ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΕΙΡΑΙΩΣ

Σχολή Χρηματοοικονομικής και Στατιστικής

Τμήμα Στατιστικής και Ασφαλιστικής Επιστήμης

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΣΤΗΝ **ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ**

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΙ ΓΙΑ ΠΕΙΡΑΜΑΤΑ ΑΝΑΜΙΞΗΣ ΥΛΙΚΩΝ

Ειρήνη Σουρμελάκη

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
Ιούνιος 2023

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**

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΙ ΓΙΑ ΠΕΙΡΑΜΑΤΑ ΑΝΑΜΙΞΗΣ ΥΛΙΚΩΝ

Ειρήνη Σουρμελάκη

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
Ιούνιος 2023

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:

- Χ. Ευαγγελάρας (Αναπληρωτής Καθηγητής, Επιβλέπων)
- Μ. Κούτρας (Καθηγητής)
- Κ. Πολίτης (Αναπληρωτής Καθηγητής)

Η έγκριση της Διπλωματική 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

Order - of - Addition Experiments

By

Irene Sourmelaki

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
June 2023

Στην οικογένεια μου, στην μητέρα μου Ρεγγίνα,
στους φίλους μου και στις φίλες μου Ειρήνη και Αννέτα.

Περίληψη

Στη παρούσα διπλωματική γίνεται αρχικά μία αναφορά στον ορισμό του πειράματος και τους στόχους του. Έπειτα ορίζεται ο στατιστικός πειραματικός σχεδιασμός, οι μέθοδοι, οι αρχές του και οι κατευθυντήριες γραμμές του, πως έχει εξελιχθεί ο πειραματικός σχεδιασμός μέσα στα χρόνια και πως χρησιμοποιήθηκε από διάφορες επιστήμες.

Στο δεύτερο κεφάλαιο αναφέρονται οι μέθοδοι ανάλυσης των πειραματικών σχεδιασμών, αναλύονται οι πειραματικοί σχεδιασμοί με έναν ή και περισσότερους παράγοντες και περιγράφονται κάποια είδη σχεδιασμών (πλήρεις 2^k και κλασματικοί 2^{k-p} σχεδιασμοί).

Η ανάπτυξη του τρίτου κεφαλαίου βασίζεται στη μελέτη της θεωρίας της σειράς ανάμειξης υλικών (Order – of – Addition experiments) σε έναν πειραματικό σχεδιασμό. Αναλυτικότερα, παρουσιάζεται ο πλήρης σχεδιασμός και οι ιδιότητες του υπό το πρίσμα της σειράς προσθήκης μεταβλητών (components) κατά ζεύγη (Pairwise ordering – PWO). Δίνεται παράδειγμα ενός PWO σχεδιασμού για τέσσερις μεταβλητές, πως μέσα από αυτόν μπορούν να παραχθούν οικονομικότεροι σχεδιασμοί με στόχο την εξοικονόμηση χρόνου και χρήματος και ορίζεται ένα μέτρο που υπολογίζει την αποδοτικότητα του σχεδιασμού (D – efficiency).

Τέλος, στο τέταρτο και τελευταίο κεφάλαιο αναπτύσσεται η μελέτη περίπτωσης ενός PWO σχεδιασμού με τέσσερις μεταβλητές. Από τις συνολικές εκτελέσεις (θεραπείες) του πλήρους PWO σχεδιασμού με τέσσερις μεταβλητές επιλέγεται ένα πλήθος σχεδιασμών με λιγότερες εκτελέσεις ο καθένας τη φορά και υπολογίζεται η D – αποδοτικότητα τους, με τελικό σκοπό να βρεθεί ο σχεδιασμός με τις λιγότερες εκτελέσεις που πλησιάζει περισσότερο την αποδοτικότητα του πλήρους σχεδιασμού, όπου είναι και η καλύτερη.

Abstract

In this thesis, a reference is first made to the definition of the experiment and its objectives. Then statistical experimental design, its methods, principles and guidelines are defined, how experimental design has evolved over the years and how it has been used by various sciences.

The second chapter discusses the methods of analysis of experimental designs, analyses experimental designs with one or more factors and describes some types of designs (full 2k and fractional 2k-p designs).

The development of the third chapter is based on the study of the theory of order-of-addition experiments in an experimental design. In more detail, the full design and its properties are presented in the light of Pairwise ordering (PWO) of adding variables (components). An example of a PWO design for four variables is given, how through it more economical designs can be produced to save time and money, and a measure is defined that calculates the design efficiency (D - efficiency).

Finally, the fourth and final chapter develops a case study of a PWO design with four variables. From the total executions (treatments) of the full PWO design with four variables, several designs with fewer executions each at a time are selected and their D - efficiency is calculated, with the goal of finding the design with the fewest executions that most closely approximates the efficiency of the full design, where it is the best.

Περιεχόμενα

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

Εισαγωγή

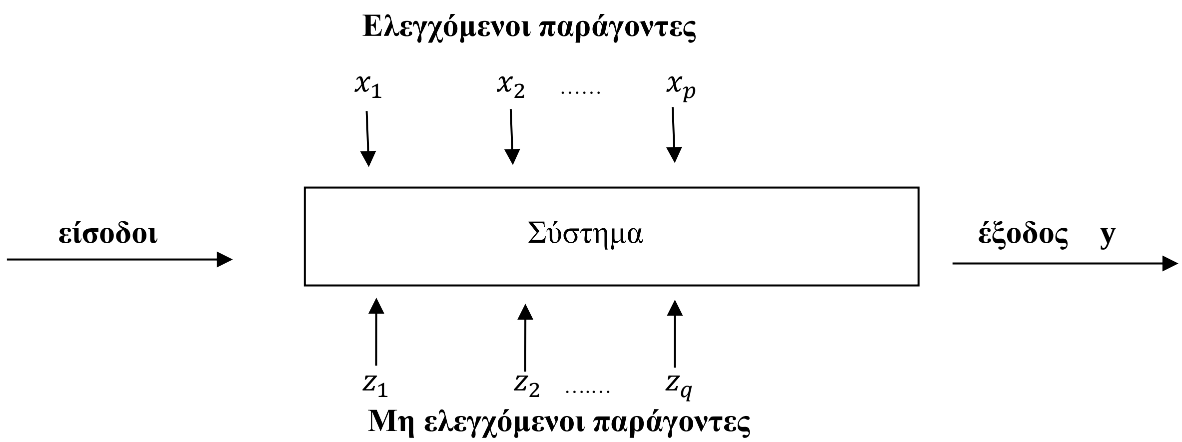
1.1 Διεργασίες και Πειράματα

Η παρατήρηση της λειτουργίας ενός συστήματος αποτελεί σημαντικό μέρος της κατανόησης και της εκμάθησης του τρόπου λειτουργίας του. Όμως, για να κατανοήσουμε πλήρως τις σχέσεις αιτίου – αποτελέσματος που διέπουν ένα σύστημα, πρέπει να τροποποιήσουμε τις μεταβλητές εισόδου και να παρατηρήσουμε τις αλλαγές που προκαλούνται στην έξοδο λόγω της παραπάνω τροποποίησης, δηλαδή να διεξάγουμε πειράματα στο σύστημα που μελετάμε. Ουσιαστικά μέσα από τη διεξαγωγή των πειραμάτων, αποδεικνύουμε αν οι θεωρίες που κατασκευάστηκαν μέσω της αρχικής παρατήρησης είναι σωστές ή λανθασμένες.

Ως πείραμα λοιπόν, ορίζουμε μια δοκιμή ή μία σειρά εκτελέσεων στις οποίες γίνονται σκόπιμα αλλαγές στις μεταβλητές εισόδου ενός συστήματος ή μίας διαδικασίας, ώστε να μπορούμε να παρατηρήσουμε και να προσδιορίσουμε τους λόγους για τις αλλαγές που μπορεί να παρατηρηθούν στην απόκριση εξόδου. Ενδέχεται να θέλουμε να προσδιορίσουμε ποιες μεταβλητές εισόδου είναι υπεύθυνες για τις παρατηρούμενες αλλαγές στην απόκριση, να δημιουργήσουμε ένα μοντέλο που να συνδέει την απόκριση με ορισμένες σημαντικές μεταβλητές εισόδου, να χρησιμοποιήσουμε το μοντέλο αυτό για βελτίωση του συστήματος που μελετάμε ή για τη λήψη άλλων αποφάσεων. Κάθε πειραματική εκτέλεση αποτελεί μία δοκιμή και οι ερευνητές εκτελούν συχνά πειράματα σε όλα τα πεδία έρευνας με σκοπό να ανακαλύψουν αν ισχύουν οι αρχικές υποθέσεις στο σύστημα που μελετούν.

Ο πειραματισμός παίζει σημαντικό ρόλο στη τεχνολογία, στις εμπορικές δραστηριότητες και στην υλοποίηση προϊόντων, οι οποίες περιλαμβάνουν το σχεδιασμό και τη διαμόρφωση νέων προϊόντων, την ανάπτυξη διαδικασιών παραγωγής και τη βελτίωση διαδικασιών. Στόχος είναι η ανάπτυξη ισχυρής διαδικασίας, δηλαδή μίας διαδικασίας που να επηρεάζεται ελάχιστα από εξωτερικές πηγές μεταβλητότητας. Υπάρχουν πολλές άλλες εφαρμογές των πειραματικών σχεδιασμών που δεν αφορούν μόνο τη παραγωγή ή την ανάπτυξη προϊόντων όπως το μάρκετινγκ, επιχειρήσεις παροχής υπηρεσιών και γενικότερα οι επιχειρηματικές δραστηριότητες.

Τα πειράματα χρησιμοποιούνται για να μελετήσουμε την απόδοση ενός συστήματος. Ένα σύστημα μπορεί να περιγράφει παραστατικά μέσω του παρακάτω σχήματος



Μπορούμε να απεικονίσουμε ένα σύστημα ως ένα συνδυασμό λειτουργιών, μηχανών, μεθόδων, ανθρώπων και άλλων πόρων που μετατρέπει κάποια είσοδο (π.χ. υλικό) σε έξοδο που έχει μία ή περισσότερες μεταβλητές απόκρισης. Κάποιες από τις μεταβλητές του συστήματος $x_1, x_2, \dots, x_p$, είναι ελεγχόμενες ενώ άλλες μεταβλητές $z_1, z_2, \dots, z_q$ να μην είναι ελεγχόμενες. Τα περισσότερα πειράματα περιλαμβάνουν τη μελέτη των επιδράσεων ενός, δύο ή περισσότερων παραγόντων. Σκοπός μας είναι να μελετήσουμε τις επιδράσεις που ασκούν ελεγχόμενες μεταβλητές σε μία μεταβλητή που μας ενδιαφέρει. Ως παραγοντικά σχέδια ορίζουμε ότι σε κάθε πλήρη δοκιμή ή επανάληψη του πειράματος διερευνώνται όλοι οι δυνατοί συνδυασμοί των επιπέδων των παραγόντων. Αρχικά οφείλουμε να δώσουμε την ερμηνεία βασικών εννοιών που θα χρησιμοποιήσουμε παρακάτω:

Ως ***μεταβλητή απόκρισης*** ορίζεται το αποτέλεσμα που μετριέται σε ένα πείραμα.

Παράγοντας είναι η μεταβλητή (ποιοτική ή ποσοτική) τις οποίας οι τιμές / καταστάσεις μεταβάλλονται προμελετημένα, έτσι ώστε να εξετάσουμε την επίδραση των μεταβολών στη μεταβλητή απόκρισης.

Επίπεδο ή στάθμη είναι μία τιμή ή κατάσταση ενός παράγοντα, στο οποίο μετράμε τη μεταβλητή απόκρισης.

Επιπλέον, ως ***θεραπεία ή αγωγή*** (treatment) ορίζεται κάθε συνδυασμός επιπέδων των παραγόντων που εξετάζονται σε ένα πείραμα.

Ως ***επίδραση στη μεταβλητή απόκρισης*** εννοούμε τη παρατηρούμενη μεταβολή της μεταβλητής απόκρισης καθώς μεταβάλλονται οι θεραπείες.

Ως ***μεταβλητή πλαισίου*** ορίζεται μία γνωστή μεταβλητή, η οποία ενδέχεται να επηρεάζει τη μεταβλητή απόκρισης, όμως δεν παρουσιάζει ενδιαφέρον και τη θέτουμε υπό έλεγχο για να εξαφανιστεί η επίδρασή της. Ο έλεγχός μίας μεταβλητής πλαισίου επιτυγχάνεται μέσω της σταθεροποίησης, δηλαδή να παρατηρήσουμε μία μόνο τιμή / κατάσταση της μεταβλητής πλαισίου και μέσω της ομαδοποίησης, δηλαδή να παρατηρήσουμε σε ομάδες που αντιπροσωπεύουν διαφορετικές τιμές / καταστάσεις της μεταβλητής πλαισίου.

Επιπλέον, καθώς αναπτύσσεται αυτή η εργασία θα συναντήσουμε τον όρο ***πειραματικό σφάλμα (SSE)*** όπου αποτελεί τη μεταβλητότητα της μεταβλητής απόκρισης, η οποία δεν μπορεί να αποδοθεί σε αλλαγή θεραπείας. Στόχος μας είναι να είναι η ελαχιστοποίηση του πειραματικού σφάλματος, προκειμένου να εντοπίσουμε τις διαφορές των επιδράσεων που ασκούν οι θεραπείες στη μεταβλητή απόκρισης.

Οι στόχοι του πειράματος μπορεί να είναι οι εξής:

1. Να προσδιοριστούν οι τιμές ή οι καταστάσεις που έχουν σημαντική επίδραση για την απόκριση που εξετάζουμε.
2. Να προσδιοριστούν οι τιμές ή οι καταστάσεις που θα πρέπει να ρυθμιστούν οι ελεγχόμενοι παράγοντες ώστε η απόκριση να είναι όσο το δυνατόν πιο κοντά στην επιθυμητή τιμή
3. Να προσδιοριστούν οι τιμές ή οι καταστάσεις που πρέπει να ρυθμιστούν οι ελεγχόμενοι παράγοντες, ώστε η μεταβλητότητα της απόκρισης να είναι μικρή.

4. Να προσδιοριστούν οι τιμές ή οι καταστάσεις που πρέπει να ρυθμιστούν οι ελεγχόμενοι παράγοντες έτσι ώστε οι επιδράσεις των μη ελεγχόμενων παραγόντων να ελαχιστοποιούνται.

Τα πειράματα λοιπόν περιλαμβάνουν διάφορους παράγοντες (ελεγχόμενους και μη ελεγχόμενους) και στόχος του πειραματιστή είναι μέσα από τα πειράματα να προσδιορίσει την επίδραση που έχουν αυτοί οι παράγοντες στην απόκριση εξόδου του συστήματος. Η γενική προσέγγιση του σχεδιασμού και της διεξαγωγής ενός πειράματος ονομάζεται στρατηγική ενός πειράματος και ο πειραματιστής έχει να επιλέξει ανάμεσα σε διάφορες στρατηγικές πειραματισμού (προσέγγιση βέλτιστης εκτίμηση, προσέγγιση ενός παράγοντα κάθε φορά, παραγοντικό πείραμα)

Ο πειραματισμός αποτελεί μέρος της επιστημονικής διαδικασίας και είναι ένας βασικός τρόπος με τον οποίο μαθαίνουμε πως λειτουργούν τα συστήματα. Ουσιαστικά διατυπώνουμε θεωρίες σχετικά με μία διαδικασία, έπειτα εκτελούμε πειράματα για να παράξουμε δεδομένα από αυτή τη διαδικασία και στη συνέχεια χρησιμοποιούμε τις πληροφορίες του πειράματος για να διατυπώσουμε νέες θεωρίες.

