8}{m(m-1)} & \text{αν } |m-q(n-1)| \geq \dfrac{3}{2}n-1, \end{cases}$$

Για κάθε $x \in \Re$, $\lfloor x \rfloor^+ = \max\{0, \lfloor x \rfloor\}$ και $x^+ = \max\{0, x\}$ όπου $\lfloor . \rfloor$ και $\lceil . \rceil$ είναι οι συναρτήσεις ελαχίστου (*floor*) και μεγίστου (*ceiling*) αντίστοιχα. Θα υποδείξουμε τα κατώτερα όριο των Ryan και Bulutoglu (2007) ως LB_{RB}.

Στο παρακάτω θεώρημα δίνονται τα κατώτερα όρια των Das et al. (2008), τα οποία παρέχουν περισσότερες λεπτομέρειες, καθώς εντοπίζουν με ακρίβεια τις περιπτώσεις όπου είναι δυνατή μία βελτίωση. Τέτοιες λεπτομέρειες δεν παρέχονται από τους Ryan και Bulutoglu (2007).

Θεώρημα 2.4 (Das et al., 2008)

Για έναν υπερκορεσμένο σχεδιασμό με n εκτελέσεις και m=p(n-1)±r παράγοντες (p θετικό, $0 \le r \le \frac{n}{2}$), το κατώτερο όριο LB_D του $E(s^2)$, είναι:

❖ $n \equiv 0 \bmod 4$:

$$LB_D = \frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)} + \frac{n}{m(m-1)}\left(D(n,r) - \frac{r^2}{n-1}\right),$$

όπου

$$D(n,r) = \begin{cases} n+2r-3 & \text{για } |r| \equiv 1 \bmod 4, \\ 2n-4 & \text{για } |r| \equiv 2 \bmod 4, \\ n+2r+1 & \text{για } |r| \equiv 3 \bmod 4, \\ 4r & \text{για } |r| \equiv 0 \bmod 4, \end{cases}$$

❖ $n \equiv 2 \bmod 4$:

$$LB_D = \max\left\{\frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)} + \frac{n}{m(m-1)}\left(D(n,r) - \frac{r^2}{n-1}\right), 4\right\},$$

όπου

i. το p είναι περιττός αριθμός:

$$D(n,r) = \begin{cases} n+2r-3+x/n & \text{για } |r| \equiv 1 \bmod 4, \\ 2n-4+8/n & \text{για } |r| \equiv 2 \bmod 4, \\ n+2r+1 & \text{για } |r| \equiv 3 \bmod 4, \\ 4r & \text{για } |r| \equiv 0 \bmod 4, \end{cases}$$

ii. το p είναι περιττός αριθμός:

$$D(n,r) = \begin{cases} 2r-8r/n+n-16/n+9 & \text{για } |r| \equiv 1 \bmod 4, \\ 4r-8r/n-8/n+8 & \text{για } |r| \equiv 2 \bmod 4, \\ n+2r+8/n-3 & \text{για } |r| \equiv 3 \bmod 4, \\ 2n-4+x/n & \text{για } |r| \equiv 0 \bmod 4, \end{cases}$$

και το $x = 32$, αν

$$\left\{\frac{m-1-2i}{4} + \left[\frac{m+(1+2i)(n-1)}{4(n-1)}\right]\right\} \equiv (1 - i \bmod 2)$$

για $i = 0$ ή 1. Διαφορετικά, το $x = 0$.

Περισσότερες λεπτομέρειες της ιστορικής εξέλιξης των ορίων αυτών, μπορούν να βρεθούν στην εργασία των Kole et al. (2010).

Πίνακας 2.1

Κατώτερα όρια στο E(s^2) για κάποιους επιλεγμένους ισορροπημένους SSD(n, m), n ζυγός αριθμός

Δοθέντα κατώτερα όρια

n	m	LB	LB_{BU}	LB_{BC}	LB_{RB}	LB_D
6	10	4.000	4.000	4.000	4.000	4.000
8	14	4.923	4.923	4.923	4.923	4.923
8	21	6.400	6.400	6.400	6.400	6.400
10	18	5.882	5.882	5.882	5.882	5.882
12	110	11.900	11.900	11.900	11.900	11.900
14	140	13.775	–	13.787	13.787	13.787
14	150	13.862	13.876	13.876	13.876	13.876
16	160	15.564	15.577	15.577	15.577	15.577
20	250	19.531	19.539	19.539	19.539	19.539

Σημείωση: «-» σε γραμμή κάτω από στήλη υποδεικνύει ότι αυτός ο SSD(n, m) δεν είχε μελετηθεί από τον συγγραφέα.

2.1.2 Κατώτερα όρια του κριτηρίου E(s^2) για μη ισορροπημένους σχεδιασμούς

Όλα τα όρια που αναφέρθηκαν παραπάνω ισχύουν για ισορροπημένους σχεδιασμούς. Για μη ισορροπημένους σχεδιασμούς, τα παραπάνω όρια δεν εφαρμόζονται. Οι Nguyen και Cheng (2008), ήταν μεταξύ των πρώτων συγγραφέων που δημιούργησαν ένα κατώτερο όριο στο E(s^2) για έναν μη ισορροπημένο σχεδιασμό, όταν το n είναι περιττός αριθμός και γενίκευσαν τα κατώτερα όρια που δόθηκαν στην εξίσωση (2.1), ώστε να εφαρμόζονται τόσο για περιττά όσο και για ζυγά μεγέθη εκτελέσεων. Οι Bulutoglu και Ryan (2008), συμπλήρωσαν το κατώτερο όριο για το E(s^2), βελτιώνοντάς το, για μη ισορροπημένους σχεδιασμούς δύο επιπέδων με ζυγό μέγεθος εκτελέσεων. Το καλύτερο κατώτερο όριο που γνωρίζουμε για αυτή την περίπτωση, δόθηκε από τους Suen και Das (2010). Οι Jones και Majumdar (2014) πρότειναν ένα κριτήριο, το οποίο είναι γνωστό ως κριτήριο της UE(s^2)-βελτιστοποίησης. Η UE(s^2)-βελτιστοποίηση, είναι ουσιαστικά ίδια με την E(s^2)-βελτιστοποίηση, με τη διαφορά ότι στην UE(s^2)-βελτιστοποίηση δεν επιμένουμε στην ισορροπία των παραγόντων. Θεωρούμε πειράματα με $m-1$ παράγοντες δύο επιπέδων και ένα a priori μοντέλο που περιέχει τις κύριες επιδράσεις και έναν σταθερό όρο. Θα χρησιμοποιήσουμε τη σημείωση X για να υποδηλώσουμε τον σχεδιασμό καθώς και τον πίνακα μοντέλου. Ο X είναι ένας $n\times m$ πίνακας με καταχωρήσεις -1 ή 1, με την πρώτη στήλη να αποτελείται από «1». Υποθέτουμε ότι $m>n$ και $rank(X)=n$. Έστω $S=X'X$ ορίζει τον πίνακα πληροφορίας και s_{ij} τα στοιχεία του S. Αν το $s_{ij}=0$, τότε οι παράγοντες i και j είναι ορθογώνιοι. Ένας σχεδιασμός για τον οποίο ισχύει αυτή η συνθήκη για όλα τα i και j $(i\neq j)$, είναι ένας ορθογώνιος σχεδιασμός και για τον σχεδιασμό αυτό, ο σταθερός όρος και όλες οι κύριες επιδράσεις εκτιμώνται με τη μέγιστη αποτελεσματικότητα. Μία απαραίτητη συνθήκη για την ύπαρξη ενός ορθογώνιου σχεδιασμού είναι το $n=2$ ή $n\equiv 0 \bmod 4$ και $n\geq m$. Καθώς το $m>n$ στη συγκεκριμένη ρύθμιση, δεν υπάρχουν ορθογώνιοι σχεδιασμοί.

Έστω

$$O(X)=\sum_{i\neq j=1}^{m}\sum s^2_{ij}$$

Το $O(X)$ μπορεί να θεωρηθεί ως κριτήριο ορθογωνιότητας του σχεδιασμού X. Το $O(X)=0$ για ορθογώνιους σχεδιασμούς. Ξεκινώντας με τους Booth και Cox (1962), η σημείωση $E(s^2)$ χρησιμοποιήθηκε για να δηλώσει τον μέσο όρο των s^2_{ij} για τις κύριες επιδράσεις. Για λόγους συμβατότητας, χρησιμοποιούμε την ένδειξη $UE(s^2)$ για να δηλώσουμε τον μέσο όρο των s^2_{ij} για όλες τις παραμέτρους:

$$E(s^2)=\frac{\sum_{i\neq j=2}^{m}\sum s^2_{ij}}{(m-1)(m-2)}$$

$$UE(s^2)=\frac{O(X)}{m(m-1)}=\frac{\sum_{i\neq j=1}^{m}\sum s^2_{ij}}{m(m-1)}.$$

Θεώρημα 2.5 (Jones και Majumdar, 2008)

(i) Αν $m=0 \bmod 4$,

$$\min UE(s^2)=\frac{n(m-n)}{m-1}$$

Στα πλαίσια της συγκεκριμένης διπλωματικής εργασίας, δε μας απασχολούν περαιτέρω οι μη ισορροπημένοι σχεδιασμοί. Για περισσότερες πληροφορίες μπορείτε να ανατρέξετε στις παραπάνω εργασίες.

2.2 Συσχέτιση μεταξύ των στηλών (Lin 1995 , Li και Wu 1997)

Ο Lin (1995) εισήγαγε τη συσχέτιση $r_{d_{ij}} = \dfrac{x_d'^{(i)} x_d^{(j)}}{n}$ μεταξύ δύο στηλών $x_d^{(i)}$ και $x_d^{(j)}$ ως έναν απλό τρόπο μέτρησης της ορθογωνιότητας μεταξύ δύο στηλών. Για έναν σχεδιασμό $d \in D$, έστω $r_d^0 = \max_{i<j} r_{d_{ij}}$. Τότε, ένας σχεδιασμός $d^* \in D$ θεωρείται βέλτιστος, σε σχέση με τον απόλυτο συντελεστή συσχέτισης, αν το $r_{d*}^0 = \min_{d \in D}(r_d^0)$. Αν οποιοιδήποτε δύο σχεδιασμοί έχουν τον ίδιο βαθμό μη ορθογωνιότητας, τότε ο προτιμώμενος σχεδιασμός είναι αυτός στον οποίο ο αριθμός της συχνότητας εμφάνισης του $r_{\max}$ είναι ελάχιστος μεταξύ όλων των $\binom{m}{2}$ ζευγαριών.

Οι Li και Wu (1997) έδωσαν ένα άλλο κριτήριο για τη μη ορθογωνιότητα, παρόμοιο με αυτό του Lin (1995), το οποίο είναι η συσχέτιση μεταξύ της $i-$οστής και $j-$οστής στήλης του σχεδιασμού X, $i \neq j = 1, 2, ...m$. Αυτό ορίζεται ως $\dfrac{s_{ij}}{n}$, όπου το $s_{ij} = 0$ υποδηλώνει ότι οι στήλες i και j είναι ορθογώνιες. Για έναν σχεδιασμό $d \in D$, ορίζουμε τη μεγαλύτερη απόλυτη συσχέτιση $M_d^0 = \max_{i<j} \left| \dfrac{s_{d_{ij}}}{n} \right|$. Ένας σχεδιασμός $d^* \in D$, θεωρείται βέλτιστος από την άποψη της συσχέτισης μεταξύ των στηλών του X , αν $M_{d^*}^0 = \min_{d \in D}(M_d^0)$.

2.3 Μη ορθογώνια ζευγάρια (Li και Wu, 1997)

Ένα άλλο κριτήριο της μη ορθογωνιότητας ενός υπερκορεσμένου σχεδιασμού, είναι ως προς τον αριθμό των μη ορθογώνιων ζευγών n^0 στον σχεδιασμό X . Για έναν σχεδιασμό $d \in D$, έστω $f_d =$ ο αριθμός των εκτός της διαγωνίου στοιχείων $s_{d_{ij}} = 0$ στο d . Ένας σχεδιασμός $d^* \in D$ θεωρείται βέλτιστος, όσον αφορά στον αριθμό των μη ορθογώνιων ζευγών στον σχεδιασμό, αν $f_{d*} = \max_{d \in D} f_d$.

2.4 Άλλα κριτήρια

Κάποια άλλα κριτήρια της μη ορθογωνιότητας έχουν επίσης μελετηθεί στη βιβλιογραφία.

(1) Για έναν σχεδιασμό $d \in D$, ένα κριτήριο ορίζεται ως εξής

$$average(s_d) = \sum_{i<j} \left| s_{d_{ij}} \right| \Big/ \binom{m}{2}$$

Ένας σχεδιασμός $d^* \in D$ θεωρείται βέλτιστος, όσον αφορά στη μέση απόλυτη τιμή των μη διαγώνιων στοιχείων $s_{d_{ij}}$, αν $average(s_{d*}) = \min_{d \in D} \{average(s_d)\}$.