1.2 Σχεδιασμός Πειραμάτων

Ο πειραματικός σχεδιασμός ορίζεται, σύμφωνα με το Kirk (1995), ως μία διαδικασία ή μεθοδολογικό σχέδιο σύμφωνα με το οποίο οι διαθέσιμες πειραματικές μονάδες (αντικείμενα ή υποκείμενα) θα ενταχθούν σε διάφορες πειραματικές συνθήκες και τα δεδομένα θα αναλυθούν μέσω στατιστικής διαδικασίας σύμφωνα με το σχέδιο αυτό.

Ο πειραματικός σχεδιασμός αποτελεί ένα πολύ σημαντικό εργαλείο της επιστήμης για τη βελτίωση των διεργασιών και των προϊόντων. Σημαντικές συνιστώσες του πειραματικού σχεδιασμού είναι ο σχεδιασμός, η ανάπτυξη νέων διαδικασιών κατασκευής και η διαχείριση αυτών των κατασκευών. Η εφαρμογή του πειραματικού σχεδιασμού στα αρχικά στάδια της ανάπτυξης μίας διαδικασίας έχει ως αποτέλεσμα τη βελτίωση των αποδόσεων των διεργασιών της, την επίτευξη μειωμένης μεταβλητότητας, τη μεγαλύτερη συμμόρφωση με τις απαιτήσεις στόχους που έχουν τεθεί αρχικά και τη μείωση του χρόνου ανάπτυξης και του συνολικού κόστους.

Οι μέθοδοι του πειραματικού σχεδιασμού είναι πολύ σημαντικοί σε δραστηριότητες όπου αναπτύσσονται νέα προϊόντα και βελτιώνονται τα ήδη υπάρχοντα.

Απαραίτητες ενέργειες για την επιλογή του πλέον κατάλληλου σχεδιασμού είναι η αξιολόγηση και σύγκριση των διαθέσιμων ήδη κατασκευασμένων ή / και υπό κατασκευή πειραματικών σχεδίων, η διαχείρισιμη από πλευράς χρόνου και κόστους εφαρμογή του και η ευελιξία που δίνει στην ανάλυση δεδομένων. Η χρήση του πειραματικού σχεδιασμού συμβάλει ώστε τα προϊόντα να κατασκευαστούν ευκολότερα, να έχουν καλύτερη απόδοση, αξιοπιστία, χαμηλότερο κόστος και χαμηλότερο χρόνο σχεδιασμό.

1.3 Στατιστικός σχεδιασμός πειραμάτων και κατευθυντήριες γραμμές

Για να συλλεχθούν τα κατάλληλα δεδομένα, να αναλυθούν με στατιστικές μεθόδους και να εξαχθούν έγκυρα αποτελέσματα και αντικειμενικά συμπεράσματα απαιτείται ο στατιστικός σχεδιασμός των πειραμάτων. Η στατιστική προσέγγιση του πειραματικού σχεδιασμού είναι απαραίτητη εάν στοχεύουμε να εξάγουμε ουσιαστικά συμπεράσματα από τα δεδομένα. Έτσι, σε κάθε πειραματικό σχεδιασμό υπάρχουν δύο πυλώνες, ο σχεδιασμός του πειράματος και η στατιστική ανάλυση των δεδομένων. Οι δύο αυτοί πυλώνες συνδέονται άρρηκτα μεταξύ τους επειδή η μέθοδος ανάλυσης εξαρτάται από το σχεδιασμό που χρησιμοποιείται.

Οι τρεις βασικές αρχές του πειραματικού σχεδιασμού είναι: ***η τυχαιοποίηση***, ***η επανάληψη*** *και* ***ο ομαδοποίηση*** και αποτελούν μέρος κάθε πειράματος.

Η **τυχαιοποίηση** είναι η βασική αρχή που διέπει τη χρήση στατιστικών μεθόδων στο πειραματικό σχεδιασμό. Με τον όρο **τυχαιοποίηση** εννοούμε ότι τόσο η κατανομή του πειραματικού υλικού όσο και η σειρά με την οποία θα εκτελεστούν οι επιμέρους εκτελέσεις του πειράματος καθορίζονται τυχαία. Είναι γνωστό ότι οι στατιστικές μέθοδοι απαιτούν οι παρατηρήσεις να είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές και η τυχαιοποίηση καθιστά την υπόθεση αυτή τις περισσότερες φορές έγκυρη.

Με τον όρο **επανάληψη** εννοούμε μια ανεξάρτητη επανάληψη κάθε συνδυασμό των επιπέδων των παραγόντων. Αρχικά επιτρέπει στον πειραματιστή να λάβει μία εκτίμηση του πειραματικού σφάλματος, αυτή η εκτίμηση γίνεται βασική μονάδα μέτρησης για το προσδιορισμό του κατά πόσο οι παρατηρούμενες διαφορές στα δεδομένα είναι πραγματικά στατιστικά σημαντικά διαφορές.

Η **ομαδοποίηση** αποτελεί μία τεχνική σχεδιασμού που χρησιμοποιείται για τη βελτίωση της ακρίβειας με την οποία γίνονται συγκρίσεις μεταξύ των παραγόντων ενδιαφέροντος. Η ομαδοποίηση συχνά χρησιμοποιείται για να μειωθεί ή να εξαλειφθεί η μεταβλητότητα όπου μεταδίδεται από ενοχλητικούς παράγοντες, παράγοντες οι οποίοι μπορεί να επηρεάζουν την απόκριση του πειράματος αλλά για τους οποίους δεν ενδιαφερόμαστε άμεσα.

Με σκοπό να χρησιμοποιηθεί η στατιστική προσέγγιση στο σχεδιασμό και την ανάλυση ενός πειράματος, είναι αναγκαίο όλοι όσοι εμπλέκονται στο πείραμα να έχουν εκ των προτέρων μία σαφή ιδέα για το τι ακριβώς πρόκειται να μελετηθεί, το τρόπο που θα συλλεχθούν τα δεδομένα και μία ποιοτική κατανόησης του τρόπου με τον οποίο θα αναλυθούν τα δεδομένα.

Πρώτο βήμα είναι η ***αναγνώριση και η διατύπωση του προβλήματος***, είναι δηλαδή απαραίτητη η σαφής διατύπωση του προβλήματος στην οποία αναπτύσσονται όλες οι ιδέες σχετικά με τους στόχους του πειράματος. Είναι πολλές φορές χρήσιμο να προετοιμαστεί ένας κατάλογος με συγκεκριμένα προβλήματα ή ερωτήματα που ενδεχομένως να αντιμετωπιστούν από το πείραμα.

Δεύτερο βήμα αποτελεί η ***επιλογή της μεταβλητής απόκρισης***, δηλαδή ο πειραματιστής να ορίσει τη μεταβλητή αυτή που παρέχει χρήσιμες πληροφορίες σχετικά με τη διαδικασία που μελετάται.

Τρίτο βήμα είναι η ***επιλογή παραγόντων, επιπέδων και εύρους***. Όπως έχουμε αναφέρει και πιο πάνω οι παράγοντες είναι μεταβλητές (ποιοτικές ή ποσοτικές) των οποίων οι τιμές / καταστάσεις μεταβάλλονται προμελετημένα έτσι ώστε να εξεταστεί η επίδραση των μεταβολών στη μεταβλητή απόκρισης. Επίπεδο (ή στάθμη) του παράγοντα είναι μία τιμή ή κατάσταση, στο οποίο μετράμε τη μεταβλητή απόκρισης. Στους ποσοτικούς παράγοντες τα επίπεδα επιλέγονται με βάση το εύρος τιμών που μας ενδιαφέρει, ενώ στους ποιοτικούς παράγοντες επίπεδα μπορούν να αποτελούν όλες οι δυνατές καταστάσεις που μας ενδιαφέρουν και το δείγμα το καταστάσεων αυτών είναι τυχαίο.

Ανάλογα με το τρόπο που έχουν επιλεγεί τα επίπεδα του παράγοντα εξετάζουμε δύο περιπτώσεις, η πρώτη είναι το ***μοντέλο με σταθερές επιδράσεις*** (Fixed effects models) όπου τα επίπεδα του παράγοντα είναι συγκεκριμένα και τα συμπεράσματα που εξάγουμε αφορούν μόνο στα εξεταζόμενα επίπεδα και η δεύτερη είναι το ***μοντέλο τυχαίων***

επιδράσεων (Random effects model) όπου όλα τα επίπεδα του παράγοντα επιλέγονται στη τύχη από ένα σύνολο πολλών επιπέδων και τα συμπεράσματα για την επίδραση του παράγοντα αφορούν στο σύνολο των τιμών του.

Στη συνέχεια, έχουμε την ***επιλογή πειραματικού σχεδίου***, η οποία προφανώς εξαρτάται από το πλήθος των παραγόντων που χρησιμοποιούνται, το πλήθος των επιπέδων τους και τυχόν περιορισμούς σχετικά με τη τυχαιοποίηση, την ομαδοποίηση και το κόστος του πειραματισμού.

Πέμπτο βήμα αποτελεί ***η εκτέλεση του πειράματος,*** όπου είναι πολύ σημαντικό να παρακολουθείται προσεκτικά η διαδικασία για να διασφαλιστεί ότι όλα λειτουργούν σύμφωνα με το αρχικό σχέδιο. Τα λάθη σε αυτό το στάδιο συνήθως καταστρέφουν την εγκυρότητα του πειράματος.

Μετά την εκτέλεση του πειράματος, σειρά έχει η ***στατιστική ανάλυση των δεδομένων***. Για την ανάλυση λοιπόν των δεδομένων θα πρέπει να χρησιμοποιούνται στατιστικές μέθοδοι ώστε τα αποτελέσματα και τα συμπεράσματα να είναι αντικειμενικά. Εάν το πείραμα έχει σχεδιαστεί σωστά και εκτελεστεί σύμφωνα με το σχεδιασμό, οι απαιτούμενες στατιστικές μέθοδοί δεν είναι περίπλοκές. Σημαντικό ρόλο στην ανάλυση και ερμηνεία των δεδομένων παίζουν οι γραφικές μέθοδοι. Επιπροσθέτως, σημαντική είναι και η χρήση εμπειρικού μοντέλου, δηλαδή η χρήση μίας εξίσωσης που προκύπτει από τα δεδομένα και εκφράζει τη σχέση μεταξύ απόκρισης και σημαντικών παραγόντων του σχεδιασμού.

Ύστερα από την ανάλυση των δεδομένων, ο πειραματιστής πρέπει να εξάγει πρακτικά **συμπεράσματα** σχετικά με τα αποτελέσματα και να προτείνει μία πορεία δράσης. Θα πρέπει επίσης να πραγματοποιηθούν επακόλουθες εκτελέσεις και δοκιμές ελέγχου για την επικύρωση των συμπερασμάτων του πειράματος.

Συμπερασματικά, καθ’ όλη τη διάρκεια της διαδικασίας πρέπει να αναλογιστούμε ότι ο πειραματισμός αποτελεί σημαντικό μέρους της μαθησιακής διαδικασίας, όπου στην αρχή διατυπώνουμε απλές υποθέσεις για ένα σύστημα που μελετάμε, εκτελούμε πειράματα με σκοπό να διερευνήσουμε αυτές τις υποθέσεις και με βάση τα αποτελέσματα διατυπώνουμε νέες υποθέσεις. Αυτό υποδηλώνει ότι ο πειραματισμός είναι επαναληπτικός. Ένα επιτυχημένο πείραμα απαιτεί γνώση των σημαντικών παραγόντων, τα εύρη στα οποία θα πρέπει να μεταβληθούν οι παράγοντες αυτοί, το κατάλληλο αριθμό των επιπέδων που θα χρησιμοποιηθούν και τις κατάλληλες μονάδες μέτρησης για τις μεταβλητές αυτές. Καθώς ένα πείραμα προχωράει εγκαταλείπουμε κάποιους παράγοντες, προσθέτουμε άλλους, μεταβάλουμε τη περιοχή διερεύνησης για κάποιους παράγοντες ή επιλέγουμε νέα μεταβλητή απόκρισης. Αυτό υποδηλώνει ότι πειραματιζόμαστε διαδοχικά. Έτσι λοιπόν, εφόσον όλα τα πειράματα είναι σχεδιασμένα πειράματα, σημασία έχει να κατασκευάσουμε ένα καλά σχεδιασμένο πείραμα και ένας καλός προ- πειραματικός σχεδιασμός οδηγεί σε ένα επιτυχημένο πείραμα, αποφεύγοντας τη σπατάλη χρόνου και χρημάτων.

1.4 Ιστορική αναδρομή στατιστικού πειραματικού σχεδιασμού

Τέσσερις ήταν οι εποχές που συνέβαλλαν στην ανάπτυξη του στατιστικού πειραματικού σχεδιασμού. Η πρώτη είναι η ***γεωργική εποχή*** με το έργο του Ronald A.Fisher από το 1920 έως τις αρχές του 1930. Πιο συγκεκριμένα, ο Fisher ήταν υπεύθυνος για τη στατιστική ανάλυση των δεδομένων στο Γεωργικό Πειραματικό Σταθμό Rothamsted στην Αγγλία. Αναγνώρισε λοιπόν ότι οι ατέλειες που αναπτύσσονται στο τρόπο με τον οποίο διεξάγεται ένα πείραμα που παράγει δεδομένα, εμποδίζουν την ανάλυση δεδομένων από το σύστημα, στη περίπτωσή μας τα γεωργικά συστήματα. Επηρεασμένος από άλλους επιστήμονες και ερευνητές από άλλους τομείς, ανέπτυξε τις τρείς βασικές αρχές του πειραματικού σχεδιασμού που έχουν ήδη αναπτυχθεί λεπτομερώς παραπάνω: τη τυχαιοποίηση, την επανάληψη και την ομαδοποίηση. Τέλος εισάγει τη στατιστική σκέψη και τις αρχές στο πειραματικό σχεδιασμό πειραματικών ερευνών, συμπεριλαμβανομένης της έννοιας του παραγοντικού σχεδιασμού και της ανάλυσης διακύμανσης.

Η δεύτερη εποχή είναι η ***βιομηχανική εποχή***, η οποία χαρακτηρίζεται από την ανάπτυξη της μεθοδολογίας επιφανειών απόκρισης (RSM) από τους Box και Wilson και τοποθετείται χρονολογικά γύρο στο 1951. Σύμφωνα με αυτούς, τα πειράματα που αναπτύσσονται στο τομέα της βιομηχανίας διαφέρουν από αυτόν της γεωργίας για δύο λόγους, πρώτον η μεταβλητή απόκρισης των βιομηχανικών πειραμάτων μπορεί να παρατηρηθεί σχεδόν αμέσως και δεύτερον ο πειραματιστής μπορεί να αντιληφθεί αμεσότερα σημαντικές πληροφορίες από έναν μικρό αριθμό εκτελέσεων που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να σχεδιαστεί το επόμενο πείραμα. Μέσα στα επόμενα τριάντα χρόνια η μεθοδολογία επιφανειών απόκρισης (RSM) και άλλες τεχνικές σχεδιασμού διαδόθηκαν στις χημικές βιομηχανίες και στις βιομηχανίες διεργασιών, όμως ο στατιστικός σχεδιασμός στη βάση του εργοστασίου ή της παραγωγικής διαδικασίας δεν ήταν τόσο διαδεδομένος λόγω της μη επαρκούς εκπαίδευσης σε στατιστικές έννοιες και μεθόδους των ειδικών επί των διεργασιών, της απουσίας υπολογιστικών πόρων και φιλικού προς τους διαχειριστές στατιστικού λογισμικού μέσω του οποίου θα πραγματοποιούταν ο στατιστικός σχεδιασμός πειραμάτων. Κατά τη βιομηχανική εποχή άρχισε να εξετάζεται ο βέλτιστος σχεδιασμός πειραμάτων από τους Kiefer και Wolfowitz (1959). Προτείνουν λοιπόν μία προσέγγιση για την επιλογή του βέλτιστου σχεδιασμού με βάσει κάποια κριτήρια βελτιστοποίησης. Η προσέγγισή τους αρχικά βασίστηκε στην επιλογή ενός σχεδιασμού που θα οδηγούσε στην ακριβέστερη εκτίμηση των παραμέτρων του μοντέλου που μελετάμε, όμως λόγω της έλλειψης υπολογιστικών εργαλείων η προσέγγιση αυτή δε εφαρμόστηκε. Τα τελευταία χρόνια οι αλγόριθμοί που αφορούν στη δημιουργία βέλτιστων σχεδιασμών και οι υπολογιστικές δυνατότητες έχουν σημειώσει ταχεία ανάπτυξη.