(2) Για έναν σχεδιασμό $d \in D$, έστω $s_d^0 = \max_{i<j} \left\{ \left\| s_{d_{ij}} \right\| \right\}$. Τότε, ο σχεδιασμός $d^* \in D$ θεωρείται βέλτιστος, όσον αφορά την απόλυτη τιμή των μη διαγώνιων στοιχείων $s_{d_{ij}}$, αν $s_{d*}^0 = \min_{d \in D}(s_d^0)$.

(3) Για έναν σχεδιασμό $d \in D$, έστω $f_d^N =$ η συχνότητα του $\left\{ \left| s_{d_{ij}} \right| = \pm s_{d\ \max} \right\}$. Τότε, ένας σχεδιασμός $d^* \in D$ θεωρείται βέλτιστος, όσον αφορά στη συχνότητα της μέγιστης τιμής των μη διαγώνιων στοιχείων $s_{d_{ij}}$, αν το $f_{d*}^N = \min_{d \in D}(f_d^N)$.

Για αναφορά σε αυτά τα κριτήρια, συμβουλευτείτε τις εργασίες των Lin (1993a, 1995), Wu (1993) και των Deng, Lin και Wang (1999).

2.4.1 Ελάχιστη απόκλιση ροπής (*Minimum moment aberration*) – (Xu, 2003)

Το κριτήριο της γενικευμένης ελάχιστης απόκλισης (*Generalized Minimum Aberration – GMA*) έχει προταθεί για την αξιολόγηση μη κανονικών (nonregular) σχεδιασμών, οι οποίοι είναι χρήσιμοι για την ανίχνευση κύριων επιδράσεων μόνο [συμβουλευτείτε για παράδειγμα τις εργασίες των Deng και Tang (1999), Tang και Deng (1999), Xu και Wu (2001) και Ma και Fang (2001)]. Το κριτήριο της γενικευμένης ελάχιστης απόκλισης έχει επίσης προταθεί σαν μία επέκταση του $E(s^2)$ κριτηρίου από τους Xu και Wu (2001), για την αξιολόγηση της ποιότητας των γενικών υπερκορεσμένων σχεδιασμών (συμπεριλαμβανομένων των περιπτώσεων πολλαπλών και μικτών επιπέδων). Αν και κάποια γενικά αποτελέσματα είναι διαθέσιμα για την περίπτωση των δύο επιπέδων, δεν υπάρχουν διαθέσιμα γενικά αποτελέσματα βελτιστοποίησης. Ο Xu (2003) εισήγαγε την ελάχιστη απόκλιση ροπής (Minimum Moment Aberration – MMA) σαν μία εναλλακτική της γενικευμένης ελάχιστης απόκλισης, η οποία ερευνά τη σχέση μεταξύ των εκτελέσεων (για παράδειγμα, γραμμές του X), αντί να μελετήσει τη σχέση μεταξύ των παραγόντων (για παράδειγμα, στήλες του X). Η ελάχιστη απόκλιση ροπής ελαχιστοποιεί διαδοχικά τις στιγμές ισχύος του αριθμού των συμπτώσεων μεταξύ των εκτελέσεων. Το κριτήριο της γενικευμένης ελάχιστης απόκλισης, μπορεί να χρησιμεύσει ως κριτήριο βελτιστοποίησης για τους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς. Είναι γνωστό ότι τόσο το $E(s^2)$ όσο και το $average(\chi^2)$ είναι ειδικές περιπτώσεις του κριτηρίου της γενικευμένης ελάχιστης απόκλισης. Το κριτήριο $average(\chi^2)$ για την αξιολόγηση ενός υπερκορεσμένου σχεδιασμού πολλαπλών ή μικτών επιπέδων, είναι ανάλογο του $E(s^2)$ για την αξιολόγηση ενός υπερκορεσμένου σχεδιασμού δύο επιπέδων.

Για έναν (n,q^m)-σχεδιασμό $D=\left[x_{ij}\right]_{n\times m}$ και έναν θετικό ακέραιο t,ορίζουμε την t-οστή ροπή ως εξής,

$$K_t(D)=\left[n(n-1)/2\right]^{-1}\sum_{1\le i\le j\le n}\left[\delta_{ij}(D)\right]^t$$

όπου το $\delta_{ij}(D)=\sum_{k=1}^{m}\delta(x_{ik},x_{jk})$ είναι ο αριθμός των συμπτώσεων μεταξύ της i-οστής και j-οστής γραμμής, το $\delta(u,v)$ είναι η λειτουργία δέλτα του Kronecker, η οποία ισούται με 1 αν το $u=v$ και με 0 διαφορετικά, και το x_{ij} είναι το επίπεδο του j-οστού παράγοντα στην i-οστή εκτέλεση. Είναι σημαντικό να σημειώσουμε ότι το $m-\delta_{ij}(D)$ είναι γνωστό ως η απόσταση του Hamming μεταξύ της i-οστής και j-οστής γραμμής, στην αλγεβρική θεωρία κωδίκων. Το «q» υποδηλώνει τον αριθμό των επιπέδων των παραγόντων. Η εργασία αυτή περιορίζεται σε q=2.

Για δύο (n,q^m)-σχεδιασμούς D_1 και D_2, ο D_1 θεωρείται ότι έχει λιγότερη απόκλιση ροπής σε σχέση με τον D_2, αν υπάρχει ένα $t,\ 1\le t\le m$, τέτοιο ώστε $K_t(D_1)<K_t(D_2)$ και $K_i(D_1)=K_i(D_2)$ για $i=1,...,t-1$. Ο D_1 θεωρείται ότι έχει ελάχιστη απόκλιση ροπής, αν δεν υπάρχει άλλος σχεδιασμός με λιγότερη απόκλιση ροπής από τον D_1.

Η έννοια της ελάχιστης απόκλισης ροπής έχει επίσης χρησιμοποιηθεί για τη μελέτη των υπερκορεσμένων σχεδιασμών εξετάζοντας μόνο ισορροπημένους σχεδιασμούς, οι οποίοι ελαχιστοποιούν την πρώτη ροπή $K_1(D)$. Στο πνεύμα της ελάχιστης απόκλισης ροπής, ένα καλό κριτήριο βελτιστοποίησης για τους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς, είναι η ελαχιστοποίηση του $K_2(D)$.

Ο Xu (2003) έδειξε ότι για έναν ισορροπημένο (n,q^m)-σχεδιασμό d ισχύει ότι,

$$average(\chi^2)=\left[(n-1)q^2K_2(D)-nm(m+q-1)+(mq)^2\right]\big/\left[m(m-1)\right]$$

Επιπλέον, αν οι $D_1,...,D_u$ είναι u κορεσμένες ορθογώνιες διατάξεις ισχύος δύο, ο πίνακας $D=(D_1,...,D_u)$ έχει την ελάχιστη απόκλιση ροπής. Επιπροσθέτως, η κατάργηση μίας στήλης ή η προσθήκη μίας στήλης στο D, οδηγεί σε έναν ελάχιστης απόκλισης ροπής σχεδιασμό.

2.4.2 Συσχέτιση δύο στηλών

Ένα άλλο σημαντικό κριτήριο για τη μέτρηση της ποιότητας ενός υπερκορεσμένου σχεδιασμού είναι η συσχέτιση των στηλών. Δύο στήλες ενός υπερκορεσμένου σχεδιασμού θεωρούνται πλήρως συσχετισμένες, αν οι στήλες είναι πανομοιότυπες ή αποτελούν γραμμικό συνδυασμό. Οποιεσδήποτε δύο στήλες ενός υπερκορεσμένου σχεδιασμού δύο επιπέδων είναι πλήρως συσχετισμένες, αν τα εσωτερικά γινόμενά τους είναι $\pm n$. Έστω r_{ij} είναι η συσχέτιση μεταξύ της i-οστής και j-οστής στήλης ενός υπερκορεσμένου σχεδιασμού X. Τότε, οι στήλες i και j είναι πλήρως συσχετισμένες αν $|r_{ij}| = 1$. Αν το $r_{ij} = 0$, τότε οι στήλες i και j είναι ορθογώνιες μεταξύ τους.

Όσο μικρότερος είναι ο αριθμός των πλήρως συσχετισμένων ζευγαριών των στηλών σε έναν σχεδιασμό, τόσο καλύτερος είναι ο σχεδιασμός, όσον αφορά στον εντοπισμό ενεργών παραγόντων. Θα ήταν επιθυμητό να δημιουργήσουμε έναν υπερκορεσμένο σχεδιασμό για δοθέντα n και m, ο οποίος έχει τη μικρότερη τιμή του $E(s^2)$ και να μην υπάρχουν καθόλου δύο στήλες που να είναι πλήρως συσχετισμένες. Ο καλύτερος σχεδιασμός είναι αυτός στον οποίο δεν υπάρχουν καθόλου δύο στήλες που να είναι πλήρως συσχετισμένες.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

Στο παρόν κεφάλαιο, θα πραγματοποιήσουμε ανασκόπηση των μεθόδων κατασκευής βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών.

3.1 Εισαγωγή

Η ιδέα των υπερκορεσμένων σχεδιασμών εισήχθη από τον Satterthwaite (1959), ο οποίος πρότεινε τη χρήση τυχαίων ισορροπημένων σχεδιασμών, η οποία δέχτηκε κριτική στη συζήτηση που δημοσιεύθηκε ως συνέχεια της συγκεκριμένης εργασίας. Ο Watson (1961) πρότεινε μία εναλλακτική ιδέα ομαδοποίησης των m παραγόντων σε z υποομάδες μεγέθους $\lfloor m/z \rfloor$ ή $\lfloor m/z \rfloor+1$ και στη συνέχεια την αντιμετώπιση κάθε υποομάδας παραγόντων ως «παράγοντα», τον οποίο προτιμούμε να ονομάζουμε ως «ομαδοποιημένο παράγοντα» για να τον ξεχωρίσουμε από τους αρχικούς παράγοντες. Για κάθε ομαδοποιημένο παράγοντα, μόνο ένας μικρός αριθμός επιπέδων, συνήθως 2 ή 3, επιλέγεται. Έπειτα, ένας πολύ μικρότερος σχεδιασμός μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη μελέτη των ομαδοποιημένων παραγόντων. Αν ένας ομαδοποιημένος παράγοντας βρεθεί ότι έχει μία σημαντική επίδραση στην ανάλυση, τότε οι παράγοντες στην ομάδα μελετώνται σε ένα επόμενο πείραμα. Διαφορετικά, προβάλλονται. Αν και αυτή η προσέγγιση είναι περισσότερο αποδεκτή από τον τυχαίο ισορροπημένο σχεδιασμό, απαιτεί ισχυρές παραδοχές για να εξασφαλιστεί ότι η επίδραση ενός ομαδοποιημένου παράγοντα είναι σημαντική αν και μόνο αν η επίδραση ενός τουλάχιστον από τους παράγοντές του είναι σημαντική. Στην πράξη, τέτοιες υποθέσεις είναι συχνά πιο δυνατές και είναι πιο δύσκολο να επαληθευτούν, σε σχέση με την υπόθεση της σπανιότητας των επιδράσεων (assumption of effect sparsity).

Οι Booth και Cox (1962) ήταν μεταξύ των πρώτων ερευνητών που κατασκεύασαν υπερκορεσμένους σχεδιασμούς με συστηματικό τρόπο. Στην κατασκευή τους, κάποιες πρόσθετες στήλες προστέθηκαν διαδοχικά στον αρχικό σχεδιασμό, αποφεύγοντας παράλληλα μία μεγάλη αξία των τετραγωνικών εσωτερικών γινομένων μεταξύ όλων των (αρχικών και πρόσθετων) στηλών. Κατασκεύασαν 7 υπερκορεσμένους σχεδιασμούς μέσω αναζήτησης στον ηλεκτρονικό υπολογιστή. Οι Booth και Cox (1962) κατασκεύασαν τους ακόλουθους σχεδιασμούς χρησιμοποιώντας έναν αλγόριθμο μέσω ηλεκτρονικού υπολογιστή, υποθέτοντας ότι μόνο δύο από τους m είναι ενεργοί:

SSD(12, 16), SSD(12, 20), SSD(12, 24), SSD(18, 24), SSD(18, 30), SSD(18, 36), και SSD(24, 30).

Η έρευνα στην κατασκευή των υπερκορεσμένων σχεδιασμών, ύστερα από μία περίοδο περίπου 30 ετών, ανέκαμψε από τους Lin (1993a) και Wu (1993).

3.2 Μέθοδος κατασκευής του Lin (1993a)

Αρχικά η έρευνα ανέκαμψε από τον Lin (1993a), ο οποίος πρότεινε μία μέθοδο κατασκευής υπερκορεσμένων σχεδιασμών μέσω μισών κλασματικών σχεδιασμών (πίνακας Hadamard) των Plackett-Burman (1946).

Έστω H είναι ένας $n \times n$ πίνακας Hadamard. Χωρίς απώλεια της γενικότητας, ο H μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$\mathrm{H} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \mathrm{H}^h \\ 1 & -1 & * \end{bmatrix},$$

όπου το 1 είναι το $n/2 \times 1$ διάνυσμα των «1». Αν δεν υπάρχουν καθόλου δύο στήλες του H^h που να είναι πλήρως συσχετισμένες, τότε ο H^h ορίζει έναν υπερκορεσμένο σχεδιασμό με $n-2$ παράγοντες και $n/2$ εκτελέσεις. Ο Nguyen (1996) και ο Cheng (1997) έδειξαν ότι αυτός ο σχεδιασμός είναι βέλτιστος σύμφωνα με το $\mathrm{E}(s^2)$-κριτήριο, το οποίο προτάθηκε από τους Booth και Cox (1962). Σημειώστε ότι είναι απαραίτητο ότι δεν υπάρχουν καθόλου δύο στήλες ενός υπερκορεσμένου σχεδιασμού που είναι πλήρως συσχετισμένες, έτσι ώστε να μην υπάρχουν περιττοί παράγοντες. Στην κατασκευή του Lin, αν πρέπει να αφαιρεθούν ορισμένοι περιττοί παράγοντες για να παραχθεί ένας θεμιτός σχεδιασμός, τότε ο σχεδιασμός που προέκυψε μπορεί να μην είναι πλέον $\mathrm{E}(s^2)$-βέλτιστος.

Μπορεί να αποδειχθεί ότι δεν υπάρχουν καθόλου δύο στήλες του H^h που να είναι πλήρως συσχετισμένες αν η ορθογώνια διάταξη

$$\mathrm{H}' = \begin{bmatrix} 1 & \mathrm{H}^h \\ -1 & * \end{bmatrix}$$

δεν έχει ορίζουσα σχέση μήκους 3. Αυτό ισχύει επειδή αν ο H' δεν έχει ορίζουσα σχέση μήκους 3, τότε έχει προβολικότητα τουλάχιστον 3. Προβάλλοντας τον H' στην πρώτη του στήλη και σε 2 άλλες αυθαίρετες στήλες, βλέπουμε ότι ο H^h πρέπει να έχει προβολικότητα τουλάχιστον 2, και ως εκ τούτου δεν έχει πλήρως συσχετισμένες στήλες. Όπως δείχθηκε στο θεώρημα 1.1, οι σχεδιασμοί του Paley μεγέθους ≥ 12 δεν έχουν ορίζουσες σχέσεις μήκους 3. Τότε, όταν η μέθοδος του Lin (1993a) εφαρμόζεται σε έναν πίνακα του Paley τάξης μεγαλύτερης ή ίσης του 12, οδηγεί πάντα σε $\mathrm{E}(s^2)$ βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς, χωρίς πλήρως συσχετισμένους παράγοντες, όπως θα δούμε και στο παράδειγμα 4.1 στο Κεφάλαιο 4.

Ο Lin (1993a) κατασκεύασε έναν υπερκορεσμένο σχεδιασμό με $m = t-2$ παράγοντες και $n = t/2$, όπου το t είναι η τάξη του χρησιμοποιημένου πίνακα Hadamard. Για παράδειγμα, χρησιμοποιώντας τον κορεσμένο σχεδιασμό δύο επιπέδων τάξης $t = 12$ και παίρνοντας την πρώτη στήλη ως στήλη διακλάδωσης, μπορεί να κατασκευαστεί ένας SSD με $n = t/2 = 6$ και

$m = t - 2 = 10$, χρησιμοποιώντας μισό κλάσμα του πίνακα Hadamard. Στο παράδειγμα αυτό, επιλέγουμε τις γραμμές που αντιστοιχούν στα θετικά στοιχεία της πρώτης στήλης (στα «+»). Ο παραγόμενος υπερκορεσμένος σχεδιασμός σημειώνεται στον Πίνακα 3.1 που ακολουθεί.

Πίνακας 3.1

Πίνακας Hadamard τάξης $t = 12$ και ο παραγόμενος υπερκορεσμένος σχεδιασμός

0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
+	+	−	+	+	+	−	−	−	+	−	−
+	−	+	−	+	+	+	−	−	−	+	−
+	−	−	+	−	+	+	+	−	−	−	+
+	+	−	−	+	−	+	+	+	−	−	−
+	−	+	−	−	+	−	+	+	+	−	−
+	−	−	+	−	−	+	−	+	+	+	−
+	−	−	−	+	−	−	+	−	+	+	+
+	+	−	−	−	+	−	−	+	−	+	+
+	+	+	−	−	−	+	−	−	+	−	+
+	+	+	+	−	−	−	+	−	−	+	−
+	−	+	+	+	−	−	−	+	−	−	+

Η μέθοδος αυτή έχει το πλεονέκτημα της απλότητας στην κατασκευή, έχει καλές ιδιότητες για τα τετραγωνικά εσωτερικά γινόμενα και ευελιξία για το n, έτσι οι υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί είναι διαθέσιμοι για οποιονδήποτε ζυγό αριθμό πειραματικών εκτελέσεων.

3.3 Μέθοδος κατασκευής του Wu (1993)

Ο Wu (1993) πρότεινε υπερκορεσμένους σχεδιασμούς, προσθέτοντας τις αλληλεπιδράσεις δύο στηλών στον σχεδιασμό των Plackett-Burman. Η μέθοδος αυτή παράγει περισσότερες στήλες σε σχέση με τη μέθοδο του Lin (1993a), όταν το n είναι πολλαπλάσιο του 4, εκτός αν το n είναι δύναμη του δύο. Αν και είναι αρκετά εύκολο να κατασκευάσουμε αυτούς τους σχεδιασμούς, οι ιδιότητές τους δεν είναι τόσο καλές, καθώς οι συσχετίσεις μεταξύ των στηλών που προκύπτουν, είναι αρκετά μεγάλες. Σαν παράδειγμα, μπορεί κάποιος να χρησιμοποιήσει τον πίνακα Hadamard που δίνεται στον Πίνακα 3.1, να μετακινήσει την πρώτη του στήλη (στήλη 0) και να προσθέσει τις 55 αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων, για να κατασκευάσει έναν υπερκορεσμένο σχεδιασμό με $n = 12$ εκτελέσεις και $m = 66$ στήλες.

Έστω X είναι ένας $OA(n,\ 2^{n-1},\ 2)$, ο οποίος λαμβάνεται διαγράφοντας μία στήλη με «1» από έναν $n \times n$ πίνακα Hadamard. Συμπληρώνοντας τον X με f γινόμενα 2 στηλών του, όπου $f \le \binom{n-1}{2}$, λαμβάνεται ένας υπερκορεσμένος σχεδιασμός με $n-1+f$ παράγοντες, αν δεν υπάρχουν δύο από τις στήλες f οι οποίες προστέθηκαν, που να είναι πλήρως συσχετισμένες και καμία από αυτές δεν είναι πλήρως συσχετισμένη με καμία στήλη του X. Είναι εύκολο να δούμε ότι αυτό συμβαίνει αν ο X δεν έχει ορίζουσα σχέση μήκους 3 ή 4. Και πάλι, το παραπάνω ισχύει για σχεδιασμούς του Paley μεγέθους $n \ge 12$.

Η μέθοδος του Wu (1993) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να κατασκευάσουμε έναν $n-$ εκτελέσεων σχεδιασμό με έως $n-1+\binom{n-1}{2}$ παράγοντες. Οι σχεδιασμοί αυτοί ωστόσο, μπορεί να μην είναι $E(s^2)$ βέλτιστοι. Πράγματι, ο Wu (1993) δεν αναφέρει κανένα αποτέλεσμα βελτιστοποίησης. Θα δούμε παρακάτω ότι σε ορισμένες περιπτώσεις, συμπεριλαμβανομένου όταν το $f = \binom{n-1}{2}$, οι σχεδιασμοί οι οποίοι κατασκευάστηκαν από τη μέθοδο του Wu (1993) είναι $E(s^2)$ βέλτιστοι. Έτσι για παράδειγμα, ο σχεδιασμός που λαμβάνεται προσθέτοντας στον 12 εκτελέσεων Plackett-Burman σχεδιασμό όλες τις $\binom{11}{2} = 55$ αλληλεπιδράσεις των στηλών του, είναι ένας $E(s^2)$ βέλτιστος σχεδιασμός για 66 παράγοντες σε 12 εκτελέσεις.

Πόρισμα 3.1

Έστω X είναι ένας $OA(n,\ 2^{n-1},\ 2)$, ο οποίος λαμβάνεται διαγράφοντας μία στήλη με «1» από έναν $n \times n$ πίνακα Hadamard και έστω D^{ext} είναι ο σχεδιασμός ο οποίος λαμβάνεται προσθέτοντας στον X τις $\binom{n-1}{2}$ αλληλεπιδράσεις των στηλών του. Αν ο D^{ext} δεν περιέχει πλήρως συσχετισμένες στήλες, τότε είναι ένας $E(s^2)$ βέλτιστος υπερκορεσμένος σχεδιασμός με n εκτελέσεις και $n-1+\binom{n-1}{2}$ παράγοντες.

Για την απόδειξη μπορείτε να ανατρέξετε στην εργασία των Bulutoglu και Cheng (2003).

Ο σχεδιασμός του Πορίσματος 3.1 περιέχει όλες τις κύριες επιδράσεις και όλες τις στήλες αλληλεπίδρασης δύο παραγόντων, σε ένα κορεσμένο πλάνο κύριων επιδράσεων, όπως θα δούμε και στο παράδειγμα της ενότητας 4.2.1 του Κεφαλαίου 4.

Πόρισμα 3.2

Έστω X είναι ένας $OA(n,\ 2^{n-1},\ 2)$, ο οποίος λαμβάνεται διαγράφοντας μία στήλη με «1» από έναν $n \times n$ πίνακα Hadamard και έστω S είναι ένας $n \times \binom{n-1}{2}$ πίνακας του οποίου οι στήλες αποτελούνται από όλα τα $m_i \odot m_j$, $1 \le i < j \le n-1$, όπου τα $m_1, ..., m_{n-1}$ είναι οι στήλες του X. Αν ο S δεν περιέχει πλήρως συσχετισμένες στήλες, τότε είναι ένας $E(s^2)$ βέλτιστος υπερκορεσμένος σχεδιασμός με n εκτελέσεις και $\binom{n-1}{2}$ παράγοντες.

Για την απόδειξη μπορείτε να ανατρέξετε στην εργασία των Bulutoglu και Cheng (2003).

Ο σχεδιασμός του Πορίσματος 3.2 περιέχει όλες τις στήλες αλληλεπίδρασης δύο παραγόντων, όπως θα δούμε και στο παράδειγμα της ενότητας 4.2.2 του Κεφαλαίου 4.

Πόρισμα 3.3

Έστω X είναι ένας $OA(n,\ 2^{n-1},\ 2)$, ο οποίος λαμβάνεται διαγράφοντας μία στήλη με «1» από έναν $n \times n$ πίνακα Hadamard και για κάθε i_0, $1 \le i_0 \le n-1$, έστω ο X^{i_0} είναι ένας $n \times (2n-3)$ πίνακας, ο οποίος αποτελείται από τις στήλες m_i με $1 \le i \le n-1$ και $m_{i_0} \odot m_j$ με $1 \le j \le n-1$, $j \ne i_0$, όπου τα $m_1, ..., m_{n-1}$ είναι οι στήλες του X. Αν ο X^{i_0} δεν περιέχει πλήρως συσχετισμένες στήλες, τότε είναι ένας $E(s^2)$ βέλτιστος υπερκορεσμένος σχεδιασμός με n εκτελέσεις και $2n-3$ παράγοντες.

Για την απόδειξη μπορείτε να ανατρέξετε στην εργασία των Bulutoglu και Cheng (2003).

Ο σχεδιασμός του Πορίσματος 3.3 περιέχει όλες τις κύριες επιδράσεις και τις αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων με τη συμμετοχή ενός δοσμένου παράγοντα, όπως θα δούμε και στο παράδειγμα της ενότητας 4.2.3 του Κεφαλαίου 4.

3.4 Μέθοδοι κατασκευής μετά το 1993

Οι Tang και Wu (1993) δημιούργησαν μία μέθοδο κατασκευής υπερκορεσμένων σχεδιασμών, λαμβάνοντας υπόψη τα μέσα εσωτερικά τετραγωνικά γινόμενα. Οι προτεινόμενοι υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί θα ήταν βολικοί για πρακτική εφαρμογή, όταν όλοι οι παράγοντες έχουν ομοιόμορφη πιθανότητα (αβεβαιότητα) ενός παράγοντα που είναι ενεργός, επειδή αυτοί οι σχεδιασμοί εξασφαλίζουν μικρά τετραγωνικά εσωτερικά γινόμενα μεταξύ των στηλών.