Η ***τρίτη εποχή*** του στατιστικού σχεδιασμού ξεκίνησε στα τέλη του 1970 και χαρακτηρίστηκε κυρίως από το έργο του Taguchi, Wu και Kackar. Ο Taguchi πρότεινε τους κλασματικούς παραγοντικούς σχεδιασμούς, τις ορθογώνιους σχηματισμούς (Orthogonal Arrays) και ορισμένες νέες στατιστικές μεθόδους. Η μεθοδολογία του Taguchi δημιούργησε αρκετές αντιπαραθέσεις μεταξύ των επιχειρηματιών του δυτικού κόσμου που τον υποστήριξαν και της επιστημονικής κοινότητας, η οποία δεν είχε αξιολογήσει επαρκώς τη μεθοδολογία του. Αργότερα, τα αποτελέσματα της αξιολόγησης από την επιστημονική κοινότητα κατέδειξαν ότι οι τεχνικές έννοιες και στόχοι του Taguchi είχαν αναπτυχθεί και θεμελιωθεί επαρκώς αλλά εντόπισαν προβλήματα στην πειραματική στρατηγική και μεθόδους ανάλυσης των δεδομένων.

Μία θετική απόρροια που προέκυψε από τη διαμάχη της τρίτης εποχή, ήταν η έναρξη της ***τέταρτης εποχής*** του πειραματικού σχεδιασμού. Πιο αναλυτικά, η τέταρτη εποχή περιλαμβάνει ένα ενδιαφέρον για το στατιστικό σχεδιασμό από τους ερευνητές και επαγγελματίες με σκοπό την ανάπτυξη νέων προσεγγίσεων σε πειραματικά προβλήματα στο τομέα της βιομηχανίας. Τέλος, βελτιώθηκε το λογισμικό υπολογιστών για τη κατασκευή και την αξιολόγηση των σχεδίων και προσέφερε νέα χαρακτηριστικά και δυνατότητες.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

Πειραματικοί Σχεδιασμοί και Μέθοδοι Ανάλυσης

2.1 Μέθοδοι Ανάλυσης: Ανάλυσης Παλινδρόμησης και Ανάλυση Διακύμανσης

Με την ανάλυση παλινδρόμησης (regression analysis) επιδιώκουμε να εξετάζουμε τη σχέση μεταξύ δύο ή περισσότερων μεταβλητών με σκοπό την πρόβλεψη των τιμών της μίας, μέσω των τιμών της άλλης. Σε κάθε πρόβλημα παλινδρόμησης διακρίνουμε δύο είδη μεταβλητών: τις ανεξάρτητες μεταβλητές (ελεγχόμενες ή επεξηγηματικές) και τις εξαρτημένες μεταβλητές ή μεταβλητή απόκρισης. Στα ***πειράματα έρευνας***, η ανεξάρτητη μεταβλητή *X* είναι αυτή που μπορούμε να ελέγξουμε, να καθορίσουμε δηλαδή τις τιμές της (π.χ. το ύψος μίας διαφημιστικής δαπάνης ενός προϊόντος, η ποσότητα λιπάσματος). Η εξαρτημένη μεταβλητή *Y* είναι εκείνη στην οποία καταγράφεται το αποτέλεσμα των μεταβολών που συμβαίνουν στην ανεξάρτητη μεταβλητή *X* (π.χ. η ζήτηση ενός προϊόντος, απόδοση μίας καλλιέργειας).

Ανάλογα με τον αριθμό των ανεξάρτητων μεταβλητών που χρησιμοποιούμε στη παλινδρόμηση, παίρνει και διαφορετικό όνομα η παλινδρόμηση. Αν λοιπόν, χρησιμοποιούμε μία μόνο ανεξάρτητη / επεξηγηματική μεταβλητή *X*, καλείται απλή παλινδρόμηση ενώ όταν χρησιμοποιούμε παραπάνω από μία ανεξάρτητες / επεξηγηματικές μεταβλητές $X_1, X_2, \dots, X_k$, ονομάζεται πολλαπλή παλινδρόμηση.

Στην απλή παλινδρόμηση χρησιμοποιούμε μία μόνο ανεξάρτητη (επεξηγηματική) μεταβλητή *X*, και μία δεύτερη εξαρτημένη μεταβλητή ή μεταβλητή απόκρισης *Y*, η οποία μπορεί να προσεγγιστεί ικανοποιητικά από μία συνάρτηση του *X*, για παράδειγμα η *Y* να εκφραστεί μέσω της *X* μέσω της παρακάτω εξίσωσης: $Y = 7X + 10$.

Επέκταση του μοντέλου απλής παλινδρόμησης αποτελεί το γραμμικό μοντέλο πολλαπλής παλινδρόμησης το οποίο, αν μελετάμε $p - 1$ ανεξάρτητες μεταβλητές $X_1, X_2, \dots, X_{p-1}$ παίρνει την εξής μορφή

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i,1} + \beta_2 x_{i,2} + \cdots + +\beta_{p-1} x_{i,p-1} + +\varepsilon_i,\ i = 1,2, \dots, \nu$$

και στο οποίο ισχύουν οι εξής υποθέσεις:

1. Οι ποσότητες $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{p-1}$ είναι άγνωστες παράμετροι.
2. Τα $x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,p-1}$, $i = 1,2, \dots, \nu$, είναι γνωστοί αριθμοί, δηλαδή είναι οι τιμές των ανεξάρτητων μεταβλητών κατά την i επανάληψη του πειράματος. Οι τιμές αυτές καθορίζονται από τον ερευνητή που εκτελεί το πείραμα.
3. Το Y_i είναι η τιμή της ανεξάρτητης μεταβλητής κατά την i επανάληψη του πειράματος. Το Y_i είναι τυχαία μεταβλητή και θα συμβολίζουμε με y_i τη τιμή που λαμβάνει αυτή, αν εκτελεστεί το πείραμα και καταγραφεί το αποτέλεσμα που παρατηρείται για τη μεταβλητή απόκρισης Y.
4. Τα ε_i, $i = 1,2, \dots, \nu$, είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές με κατανομή την $N(0, \sigma^2)$.

Γράφοντας αναλυτικά τις ν ισότητες που προκύπτουν από το γραμμικό μοντέλο έχουμε

$$\begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_\nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,p-1} \\ 1 & x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,p-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{\nu,1} & x_{\nu,2} & \cdots & x_{\nu,p-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_{p-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_\nu \end{bmatrix}$$

δηλαδή, το γραμμικό μοντέλο παίρνει την ακόλουθη μορφή:

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

όπου X είναι ο ***πίνακας σχεδιασμού*** του μοντέλου, $\boldsymbol{\beta}$ το διάνυσμα – στήλη που περιέχει τις άγνωστες παραμέτρους και $\mathbf{Y}$, $\boldsymbol{\varepsilon}$ τα τυχαία διανύσματα – στήλες που περιέχουν τις παρατηρήσεις και τα τυχαία σφάλματα, αντίστοιχα.

Το διάνυσμα – στήλη $\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 & \hat{\beta}_1 & \dots & \hat{\beta}_{p-1} \end{bmatrix}'$ των εκτιμητριών ελάχιστων τετραγώνων των παραμέτρων $\boldsymbol{\beta}$ δίνεται από το τύπο

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}} = (X^T X)^{-1} X' \mathbf{Y}.$$

Σημειώνεται ότι οι εκτιμήτριες ελαχίστων τετραγώνων στο μοντέλο πολλαπλής παλινδρόμησης είναι συναρτήσεις των τυχαίων μεταβλητών Y_i και είναι επίσης τυχαίες μεταβλητές.

Ο πίνακας $X^T X$ είναι πολύ σημαντικός για τη μελέτη των εκτιμητριών ελαχίστων τετραγώνων του μοντέλου πολλαπλής παλινδρόμησης, αφού πέρα από το γεγονός που μας διευκολύνει στον υπολογισμό τους, δίνει επίσης τη δυνατότητα να λάβουμε πληροφορίες για τη διακύμανση και τις συνδιακυμάνσεις τους. Ο πίνακας $X^T X$ αναφέρεται συνήθως ως **πίνακας πληροφορίας** (information matrix) του γραμμικού μοντέλου.

Η ανάλυση της διακύμανσης ή διασποράς (Analyze of Variance - ANOVA) είναι ευρέως διαδομένη μέθοδος ανάλυσης δεδομένων από πειραματικούς σχεδιασμούς. Η μεθοδολογία αυτή αποσκοπεί στο να ανιχνευτούν διαφορές μεταξύ των μέσων ορισμένων πληθυσμών. Ο σκοπός είναι να αξιολογήσουμε την επίδραση που ασκούν q ανεξάρτητες μεταβλητές (ποιοτικές ή ποσοτικές) που ονομάζονται παράγοντες, στη μεταβλητή απόκρισης. Κάθε παράγοντας που μελετάμε μπορεί να εξεταστεί σε k διαφορετικές τιμές στο πείραμα που ονομάζονται επίπεδα. Κάθε συνδυασμός επιπέδων των παραγόντων ονομάζεται και θεραπεία ή αγωγή (treatment).

Αν μελετάμε την επίδραση ενός παράγοντα στην απόκριση, τότε λέμε ότι χρησιμοποιούμε την ***ανάλυση διασποράς κατά ένα παράγοντα*** (One – way Anova), ενώ αν έχουμε δύο ή περισσότερους παράγοντες τότε χρησιμοποιούμε την ***ανάλυση διασποράς με δύο ή περισσότερους παράγοντες*** (Multi factor Anova).

Το πλαίσιο εφαρμογής της μεθόδου παρουσιάζεται ως εξής: αρχικά προσδιορίζουμε ποιες από το σύνολο των θεραπειών μας ενδιαφέρουν, κατανέμουμε με τυχαίο τρόπο τις πειραματικές μονάδες στις υπό μελέτη θεραπείες, καταγράφουμε τη τιμή που λαμβάνει η μεταβλητή απόκρισης Y στις πειραματικές μονάδες και τέλος εξετάζουμε αν η μεταβολή των τιμών των παραγόντων έχει κάποια επίδραση στη μεταβλητή απόκρισης, καταγράφοντας τη μεταβολή στη τιμή της μεταβλητής απόκρισης καθώς αλλάζουν οι θεραπείες. Βασικός στόχος της ανάλυσης διακύμανσης είναι ο διαχωρισμός της συνολικής μεταβλητότητας της μεταβλητής απόκρισης σε δύο βασικές συνιστώσες: στη μεταβλητότητα που οφείλεται σε αλλαγή θεραπείας και στη τυχαία μεταβλητότητα (μη ελεγχόμενη).

Ο τρόπος που θα αναλυθούν στατιστικά τα δεδομένα σε ένα πλήρως τυχαιοποιημένο πείραμα (ο καταμερισμός των πειραματικών μονάδων στις θεραπείες γίνεται τυχαία) σχετίζεται από τη σημασία που δίνεται στα επίπεδα που έχουν επιλεγεί για κάθε παράγοντα. Πιο αναλυτικά, εάν επιδιώκουμε να εξάγουμε συμπεράσματα που αφορούν μόνο τα επίπεδα των παραγόντων που έχουν συμπεριληφθεί στο πείραμα τότε εφαρμόζουμε το ***μοντέλο σταθερών επιδράσεων***. Αντίθετα, θέλουμε τα αποτελέσματα να αφορούν όλο το εύρος τιμών που μπορεί να πάρει ένας παράγοντας – και όχι μόνο όσες εξετάζονται στο πείραμα – τότε εφαρμόζουμε το ***μοντέλο τυχαίων επιδράσεων***. Η Ανάλυση Διακύμανσης έχει εφαρμογή σε ποικίλα επιστημονικά πεδία, όπως στη Βιοϊατρική και στον Στατιστικό Έλεγχο Ποιότητας. Ακολουθεί μια αναλυτική περιγραφή της μεθόδου για τη μελέτη 2 παραγόντων Α και Β με ισορροπημένο σχεδιασμό, δηλαδή σε σχεδιασμό όπου κάνουμε τον ίδιο ακριβώς αριθμό μετρήσεων, n, σε κάθε θεραπεία.

Έστω ότι ερευνούμε τις επιδράσεις που έχουν δύο παράγοντες Α και Β, με α και β επίπεδα αντίστοιχα, στην απόκριση *Y*. Το μοντέλο ανάλυσης διακύμανσης κατά δύο παράγοντες μπορεί να παρουσιαστεί και ως

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \alpha\beta_{ij} + \varepsilon_{ijk},\ i = 1,2,\dots,a,\ j = 1,2,\dots,\beta,\ k = 1,2,\dots,n$$

όπου

μ: είναι ο ολικός μέσος του συνόλου των παρατηρήσεων

α_i: είναι η επίδραση του *i*-οστού επιπέδου του παράγοντα Α πάνω στη μεταβλητή απόκρισης

β_j: είναι η επίδραση του *j*-οστού επιπέδου του παράγοντα Β πάνω στη μεταβλητή απόκρισης

$\alpha\beta_{ij}$: είναι η αλληλεπίδραση μεταξύ του *i*-οστού επιπέδου του παράγοντα Α και του *j*-οστού επιπέδου του παράγοντα Β πάνω στη μεταβλητή απόκρισης, και

ε_{ijk}: είναι τα τυχαία σφάλματα που υποθέτουμε ότι είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές με κατανομή την $N(0, \sigma^2)$.