Ο Lin (1995) εξετάζει τον μέγιστο αριθμό παραγόντων που μπορούν να προσαρμοστούν, όταν ο αριθμός των εκτελέσεων δίνεται και ο βαθμός της μη ορθογωνιότητας είναι καθορισμένος. Ένας αλγόριθμος κατασκευής και αρκετοί νέοι σχεδιασμοί δύο επιπέδων παρέχονται σε εκείνη την εργασία. Η ιδέα του προτεινόμενου αλγορίθμου, μπορεί να περιγραφεί σύντομα με τον ακόλουθο τρόπο. Για ένα καθορισμένο μέγεθος εκτελέσεων n, ο αλγόριθμος παράγει όλες τις πιθανές στήλες ενός υπερκορεσμένου σχεδιασμού με τυχαία σειρά. Σε κάθε στάδιο, εισάγεται μία υποψήφια στήλη και τα εσωτερικά γινόμενα που σχετίζονται με όλες τις υπόλοιπες διατηρούμενες στήλες, υπολογίζονται για να εξακριβωθεί αν οι απαιτήσεις ικανοποιούνται (για παράδειγμα, αν η μέγιστη συσχέτιση είναι μικρότερη σε σχέση με την προκαθορισμένη τιμή). Αν όχι, η υποψήφια στήλη απορρίπτεται και η έρευνα συνεχίζεται.

Ο Cheng (1997) χρησιμοποίησε ορθογώνιες διατάξεις δύο επιπέδων και block σχεδιασμούς για να βρει υπερκορεσμένους σχεδιασμούς που ικανοποιούν το κατώτερο όριο για το $E(s^2)$. Ο Cheng (1997) συσχέτισε τους $E(s^2)$-βέλτιστους σχεδιασμούς με τις ορθογώνιες διατάξεις και επίσης μελέτησε τις επεκτάσεις ή τις περικοπές του σχεδιασμού με έναν ή δύο παράγοντες. Στην ίδια εργασία, αποδείχθηκε ότι μπορεί κάποιος να δημιουργήσει καινούριους $E(s^2)$-βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς, προσθέτοντας έναν ή δύο παράγοντες (ή αφαιρώντας έναν ή δύο παράγοντες) σε κάποιον ήδη γνωστό $E(s^2)$-βέλτιστο υπερκορεσμένο σχεδιασμό.

Οι Yamada και Lin (1997) κατασκεύασαν μία νέα τάξη των υπερκορεσμένων σχεδιασμών, συμπεριλαμβάνοντας μία ορθογώνια βάση. Ανέπτυξαν επίσης μία μέθοδο που συνδυάζει δύο σχεδιασμούς, διπλασιάζει τα μεγέθη εκτελέσεών τους και διατηρεί τις επιθυμητές ιδιότητες. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί χρησιμοποιώντας την ακόλουθη κατασκευή:

$$C^* = \begin{bmatrix} 1 & C_0^n & C_0^n & C_+^n & C_+^n \\ 1 & C_0^n & -C_0^n & C_+^n & -C_+^n \end{bmatrix}.$$

Ο συμπληρωματικός σχεδιασμός έχει επίσης ορθογώνια βάση και $\max\left\{(c_i^{*T} c_i^*)^2\right\} = (2p)^2$, όπου το $\max\left\{(c_i^T c_i)^2\right\} = p^2$ είναι το μέγιστο της στήλης του πίνακα C_+^n.

Οι Liu και Zhang (2000) έδωσαν μία μέθοδο κατασκευής των $E(s^2)$-βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών, χρησιμοποιώντας κυκλικούς ισορροπημένους σχεδιασμούς μη πλήρων ομάδων (BIBDs). Οι Lu και Meng (2000) έδωσαν μία άλλη μέθοδο κατασκευής υπερκορεσμένων σχεδιασμών δύο επιπέδων. Οι Butler et al. (2001) εισήγαγαν μία γενική μέθοδο κατασκευής $E(s^2)$-βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών.

Οι Butler et al. (2001) έδειξαν ένα βελτιωμένο κατώτερο όριο για το κριτήριο $E(s^2)$. Επίσης, εφάρμοσαν μία τεχνική για το χτίσιμο «μεγαλύτερων» $E(s^2)$-βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών, χρησιμοποιώντας «μικρότερους» γνωστούς υπερκορεσμένους σχεδιασμούς. Πρότειναν την κατασκευή των $E(s^2)$-βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών, χρησιμοποιώντας τις παρακάτω κατασκευές:

$$\begin{pmatrix} X_0 & X_1 \\ X_0 & -X_1 \end{pmatrix},\ (a_1 \otimes X_1, ..., a_m \otimes X_m, 1_{2^m} \otimes X_0)$$

όπου το $\otimes$ είναι το γινόμενο του Kronecker, το X_0 είναι ένας υπερκορεσμένος σχεδιασμός, τα $X_i\ (i = 1, 2, ..., m)$ είναι ορθογώνιοι (1,-1) πίνακες και τα $a_i\ (i = 1, 2, ..., m)$ είναι διανύσματα με στοιχεία (1,-1). Οι διαστάσεις κάθε μέρους στο γινόμενο του Kronecker είναι κατάλληλα επιλεγμένες.

Οι Allen και Bernshteyn (2003) πρότειναν μία νέα τάξη των υπερκορεσμένων σχεδιασμών, η οποία μεγιστοποιεί την πιθανότητα ότι η με βήματα παλινδρόμηση θα ανιχνεύσει τις σημαντικές κύριες επιδράσεις. Οι σχεδιασμοί τους συγκρίνονται με άλλους στη βιβλιογραφία. Ισορροπημένοι ή μη ισορροπημένοι υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί κατασκευάστηκαν βελτιστοποιώντας ένα επιθυμητό κριτήριο, χρησιμοποιώντας έναν απλό αλγόριθμο βελτιστοποίησης.

Οι Bulutoglu και Cheng (2004) έδωσαν μία ακόμα μέθοδο κατασκευής για βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς δύο επιπέδων. Πρότειναν επίσης ένα κατώτερο όριο στο $E(s^2)$, το οποίο είναι ευκρινέστερο από αυτό των Nguyen (1996) και των Butler et al. (2001).

Οι Liu, Ryan και Dean (2007) έδωσαν κάποιες μεθόδους κατασκευής για $E(s^2)$ αποδοτικούς υπερκορεσμένους σχεδιασμούς. Έδωσαν επίσης μέθοδο ανάλυσης για υπερκορεσμένους σχεδιασμούς δύο επιπέδων.

Ο Bulutoglu (2007) έδωσε μία θεωρητική μέθοδο βασισμένη στη μέθοδο κατασκευής των Bulutoglu και Cheng (2004) για $E(s^2)$ βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς.

3.5 Αναζήτηση μέσω ηλεκτρονικού υπολογιστή για βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς

Αν και αρκετοί ερευνητές έχουν δώσει μία σειρά θεωρητικών κατασκευαστικών διαδικασιών, ο αλγόριθμος αναζήτησης μέσω ηλεκτρονικού υπολογιστή, έχει χρησιμοποιηθεί εκτενώς στη βιβλιογραφία για την κατασκευή υπερκορεσμένων σχεδιασμών σε περιπτώσεις ισορροπημένων και μη ισορροπημένων σχεδιασμών. Η ανάγκη αυτή προέκυψε από τη μεγάλη δυσκολία κατασκευής $E(s^2)$ βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών, για οποιαδήποτε n και m.

3.5.1 Ισορροπημένοι υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί

Ο Nguyen (1996) περιέγραψε μία μέθοδο κατασκευής υπερκορεσμένων σχεδιασμών από ισορροπημένους σχεδιασμούς μη πλήρων ομάδων (BIBDs), χρησιμοποιώντας αλγόριθμο ανταλλαγής από στήλες. Ο αλγόριθμος αυτός ονομάζεται αλγόριθμος NOA και μπορεί να περιγραφεί σύντομα ως εξής:

1. Ξεκινήστε κατασκευάζοντας τυχαία έναν ισορροπημένο σχεδιασμό και έπειτα υπολόγισε το $f = \sum_{i<j} s_{ij}^2$ του.

2. Για την στήλη j της επανάληψης του σχεδιασμού, αναζητήστε για ένα ζευγάρι των $i-$ οστών και $u-$ οστών στοιχείων με διαφορετικά σημάδια στη συγκεκριμένη στήλη, έτσι ώστε η ανταλλαγή των δύο αυτών στοιχείων να οδηγήσει στη μεγαλύτερη μείωση του f. Αν η αναζήτηση είναι επιτυχής, ενημέρωσε τον σχεδιασμό, χρησιμοποιώντας αυτό το αποτέλεσμα.

3. Επανέλαβε το Βήμα 2 έως ότου το $f = 0$ ή το f προσεγγίσει το κατώτερό του όριο ή το f δεν μπορεί να μειωθεί περαιτέρω από οποιαδήποτε ανταλλαγή σημαδιών.

Στην ίδια εργασία, ο συγγραφέας ανέπτυξε μία μέθοδο η οποία χρησιμοποιεί ισορροπημένους σχεδιασμούς μη πλήρων ομάδων (BIB σχεδιασμούς) για την κατασκευή των επιθυμητών υπερκορεσμένων σχεδιασμών δύο επιπέδων. Αυτή η μέθοδος μπορεί να θεωρηθεί σαν μία γενίκευση της μεθόδου που πρότεινε ο Lin (1993a) καθώς οι πίνακες Hadamard είναι ειδικές περιπτώσεις των ισορροπημένων σχεδιασμών μη πλήρων ομάδων.

Οι Deng et al. (1996b) όρισαν μία ειδική τάξη των υπερκορεσμένων σχεδιασμών, τους οριακά υπερκορεσμένους σχεδιασμούς (MOSD), στους οποίους ο αριθμός των μεταβλητών υπό έρευνα, είναι κατά ελάχιστα μεγαλύτερος από τις πειραματικές εκτελέσεις. Ξεκίνησαν με έναν κορεσμένο σχεδιασμό δύο επιπέδων H και χρησιμοποίησαν την ακόλουθη απλή διαδικασία, για να επεκτείνουν αυτό τον σχεδιασμό με δύο παραπάνω ισορροπημένες στήλες $m_1,\ m_2$.

- Η m_1 επιλέγεται πρώτη (από ένα σετ τυχαία παραγόμενων ισορροπημένων στηλών) με την υψηλότερη r-rank για το $[H, m_1]$.
- Η m_2 επιλέγεται στη συνέχεια (ξανά από ένα σετ τυχαία παραγόμενων ισορροπημένων στηλών) με την υψηλότερη r-rank για το $[H, m_1, m_2]$.

Οι Li και Wu (1997) ανέπτυξαν αλγόριθμους κατά ζεύγη κατά στήλη για την κατασκευή υπερκορεσμένων σχεδιασμών. Οι αλγόριθμοί τους ανταλλάζουν τις στήλες του πίνακα σχεδιασμού και αναζητούν έναν καλύτερο σχεδιασμό. Οι προτεινόμενοι αλγόριθμοι πιστεύεται ότι λειτουργούν πολύ καλά στην κατασκευή υπερκορεσμένων σχεδιασμών, τόσο για ένα μόνο κριτήριο όσο και για πολλαπλά κριτήρια.

Ο Lejeune (2003) πρότεινε ένα νέο είδος αλγορίθμου ανταλλαγής στηλών που ονομάζεται αλγόριθμος συντονισμού ανταλλαγής στηλών για την κατασκευή υπερκορεσμένων, κορεσμένων και μη κορεσμένων πειραματικών σχεδιασμών. Σε κάθε εκτέλεση, η διαδικασία υποκατάστασης περιοριζόταν σε ένα υποσύνολο συντεταγμένων.

Οι Ryan και Bulutoglu (2007) έδωσαν κάποιες μεθόδους κατασκευής E(s^2)-βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών με καλές minimax ιδιότητες, χρησιμοποιώντας αλγόριθμο αναζήτησης σε ηλεκτρονικό υπολογιστή. Οι Gupta et al. (2008) πρότειναν έναν αλγόριθμο για να δημιουργήσουν αποτελεσματικούς υπερκορεσμένους σχεδιασμούς δύο επιπέδων.

Οι Nguyen και Cheng (2008) έδωσαν έναν αλγόριθμο κατασκευής E(s^2)-βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών. Πρόσφατα, οι Gupta et al. (2010) έδωσαν έναν αλγόριθμο ανταλλαγής συντεταγμένων ανά στήλη, ο οποίος δημιουργεί βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς με τέτοιο τρόπο ώστε να μην υπάρχουν δύο στήλες του παραγόμενου σχεδιασμού που να είναι πλήρως συσχετισμένες.

3.5.2 Μη ισορροπημένοι υπερκορεσμένοι σχεδιασμοί

Όσο για τους μη ισορροπημένους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς, η έρευνα είναι ακόμα σε πρώιμο στάδιο και δεν υπάρχει κάποιο συγκεκριμένο κριτήριο.

3.6 Σύγκριση με άλλους σχεδιασμούς

Σαν σύγκριση, οι σχεδιασμοί του Lin είναι πιο ευέλικτοι στην επιλογή του μεγέθους εκτελέσεων, επειδή οι σχεδιασμοί που παρουσιάστηκαν παραπάνω, απαιτούν την ύπαρξη πίνακα Hadamard τάξης n, ενώ η κατασκευή του Lin απαιτεί τα ίδια για $2n$. Από την άλλη, οι σχεδιασμοί που παρουσιάστηκαν παραπάνω μπορούν να φιλοξενήσουν περισσότερους από $2n-2$ παράγοντες, όπως είδαμε προηγουμένως.

Στον παρακάτω πίνακα, συγκρίνουμε αυτές τις 2 τάξεις σχεδιασμών και εκείνους από τους Booth και Cox (1962), χρησιμοποιώντας το κριτήριο E(s^2). Δεν χρησιμοποιούμε το $E(s^2)/n^2$ για σύγκριση, καθώς οι τιμές του E(s^2) δίνονται στους πίνακες των Booth και Cox (1962) και του Lin. Ο πίνακας δεν περιλαμβάνει σχεδιασμούς με $n=20$, καθώς δεν δίνονται σε καμία εργασία. Για $n=12$, οι σχεδιασμοί στην τελευταία στήλη (υπό τον Wu) είναι εκείνοι που κατασκευάστηκαν προηγουμένως. Για $n=24$ και $m=30$ και 45, οι σχεδιασμοί υπό τον Wu, είναι εκείνοι που κατασκευάστηκαν προηγουμένως, βασισμένοι στον 24 εκτελέσεων PB σχεδιασμό και το $c_0=1$. Για $m=46$, χρησιμοποιούμε την 2×5 στήλη αλληλεπίδρασης ως την 46^{η} στήλη.

Πίνακας 3.2

Τιμές του E(s^2) κάποιων σχεδιασμών των Booth και Cox (1962), του Lin (1992) και του Wu (1992).

(Όπου κάποιος σχεδιασμός δεν είναι διαθέσιμος, υποδεικνύεται με – στον πίνακα.)

$n=12$				$n=24$			
m	BC	Lin	Wu	m	BC	Lin	Wu
16	7,06	6,27	6,00	30	12,06	11,59	9,27
18	9,68	6,59	6,59	45	–	12,80	12,80
21	–	6,86	6,86	46	–	12,80	13,29
22	–	6,86	7,40				
24	10,26	–	8,17				

Οι σχεδιασμοί των Booth και Cox (1962) έχουν μεγαλύτερες τιμές για το E(s^2) από τις άλλες 2 κλάσεις. Για $m \leq 2n-3$, οι σχεδιασμοί του Wu είναι τουλάχιστον τόσο καλοί όσο οι σχεδιασμοί του Lin. Για μικρότερο m, οι σχεδιασμοί του Wu είναι καλύτεροι. Τα πιο ενδιαφέροντα ευρήματα είναι: (i) οι σχεδιασμοί του Lin για $m=2n-2$ έχουν τη μικρότερη τιμή, (ii) για οι σχεδιασμοί του Lin για $m=2n-2$ και $2n-3$ έχουν την ίδια τιμή για το E(s^2). Και οι δύο αξίζουν περαιτέρω διερεύνηση. Η εσωτερική απόδοση των σχεδιασμών του Wu για $m=2n-2$ μπορεί να εξηγηθεί εν μέρει από την κατασκευή τους. Η $(2n-2)^{\eta}$ στήλη χρησιμοποιεί μία $2\times k$ παρέμβαση για κάποια $k>2$, τα οποία έχουν μη μηδενικές συσχετίσεις με την πλειοψηφία των $1\times j$ αλληλεπιδράσεων στην n^{η} έως και τη $(2n-3)^{\eta}$ στήλη.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

Παραδείγματα κατασκευής βέλτιστων υπερκορεσμένων σχεδιασμών

4.1 Μέθοδος half Hadamard, Lin (1993a)

4.1.1 12 εκτελέσεων πίνακας Hadamard

Αρχικά, θα πάρουμε σαν παράδειγμα τον 12 εκτελέσεων πίνακα Hadamard (από τον οποίο έχει αφαιρεθεί η πρώτη στήλη με τα «+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	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	-1	-1	1	-1	-1

από τον οποίο θεωρούμε ως στήλη διακλάδωσης την $5^η$ στήλη. Θα δημιουργήσουμε έναν σχεδιασμό half Hadamard επιλέγοντας τα «+1» από την $5^η$ στήλη. Ο σχεδιασμός που θα προκύψει θα είναι ο εξής:

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	-1	-1

Απαλείφοντας την $5^η$ στήλη, η οποία αποτελείται μόνο από «+1», θα έχουμε τελικά τον ακόλουθο σχεδιασμό, με 10 παράγοντες και 6 εκτελέσεις:

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

Από τον παραπάνω σχεδιασμό, δημιουργούμε αρχικά τον ανάστροφό του, ο οποίος είναι ο εξής:

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

Στη συνέχεια, από τον σχεδιασμό των 10 παραγόντων και 6 εκτελέσεων και από τον ανάστροφό του, δημιουργούμε τον πίνακα $X^T X$:

6	-2	2	2	-2	-2	2	2	2	2
-2	6	-2	2	2	2	2	2	2	-2
2	-2	6	2	2	2	-2	2	-2	2
2	2	2	6	2	-2	-2	2	2	-2
-2	2	2	2	6	2	-2	-2	2	2
-2	2	2	-2	2	6	2	2	-2	2
2	2	-2	-2	-2	2	6	2	2	2
2	2	2	2	-2	2	2	6	-2	-2
2	2	-2	2	2	-2	2	-2	6	2
2	-2	2	-2	2	2	2	-2	2	6

Παρατηρούμε ότι εκτός της διαγωνίου υπάρχουν 60 στοιχεία «2» και 30 στοιχεία «-2». Υπολογίζοντας την τιμή του $E(s^2)$ και του κατώτερου ορίου, αποδεικνύεται ότι ταυτίζονται και άρα αποδεικνύεται ότι η συγκεκριμένη μέθοδος του Lin (1993a) οδηγεί πάντα σε $E(s^2)$ βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς.

$$E(s^2)=\frac{n*\left[m^2+(n-1)*\left(\frac{-m}{n-1}\right)^2-m*n\right]}{m*(m-1)}=\frac{6*\left[10^2+(6-1)*\left(\frac{-10}{6-1}\right)^2-10*6\right]}{10*(10-1)}=\frac{6*(100+5*4-60)}{90}=\frac{36}{4}=4$$

ή εναλλακτικά:

$$E\left(s^2\right)=\frac{60*2^2+30*(-2)^2}{60+30}=\frac{240+120}{90}=\frac{360}{90}=4$$

Το κατώτερο όριο όταν το m είναι πολλαπλάσιο του $n-1$, δόθηκε από τον Nguyen (1996) και επίσης ανεξάρτητα και από τους Tang και Wu (1997) και είναι το εξής:

$$LB=\frac{n^2*(m-n+1)}{(n-1)*(m-1)}.$$

Άρα,

$$LB=\frac{n^2*(m-n+1)}{(n-1)*(m-1)}=\frac{6^2*(10-6+1)}{(6-1)*(10-1)}=\frac{36*5}{5*9}=4$$

Η δοκιμή επαληθεύτηκε και με άλλες στήλες διακλάδωσης. Όλες έδωσαν τα ίδια αποτελέσματα.

Είδαμε ότι η συγκεκριμένη μέθοδος του Lin (1993a) οδηγεί πάντα σε $E(s^2)$ βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς. Στο σημείο αυτό θα εξετάσουμε τι σχεδιασμό θα πάρουμε αν από τον σχεδιασμό των 10 παραγόντων και 6 εκτελέσεων που μελετήθηκε προηγουμένως, αφαιρέσουμε έναν παράγοντα (στήλη), έστω την $9^η$ στήλη. Ο καινούριος σχεδιασμός που θα προκύψει θα έχει 9 παράγοντες και 6 εκτελέσεις και θα είναι ο εξής:

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

Από τον παραπάνω σχεδιασμό, δημιουργούμε αρχικά τον ανάστροφό του, ο οποίος είναι ο εξής:

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

Στη συνέχεια, από τον σχεδιασμό των 9 παραγόντων και 6 εκτελέσεων και από τον ανάστροφό του, δημιουργούμε τον πίνακα $X^T X$:

6	-2	2	2	-2	-2	2	2	2
-2	6	-2	2	2	2	2	2	-2
2	-2	6	2	2	2	-2	2	2
2	2	2	6	2	-2	-2	2	-2
-2	2	2	2	6	2	-2	-2	2
-2	2	2	-2	2	6	2	2	2
2	2	-2	-2	-2	2	6	2	2
2	2	2	2	-2	2	2	6	-2
2	-2	2	-2	2	2	2	-2	6

Παρατηρούμε ότι εκτός της διαγωνίου υπάρχουν 48 στοιχεία «2» και 24 στοιχεία «-2». Υπολογίζοντας την τιμή του $E(s^2)$ και του κατώτερου ορίου, αποδεικνύεται ότι ταυτίζονται και άρα καταφέραμε με τη συγκεκριμένη μέθοδο, να δημιουργήσουμε $E(s^2)$ βέλτιστο υπερκορεσμένο σχεδιασμό.

$$E\left(s^2\right) = \frac{48 * 2^2 + 24 * \left(-2\right)^2}{48+24} = \frac{192+96}{72} = \frac{288}{72} = 4$$

Το βέλτιστο κατώτερο όριο όταν ο αριθμός των παραγόντων m δεν είναι πολλαπλάσιος του $n-1$, είναι αυτό που δόθηκε από τους Das et al. (2008):

$$LB_D = \frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)} + \frac{n}{m(m-1)}\left(D(n,r) - \frac{r^2}{n-1} \right),$$

όπου

$$D(n,r)=\begin{cases} n+2r-3 & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 1 \bmod 4, \\ 2n-4 & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 2 \bmod 4, \\ n+2r+1 & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 3 \bmod 4, \\ 4r & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 0 \bmod 4, \end{cases}$$

Εδώ, για $n=6$ και $m=9$, το $r=1$ και το $D(n,r)=n+2r-3=6+2*1-3=5$

Άρα,

$$LB_D=\frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)}+\frac{n}{m(m-1)}\left(D(n,r)-\frac{r^2}{n-1}\right)=\frac{6^2(9-6+1)}{(6-1)(9-1)}+\frac{6}{9(9-1)}\left(5-\frac{1^2}{6-1}\right)=\frac{144}{40}+\frac{6}{72}\left(5-\frac{1}{5}\right)=3,6+0,4=4$$

4.1.2 20 εκτελέσεων πίνακας Hadamard

Στη συνέχεια, θα πάρουμε σαν παράδειγμα τον 20 εκτελέσεων πίνακα Hadamard (από τον οποίο έχει αφαιρεθεί η πρώτη στήλη με τα «+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	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	-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	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	-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	-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

από τον οποίο θεωρούμε ως στήλη διακλάδωσης την 11^{η} στήλη. Θα δημιουργήσουμε έναν σχεδιασμό half Hadamard επιλέγοντας τα «+1» από την 11^{η} στήλη. Ο σχεδιασμός που θα προκύψει θα είναι ο εξής:

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	-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	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

Απαλείφοντας την $11^{η}$ στήλη, η οποία αποτελείται μόνο από «+1», θα έχουμε τελικά τον ακόλουθο σχεδιασμό, με 18 παράγοντες και 10 εκτελέσεις:

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	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	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

Από τον παραπάνω σχεδιασμό, δημιουργούμε αρχικά τον ανάστροφό του, ο οποίος είναι ο εξής:

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	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	-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

Στη συνέχεια, από τον σχεδιασμό των 18 παραγόντων και 10 εκτελέσεων και από τον ανάστροφό του, δημιουργούμε τον πίνακα $X^T X$:

10	2	-2	2	6	2	-2	-2	2	2	-2	-2	-2	2	-2	2	2	2
2	10	-2	-2	-2	2	-2	2	2	2	2	-2	2	6	2	-2	-2	2
-2	-2	10	-2	-2	2	2	-2	2	6	2	2	2	-2	-2	2	2	2
2	-2	-2	10	2	2	2	-2	-2	-2	6	2	-2	2	2	2	2	-2
6	-2	-2	2	10	-2	-2	2	2	2	-2	2	2	-2	2	2	2	-2
2	2	2	2	-2	10	2	-2	6	-2	2	-2	-2	-2	2	-2	2	2
-2	-2	2	2	-2	2	10	2	2	-2	-2	2	-2	2	2	6	-2	2
-2	2	-2	-2	2	-2	2	10	2	-2	-2	6	2	2	2	-2	2	2
2	2	2	-2	2	6	2	2	10	2	-2	2	-2	-2	2	-2	-2	-2
2	2	6	-2	2	-2	-2	-2	2	10	2	2	2	2	-2	2	-2	-2
-2	2	2	6	-2	2	-2	-2	-2	2	10	2	2	2	2	-2	2	-2
-2	-2	2	2	2	-2	2	6	2	2	2	10	-2	2	-2	-2	2	-2
-2	2	2	-2	2	-2	-2	2	-2	2	2	-2	10	-2	6	2	2	2
2	6	-2	2	-2	-2	2	2	-2	2	2	2	-2	10	-2	2	-2	2
-2	2	-2	2	2	2	2	2	2	-2	2	-2	6	-2	10	2	-2	-2
2	-2	2	2	2	-2	6	-2	-2	2	-2	-2	2	2	2	10	-2	2
2	-2	2	2	2	2	-2	2	-2	-2	2	2	2	-2	-2	-2	10	6
2	2	2	-2	-2	2	2	2	-2	-2	-2	-2	2	2	-2	2	6	10

Παρατηρούμε ότι εκτός της διαγωνίου υπάρχουν 126 στοιχεία «-2», 162 στοιχεία «2» και 18 στοιχεία «6». Υπολογίζοντας την τιμή του $E(s^2)$ και του κατώτερου ορίου, αποδεικνύεται ότι ταυτίζονται και άρα αποδεικνύεται ότι η συγκεκριμένη μέθοδος του Lin (1993a) οδηγεί πάντα σε $E(s^2)$ βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς.

$$E(s^2) = \frac{n * \left[m^2 + (n-1) * \left(\frac{-m}{n-1} \right)^2 - m*n \right]}{m*(m-1)} = \frac{10 * \left[18^2 + (10-1) * \left(\frac{-18}{10-1} \right)^2 - 18*10 \right]}{18*(18-1)} = \frac{10*\left(324+9*4-180\right)}{306} = \frac{1800}{306} \approx 5{,}8824$$

ή εναλλακτικά:

$$E\left(s^2\right) = \frac{18*6^2 + 126*\left(-2\right)^2 + 162*2^2}{18+126+162} = \frac{648+504+648}{306} = \frac{1800}{306} \approx 5{,}8824$$

Το κατώτερο όριο όταν το m είναι πολλαπλάσιο του $n-1$, δόθηκε από τον Nguyen (1996) και επίσης ανεξάρτητα και από τους Tang και Wu (1997) και είναι το εξής:

$$LB = \frac{n^2 * \left(m-n+1\right)}{\left(n-1\right)*\left(m-1\right)}.$$

Άρα,

$$LB = \frac{n^2 * \left(k-n+1\right)}{(n-1)*(k-1)} = \frac{10^2 * (18-10+1)}{(10-1)*(18-1)} = \frac{100*9}{9*17} \approx 5{,}8824$$

Η δοκιμή επαληθεύτηκε και με άλλες στήλες διακλάδωσης. Όλες έδωσαν τα ίδια αποτελέσματα.

Είδαμε ότι η συγκεκριμένη μέθοδος του Lin (1993a) οδηγεί πάντα σε $E(s^2)$ βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς. Στο σημείο αυτό θα εξετάσουμε τι σχεδιασμό θα πάρουμε αν από τον σχεδιασμό των 18 παραγόντων και 10 εκτελέσεων που μελετήθηκε προηγουμένως, αφαιρέσουμε έναν παράγοντα (στήλη), έστω την $13^{η}$ στήλη. Ο καινούριος σχεδιασμός που θα προκύψει θα έχει 17 παράγοντες και 10 εκτελέσεις και θα είναι ο εξής:

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	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	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

Από τον παραπάνω σχεδιασμό, δημιουργούμε αρχικά τον ανάστροφό του, ο οποίος είναι ο εξής:

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	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	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

Στη συνέχεια, από τον σχεδιασμό των 17 παραγόντων και 10 εκτελέσεων και από τον ανάστροφό του, δημιουργούμε τον πίνακα $X^T X$:

10	2	-2	2	6	2	-2	-2	2	2	-2	-2	2	-2	2	2	2
2	10	-2	-2	-2	2	-2	2	2	2	2	-2	6	2	-2	-2	2
-2	-2	10	-2	-2	2	2	-2	2	6	2	2	-2	-2	2	2	2
2	-2	-2	10	2	2	2	-2	-2	-2	6	2	2	2	2	2	-2
6	-2	-2	2	10	-2	-2	2	2	2	-2	2	-2	2	2	2	-2
2	2	2	2	-2	10	2	-2	6	-2	2	-2	-2	2	-2	2	2
-2	-2	2	2	-2	2	10	2	2	-2	-2	2	2	2	6	-2	2
-2	2	-2	-2	2	-2	2	10	2	-2	-2	6	2	2	-2	2	2
2	2	2	-2	2	6	2	2	10	2	-2	2	-2	2	-2	-2	-2
2	2	6	-2	2	-2	-2	-2	2	10	2	2	2	-2	2	-2	-2
-2	2	2	6	-2	2	-2	-2	-2	2	10	2	2	2	-2	2	-2
-2	-2	2	2	2	-2	2	6	2	2	2	10	2	-2	-2	2	-2
2	6	-2	2	-2	-2	2	2	-2	2	2	2	10	-2	2	-2	2
-2	2	-2	2	2	2	2	2	2	-2	2	-2	-2	10	2	-2	-2
2	-2	2	2	2	-2	6	-2	-2	2	-2	-2	2	2	10	-2	2
2	-2	2	2	2	2	-2	2	-2	-2	2	2	-2	-2	-2	10	6
2	2	2	-2	-2	2	2	2	-2	-2	-2	-2	2	-2	2	6	10

Παρατηρούμε ότι εκτός της διαγωνίου υπάρχουν 112 στοιχεία «-2», 144 στοιχεία «2» και 16 στοιχεία «6». Υπολογίζοντας την τιμή του $E(s^2)$ και του κατώτερου ορίου, αποδεικνύεται ότι οι 2 τιμές είναι ίσες μεταξύ τους και συνεπώς ο συγκεκριμένος σχεδιασμός που φτιάξαμε είναι $E(s^2)$ βέλτιστος υπερκορεσμένος σχεδιασμός.

$$E\left(s^2\right)=\frac{112*\left(-2\right)^2+144*2^2+16*6^2}{112+144+16}=\frac{448+576+576}{272}=\frac{1600}{272}\approx 5{,}8824$$

Το βέλτιστο κατώτερο όριο όταν ο αριθμός των παραγόντων m δεν είναι πολλαπλάσιος του $n-1$, είναι αυτό που δόθηκε από τους Das et al. (2008):

$$LB_D=\frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)}+\frac{n}{m(m-1)}\left(D(n,r)-\frac{r^2}{n-1}\right),$$

όπου

$$D(n,r)=\begin{cases} n+2r-3 & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 1 \bmod 4, \\ 2n-4 & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 2 \bmod 4, \\ n+2r+1 & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 3 \bmod 4, \\ 4r & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 0 \bmod 4, \end{cases}$$

Εδώ, για $n=10$ και $m=17$, το $r=1$ και το $D\left(n,r\right)=n+2r-3=10+2*1-3=9$

Άρα,

$$LB_D=\frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)}+\frac{n}{m(m-1)}\left(D(n,r)-\frac{r^2}{n-1}\right)=\frac{10^2\left(17-10+1\right)}{(10-1)\left(17-1\right)}+\frac{10}{17\left(17-1\right)}\left(9-\frac{1^2}{10-1}\right)=\frac{800}{144}+\frac{10}{272}\left(9-\frac{1}{9}\right)=5{,}55+0{,}327\approx 5{,}8824$$

4.2 Μέθοδος Wu (1993)

4.2.1 12 εκτελέσεων πίνακας Hadamard, m=66

Θα δούμε τώρα ένα παράδειγμα, το οποίο εφαρμόζεται σε έναν 12 εκτελέσεων πίνακα Hadamard. Από τον πίνακα αυτό έχουμε σχεδιασμό ο οποίος αποτελείται από όλες τις κύριες επιδράσεις και όλες τις στήλες αλληλεπίδρασης δύο παραγόντων. Ο αρχικός πίνακας Hadamard είναι ο εξής (από τον οποίο έχει αφαιρεθεί η πρώτη στήλη με τα «+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	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	-1	-1	1	-1	-1

Από αυτόν τον πίνακα Hadamard, βρίσκουμε όλες τις αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων. Τελικά, έχουμε έναν σχεδιασμό με $n=12$ εκτελέσεις και $m=66$ στήλες. Εξ' αιτίας του μεγέθους του παραπάνω σχεδιασμού, θα δείξουμε μόνο τα αριθμητικά αποτελέσματα, από τα οποία προκύπτει ότι η συγκεκριμένη μέθοδος του Wu (1993) οδηγεί πάντα σε E(s^2) βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς.

Ο πίνακας $X^T X$ είναι ένας πίνακας ο οποίος αποτελείται από 66 στήλες και 66 εκτελέσεις. Για τον λόγο αυτό δεν είναι δυνατό να παρουσιαστεί εδώ. Παρατηρούμε ότι εκτός της διαγωνίου υπάρχουν 1320 στοιχεία «0», 1980 στοιχεία «4» και 990 στοιχεία «-4».

Τα αριθμητικά αποτελέσματα για την τιμή του E(s^2) είναι:

$$E(s^2)=\frac{n*\left[m^2+(n-1)*\left(\frac{-m}{n-1}\right)^2-m*n\right]}{m*(m-1)}=\frac{12*\left[66^2+(12-1)*\left(\frac{-66}{12-1}\right)^2-66*12\right]}{66*(66-1)}=\frac{12*(4356+11*36-792)}{4290}=\frac{47520}{4290}\approx 11,077$$

ή εναλλακτικά:

$$E\left(s^2\right)=\frac{1320*0^2+1980*4^2+990*(-4)^2}{1320+1980+990}=\frac{0+31680+15840}{4290}=\frac{47520}{4290}\approx 11,077$$

Το κατώτερο όριο όταν το m είναι πολλαπλάσιο του $n-1$, δόθηκε από τον Nguyen (1996) και επίσης ανεξάρτητα και από τους Tang και Wu (1997) και είναι το εξής:

$$LB = \frac{n^2 * (m - n + 1)}{(n-1) * (m-1)}.$$

Άρα,

$$LB = \frac{n^2 * (m - n + 1)}{(n-1) * (m-1)} = \frac{12^2 * (66 - 12 + 1)}{(12-1) * (66-1)} = \frac{144 * 55}{715} = \frac{7920}{715} \approx 11,077$$

Είδαμε ότι η συγκεκριμένη μέθοδος του Wu (1993) οδηγεί πάντα σε $E(s^2)$ βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς. Στο σημείο αυτό θα εξετάσουμε τι σχεδιασμό θα πάρουμε αν από τον σχεδιασμό των 66 παραγόντων και 12 εκτελέσεων που μελετήθηκε προηγουμένως, αφαιρέσουμε έναν παράγοντα (στήλη), έστω την $40^{η}$ στήλη. Ο καινούριος σχεδιασμός που θα προκύψει θα έχει 65 παράγοντες και 12 εκτελέσεις. Εξ' αιτίας του μεγέθους του παραπάνω σχεδιασμού, θα δείξουμε μόνο τα αριθμητικά αποτελέσματα.

Ο πίνακας $X^T X$ είναι ένας πίνακας ο οποίος αποτελείται από 65 στήλες και 65 εκτελέσεις. Για τον λόγο αυτό δεν είναι δυνατό να παρουσιαστεί εδώ. Παρατηρούμε ότι εκτός της διαγωνίου υπάρχουν 1280 στοιχεία «0», 1920 στοιχεία «4» και 960 στοιχεία «-4».