Οι έλεγχοι υποθέσεων που ενδιαφέρουν είναι οι εξής:

Έλεγχος σημαντικότητας των κύριων επιδράσεων του παράγοντα Α:

$$H_0: \alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_\mathrm{\alpha} = 0$$

$$H_1: \alpha_i \neq 0 \text{ για τουλάχιστον ένα } i$$

Έλεγχος σημαντικότητας των κύριων επιδράσεων του παράγοντα Β:

$$H_0: \beta_1 = \beta_2 = \cdots = \beta_\mathrm{\beta} = 0$$

$$H_1: \beta_j \neq 0 \text{ για τουλάχιστον ένα } j$$

Έλεγχος σημαντικότητας της αλληλεπίδρασης των δύο παραγόντων:

$$H_0: a\beta_{11} = a\beta_{12} = \cdots = a\beta_{\alpha\beta} = 0$$

$$H_1: a\beta_{\iota j} \neq 0 \ \text{ για τουλάχιστον ένα ζεύγος } (i\ ,j)$$

Χρησιμοποιώντας τώρα τα:

- $Y_{i..} = \sum_{j=1}^{\beta} \sum_{k=1}^{n} Y_{ijk}$, i=1,2,…,α για το άθροισμα των παρατηρήσεων της μεταβλητής απόκρισης στο i-οστό επίπεδο του Α,
- $\bar{Y}_{i..} = \frac{Y_{i..}}{\beta n}$, i=1,2,…,α, για το μέσο του i-οστού επιπέδου του παράγοντα Α,
- $Y_{.j.} = \sum_{i=1}^{\alpha} \sum_{k=1}^{n} Y_{ijk}$, j=1,2,…,β για το άθροισμα των παρατηρήσεων της μεταβλητής απόκρισης στο j-οστό επίπεδο του παράγοντα Β,
- $\bar{Y}_{.j.} = \frac{Y_{.j.}}{an}$, j=1,2,…,β για το μέσο του j-οστού επιπέδου του παράγοντα Β,
- $Y_{...} = \sum_{i=1}^{\alpha} \sum_{j=1}^{\beta} \sum_{k=1}^{n} Y_{ijk}$, για το συνολικό άθροισμα των παρατηρήσεων της μεταβλητής απόκρισης, και
- $\bar{Y} = \frac{Y_{...}}{\alpha\beta n}$, για το συνολικό μέσο των παρατηρήσεων της μεταβλητής απόκρισης

μπορούμε να δείξουμε ότι ισχύει

$$SSTO = SSA + SSB + SSAB + SSE$$

όπου η συνολική μεταβλητότητα *SSTO* των τιμών της μεταβλητής απόκρισης υπολογίζεται από τη σχέση $SSTO = \sum_{i=1}^{\alpha} \sum_{j=1}^{\beta} \sum_{k=1}^{n} (Y_{ijk} - \bar{Y})^2$, η μεταβλητότητα των τιμών της μεταβλητής απόκρισης που οφείλεται στις μεταβολές των επιπέδων του παράγοντα Α υπολογίζεται από την $SSA = \beta n \sum_{i=1}^{\alpha} (\bar{Y}_{i..} - \bar{Y})^2$, η μεταβλητότητα των τιμών της μεταβλητής απόκρισης που οφείλεται στις μεταβολές των επιπέδων του παράγοντα Β υπολογίζεται από την $SSB = \alpha n \sum_{i=1}^{\beta} (\bar{Y}_{.j.} - \bar{Y})^2$ και η μεταβλητότητα των τιμών της μεταβλητής απόκρισης που οφείλεται στην αλληλεπίδραση των παραγόντων Α και Β υπολογίζεται από την $SSAB = n \sum_{j=1}^{a} \sum_{j=1}^{\beta} (\bar{Y}_{ij.} - \bar{Y}_{i..} - \bar{Y}_{.j.} + \bar{Y})^2$. Τέλος, ο όρος $SSE = \sum_{i=1}^{\alpha} \sum_{j=1}^{\beta} \sum_{k=1}^{n} (Y_{ijk} - \bar{Y}_{ij.})^2$ αντιπροσωπεύει το άθροισμα των τετραγώνων που εκφράζει τη μη ελεγχόμενη μεταβλητότητα που εμφανίζεται μεταξύ των παρατηρήσεων που ανήκουν στον ίδιο συνδυασμό επιπέδων των παραγόντων και είναι γνωστό ως το άθροισμα των τετραγώνων των σφαλμάτων.

Το άθροισμα τετραγώνων *SSA* έχει α – 1 βαθμούς ελευθερίας, το άθροισμα τετραγώνων *SSB* έχει β – 1 βαθμούς ελευθερίας, το άθροισμα τετραγώνων της αλληλεπίδρασης *SSAB* έχει (α – 1)(β – 1) βαθμούς ελευθερίας και τέλος το ολικό άθροισμα *SSTO* έχει αβn – 1 βαθμούς ελευθερίας. Επομένως, οι βαθμοί ελευθερίας για το άθροισμα των τετραγώνων των σφαλμάτων *SSE* είναι ίσο με αβ(n – 1). Τα μέσα αθροίσματα τετραγώνων των Α, Β, ΑΒ και των σφαλμάτων θα είναι

$$MSA = \frac{SSA}{\alpha-1}, MSB = \frac{SSB}{\beta-1}, MSAB = \frac{SSAB}{(\alpha-1)(\beta-1)} \text{ και } MSE = \frac{SSE}{\alpha\beta(n-1)}.$$

Οι λόγοι *MSA/MSE, MSB/MSE* και *MSAB/MSE* ακολουθούν τη κατανομή F με α – 1, β – 1 και (α – 1)(β – 1) βαθμούς ελευθερίας για τον αριθμητή αντίστοιχα και αβ(n – 1) βαθμούς ελευθερίας για το παρονομαστή και χρησιμοποιούνται για τον έλεγχο των μηδενικών υποθέσεων για τις κύριες επιδράσεις των Α και Β και την αλληλεπίδραση ΑΒ, αντίστοιχα.

Προφανώς, η μεθοδολογία γενικεύεται άμεσα για τη μελέτη των επιδράσεων περισσότερων από δύο παραγόντων.

2.2 Πλήρεις Παραγοντικοί Σχεδιασμοί (2^k) και Κλασματικοί Παραγοντικοί Σχεδιασμοί (2^{k-p})

Μια σπουδαία κατηγορία σχεδιασμών είναι όταν χρησιμοποιούνται για τη μελέτη k παραγόντων οι οποίοι εξετάζονται αποκλειστικά σε δύο επίπεδα ο καθένας. Η πλήρης επανάληψη του σχεδιασμού αυτού απαιτεί 2^k παρατηρήσεις και ουσιαστικά αντιπροσωπεύει τον 2^k πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό. Συχνά χρησιμοποιούμε τον συμβολισμό +1 και -1 με σκοπό να δηλώσουμε τα δύο επίπεδα των παραγόντων, ο οποίος είναι ιδιαίτερα χρήσιμος τόσο για την ανάλυση των ιδιοτήτων του σχεδιασμού όσο και για την ανάλυση των παρατηρήσεων. Επιπλέον, τα επίπεδα ονομάζονται «υψηλό» και «χαμηλό» αντίστοιχα, το οποίο υποδηλώνει και μία διάταξη στα επίπεδα των παραγόντων που μελετάμε κάθε φορά.

Οι 2^k πλήρεις παραγοντικοί σχεδιασμοί πειραμάτων εμφανίζουν υψηλή απόδοση με ορισμένη οικονομία σχετικά με το πλήθος των πειραμάτων που πρέπει να εκτελεστούν, διότι μπορούν να μελετηθούν αρκετοί παράγοντες με μικρό αριθμό δοκιμών σε αντιδιαστολή με έναν πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό, στον οποίο οι παράγοντες μελετώνται σε περισσότερα από δύο επίπεδα. Μεγάλη σημασία σε αυτά τα πειράματα παρουσιάζει ο Πίνακας Σχεδιασμού στις στήλες του οποίου παρουσιάζονται οι παράγοντες και στις γραμμές οι θεραπείες (ένας συγκεκριμένος συνδυασμός των επιπέδων των παραγόντων). Στον ακόλουθο πίνακα σχεδιασμού παρουσιάζεται ένα 2^3 πλήρες παραγοντικό πείραμα, οι τρεις παράγοντες συμβολίζονται με κεφαλαία γράμματα A, B, και C και τα πρόσημα υποδηλώνουν το «υψηλό» και «χαμηλό» επίπεδο του κάθε παράγοντα.

Θεραπεία			
α/α	**A**	**B**	**C**
1	-	-	-
2	+	-	-
3	-	+	-
4	+	+	-
5	-	-	+
6	+	-	+
7	-	+	+
8	+	+	+

Από τον παραπάνω πίνακα το δεύτερο πείραμα θα πραγματοποιηθεί με το παράγοντα A στο υψηλό επίπεδο (+), τον παράγοντα B στο χαμηλό επίπεδο (-) και το παράγοντα C στο χαμηλό επίπεδο (-).

Για την ανάλυση ενός 2^k πλήρους παραγοντικού πειράματος μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο πίνακας αλγεβρικών προσήμων που προκύπτει από τον πίνακα σχεδιασμού και βοηθά στον υπολογισμό των εκτιμήσεων των παραγοντικών επιδράσεων, κύριων και αλληλεπιδράσεων, και στη μελέτη της συσχέτισής τους. Στο παρακάτω πίνακα υπάρχουν οι στήλες των k παραγόντων, όπως εμφανίζονται στον αντίστοιχο πίνακα σχεδιασμού και δημιουργούνται επιπλέον στήλες που αντιστοιχούν σε όλες τις αλληλεπιδράσεις των k παραγόντων. Οι τελευταίες δημιουργούνται από το γινόμενο των στηλών που αντιστοιχούν στου παράγοντες που συμμετέχουν σε κάθε αλληλεπίδραση. Τέλος στο πίνακα αλγεβρικών προσήμων τοποθετείται ως πρώτη και μία στήλη που αποτελείται μόνο από +1.

Ο παρακάτω πίνακας αποτελεί έναν πίνακα αλγεβρικών προσήμων για έναν 2^3 πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό και τα σύμβολα (1), a, b, c, ab, ac, bc και abc, αντιπροσωπεύουν το άθροισμα των τιμών των n μετρήσεων που προκύπτουν σε αυτή τη θεραπεία.

Θεραπεία	I	A	B	C	AB	AC	BC	ABC	Y
1	+	-	-	-	+	+	+	-	(1)
2	+	+	-	-	-	-	+	+	a
3	+	-	+	-	-	+	-	+	b
4	+	+	+	-	+	-	-	-	ab
5	+	-	-	+	+	-	-	+	c
6	+	+	-	+	-	+	-	-	ac
7	+	-	+	+	-	-	+	-	bc
8	+	+	+	+	+	+	+	+	abc

Σύμφωνα με τον παραπάνω πίνακα υπάρχουν τρεις κύριες επιδράσεις των παραγόντων A, B και C, τρεις αλληλεπιδράσεις δεύτερης τάξης AB, AC και BC και μία αλληλεπίδραση τρίτης τάξης η ABC.

Ως κύρια επίδραση ενός παράγοντα ορίζουμε τη διαφορά των μέσων αποκρίσεων που αντιστοιχούν στο «χαμηλό» και «υψηλό» επίπεδο, παρατηρούμε ουσιαστικά την αλλαγή της απόκρισης η οποία προκαλείται από την αλλαγή στο επίπεδο του παράγοντα. Έτσι, για παράδειγμα, η κύρια επίδραση του παράγοντα A υπολογίζεται από

$$A = \bar{Y}_{A+} - \bar{Y}_{A-}.$$

Ο πίνακας αλγεβρικών προσήμων, όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, είναι σημαντικός για να υπολογίσουμε τις παραγοντικές επιδράσεις. Επομένως, ο υπολογισμός της κύριας επίδρασης του παράγοντα A σε ένα 2^3 πλήρες παραγοντικό πείραμα με τη βοήθεια του πίνακα αλγεβρικών προσήμων γίνεται ως εξής:

Για το υψηλό επίπεδο, χρησιμοποιούνται οι τιμές τις απόκρισης από τις θεραπείες a, ab, ac και abc. Αναφορικά με το χαμηλό επίπεδο του παράγοντα A χρησιμοποιούνται οι τιμές από τις (1), b, c, και bc. Άρα, όταν ο παράγοντας A μεταβαίνει από το χαμηλό στο υψηλό επίπεδο, η μέση μεταβολή στην απόκριση *Y* είναι ως εξής:

$$\frac{a + ab + ac + abc}{4n} - \frac{1 + b + c + bc}{4n}$$

η εναλλακτικά,

$$A = \frac{1}{4n}\,[\alpha + \alpha b + ac + abc - 1 - b - c - bc]$$

Παρατηρούμε λοιπόν ότι η επίδραση του παράγοντα A υπολογίζεται διαιρώντας μία προσθαφαίρεση των τιμών που συγκεντρώθηκαν για την κάθε θεραπεία με τη ποσότητα $4n$. Ο τρόπος με τον οποίο πραγματοποιείται η προσθαφαίρεση προκύπτει από το πίνακα αλγεβρικών προσήμων εφόσον εφαρμόσουμε το “εσωτερικό γινόμενο” της στήλης A με τη στήλη Υ, η ποσότητα αυτή καλείται «αντίθεση» και συμβολίζεται με l_A. Μέσω της παραπάνω μεθόδου και με τη βοήθεια φυσικά του πίνακα αλγεβρικών προσήμων μπορούμε να υπολογίσουμε και τις υπόλοιπες παραγοντικές επιδράσεις.

Γενικότερα, στη περίπτωση ενός 2^k πλήρη παραγοντικού σχεδιασμού που έχει κατασκευαστεί ο πίνακας αλγεβρικών προσήμων, υπάρχει η παρακάτω σχέση για να υπολογίσουμε οποιαδήποτε επίδραση:

$$\mathrm{AB} \ldots = \frac{l_{AB\ldots}}{\mathrm{n} \cdot 2^{k-1}}$$

Η πραγματοποίηση της αξιολόγησης της παραγοντικής επίδρασης που μας ενδιαφέρει γίνεται μέσω της ανάλυσης διασποράς. Τα αθροίσματα τετραγώνων κάθε επίδρασης που χρειάζεται η μεθοδολογία, υπολογίζονται από τις αντίστοιχες αντιθέσεις με τη βοήθεια του πίνακα αλγεβρικών προσήμων βάσει του τύπου:

$$SSAB \ldots = \frac{l_{AB\ldots}^2}{n \cdot 2^k}$$

και έχουν έναν βαθμό ελευθερίας το καθένα.

Ο πίνακας αλγεβρικών προσήμων μας προσφέρει τη πληροφορίες και για τη συσχέτιση των εκτιμήσεων των παραγοντικών επιδράσεων. Οι τιμές προκύπτουν υπολογίζοντας το εσωτερικό γινόμενο των στηλών που αντιστοιχούν στις επιδράσεις που μας αφορούν. Αναφορικά με τους πλήρεις παραγοντικούς σχεδιασμούς, η τιμή αυτή είναι πάντα μηδέν και επομένως οι εκτιμήσεις είναι ασυσχέτιστες.

Εκτός από την εκτίμηση και την αξιολόγηση των επιδράσεων σε έναν 2^k παραγοντικό σχεδιασμό, συχνά επιδιώκουμε να προσδιορίσουμε ένα μοντέλο με βάση το οποίο να μπορούμε να προβλέψουμε την απόκριση ή να εκτιμήσουμε τη μέση απόκριση για οποιεσδήποτε τιμές των παραγόντων ανάμεσα στα επίπεδα που εξετάσαμε. Σαν παράδειγμα, χρησιμοποιούμε τον 2^2 πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό και σημειώνουμε ότι η διαδικασία γενικεύεται εύκολα και άμεσα για οποιοδήποτε σχεδιασμό.

Για το 2^2 παραγοντικό σχεδιασμό, χρησιμοποιείται το γραμμικό μοντέλο

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \varepsilon$$

όπου:

X_1 είναι μια κωδικοποιημένη μεταβλητή με τιμές +1 και –1 ανάλογα με το ποιο επίπεδο χρησιμοποιείται για τον παράγοντα Α.

X_2 είναι μία κωδικοποιημένη μεταβλητή με τιμές +1 και –1 ανάλογα με το ποιο επίπεδο χρησιμοποιείται για τον παράγοντα B και

X_1X_2 είναι μία κωδικοποιημένη μεταβλητή για την αλληλεπίδραση AB, οι τιμές της οποίας προκύπτουν από το γινόμενο των τιμών της X_1 και της X_2.