Τα αριθμητικά αποτελέσματα για την τιμή του $E(s^2)$ είναι:

$$E(s^2) = \frac{1280 * 0^2 + 1920 * 4^2 + 960 * (-4)^2}{1280 + 1920 + 960} = \frac{0 + 30720 + 15360}{4160} = \frac{46080}{4160} \approx 11,077$$

Το βέλτιστο κατώτερο όριο όταν ο αριθμός των παραγόντων m δεν είναι πολλαπλάσιος του $n-1$, είναι αυτό που δόθηκε από τους Das et al. (2008):

$$LB_D = \frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)} + \frac{n}{m(m-1)}\left(D(n,r) - \frac{r^2}{n-1}\right),$$

όπου

$$D(n,r) = \begin{cases} n + 2r - 3 & \text{για } |\mathrm{r}| \equiv 1 \bmod 4, \\ 2n - 4 & \text{για } |\mathrm{r}| \equiv 2 \bmod 4, \\ n + 2r + 1 & \text{για } |\mathrm{r}| \equiv 3 \bmod 4, \\ 4r & \text{για } |\mathrm{r}| \equiv 0 \bmod 4, \end{cases}$$

Εδώ, για $n = 12$ και $m = 65$, το $r = 1$ και το $D(n,r) = n + 2r - 3 = 12 + 2*1 - 3 = 11$

Άρα,

$$LB_D = \frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)} + \frac{n}{m(m-1)}\left(D(n,r) - \frac{r^2}{n-1}\right) = \frac{12^2(65-12+1)}{(12-1)(65-1)} + \frac{12}{65(65-1)}\left(11 - \frac{1^2}{12-1}\right) = \frac{7776}{704} + \frac{12}{4160}\left(11 - \frac{1}{11}\right) = 11,045 + 0,0315 \approx 11,08$$

Οι δύο τιμές είναι ίσες μεταξύ τους, συνεπώς ο συγκεκριμένος σχεδιασμός που φτιάξαμε είναι $E(s^2)$ βέλτιστος υπερκορεσμένος σχεδιασμός.

4.2.2 12 εκτελέσεων πίνακας Hadamard, m=55

Θα δούμε τώρα ένα παράδειγμα, το οποίο εφαρμόζεται σε έναν 12 εκτελέσεων πίνακα Hadamard. Από τον πίνακα αυτό έχουμε σχεδιασμό ο οποίος αποτελείται από όλες τις στήλες αλληλεπίδρασης δύο παραγόντων. Ο αρχικός πίνακας Hadamard είναι ο ίδιος με τον πίνακα στο 4.2.1.

Από αυτόν τον πίνακα Hadamard, βρίσκουμε όλες τις αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων. Τελικά, έχουμε έναν σχεδιασμό με $n=12$ εκτελέσεις και $m=55$ στήλες. Εξ' αιτίας του μεγέθους του παραπάνω σχεδιασμού, θα δείξουμε μόνο τα αριθμητικά αποτελέσματα, από τα οποία προκύπτει ότι η συγκεκριμένη μέθοδος του Wu (1993) οδηγεί πάντα σε E(s^2) βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς.

Ο πίνακας $X^T X$ είναι ένας πίνακας ο οποίος αποτελείται από 55 στήλες και 55 εκτελέσεις. Για τον λόγο αυτό δεν είναι δυνατό να παρουσιαστεί εδώ. Παρατηρούμε ότι εκτός της διαγωνίου υπάρχουν 990 στοιχεία «0», 1320 στοιχεία «4» και 660 στοιχεία «-4».

Τα αριθμητικά αποτελέσματα για την τιμή του E(s^2) είναι:

$$E(s^2)=\frac{n*\left[k^2+(n-1)*\left(\frac{-k}{n-1}\right)^2-k*n\right]}{k*(k-1)}=\frac{12*\left[55^2+(12-1)*\left(\frac{-55}{12-1}\right)^2-55*12\right]}{55*(55-1)}=\frac{12*\left(3025+11*25-660\right)}{2970}=\frac{31680}{2970}\approx 10,667$$

ή εναλλακτικά:

$$E\left(s^2\right)=\frac{990*0^2+1320*4^2+660*\left(-4\right)^2}{990+1320+660}=\frac{0+21120+10560}{2970}=\frac{31680}{2970}\approx 10,667$$

Το κατώτερο όριο όταν το m είναι πολλαπλάσιο του $n-1$, δόθηκε από τον Nguyen (1996) και επίσης ανεξάρτητα και από τους Tang και Wu (1997) και είναι το εξής:

$$LB=\frac{n^2*\left(m-n+1\right)}{\left(n-1\right)*\left(m-1\right)}.$$

Άρα,

$$LB=\frac{n^2*\left(m-n+1\right)}{(n-1)*(m-1)}=\frac{12^2*(55-12+1)}{(12-1)*(55-1)}=\frac{144*44}{594}=\frac{6336}{594}\approx 10,667$$

Είδαμε ότι η συγκεκριμένη μέθοδος του Wu (1993) οδηγεί πάντα σε E(s^2) βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς. Στο σημείο αυτό θα εξετάσουμε τι σχεδιασμό θα πάρουμε αν από τον σχεδιασμό των 55 παραγόντων και 12 εκτελέσεων που μελετήθηκε προηγουμένως, αφαιρέσουμε έναν παράγοντα (στήλη), έστω την 42η στήλη. Ο καινούριος σχεδιασμός που θα προκύψει θα έχει 54 παράγοντες και 12 εκτελέσεις. Εξ' αιτίας του μεγέθους του παραπάνω σχεδιασμού, θα δείξουμε μόνο τα αριθμητικά αποτελέσματα.

Ο πίνακας $X^T X$ είναι ένας πίνακας ο οποίος αποτελείται από 54 στήλες και 54 εκτελέσεις. Για τον λόγο αυτό δεν είναι δυνατό να παρουσιαστεί εδώ. Παρατηρούμε ότι εκτός της διαγωνίου υπάρχουν 954 στοιχεία «0», 1272 στοιχεία «4» και 636 στοιχεία «-4».

Τα αριθμητικά αποτελέσματα για την τιμή του E(s^2) είναι:

$$E\left(s^2\right)=\frac{954*0^2+1272*4^2+636*\left(-4\right)^2}{954+1272+636}=\frac{0+20352+10176}{2862}=\frac{30528}{2862}\approx 10,667$$

Το βέλτιστο κατώτερο όριο όταν ο αριθμός των παραγόντων m δεν είναι πολλαπλάσιος του $n-1$, είναι αυτό που δόθηκε από τους Das et al. (2008):

$$LB_D=\frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)}+\frac{n}{m(m-1)}\left(D(n,r)-\frac{r^2}{n-1}\right),$$

όπου

$$D(n,r)=\begin{cases} n+2r-3 & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 1 \bmod 4, \\ 2n-4 & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 2 \bmod 4, \\ n+2r+1 & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 3 \bmod 4, \\ 4r & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 0 \bmod 4, \end{cases}$$

Εδώ, για $n=12$ και $m=54$, το $r=1$ και το $D\left(n,r\right)=n+2r-3=12+2*1-3=11$

Άρα,

$$LB_D=\frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)}+\frac{n}{m(m-1)}\left(D(n,r)-\frac{r^2}{n-1}\right)=\frac{12^2\left(54-12+1\right)}{\left(12-1\right)\left(54-1\right)}+\frac{12}{54\left(54-1\right)}\left(11-\frac{1^2}{12-1}\right)=\frac{6192}{583}+\frac{12}{2862}\left(11-\frac{1}{11}\right)=10,62+0,04575\approx 10,667$$

Οι δύο τιμές είναι ίσες μεταξύ τους, συνεπώς ο συγκεκριμένος σχεδιασμός που φτιάξαμε είναι E(s^2) βέλτιστος υπερκορεσμένος σχεδιασμός.

4.2.3 12 εκτελέσεων πίνακας Hadamard, m=21

Θα δούμε τώρα ένα παράδειγμα, το οποίο εφαρμόζεται σε έναν 12 εκτελέσεων πίνακα Hadamard. Από τον πίνακα αυτό έχουμε σχεδιασμό ο οποίος αποτελείται από όλες τις κύριες επιδράσεις και από τις αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων με τη συμμετοχή ενός δοσμένου παράγοντα, συγκεκριμένα της τρίτης στήλης. Ο αρχικός πίνακας Hadamard είναι ο ίδιος με τον πίνακα των προηγούμενων 2 παραδειγμάτων.

Τελικά, έχουμε έναν σχεδιασμό με $n = 12$ εκτελέσεις και $m = 21$ στήλες. Ο σχεδιασμός είναι ο εξής:

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	-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	-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	-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

Ο πίνακας $X^T X$ είναι ο εξής:

12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	-4	-4	4	4	-4	4	4	4
0	0	12	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	4	4	-4	4	-4	4	4	-4
0	0	0	12	0	0	0	0	0	0	0	-4	4	0	4	4	4	4	4	-4	-4
0	0	0	0	12	0	0	0	0	0	0	-4	4	4	0	-4	-4	4	4	4	4
0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	0	4	-4	4	-4	0	4	4	4	-4	4
0	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	4	4	4	-4	4	0	4	-4	4	-4
0	0	0	0	0	0	0	12	0	0	0	-4	-4	4	4	4	4	0	-4	4	4
0	0	0	0	0	0	0	0	12	0	0	4	4	4	4	4	-4	-4	0	-4	4
0	0	0	0	0	0	0	0	0	12	0	4	4	-4	4	-4	4	4	-4	0	4
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	12	4	-4	-4	4	4	-4	4	4	4	0
0	0	4	-4	-4	4	4	-4	4	4	4	12	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	4	0	4	4	-4	4	-4	4	4	-4	0	12	0	0	0	0	0	0	0	0
0	-4	4	0	4	4	4	4	4	-4	-4	0	0	12	0	0	0	0	0	0	0
0	-4	4	4	0	-4	-4	4	4	4	4	0	0	0	12	0	0	0	0	0	0
0	4	-4	4	-4	0	4	4	4	-4	4	0	0	0	0	12	0	0	0	0	0
0	4	4	4	-4	4	0	4	-4	4	-4	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0
0	-4	-4	4	4	4	4	0	-4	4	4	0	0	0	0	0	0	12	0	0	0
0	4	4	4	4	4	-4	-4	0	-4	4	0	0	0	0	0	0	0	12	0	0
0	4	4	-4	4	-4	4	4	-4	0	4	0	0	0	0	0	0	0	0	12	0
0	4	-4	-4	4	4	-4	4	4	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	12

Παρατηρούμε ότι εκτός της διαγωνίου υπάρχουν 240 στοιχεία «0», 120 στοιχεία «4» και 60 στοιχεία «-4». Τα αριθμητικά αποτελέσματα, από τα οποία προκύπτει ότι η συγκεκριμένη μέθοδος του Wu (1993) οδηγεί πάντα σε E(s^2) βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς είναι τα εξής:

$$E\left(s^2\right) = \frac{240*0^2 + 120*4^2 + 60\left(-4\right)^2}{240+120+60} = \frac{0+1920+960}{420} = \frac{2880}{420} \approx 6,86$$

Το βέλτιστο κατώτερο όριο όταν ο αριθμός των παραγόντων m δεν είναι πολλαπλάσιος του $n-1$, είναι αυτό που δόθηκε από τους Das et al. (2008):

$$LB_D = \frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)} + \frac{n}{m(m-1)}\left(D(n,r) - \frac{r^2}{n-1}\right),$$

όπου

$$D(n,r) = \begin{cases} n+2r-3 & \text{για } |\mathrm{r}| \equiv 1 \bmod 4, \\ 2n-4 & \text{για } |\mathrm{r}| \equiv 2 \bmod 4, \\ n+2r+1 & \text{για } |\mathrm{r}| \equiv 3 \bmod 4, \\ 4r & \text{για } |\mathrm{r}| \equiv 0 \bmod 4, \end{cases}$$

Εδώ, για $n = 12$ και $m = 21$, το $r = 1$ και το $D\left(n,r\right) = n + 2r - 3 = 12 + 2*1 - 3 = 11.$

Άρα,

$$LB_D = \frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)} + \frac{n}{m(m-1)}\left(D(n,r) - \frac{r^2}{n-1}\right) = \frac{12^2\left(21-12+1\right)}{\left(12-1\right)\left(21-1\right)} + \frac{12}{21\left(21-1\right)}\left(11 - \frac{1^2}{12-1}\right) = \frac{144*10}{11*20} + \frac{12}{21*20}\left(11 - \frac{1}{11}\right) = 6,54 + 0,32 \approx 6,86$$

Η δοκιμή επαληθεύτηκε και με άλλες στήλες ως στήλες υπολογισμού των αλληλεπιδράσεων δύο παραγόντων. Όλες έδωσαν τα ίδια αποτελέσματα.

Είδαμε ότι η συγκεκριμένη μέθοδος του Wu (1993) οδηγεί πάντα σε E(s^2) βέλτιστους υπερκορεσμένους σχεδιασμούς. Στο σημείο αυτό θα εξετάσουμε τι σχεδιασμό θα πάρουμε αν από τον σχεδιασμό των 21 παραγόντων και 12 εκτελέσεων που μελετήθηκε προηγουμένως, αφαιρέσουμε έναν παράγοντα (στήλη), έστω την $20^{η}$ στήλη. Ο καινούριος σχεδιασμός που θα προκύψει θα έχει 20 παράγοντες και 12 εκτελέσεις.