Ουσιαστικά, ο πίνακας σχεδιασμού X του μοντέλου είναι ο πίνακας αλγεβρικών προσήμων (επαναλαμβανόμενος n φορές για καθεμία από τις επαναλήψεις του 2^2 παραγοντικού σχεδιασμού). Σημειώνεται ότι με τη χρήση των κωδικοποιημένων μεταβλητών αποφεύγουμε τη συσχέτιση μεταξύ ανεξάρτητων μεταβλητών του μοντέλου, καθώς οι μεταβλητές X_1, X_2, X_1X_2 έχουν μηδενικές συσχετίσεις. Το μοντέλο της παλινδρόμησης που προσαρμόζεται στα δεδομένα μπορεί να αποδειχθεί ότι έχει τη μορφή:

$$\hat{Y} = \bar{Y} + \frac{\mathrm{A}}{2}X_1 + \frac{\mathrm{B}}{2}X_2 + \frac{\mathrm{AB}}{2}X_1X_2$$

όπου A, B και AB είναι οι εκτιμήσεις των παραγοντικών επιδράσεων. Έτσι μπορούμε να γράψουμε το μοντέλο χωρίς να κάνουμε ανάλυση παλινδρόμησης. Αν κάποια επίδραση δεν προκύπτει ότι είναι στατιστικά σημαντική δε συμπεριλαμβάνεται στο μοντέλο και προφανώς, πριν χρησιμοποιήσουμε το μοντέλο, είναι αναγκαίο να εκτελέσουμε όλους τους διαγνωστικούς ελέγχους τον υπολοίπων. Εν κατακλείδι, με τους 2^k πλήρεις παραγοντικούς σχεδιασμούς μπορούμε να εκτιμήσουμε ασυσχέτιστα τη μία από την άλλη όλες τις παραγοντικές επιδράσεις. Στις εφαρμογές όμως έχει παρατηρηθεί ότι δεν επηρεάζουν σημαντικά όλες οι παραγοντικές επιδράσεις την απόκριση που μελετάμε.

Υπάρχουν τρεις αρχές σχετικά με τις παραγοντικές επιδράσεις και είναι οι εξής:

- ***Σποραδικότητα (Effect sparsity principle):*** Ο αριθμός των σημαντικών επιδράσεων είναι μικρός.
- ***Ιεραρχία (Hierarchical ordering principle):*** Οι επιδράσεις χαμηλής τάξης είναι πιθανότερο να είναι σημαντικές από αυτές τις υψηλής τάξης.
- ***Κληρονομικότητα (Effect heredity principle):*** Για να είναι μία αλληλεπίδραση σημαντική πρέπει οι «γονείς» της να είναι σημαντικοί (ισχυρή κληρονομικότητα – strong heredity) ή για να είναι μία αλληλεπίδραση σημαντική πρέπει τουλάχιστον ένας «γονέας» της να είναι σημαντικός (αδύναμη κληρονομικότητα – weak heredity).

Λαμβάνοντας υπόψη ότι κάθε πειραματική εκτέλεση μας δίνει έναν βαθμό ελευθερίας για τη πραγματοποίηση εκτίμησης και συνδυαστικά με τις αρχές που διέπουν τις παραγοντικές επιδράσεις, είναι έκδηλο ότι συχνά χρησιμοποιούνται αρκετά περισσότερα πειράματα από όσα χρειάζονται στη πραγματικότητα για να εκτιμήσουμε τις επιδράσεις που θεωρούμε ότι ενδέχεται να είναι σημαντικές. Βάσει των παραπάνω λοιπόν, και συγκεκριμένα σε περιπτώσεις που η δυνατότητα πειραματισμού είναι περιορισμένη, στην πράξη χρησιμοποιούμε ένα επιλεγμένο υποσύνολο θεραπειών του πλήρους παραγοντικού πειράματος, υποθέτοντας ότι μερικές από τις αλληλεπιδράσεις υψηλής τάξης δεν είναι σημαντικές (σύμφωνα με τις αρχές των παραγοντικών επιδράσεων). Οι σχεδιασμοί για αυτές της περιπτώσεις ανήκουν στην κατηγορία των κλασματικών παραγοντικών σχεδιασμών (Fractional Factorial Designs) και είναι πιο διαδεδομένοι σε πειράματα κρησαρίσματος (screening experiments)

Οι κλασματικοί παραγοντικοί σχεδιασμοί συμβολίζονται ως 2^{k-p} , σύμβολο που σημαίνει ότι μελετάμε *k* παράγοντες με δύο επίπεδα τον καθένα χρησιμοποιώντας 2^{k-p} συνολικά επιλεγμένες θεραπείες. Το κλάσμα χαρακτηρίζεται και ως το $1/2^p$ κλάσμα του πλήρους 2^k παραγοντικού σχεδιασμού. Έτσι για παράδειγμα, για να μελετηθούν 8 παράγοντες με δύο επίπεδα ο καθένας με έναν πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό χρειάζονται 2^8 =256 πειράματα ενώ αν χρησιμοποιήσουμε το ½ κλάσμα του πλήρους σχεδιασμού θα χρειαστούν τα μισά πειράματα, δηλαδή 128. Ένα μειονέκτημα που παρουσιάζεται με τη χρήση αυτού του είδους σχεδιασμού είναι ότι χάνουμε κάποιες πληροφορίες και μπορεί μετέπειτα να αντιμετωπίσουμε δυσκολία στην ερμηνεία των παραγοντικών επιδράσεων, φαινόμενο το οποίο είναι γνωστό ως «σύγχυση» των παραγοντικών επιδράσεων.

Αναφορικά με το κατασκευαστικό κομμάτι ενός 2^{k-p} κλασματικού παραγοντικού σχεδιασμού δεν υπάρχει κάποια μεγάλη δυσκολία. Δημιουργούμε αρχικά έναν πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό με $k-p$ παράγοντες, ο οποίος λέγεται και σχεδιασμός – βάση, και έπειτα προσθέτουμε *p* επιπλέον στήλες (παράγοντες) των οποίων τα επίπεδα (+ ή -) σε κάθε θεραπεία προκύπτουν από το πολλαπλασιασμό των επιπέδων συγκεκριμένων στηλών του σχεδιασμού βάση. Το γινόμενο των στηλών που προκύπτει από το σχεδιασμό – βάση, που δημιουργεί ουσιαστικά κάθε νέα στήλη, ονομάζεται γεννήτορας του σχεδιασμού. Μία άλλη τεχνική χρησιμοποιεί τον πίνακα των αλγεβρικών προσήμων του πλήρους παραγοντικού πειράματος, την οποία θα παρουσιάσουμε μέσα από ένα παράδειγμα χρησιμοποιώντας τον πίνακα αλγεβρικών προσήμων του 2^3 πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού. Ένας κλασματικός 2^{3-1} πειραματικός σχεδιασμός μπορεί να κατασκευαστεί αν επιλέξουμε μια στήλη αυτού του πίνακα προσήμων και κρατήσουμε αυτές τις γραμμές που η συγκεκριμένη στήλη επιλογής έχει το ίδιο πρόσημο / επίπεδο.

Πείραμα	I	A	B	AB	C	AC	BC	D=ABC
1	+	-	-	+	-	+	+	-
2	+	+	-	-	-	-	+	+
3	+	-	+	-	-	+	-	+
4	+	+	+	+	-	-	-	-
5	+	-	-	+	+	-	-	+
6	+	+	-	-	+	+	-	-
7	+	-	+	-	+	-	+	-
8	+	+	+	+	+	+	+	+

Κρατώντας μόνο το οριζόντιο έντονα γραμμοσκιασμένο κομμάτι έχουμε το πίνακα αλγεβρικών προσήμων ενός κλασματικού παραγοντικού σχεδιασμού τριών παραγόντων.

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

από όπου προκύπτει ότι ο σχεδιασμός είναι:

A	B	C
-	-	-
+	+	-
+	-	+
-	+	+

Ο σχεδιασμός 2^{3-1} σχηματίστηκε επιλέγοντας τις θεραπείες εκείνες που έχουν αρνητικό πρόσημο στη στήλη ABC. Η στήλη ABC ονομάζεται γεννήτορας, διότι γέννησε το παραπάνω σχεδιασμό. Ο πίνακας αλγεβρικών προσήμων ενός 2^{k-p} κλασματικού παραγοντικού σχεδιασμού δεν διαφέρει σε τίποτα από τον αντίστοιχο πίνακα ενός 2^k πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό. Η μόνη διαφορά έγκειται στο ότι ο κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός θα παρουσιάσει ταυτόσημες στήλες. Στη πράξη αυτό σημαίνει ότι θα υπάρξει σύγχυση των επιδράσεων του κλασματικού σχεδιασμού, δηλαδή θα υπάρχουν επιδράσεις οι οποίες θα έχουν υπολογιστεί με τον ίδιο τρόπο όπως και άλλες επιδράσεις. Οι ταυτόσημες στήλες στο πίνακα αλγεβρικών προσήμων οδηγεί στην ύπαρξη ταυτόσημων επιδράσεων. Γενικότερα ένας 2^{k-p} κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός ερευνά k παράγοντες με 2 επίπεδα ο καθένας και με 2^{k-p} συνολικά θεραπείες. Ο σχεδιασμός αυτός έχει $2^p - 1$ ορίζουσες σχέσεις που χωρίζουν τις επιδράσεις σε 2^{k-p} ομάδες οι οποίες περιέχουν 2^p συνολικά ταυτόσημες επιδράσεις. Για συγκεκριμένα k και p μπορούμε να δημιουργήσουμε διάφορους κλασματικούς παραγοντικούς σχεδιασμούς. Για διαφορετικές επιλογές θα δημιουργηθούν και διαφορετικά σύνολα ταυτόσημων επιδράσεων.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

Order - of - Addition Experiments και Paired – Wise Ordering (PWO) μοντέλο

3.1 Γέννηση του σχεδιασμού Order – of – Addition και ορισμός της θεραπείας

Υπάρχουν προβλήματα στα οποία για τη παραγωγή του τελικού προϊόντος, χρειάζεται να αναμειχθούν m συστατικά και πιθανολογείται ότι η σειρά με την οποία θα αναμειχθούν κατά τη διαδικασία παραγωγής επηρεάζει κάποια κρίσιμη ποσότητα του τελικού προϊόντος που μας ενδιαφέρει. Τέτοια προβλήματα εμφανίζονται συχνά σε διάφορες περιοχές της επιστήμης όπως την Χημεία, την Επιστήμη τροφίμων και την Ιατρική.

Το 1935, ο R.A. Fisher περιγράφει στο βιβλίο του με τίτλο «*The designs of experiments*» (1935) το περίφημο πείραμα *«Lady Tasting Tea»,* στο οποίο τα τέσσερα φλυτζάνια τσαγιού παρασκευάστηκαν εισάγοντας πρώτα γάλα και συνέχεια τσάι, ενώ τα άλλα τέσσερα φλυτζάνια τσαγιού φτιάχτηκαν προσθέτοντας πρώτα τσάι και έπειτα γάλα. Στόχος αυτού του πειράματος ήταν να δοκιμαστεί η ικανότητα της κυρίας να προσδιορίσει τη σειρά των υλικών που προστέθηκαν στο μείγμα σε κάθε ένα από τα οχτώ φλιτζάνια, όταν τα δοκίμασε με τυχαία σειρά. Φημολογείται ότι η κυρία ήταν σε θέση να προσδιορίσει σωστά τη σειρά των συστατικών που προστέθηκαν και στα οχτώ φλιτζάνια του τσαγιού, το οποίο οδηγεί στο συμπέρασμα ότι είναι εξαιρετικά απίθανο να μαντεύει αλλά μάλλον έχει κάποια ικανότητα να προσδιορίζει τη σειρά. Το πείραμα αυτό θεωρείται ιστορική στιγμή για το τομέα της στατιστικής λόγω της θέσης του ως έναν από τους πυλώνες στήριξης της ανάλυσης τυχαιοποίησης των πειραμάτων. Επίσης, το πείραμα αυτό αντιπροσωπεύει την πρώτη σύγχρονη στατιστική προσπάθεια κατανόησης της σχέσης μεταξύ της διαδοχικής σειράς ενός συνόλου συστατικών (τσάι και γάλα) και ενός μετρούμενου αποτελέσματος (σωστός προσδιορισμός της σειράς προσθήκης των συστατικών).

Σύμφωνα με το παραπάνω παράδειγμα, αν πρόκειται να αναμειχθούν m συστατικά (components), τα $c_1, c_2, c_3, \dots c_m$, υπάρχουν m! διαφορετικοί τρόποι (σειρές) για να γίνει αυτό. Το ενδιαφέρον λοιπόν, εστιάζεται στην ανάπτυξη μίας μεθοδολογίας, η οποία να υποδείξει τη βέλτιστη σειρά. Μια λογική προσέγγιση είναι να μετρηθεί το χαρακτηριστικό που μας ενδιαφέρει χρησιμοποιώντας όλες τις δυνατές «σειρές» και στη συνέχεια με τη χρήση κατάλληλων στατιστικών τεχνικών, να βρεθεί η σειρά που «βελτιστοποιεί» τη τιμή του χαρακτηριστικού που μελετάμε. Αν έχουμε για παράδειγμα τρία συστατικά (m=3) τα c_1, c_2, c_3, οι διαφορετικές σειρές ανάμειξης θα είναι έξι (αφού 3!=6) και είναι οι εξής:

c_1, c_2, c_3

c_1, c_3, c_2

c_2, c_1, c_3

c_2, c_3, c_1

c_3, c_1, c_2

c_3, c_2, c_1

Ο σκοπός των σχεδιασμών στα πειράματα ανάμειξης υλικών (Order of Addition Experiments – OofA) είναι να προσδιορίσουν τη βέλτιστη σειρά προσθήκης σε μία ακολουθία από m συστατικά σε ένα σύστημα (θεραπεία). Ειδικότερα, συγκρίνουμε έναν αριθμό διαφορετικών σειρών προσθήκης, για να συμπεράνουμε την εξάρτηση ή το βαθμό εξάρτησης που έχει η μεταβλητή απόκρισης που μελετάμε, από τη σειρά προσθήκης των συστατικών, αν διαθέτουμε m συστατικά προσθήκης. Η αναζήτηση όλων των συνδυασμών είναι εξαντλητική, αν αναλογιστεί κανείς ότι απαιτούνται m! εκτελέσεις του πειράματος, γεγονός το οποίο δεν είναι χρονικά και οικονομικά εφικτό, ειδικότερα αν έχουμε μεγάλο αριθμό m συστατικών. Για παράδειγμα, για m=10 απαιτούνται περίπου 10! = 3.628.800 εκτελέσεις.

Ο Στατιστικός Σχεδιασμός Πειραμάτων (Statistical Design of Experiments – DOE) αποτελεί ισχυρό εργαλείο για τη συλλογή δεδομένων υπό τον έλεγχο του πειραματικού κόστους. Η επιτυχημένη εφαρμογή του Στατιστικού Σχεδιασμού Πειραμάτων (Statistical Design of Experiments - DOE) στα πειράματα ανάμειξης υλικών (Order of Addition Experiments – OofA) βοηθάει τους πειραματιστές:

- να προσδιορίσουν τη σημαντικότητα σχετικά με το αποτέλεσμα στη σειρά προσθήκης των m συστατικών.
- και να καταλήξουν στη βέλτιστη σειρά προσθήκης και όλα αυτά με σημαντικά λιγότερες πειραματικές εκτελέσεις και υψηλότερη αξιοπιστία.

Προβλήματα σειράς προσθήκης συστατικών συναντάμε σε πολλούς τομείς, στη χημεία, στη βιολογία, στην επιστήμη τροφίμων, στην πολιτική επιστήμη, στην επιχειρησιακή έρευνα και στη μηχανική. Πιο συγκεκριμένο παράδειγμα αποτελεί ο συνδυασμός φαρμάκων στο οποίο όμως υπάρχει ένας σημαντικός περιορισμός ως προς τη τεχνική, δηλαδή τα φάρμακα προστίθενται ταυτόχρονα και δεν λαμβάνεται υπόψη η αλληλουχία των φαρμάκων. Ωστόσο, η αλληλουχία φαρμάκων συχνά παίζει σημαντικό ρόλο στην απόφαση της αποτελεσματικότητας των τελικών σημείων, διότι η πρώιμη προσθήκη ορισμένων φαρμάκων θα μπορούσε να προετοιμάσει το βιολογικό σύστημα να δεχθεί ή να υπερασπιστεί καλύτερα τα μεταγενέστερα φάρμακα. Κλινικές μελέτες δείχνουν ότι η αλληλουχία των φαρμάκων έχει μεγάλη σημασία για τη βελτίωση της επίδρασης της θεραπείας.

Παρόλο που αντίκτυπος που έχουν τα προβλήματα σειράς προσθήκης σε ένα ευρύ φάσμα ερευνητικών τομέων είναι μεγάλος και η θεμελίωσή τους στην κλασική στατιστική αναμφισβήτητη, είναι εκπληκτικό ότι στατιστική μεθοδολογία για το σχεδιασμό και την ανάλυση πειραμάτων σειράς προσθήκης έχει μόλις πρόσφατα αναπτυχθεί. Το βασικό πρόβλημα που αντιμετωπίζουν οι ερευνητές που επιθυμούν να επιλύσουν προβλήματα σειράς προσθήκης είναι η ραγδαία αύξηση στο πλήθος των πειραμάτων που λαμβάνει χώρα, καθώς το μέγεθος m του συστατικού αυξάνεται. Πολλά από τα μοντέλα και τα σχέδια που αναπτύχθηκαν πρόσφατα, ενώ παρέχουν μια βάση για τη μελέτη αυτού του προβλήματος, στερούνται ευελιξίας και ως εκ τούτου επιφέρουν προβλήματα. Ομοίως, οι υπάρχουσες μέθοδοι δε καταφέρουν να αντιμετωπίσουν σημαντικές περιπτώσεις που είναι πρακτικά σχετικές με πολλά εφαρμοσμένα προβλήματα. Συχνά, μια πειραματική διαδικασία συνίσταται στην εκτέλεση ενός συνόλου βημάτων με μια σταθερή σειρά, στην οποία η εκτέλεση κάθε βήματος εξαρτάται από ένα σύνολο πειραματικών μεταβλητών. Κατά την ολοκλήρωση κάθε διαδικασίας, καταγράφεται η απόκριση ή οι αποκρίσεις που μας ενδιαφέρουν. Ωστόσο, σε ορισμένες περιπτώσεις οι μεταβλητές ενδιαφέροντος είναι τα ίδια τα βήματα της διαδικασίας. Για παράδειγμα, μπορεί να επιθυμούμε να βγάλουμε συμπεράσματα σχετικά με την επίδραση που έχει η σειρά των ονομάτων των υποψηφίων σε ένα ψηφοδέλτιο στο αποτέλεσμα μιας εκλογικής αναμέτρησης ή να βελτιστοποιήσουμε το ποσοστό ολοκλήρωσης μιας ακολουθίας οθονών εισαγωγής σε ένα κινητό, για να ενθαρρύνουμε μια θετική εμπειρία χρήστη. Προκειμένου να σχεδιαστούν και να αναλυθούν τα βήματα και σε άλλα πειράματα που αφορούν τη σειρά προσθήκης, χρειαζόμαστε ένα πιο συγκεκριμένο πλαίσιο.

Κάθε υλικό που πρέπει να προστεθεί ή βήμα που πρέπει να εκτελεστεί στο πείραμα καλείται *συστατικό*. Κάθε σύνολο διατεταγμένων συστατικών ονομάζεται ακολουθία ή διάταξη. Έστω ότι το πείραμα περιλαμβάνει m συστατικά, τα οποία συμβολίζονται χωρίς βλάβη με 0, 1, ... , $m - 1$. Συνολικά, υπάρχουν $m!$ δυνατές μεταθέσεις. Έστω F_m ο πίνακας του πλήρους σχεδίου με $m!$ γραμμές και m στήλες, όπου κάθε γραμμή είναι μια μετάθεση των m στοιχείων. Ο παρακάτω πίνακας είναι ο πίνακας F_4 του πλήρους σχεδιασμού για $m = 4$ συστατικά.

Εκτέλεση	**$α_1$**	**$α_2$**	**$α_3$**	**$α_4$**	**Εκτέλεση**	**$α_1$**	**$α_2$**	**$α_3$**	**$α_4$**
1	0	1	2	3	**13**	2	0	1	3
2	0	1	3	2	**14**	2	0	3	1
3	0	2	1	3	**15**	2	1	0	3
4	0	2	3	1	**16**	2	1	3	0
5	0	3	1	2	**17**	2	3	0	1
6	0	3	2	1	**18**	2	3	1	0
7	1	0	2	3	**19**	3	0	1	2
8	1	0	3	2	**20**	3	0	2	1
9	1	2	0	3	**21**	3	1	0	2
10	1	2	3	0	**22**	3	1	2	0
11	1	3	0	2	**23**	3	2	0	1
12	1	3	2	0	**24**	3	2	1	0

Η εκτέλεση όλων των πιθανών μεταθέσεων (δηλαδή, ακολουθώντας τον πλήρη σχεδιασμό F_m) γίνεται αντιληπτό ότι δε μπορεί να πραγματοποιηθεί ακόμη και για πειράματα με πέντε ή περισσότερα συστατικά. Ο οικονομικός προϋπολογισμός ενός πειράματος επιτρέπει n ($<< m!$) εκτελέσεις και συνεπώς, για την εξοικονόμηση χρόνου και κόστους, είναι απαραίτητο να επιλεγεί ένα υποσύνολο n μεταθέσεων από τις $m!$. Μπορούμε να παρουσιάσουμε το σύνολο των n μεταθέσεων των m συστατικών που χρησιμοποιούμε σε ένα πίνακα Α διάστασης $n \times m$, όπου κάθε γραμμή είναι μία μετάθεση των στοιχείων 0, 1, . . . , $m - 1$.

Λίγες μελέτες έχουν πραγματοποιηθεί για την ορθή επιλογή των *n* μεταθέσεων και για την ανάπτυξη μοντέλων για τη μελέτη του φαινομένου της διάταξης συστατικών σε ένα πείραμα. Στο επίκεντρο των μοντέλων που έχουν προταθεί είναι μια βασική υπόθεση: *το φαινόμενο διάταξης καθορίζεται από τη σχετική θέση ή την απόλυτη θέση κάθε συστατικού στην ακολουθία*. Δηλαδή, μπορούμε να επηρεάσουμε την απόκριση μετακινώντας ένα συστατικό αργότερα ή νωρίτερα στην ακολουθία και η κατανόηση αυτής της σχέσης απαιτεί να εξετάσουμε ποια συστατικά μετατοπίστηκαν όταν μετακινήθηκε το συστατικό. Η επιλογή του ποια από αυτές τις υποθέσεις που θα γίνουν σχετικά με την διαδικασία δημιουργίας δεδομένων παίζει σημαντικό ρόλο στον τρόπο μοντελοποίησης του προβλήματος.

3.2 Paired – Wise Ordering σχεδιασμός και οι ιδιότητές του

Οι Van Nostrand και Voelkel μελέτησαν λοιπόν σχεδιασμούς σειράς ανάμειξης υλικών (Order of Addition Experiments – OofA) υπό το πρίσμα ενός μοντέλου που ελέγχει τη σειρά προσθήκη κατά ζεύγη (Paired – Wise Ordering - PWO). Ισχυρίζονται δηλαδή, ότι σε ένα μοντέλο η βέλτιστη σειρά προσθήκης των *m* συστατικών μπορεί να προκύψει από τη μελέτη της σειράς προσθήκης των συστατικών κατά ζεύγη. Πιο αναλυτικά:

- υποθέτουν ότι υπάρχουν *m* (*m*>=2) συστατικά τα $c_1, c_2, \dots, c_m$ επομένως θα υπάρχουν συνολικά *m!* πιθανές σειρές προσθήκης των *m* συστατικών.
- Μία σειρά προσθήκης αντιπροσωπεύεται από ένα διάνυσμα $\boldsymbol{\alpha} = [a_1, a_2, \dots, a_m]^T$ όπου τα $a_1, a_2, \dots, a_m$ είναι μια μετάθεση του $c_1, c_2, \dots, c_m$. Εδώ μία σειρά αποτελεί μία θεραπεία.

Για την ανάλυση των δεδομένων με στόχο την ανάδειξη της βέλτιστης σειράς ανάμειξης, ο Van Nostrand πρότεινε τη χρήση ψευδομεταβλητών X_{c_i,c_j} που «δείχνουν» τη θέση δύο συστατικών c_i και c_j, $1 \leq i < j \leq m$ σε καθένα από τα διανύσματα $\boldsymbol{\alpha}$. Συγκεκριμένα, η κάθε μεταβλητή X_{c_i,c_j} λαμβάνει την τιμή 1 αν στη σειρά ανάμειξης το συστατικό c_i προηγείται του συστατικού c_j, ειδάλλως λαμβάνει τη τιμή -1. Το γραμμικό μοντέλο που προσαρμόζεται στα δεδομένα παίρνει την εξής μορφή:

$$E(Y) = \beta_0 + \sum\nolimits_{1 \le i < j \le m} \beta_{ij} X_{c_i, c_j}$$

όπου η παράμετρος β_{ij} καθορίζει τη βέλτιστη σειρά που πρέπει να προταθεί για τα συστατικά c_i και c_j. Η βέλτιστη σειρά για όλα τα συστατικά θα προκύψει από τη ταυτόχρονη χρήση των συμπερασμάτων για όλα τα β_{ij}. Εφαρμόζοντας στη πράξη τα παραπάνω χρησιμοποιούμε το παράδειγμα για m=3 συστατικά. Οι ψευδομεταβλητές που θα δημιουργηθούν για το μοντέλο σειρά προσθήκης κατά ζεύγη (PWO) για m=3 συστατικά είναι ως εξής:

	$Xc_{1,}c_2$	$Xc_{1,}c_3$	$Xc_{2,}c_3$
c_1, c_2, c_3	+1	+1	+1
c_1, c_3, c_2	+1	+1	-1
c_2, c_1, c_3	-1	+1	+1
c_2, c_3, c_1	-1	-1	+1
c_3, c_1, c_2	+1	-1	-1
c_3, c_2, c_1	-1	-1	-1

Η χρήση όλων των δυνατών σειρών ανάμειξης των συστατικών για τη συλλογή των μετρήσεων, ουσιαστικά μεταφράζεται ως χρήση ενός πλήρους σχεδιασμού για ένα Order of Addition πείραμα. Το μοντέλο PWO που χρησιμοποιείται για την ανάδειξη της βέλτιστης σειράς ανάμειξης m συστατικών έχει $p = \binom{m}{2} + 1$ παραμέτρους και επιπλέον ο πίνακας πληροφορίας του PWO μοντέλου, δηλαδή ο $X^T X$ δεν είναι διαγώνιος, δηλαδή οι καταχωρήσεις έξω από τη κύρια διαγώνιο δεν είναι μηδέν. Η χρήση ενός πλήρους σχεδιασμού Order of Addition πείραμα απαιτεί πολλές εκτελέσεις όταν το πλήθος των συστατικών αυξάνεται, ακόμα και πολύ περισσότερες από τον αριθμό των παραμέτρων που πρέπει να εκτιμηθούν. Για να δώσουμε ένα οπτικό παράδειγμα, για κάθε αριθμό συστατικών (m) έχει υπολογιστεί το πλήθος εκτελέσεων που θα γίνουν και το πλήθος των παραμέτρων που πρέπει να εκτιμηθούν αντίστοιχα για έναν πλήρη σχεδιασμό PWO.

Συστατικά (m)	**Εκτελέσεις πλήρους σχεδιασμού (m!)**	**Παράμετροι (p)**
3	6	4
4	24	7
5	120	11
6	720	16

Στο παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται οι μεταθέσεις 4 συστατικών καθώς και ο πίνακας μοντέλου του Paired – Wise Ordering που προκύπτει αν χρησιμοποιηθούν όλες.

Εκτελέσεις		I	X_{c_1,c_2}	X_{c_1,c_3}	X_{c_1,c_4}	X_{c_2,c_3}	X_{c_2,c_4}	X_{c_3,c_4}
1	c_1,c_2,c_3,c_4	1	1	1	1	1	1	1
2	c_1,c_2,c_4,c_3	1	1	1	1	1	1	-1
3	c_1,c_3,c_2,c_4	1	1	1	1	-1	1	1
4	c_1,c_3,c_4,c_2	1	1	1	1	-1	-1	1
5	c_1,c_4,c_2,c_3	1	1	1	1	1	-1	-1
6	c_1,c_4,c_3,c_2	1	1	1	1	-1	-1	-1
7	c_2,c_1,c_3,c_4	1	-1	1	1	1	1	1
8	c_2,c_1,c_4,c_3	1	-1	1	1	1	1	-1
9	c_2,c_3,c_1,c_4	1	-1	-1	1	1	1	1
10	c_2,c_3,c_4,c_1	1	-1	-1	-1	1	1	1
11	c_2,c_4,c_1,c_3	1	-1	1	-1	1	1	-1
12	c_2,c_4,c_3,c_1	1	-1	-1	-1	1	1	-1
13	c_3,c_1,c_2,c_4	1	1	-1	1	-1	1	1
14	c_3,c_1,c_4,c_2	1	1	-1	1	-1	-1	1
15	c_3,c_2,c_1,c_4	1	-1	-1	1	-1	1	1
16	c_3,c_2,c_4,c_1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
17	c_3,c_4,c_1,c_2	1	1	-1	-1	-1	-1	1
18	c_3,c_4,c_2,c_1	1	-1	-1	-1	1	-1	1
19	c_4,c_1,c_2,c_3	1	1	1	-1	1	-1	-1
20	c_4,c_1,c_3,c_2	1	1	1	-1	-1	-1	-1
21	c_4,c_2,c_1,c_3	1	-1	1	-1	1	-1	-1
22	c_4,c_2,c_3,c_1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1
23	c_4,c_3,c_1,c_2	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
24	c_4,c_3,c_2,c_1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1

3.3 Η D – αποδοτικότητα

Δεδομένου ότι η χρήση ενός πλήρους σχεδιασμού Order – of – Addition χρειάζεται πολλές εκτελέσεις καθώς το πλήθος το συστατικών *m* και ο αριθμός παραμέτρων αυξάνονται, υπάρχει τρόπος να επιλεχθεί ένα υποσύνολο μεταθέσεων πλήθους *n* από τις συνολικά *m*! διαφορετικές σειρές ανάμειξης, ώστε να χρησιμοποιηθεί αυτό το υποσύνολο για να προσαρμοστεί το PWO μοντέλο και να εξαχθούν χρήσιμα συμπεράσματα με πολύ λιγότερες παρατηρήσεις. Όμως εγείρονται δύο προβληματισμοί σχετικά με το πως θα κρίνουμε τη καταλληλότητα χρήσης μιας τέτοιας επιλογής και αν όντως υπάρχει επιλογή, αν είναι η βέλτιστη ή μπορεί να υπάρξει καλύτερη. Η απάντηση στο παραπάνω ερώτημα είναι το κριτήριο της *D*–αποδοτικότητας. Πιο αναλυτικά, οι Peng, Mukerjee και Lin (Biometrica 2019) μελέτησαν PWO μοντέλο υπό το πλήρη σχεδιασμό Order of Addition για m συστατικά και ανέδειξαν κάποια μη τετριμμένα αποτελέσματα. Ισχυρίστηκαν ότι η βέλτιστη δομή συσχέτισης ενός PWO σχεδιασμού είναι αυτή που δίνεται από έναν πλήρη PWO σχεδιασμό. Σημειώνεται ότι για τον υπολογισμό της D - αποδοτικότητας στην περίπτωση που ο n x p πίνακας μοντέλου αποτελείται από στοιχεία +1 και -1, χρησιμοποιείται ο τύπος:

$$D_{eff} = \frac{|X^T X|^{1/p}}{n}\ ,\ \text{όπου } p = \binom{m}{2} + 1.$$

όπου $X^T X$ ο πίνακας πληροφορίας του PWO γραμμικού μοντέλου.