Ο πίνακας $X^T X$ είναι ο εξής:

12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	-4	-4	4	4	-4	4	4
0	0	12	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	4	4	-4	4	-4	4	-4
0	0	0	12	0	0	0	0	0	0	0	-4	4	0	4	4	4	4	4	-4
0	0	0	0	12	0	0	0	0	0	0	-4	4	4	0	-4	-4	4	4	4
0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	0	4	-4	4	-4	0	4	4	4	4
0	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	4	4	4	-4	4	0	4	-4	-4
0	0	0	0	0	0	0	12	0	0	0	-4	-4	4	4	4	4	0	-4	4
0	0	0	0	0	0	0	0	12	0	0	4	4	4	4	4	-4	-4	0	4
0	0	0	0	0	0	0	0	0	12	0	4	4	-4	4	-4	4	4	-4	4
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	12	4	-4	-4	4	4	-4	4	4	0
0	0	4	-4	-4	4	4	-4	4	4	4	12	0	0	0	0	0	0	0	0
0	4	0	4	4	-4	4	-4	4	4	-4	0	12	0	0	0	0	0	0	0
0	-4	4	0	4	4	4	4	4	-4	-4	0	0	12	0	0	0	0	0	0
0	-4	4	4	0	-4	-4	4	4	4	4	0	0	0	12	0	0	0	0	0
0	4	-4	4	-4	0	4	4	4	-4	4	0	0	0	0	12	0	0	0	0
0	4	4	4	-4	4	0	4	-4	4	-4	0	0	0	0	0	12	0	0	0
0	-4	-4	4	4	4	4	0	-4	4	4	0	0	0	0	0	0	12	0	0
0	4	4	4	4	4	-4	-4	0	-4	4	0	0	0	0	0	0	0	12	0
0	4	-4	-4	4	4	-4	4	4	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	12

Παρατηρούμε ότι εκτός της διαγωνίου υπάρχουν 218 στοιχεία «0», 108 στοιχεία «4» και 54 στοιχεία «-4».

Τα αριθμητικά αποτελέσματα για την τιμή του E(s^2) είναι:

$$E\left(s^2\right)=\frac{218*0^2+108*4^2+54\left(-4\right)^2}{218+108+54}=\frac{0+1728+864}{380}=\frac{2592}{380}\approx 6,821$$

Το βέλτιστο κατώτερο όριο όταν ο αριθμός των παραγόντων m δεν είναι πολλαπλάσιος του $n-1$, είναι αυτό που δόθηκε από τους Das et al. (2008):

$$LB_D=\frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)}+\frac{n}{m(m-1)}\left(D(n,r)-\frac{r^2}{n-1}\right),$$

όπου

$$D(n,r)=\begin{cases} n+2r-3 & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 1 \bmod 4, \\ 2n-4 & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 2 \bmod 4, \\ n+2r+1 & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 3 \bmod 4, \\ 4r & \text{για } |\mathrm{r}|\equiv 0 \bmod 4, \end{cases}$$

Εδώ, για $n=12$ και $m=20$, το $r=1$και το $D(n,r)=n+2r-3=12+2*1-3=11.$

Άρα,

$$LB_D=\frac{n^2(m-n+1)}{(n-1)(m-1)}+\frac{n}{m(m-1)}\left(D(n,r)-\frac{r^2}{n-1}\right)=\frac{12^2(20-12+1)}{(12-1)(20-1)}+\frac{12}{20(20-1)}\left(11-\frac{1^2}{12-1}\right)=\frac{1296}{209}+\frac{12}{380}\left(11-\frac{1}{11}\right)=6,2+0,345\approx 6,545$$

Οι δύο τιμές είναι διάφορες μεταξύ τους, συνεπώς ο συγκεκριμένος σχεδιασμός που φτιάξαμε δεν είναι E(s^2) βέλτιστος υπερκορεσμένος σχεδιασμός.

Αν πάρουμε τον X να είναι ένας σχεδιασμός του Paley D_n μεγέθους n, $n\geq 12$, τότε από το Θεώρημα 1.1, πάντοτε οι σχεδιασμοί που προκύπτουν δεν έχουν πλήρως συσχετισμένες στήλες και ως εκ τούτου είναι E(s^2) βέλτιστοι. Αυτοί είναι οι μοναδικοί σχεδιασμοί οι οποίοι κατασκευάστηκαν από τη μέθοδο του Wu (1993), των οποίων μπορούμε να αποδείξουμε την E(s^2) βελτιστοποίηση. Για παράδειγμα, αν προσπαθήσουμε να εφαρμόσουμε το ίδιο επιχείρημα που εφαρμόσαμε στο Πόρισμα 3.3 για να δείξουμε τη βελτιστοποίηση του σχεδιασμού που δίνεται προσθέτοντας όλα τα ζευγαρωτά γινόμενα Hadamard που περιλαμβάνουν δύο συγκεκριμένους παράγοντες σε μία κορεσμένη ορθογώνια διάταξη, τότε θα πρέπει να μετακινηθούν 3 στήλες από έναν σχεδιασμό που ελαχιστοποιεί την τιμή του E(s^2). Δεν υπάρχει εγγύηση ότι ο σχεδιασμός που προκύπτει είναι ακόμα E(s^2) βέλτιστος.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Ελληνική

Ευαγγελάρας, Χ. (2012). *Σημειώσεις ΠΜΣ στην «Εφαρμοσμένη Στατιστική» για το μάθημα Πειραματικοί Σχεδιασμοί*, Πανεπιστήμιο Πειραιά.

Ξένη

Allen, T.T. & Bernshteyn, M. (2003). Supersaturated designs, that maximize the probability of identifying active factors. *Technometrics*, vol. 45, 90–97.

Booth, K.H.V. & Cox, D.R. (1962). Some systematic supersaturated designs. *Technometrics*, vol. 4, 489-495.

Box, G. E. P. (1959). Discussion of Satterthwaite and Budne Papers. *Technometrics*, vol.1, 174–180.

Box, G.E.P. & Meyer, R.D. (1986). An analysis for unreplicated fractional factorials. *Technometrics*, vol. 28, 11–18.

Bulutoglu, D.A., 2007. Cyclically constructed $E(s^2)$-optimal supersaturated designs. *Journal of Statistical Planning and Inference*, vol. 137, 2413–2428.

Bulutoglu, D.A. & Cheng, C.S. (2003). Hidden projection properties of some nonregular fractional designs and their applications. *The Annals of Statistics*, vol. 31, no. 3, 1012–1026.

Bulutoglu, D. & Cheng, C.S. (2004). Construction of $E(s^2)$-Optimal Supersaturated Designs. *The Annals of Statistics*, vol. 32, 1662–1678.

Bulutoglu, D.A. & Ryan, K.J. (2008). $E(s^2)$-optimal supersaturated designs with good minimax properties when *N* is odd. *Journal of Statistical Theory and Practice,*vol. 138, 1754–1762.

Butler, N.A. & Mead, R. & Eskridge, K.M. & Gilmour, S.G. (2001). A General Method for Constructing E(s2)-Optimal Designs. *Journal of the Royal Statistical Society*, Series B, vol. 63, 621–632.

Cheng, C.S. (1997). E(s^2)-optimal supersaturated designs. *Statistica Sinica*, vol. 7, 929–939.

Das, A. & Dey, A. & Chan, L.Y. & Chatterjee, K. (2008). E(s^2)-Optimal Supersaturated Designs. *Journal of Statistical Planning and Inference,* vol. 138, 3749–3757.

Deng, L.Y. & Lin, D.J.K. &Wang, J. (1996b). Marginally oversaturated designs. Communications in Statistics-Theory and Methods, vol.25, 2557-2573.

Deng, L.Y. & Lin, D.J.K. & Wang, J. (1999). A resolution rank criterion for supersaturated designs. *Statistica Sinica*, vol. 9, 605–610.

Deng, L.Y. & Tang, B. (1999). Generalized resolution and minimum aberration criteria for Plackett–Burman and other nonregular factorial designs. *Statistica Sinica*, vol. 9, 1071–1082.

Georgiou, S.D. (2014). Supersaturated designs: A review of their construction and analysis. *Journal of Statistical Planning and* Inference, vol. 144, 92–109.

Gupta, V.K. & Parsad, R. & Kole, B. & Bhar, L.M. (2008). Computer-aided construction of efficient two level supersaturated designs. *Journal of the Indian Society of Agricultural Statistics,* vol. 62, 183–194.

Gupta V.K. & Singh, P. & Kole, B. & Parsad, R. (2010). Addition of runs to a two-level supersaturated design. *Journal of Statistical Planning and Inference,* vol. 140, 2531–2535.

Hedayat, A.S. & Sloane, N.J.A. & Stufken, J. (1999). *Orthogonal Arrays*. Springer, New York.

Jones, B. & Majumdar, D. (2014). Optimal Supersaturated Designs. *Journal of the American Statistical Association*, 109:508, 1592-1600.

Kole, B. & Gangwani, J. & Gupta, V.K. & Parsad, R. (2010). Two level supersaturated designs: a review. *Journal of Statistical Theory and Practice*, vol. 4, 598–608.

Lejeune, M.A. (2003). A coordinate-columnwise exchange algorithm for construction of supersaturated, saturated and non–saturated experimental designs. *American Journal of Mathematical and Management Sciences*, vol. 23, 109–142.

Li, W.W. & Wu, C.F.J. (1997). Columnwise-pairwise algorithms with applications to the construction of supersaturated designs. *Technometrics*, vol. 39, 171–179.

Lin, D.K.J. (1993a). A new class of supersaturated designs. *Technometrics*, vol. 35, 28-31.

Lin, D.K.J. (1995). Generating systematic supersaturated designs. *Technometrics*, vol. 37, 213–225.

Liu, M.Q. & Hickernell, F.J. (2002). $E(s^2)$-Optimality and minimum discrepancy in 2-level supersaturated designs. *Statistica Sinica*, vol. 12, 931-939.

Liu, Y. & Ruan, S. & Dean, A.M. (2007). Construction and analysis of $E(s^2)$ efficient supersaturated designs. *Journal of Statistical Planning and Inference,* vol. 137, 1516–1529.

Liu, M.Q & Zhang, R. (2000). Construction of $E(s^2)$ optimal supersaturated designs using cyclic BIBDs. *Journal of Statistical Planning and Inference,* vol. 91, 139–150.

Lu, X. & Meng, Y. (2000). A new method in the construction of two-level supersaturated designs. *Journal of Statistical Planning and Inference,* vol. 86, 229–238.

Ma, C.X. & Fang, K.T. (2001). A note on generalized aberration in factorial designs. *Metrika*, vol. 53, 85–93.

Nguyen, N. K. (1996). An Algorithmic Approach to Constructing Supersaturated Designs. *Technometrics*, vol. 38, 69–73.

Nguyen, N.K. & Cheng, C.S. (2008). New $E(s^2)$-optimal supersaturated designs constructed from incomplete block designs. *Technometrics*, vol. 50, 26-31.

Paley, R.E.A.C. (1933). On orthogonal matrices. *Journal of Mathematics and Physics*, vol. 12, 311-320.

Plackett, R.L. & Burman, J.P. (1946). The design of optimum multi-factorial experiments. *Biometrika*, vol. 33, 111-137.

Ryan, K.J. & Bulutoglu, D.A. (2007). $E(s^2)$-optimal supersaturated designs with good minimax properties. *Journal of Statistical Planning and Inference,* vol. 137, 2250–2262.

Satterwaite, F. (1959). Random balance experimentation. *Technometrics*, vol. 1, 111–137.

Suen, C.S. & Das, A. (2010). $E(s^2)$-optimal supersaturated designs with odd number of runs. *Journal of Statistical Planning and Inference,* vol. 140, 1398–1409.

Tang, B. & Deng, L.Y. (1999). Minimum G2-aberration for non-regular fractional factorial designs. *The Annals of Statistics*, vol. 27, 1914–1926.

Tang, B. & Wu, C. F. J. (1997). A Method for Constructing Supersaturated Designs and Its E(s2)-Optimality. *Canadian Journal of Statistics*, vol. 25, 191–201.

Watson, G.S. (1961). A study of the group screening method. *Technometrics,* vol. 3, 371–388.

Wu, C.F.J. (1993). Construction of supersaturated designs through partially aliased interactions. *Biometrika*, vol. 80, 661-669.

Xu, H. (2003). Minimum moment aberration for non-regular designs and supersaturated designs. *Statistica Sinica*, vol. 13, 691–708.

Xu, H. & Wu, C.F.J. (2001). Generalized minimum aberration for asymmetrical fractional factorial designs. *The Annals of Statistics*, vol. 29, 1066–1077.

Yamada, S. & Lin, D.K.J. (1997). Supersaturated designs including an orthogonal base. *Canada Journal of Statistics*, vol. 25, 203–213.