Ο τύπος των Peng, Mukerjee και Lin για τον υπολογισμό της βέλτιστης αποδοτικότητας ανάλογα με τον το πλήθος των m συστατικών είναι ο:

$$\text{maxD}_{\text{eff}} = maxDeff_m = \left(\frac{(m+1)^{m-1}}{3^{\binom{m}{2}}}\right)^{\frac{1}{\binom{m}{2}+1}}.$$

Δεδομένου ότι ο πλήρης σχεδιασμός είναι και ο βέλτιστος, κάθε σχεδιασμός D που προκύπτει επιλέγοντας n από τις συνολικά m! διαφορετικές σειρές ανάμειξης μπορεί να αξιολογηθεί υπολογίζοντας τη D–αποδοτικότητα του για το PWO μοντέλο (η οποία προκύπτει όπως αναφέρθηκε και παραπάνω από την ορίζουσα του πίνακα πληροφορίας του PWO μοντέλου) και τη συγκρίνουμε με την αποδοτικότητα του πλήρους σχεδιασμού. Για κάθε n λοιπόν, ο βέλτιστος σχεδιασμός θα είναι αυτός που έχει D – αποδοτικότητα όσο πιο κοντά γίνεται σε αυτή την αποδοτικότητα που προκύπτει από το πλήρη σχεδιασμό, τιμή που προκύπτει από τον τύπο των Peng, Mukerjee και Lin. Για την εφαρμογή της μεθόδου θα πρέπει σε πρώτο στάδιο να κατασκευαστούν όλοι οι σχεδιασμοί D που αποτελούνται από n διαφορετικές μεταθέσεις των m συστατικών και στη συνέχεια, να υπολογίσουμε την D – αποδοτικότητά τους, ώστε να βρούμε ποια αποδοτικότητα είναι πλησιέστερη με την αποδοτικότητα του πλήρους σχεδιασμού. Οι σχεδιασμοί D που πρέπει να σχηματίσουμε και να έχουμε στη διάθεσή μας προς μελέτη είναι $\binom{m!}{n}$. Σύμφωνα με τα παραπάνω, θα πρέπει να ισχύει ότι $n \geq \binom{m}{2}$, ώστε να μπορούν να εκτιμηθούν οι παράμετροι στο PWO μοντέλο. Παρακάτω δίνεται ένας πίνακας με το πλήθος των σχεδιασμών D που πρέπει να σχεδιαστούν και οι οποίοι θα έχουν τον ελάχιστο αριθμό επιλεγμένων διαφορετικών σειρών (n) για διάφορα m.

m	Πλήθος σχεδιασμών
3	15
4	346.104
5	1.1606E+15

Είναι φανερό ότι όσο αυξάνεται ο αριθμός των *m* συστατικών, αυξάνεται και το πλήθος των διαφορετικών μεταθέσεων, και το πλήθος των ελάχιστου αριθμού εκτελέσεων που πρέπει να επιλεγούν καθώς και το πλήθος των σχεδιασμών που σχηματίζονται. Στην ερώτηση πως είναι δυνατόν να περιοριστεί το πλήθος των σχεδιασμών που ελέγχονται δεν υπάρχει σαφής απάντηση, αλλά είναι βέβαιο ότι με εξαντλητική διαδικασία θα εντοπίσουμε το βέλτιστο σχεδιασμό με *n* διαφορετικές σειρές. Επειδή όμως κάτι τέτοιο είναι ανέφικτο και κοστοβόρο, υπάρχουν μέθοδοι για να βρίσκουμε εύκολα και γρήγορα έναν «καλό» σχεδιασμό Order of Addition.

3.3 Οικονομικοί Order – of – Addition σχεδιασμοί και Λατινικά Τετράγωνα

Μία μέθοδος για να περιορίσουμε το πλήθος n των σχεδιασμών που πρόκειται να ελέγξουμε, με σκοπό να βρούμε έναν καλό σχεδιασμό είναι η χρήση των Λατινικών Τετραγώνων. Το Λατινικό Τετράγωνο ορίζεται ως μία ταξινόμηση *υ* γραμμάτων σε *υ* γραμμές και *υ* στήλες, έτσι ώστε κάθε γράμμα να εμφανίζεται ακριβώς μία φορά σε κάθε γραμμή και κάθε στήλη. Ο παρακάτω σχηματισμός αποτελεί λατινικό τετράγωνο στης τάξης 5:

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

Για κάθε *υ* υπάρχει ένα τουλάχιστον λατινικό τετράγωνο που σχηματίζεται με κυκλική εναλλαγή των γραμμάτων που χρησιμοποιούνται.

Δυο λατινικά τετράγωνα τέτοια ώστε, στις θέσεις όπου στο πρώτο εμφανίζεται κάποιο από τα *υ* γράμματα, στις ίδιες θέσεις του άλλου εμφανίζονται όλα τα γράμματα, λέγονται Ορθογώνια Λατινικά Τετράγωνα. Για παράδειγμα, τα παρακάτω λατινικά τετράγωνα για

$\upsilon=4$, είναι ανά δύο ορθογώνια:

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

Είναι γνωστό ότι μπορούν κατασκευαστούν $m-1$ το πλήθος ορθογώνια ανά 2 λατινικά τετράγωνα τάξης m, όταν το m είναι πρώτος ή δύναμη πρώτου αριθμού. O Evangelaras (2021) έδειξε ότι καλοί σχεδιασμοί για Order-of-addition πειράματα προκύπτουν χρησιμοποιώντας τις μεταθέσεις που ορίζονται από τις στήλες ορθογώνιων λατινικών τετραγώνων. Το παρακάτω παράδειγμα αφορά σε τρία ορθογώνια ανά δύο λατινικά τετράγωνα τάξης $m=4$:

L_1	**L2**	**L3**
0 1 2 3	0 1 2 3	0 1 2 3
1 0 3 2	2 3 0 1	3 2 1 0
2 3 0 1	3 2 1 0	1 0 3 2
3 2 1 0	1 0 3 2	2 3 0 1

Παρατηρούμε ότι οι στήλες είναι όλες διαφορετικές μεταθέσεις των $m=4$ στοιχείων, δηλαδή κάθε στήλη διαφέρει από τις υπόλοιπες στήλες σε τουλάχιστον ένα στοιχείο. Αυτό μπορεί να αποδειχθεί εξετάζοντας κάθε δυνατό ζεύγος στηλών. Η ιδιότητα αυτή μπορεί να γενικευτεί και σε άλλα λατινικά τετράγωνα. Ο σχεδιασμός που προκύπτει αν γράψουμε, ως γραμμές τις $(m-1)m$ διαφορετικές στήλες που προκύπτουν θα έχουμε έναν σχεδιασμό Order of Addition με $n=m(m-1)$. Από αυτόν τον σχεδιασμό μπορούμε να φτιάξουμε και άλλους αν για παράδειγμα:

- κάνουμε μία μετάθεση των στηλών του πίνακα, γεγονός που θα επηρεάσει τις ψευδομεταβλητές του pairwise order (PWO) μοντέλου και προφανώς τη τελική αποδοτικότητα του σχεδιασμού ή και
- να επιλέξουμε κάποιες από τις $(m-1)m$ γραμμές δημιουργώντας έναν «μικρότερο» σχεδιασμό.

Μια πρακτική εφαρμογή των ορθογώνιων λατινικών τετραγώνων για τέσσερα συστατικά $m=4$ και άρα με πλήθος γραμμών ίσο $n=12$ (n=(m-1)m =(4-1)4=3*4=12) είναι ο σχεδιασμός

0 1 2 3

1 0 3 2

2 3 0 1

3 2 1 0

0 2 3 1

1 3 2 0

2 0 1 3

3 1 0 2

0 3 1 2

1 2 0 3

2 1 3 0

3 0 2 1

Για τον υπολογισμό της D-αποδοτικότητας θα χρειαστούμε τον πίνακα *X* του PWO μοντέλου. Ο πίνακας αυτός είναι διάστασης 12 x 7. Έχουμε

	I	X_{c_1,c_2}	X_{c_1,c_3}	X_{c_1,c_4}	X_{c_2,c_3}	X_{c_2,c_4}	X_{c_3,c_4}
c_1,c_2,c_3,c_4	1	1	1	1	1	1	1
c_1,c_3,c_4,c_2	1	1	1	1	-1	-1	1
c_1,c_4,c_2,c_3	1	1	1	1	1	-1	-1
c_2,c_1,c_4,c_3	1	-1	1	1	1	1	-1
c_2,c_3,c_1,c_4	1	-1	-1	1	1	1	1
c_2,c_4,c_3,c_1	1	-1	-1	-1	1	1	-1
c_3,c_1,c_2,c_4	1	1	-1	1	-1	1	1
c_3,c_2,c_4,c_1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
c_3,c_4,c_1,c_2	1	1	-1	-1	-1	-1	1
c_4,c_1,c_3,c_2	1	1	1	-1	-1	-1	-1
c_4,c_2,c_1,c_3	1	-1	1	-1	1	-1	-1
c_4,c_3,c_2,c_1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1

άρα,

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}$$

και επομένως,

$$X^T X = \begin{bmatrix} 12 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12 & 4 & 4 & -4 & -4 & 4 \\ 0 & 4 & 12 & 4 & 4 & -4 & -4 \\ 0 & 4 & 4 & 12 & 4 & 4 & 4 \\ 0 & -4 & 4 & 4 & 12 & 4 & -4 \\ 0 & -4 & -4 & 4 & 4 & 12 & 4 \\ 0 & 4 & -4 & 4 & -4 & 4 & 12 \end{bmatrix}.$$

Επειδή p=7 και n=12, η D – αποδοτικότητα που προκύπτει από αυτόν το σχεδιασμό για το PWO μοντέλο είναι

$$\frac{|X^T X|^{1/p}}{n} = \frac{3145728^{1/7}}{12} = 0.706423$$

ενώ η βέλτιστη αποδοτικότητα για *m*=4 είναι

$$\left(\frac{(m+1)^{m-1}}{3^{\binom{m}{2}}}\right)^{\frac{1}{\binom{m}{2}+1}} = \left(\frac{5^3}{3^{\binom{4}{2}}}\right)^{\frac{1}{7}} = \left(\frac{125}{3^6}\right)^{\frac{1}{7}} = 0.777316$$

και συνεπώς ο σχεδιασμός μας έχει μια σχετική αποδοτικότητα ίση με 0.9088.

Από το σχεδιασμό αυτό, με μεταθέσεις των στηλών του μπορεί να προκύψουν και άλλοι Order of Addition σχεδιασμοί.

Η μεθοδολογία λοιπόν που βασίζεται στα λατινικά τετράγωνα μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να κατασκευάσουμε εύκολα και γρήγορα καλούς Order of Addition σχεδιασμούς για οποιοδήποτε πλήθος συστατικών *m*, το οποίο είναι δύναμη πρώτου αριθμού. Στόχος λοιπόν είναι να βρεθούν και εναλλακτικές μέθοδοι κατασκευής, ώστε να υπάρχει μεγάλη δεξαμενή σχεδιασμών, ώστε να εντοπίζεται κάθε φορά ο βέλτιστος σχεδιασμός, χωρίς να καταφεύγουμε σε εξαντλητικές μεθόδους που είναι ανέφικτο να πραγματοποιηθούν για μεγάλο αριθμό συστατικών m (components).

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

Εφαρμογή – Μελέτη Περίπτωσης

Στο τελευταίο κεφάλαιο της παρούσας εργασίας θα παρουσιάσουμε πως από έναν πλήρη σχεδιασμό με τέσσερα συστατικά (m=4) ο οποίος έχει 24 εκτελέσεις και D – αποδοτικότητα ίση με 0.777316, κατασκευάζονται για λόγους οικονομίας σχεδιασμοί με τέσσερα συστατικά αλλά με λιγότερες αυτή τη φορά εκτελέσεις που πλησιάζουν την D – αποδοτικότητα του πλήρη σχεδιασμού, έχοντας ως αφετηρία τον πλήρη σχεδιασμό με τα τέσσερα συστατικά, τις 24 εκτελέσεις που δημιουργούνται και τον πίνακα του Paired – Wise Ordering μοντέλου.

Εκτελέσεις		**I**	**X c_1,c_2**	**X c_1,c_3**	**X c_1,c_4**	**X c_2,c_3**	**X c_2,c_4**	**X c_3,c_4**
1	c_1,c_2,c_3,c_4	1	1	1	1	1	1	1
2	c_1,c_2,c_4,c_3	1	1	1	1	1	1	-1
3	c_1,c_3,c_2,c_4	1	1	1	1	-1	1	1
4	c_1,c_3,c_4,c_2	1	1	1	1	-1	-1	1
5	c_1,c_4,c_2,c_3	1	1	1	1	1	-1	-1
6	c_1,c_4,c_3,c_2	1	1	1	1	-1	-1	-1
7	c_2,c_1,c_3,c_4	1	-1	1	1	1	1	1
8	c_2,c_1,c_4,c_3	1	-1	1	1	1	1	-1
9	c_2,c_3,c_1,c_4	1	-1	-1	1	1	1	1
10	c_2,c_3,c_4,c_1	1	-1	-1	-1	1	1	1
11	c_2,c_4,c_1,c_3	1	-1	1	-1	1	1	-1
12	c_2,c_4,c_3,c_1	1	-1	-1	-1	1	1	-1
13	c_3,c_1,c_2,c_4	1	1	-1	1	-1	1	1
14	c_3,c_1,c_4,c_2	1	1	-1	1	-1	-1	1
15	c_3,c_2,c_1,c_4	1	-1	-1	1	-1	1	1
16	c_3,c_2,c_4,c_1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
17	c_3,c_4,c_1,c_2	1	1	-1	-1	-1	-1	1
18	c_3,c_4,c_2,c_1	1	-1	-1	-1	1	-1	1
19	c_4,c_1,c_2,c_3	1	1	1	-1	1	-1	-1
20	c_4,c_1,c_3,c_2	1	1	1	-1	-1	-1	-1
21	c_4,c_2,c_1,c_3	1	-1	1	-1	1	-1	-1
22	c_4,c_2,c_3,c_1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1
23	c_4,c_3,c_1,c_2	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
24	c_4,c_3,c_2,c_1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1

Πιο συγκεκριμένα, θα φτιαχτούν όλοι οι σχεδιασμοί με 4 συστατικά και με n = 7 έως και 12 εκτελέσεις (το πλήθος τους είναι $\binom{24}{n}$ σχεδιασμοί για κάθε n που μελετάται) με τη χρήση της Python και ειδικότερα μέσα από το Project Jupyter. Για κάθε σχεδιασμό λοιπόν θα κατασκευάσουμε σε πρώτο φάση τον πίνακα σχεδιασμού του Paired – Wise Ordering μοντέλου (PWO πίνακας X), στη συνέχεια θα υπολογίσουμε τον πίνακα πληροφορίας του PWO μοντέλου και τέλος θα υπολογίσουμε την ορίζουσα του πίνακα πληροφορίας και την τιμή της D – αποδοτικότητας με βάση τη τιμή της ορίζουσας αυτής. Επιπλέον, είναι αναγκαίο να υπολογιστεί η σχετική αποδοτικότητα του σχεδιασμού, η οποία προκύπτει από τη διαίρεση της D – αποδοτικότητας που έχει υπολογιστεί για έναν σχεδιασμό με συγκεκριμένο αριθμό συστατικών (m=4), παραμέτρων (p=7) και εκτελέσεων (n) με τη βέλτιστη αποδοτικότητα που έχει υπολογιστεί βάσει ενός συγκεκριμένου αριθμού συστατικών (m=4).

Για την περίπτωση n=7, και για την αξιολόγηση των $\binom{24}{7}$ σχεδιασμών με 7 εκτελέσεις, αναπτύσσεται ο παρακάτω κώδικας:

```
In [15]: import numpy as np

         array=np.loadtxt("C:/Users/EIRINI/Documents/OoA_4components/7run_OoA_4components_all.txt",dtype="str")
         print(array)

         ['1234' '1243' '1324' ... '4231' '4312' '4321']

In [16]: shapedarr=np.reshape(array,(-1,7))
         print(shapedarr[0])

         ['1234' '1243' '1324' '1342' '1423' '1432' '2134']
```

```
In [10]:
newarr=np.zeros((7,7),dtype="int")
for i in range(len(newarr)):
    newarr[i-1,0]=1
max=0
maxthesi=0
for y in range(len(shapedarr)):
    i=0
    for item in shapedarr[y]:
        if item.find('1')<item.find('2'):   #elegxos gia 1,2
            newarr[i,1]=1
        else:
            newarr[i,1]=-1

        if item.find('1')<item.find('3'): #elegxos gia 1,3
            newarr[i,2]=1
        else:
            newarr[i,2]=-1

        if item.find('1')<item.find('4'): #elegxos gia 1,4
            newarr[i,3]=1
        else:
            newarr[i,3]=-1

        if item.find('2')<item.find('3'): #elegxos gia 2,3
            newarr[i,4]=1
        else:
            newarr[i,4]=-1

        if item.find('2')<item.find('4'):#elegxos gia 2,4
            newarr[i,5]=1
        else:
            newarr[i,5]=-1

        if item.find('3')<item.find('4'):#elegxos gia 3,4
            newarr[i,6]=1
        else:
            newarr[i,6]=-1
```

```
        else:
            newarr[i,6]=-1
        i+=1
    #print(newarr)
    final_array=np.dot(newarr.transpose(),newarr)
    #print(final_array)
    #det=np.linalg.det(newarr.transpose())
    #print(int(det))
    det=int(np.linalg.det(final_array))
    #print(det)
    if det>max:
        max=det
        maxthesi=y
print(max,maxthesi)
print(shapedarr[maxthesi])
```

```
65535 56393
['1234' '1342' '2143' '2314' '3241' '4213' '4312']
```

In [4]:
```
d_apod=(pow(int(max),1/7))/7
print(d_apod)
```

```
0.6965792309739859
```

In [ ]:

Εξετάζοντας όλους τους σχεδιασμούς που μπορεί να σχηματιστούν με 7 εκτελέσεις, η μεγαλύτερη D – αποδοτικότητα, ίση με 0.6965, για το PWO μοντέλο προέκυψε από τον παρακάτω σχεδιασμό:

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

Η σχετική αποδοτικότητα του σχεδιασμού ισούται με 90% (0.6965 / 0.777316).

Αντίστοιχα, για n=8 έχουμε:

In [1]:
```
import numpy as np

array=np.loadtxt("C:/Users/EIRINI/Documents/OoA_4components/8run_OoA_4components_all.txt",dtype="str")
print(array)
```

```
['1234' '1243' '1324' ... '4231' '4312' '4321']
```

In [2]:
```
shapedarr=np.reshape(array,(-1,8))
print(shapedarr[0])
```

```
['1234' '1243' '1324' '1342' '1423' '1432' '2134' '2143']
```

In [5]:
```
newarr=np.zeros((8,7),dtype="int")
for i in range(len(newarr)):
    newarr[i-1,0]=1
max=0
maxthesi=0
for y in range(len(shapedarr)):
    i=0
    for item in shapedarr[y]:
        if item.find('1')<item.find('2'):   #elegxos gia 1,2
            newarr[i,1]=1
        else:
            newarr[i,1]=-1

        if item.find('1')<item.find('3'): #elegxos gia 1,3
            newarr[i,2]=1
        else:
            newarr[i,2]=-1

        if item.find('1')<item.find('4'): #elegxos gia 1,4
            newarr[i,3]=1
        else:
            newarr[i,3]=-1

        if item.find('2')<item.find('3'): #elegxos gia 2,3
```

```
            newarr[i,3]=-1

        if item.find('2')<item.find('3'): #elegxos gia 2,3
            newarr[i,4]=1
        else:
            newarr[i,4]=-1

        if item.find('2')<item.find('4'):#elegxos gia 2,4
            newarr[i,5]=1
        else:
            newarr[i,5]=-1

        if item.find('3')<item.find('4'):#elegxos gia 3,4
            newarr[i,6]=1
        else:
            newarr[i,6]=-1
        i+=1

    final_array=np.dot(newarr.transpose(),newarr)
    det=int(np.linalg.det(final_array))
    if det>max:
        max=det
        maxthesi=y
print(max,maxthesi)
print(shapedarr[maxthesi])
```

```
172032 30059
['1234' '1243' '1342' '2143' '2314' '3241' '4213' '4312']
```

```
In [6]: d_apod=(pow(int(max),1/7))/8
        print(d_apod)
```

```
0.6996070704039763
```

```
In [ ]:
```

Εξετάζοντας όλους τους σχεδιασμούς που μπορεί να σχηματιστούν, η μεγαλύτερη D – αποδοτικότητα, ίση με 0.6999 για το PWO μοντέλο προέκυψε από τον παρακάτω σχεδιασμό:

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

Η σχετική αποδοτικότητα του σχεδιασμού ισούται με 90,5 % (0.6999 / 0.777316).

Για n=9:

```
In [1]: import numpy as np

        array=np.loadtxt("C:/Users/EIRINI/Documents/OoA_4components/9run_OoA_4components_all.txt",dtype="str")
        print(array)
        shapedarr=np.reshape(array,(-1,9))
        print(shapedarr[0])
```

```
['1234' '1243' '1324' ... '4231' '4312' '4321']
['1234' '1243' '1324' '1342' '1423' '1432' '2134' '2143' '2314']
```

```
In [2]: newarr=np.zeros((9,7),dtype="int")
        for i in range(len(newarr)):
            newarr[i-1,0]=1
        max=0
        maxthesi=0
        for y in range(len(shapedarr)):
            i=0
            for item in shapedarr[y]:
                if item.find('1')<item.find('2'):   #elegxos gia 1,2
                    newarr[i,1]=1
                else:
                    newarr[i,1]=-1

                if item.find('1')<item.find('3'): #elegxos gia 1,3
                    newarr[i,2]=1
                else:
                    newarr[i,2]=-1

                if item.find('1')<item.find('4'): #elegxos gia 1,4
                    newarr[i,3]=1
                else:
                    newarr[i,3]=-1

                if item.find('2')<item.find('3'): #elegxos gia 2,3
                    newarr[i,4]=1
```

```
            newarr[i,4]=1
        else:
            newarr[i,4]=-1

        if item.find('2')<item.find('4'):#elegxos gia 2,4
            newarr[i,5]=1
        else:
            newarr[i,5]=-1

        if item.find('3')<item.find('4'):#elegxos gia 3,4
            newarr[i,6]=1
        else:
            newarr[i,6]=-1
        i+=1

    final_array=np.dot(newarr.transpose(),newarr)
    det=np.linalg.det(final_array)
    if det>max:
        max=det
        maxthesi=y
print(max,maxthesi)
print(shapedarr[maxthesi])
```

```
442368.0000000006 136839
['1234' '1243' '1432' '2413' '3214' '3412' '4213' '4231' '4312']
```

```
In [3]: d_apod=(pow(int(max),1/7))/9
        print(d_apod)
```

```
0.711701726914532
```

Εξετάζοντας όλους τους σχεδιασμούς που μπορεί να σχηματιστούν, η μεγαλύτερη D – αποδοτικότητα, ίση με 0.7117, για το PWO μοντέλο προέκυψε από τον παρακάτω σχεδιασμό:

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

Η σχετική αποδοτικότητα του σχεδιασμού ισούται με 91,5% (0.7117 / 0.777316).

Για n=10:

```
In [1]: import numpy as np

        array=np.loadtxt("C:/Users/EIRINI/Documents/OoA_4components/10run_OoA_4components_all.txt",dtype="str")
        print(array)
        shapedarr=np.reshape(array,(-1,10))
        print(shapedarr[0])
```

```
['1234' '1243' '1324' ... '4231' '4312' '4321']
['1234' '1243' '1324' '1342' '1423' '1432' '2134' '2143' '2314' '2341']
```

```
In [2]: newarr=np.zeros((10,7),dtype="int")
        for i in range(len(newarr)):
            newarr[i-1,0]=1
        max=0
        maxthesi=0
        for y in range(len(shapedarr)):
            i=0
            for item in shapedarr[y]:
                if item.find('1')<item.find('2'):   #elegxos gia 1,2
                    newarr[i,1]=1
                else:
                    newarr[i,1]=-1

                if item.find('1')<item.find('3'): #elegxos gia 1,3
                    newarr[i,2]=1
                else:
                    newarr[i,2]=-1

                if item.find('1')<item.find('4'): #elegxos gia 1,4
                    newarr[i,3]=1
                else:
                    newarr[i,3]=-1

                if item.find('2')<item.find('3'): #elegxos gia 2,3
                    newarr[i,4]=1
```

```
        else:
            newarr[i,4]=-1

        if item.find('2')<item.find('4'):#elegxos gia 2,4
            newarr[i,5]=1
        else:
            newarr[i,5]=-1

        if item.find('3')<item.find('4'):#elegxos gia 3,4
            newarr[i,6]=1
        else:
            newarr[i,6]=-1
        i+=1

    final_array=np.dot(newarr.transpose(),newarr)
    det=np.linalg.det(final_array)
    if det>max:
        max=det
        maxthesi=y
print(max,maxthesi)
print(shapedarr[maxthesi])
```

```
1081344.000000001 78368
['1234' '1243' '1324' '1432' '2314' '2431' '3142' '3241' '3412' '4213']
```

```
In [3]: d_apod=(pow(int(max),1/7))/10
print(d_apod)
```

```
0.7277711563537155
```

Εξετάζοντας όλους τους σχεδιασμούς που μπορεί να σχηματιστούν, η μεγαλύτερη D – αποδοτικότητα, ίση με 0.7277 για το PWO μοντέλο προέκυψε από τον παρακάτω σχεδιασμό:

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

Η σχετική αποδοτικότητα του σχεδιασμού ισούται με 93,6 % (0.7277 / 0.777316).

Για *n*=11:

```
In [1]: import numpy as np

array=np.loadtxt("C:/Users/EIRINI/Documents/11run_OoA_4components_all.txt",dtype="str")
print(array)
shapedarr=np.reshape(array,(-1,11))
print(shapedarr[0])
```

```
['1234' '1243' '1324' ... '4231' '4312' '4321']
['1234' '1243' '1324' '1342' '1423' '1432' '2134' '2143' '2314' '2341'
 '2413']
```

```
In [2]: newarr=np.zeros((11,7),dtype="int")
for i in range(len(newarr)):
    newarr[i-1,0]=1
max=0
maxthesi=0
for y in range(len(shapedarr)):
    i=0
    for item in shapedarr[y]:
        if item.find('1')<item.find('2'):   #elegxos gia 1,2
            newarr[i,1]=1
        else:
            newarr[i,1]=-1

        if item.find('1')<item.find('3'): #elegxos gia 1,3
            newarr[i,2]=1
        else:
            newarr[i,2]=-1

        if item.find('1')<item.find('4'): #elegxos gia 1,4
            newarr[i,3]=1
        else:
            newarr[i,3]=-1

        if item.find('2')<item.find('3'): #elegxos gia 2,3
            newarr[i,4]=1
```

```
        else:
            newarr[i,4]=-1

        if item.find('2')<item.find('4'):#elegxos gia 2,4
            newarr[i,5]=1
        else:
            newarr[i,5]=-1

        if item.find('3')<item.find('4'):#elegxos gia 3,4
            newarr[i,6]=1
        else:
            newarr[i,6]=-1
        i+=1

    final_array=np.dot(newarr.transpose(),newarr)
    det=np.linalg.det(final_array)
    if det>max:
        max=det
        maxthesi=y
print(max,maxthesi)
print(shapedarr[maxthesi])
```

```
2560000.0000000084 277317
['1234' '1243' '1342' '1432' '2314' '2413' '3214' '3241' '3412' '4231'
 '4312']
```

```
In [3]: d_apod=(pow(int(max),1/7))/11
        print(d_apod)
```

```
0.7482903886974689
```

```
In [ ]:
```

Εξετάζοντας όλους τους σχεδιασμούς που μπορεί να σχηματιστούν, η μεγαλύτερη D – αποδοτικότητα, ίση με 0.7482 για το PWO μοντέλο προέκυψε από τον παρακάτω σχεδιασμό:

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

Η σχετική αποδοτικότητα του σχεδιασμού ισούται με 96,2 % (0.7478 / 0.777316).

Τέλος, για n=12,

```
In [1]: import numpy as np

        array=np.loadtxt("C:/Users/EIRINI/Documents/OoA_4components/12run_OoA_4components_all.txt",dtype="str")
        print(array)
        shapedarr=np.reshape(array,(-1,12))
        print(shapedarr[0])

        ['1234' '1243' '1324' ... '4231' '4312' '4321']
        ['1234' '1243' '1324' '1342' '1423' '1432' '2134' '2143' '2314' '2341'
         '2413' '2431']

In [2]: newarr=np.zeros((12,7),dtype="int")
        for i in range(len(newarr)):
            newarr[i-1,0]=1
        max=0
        maxthesi=0
        for y in range(len(shapedarr)):
            i=0
            for item in shapedarr[y]:
                if item.find('1')<item.find('2'):   #elegxos gia 1,2
                    newarr[i,1]=1
                else:
                    newarr[i,1]=-1

                if item.find('1')<item.find('3'): #elegxos gia 1,3
                    newarr[i,2]=1
                else:
                    newarr[i,2]=-1

                if item.find('1')<item.find('4'): #elegxos gia 1,4
                    newarr[i,3]=1
                else:
                    newarr[i,3]=-1

                if item.find('2')<item.find('3'): #elegxos gia 2,3
                    newarr[i,4]=1
                else:
                    newarr[i,4]=-1

                if item.find('2')<item.find('4'):#elegxos gia 2,4
                    newarr[i,5]=1
                else:
                    newarr[i,5]=-1

                if item.find('3')<item.find('4'):#elegxos gia 3,4
                    newarr[i,6]=1
                else:
                    newarr[i,6]=-1
                i+=1

            final_array=np.dot(newarr.transpose(),newarr)
            det=np.linalg.det(final_array)
            if det>max:
                max=det
                maxthesi=y
        print(max,maxthesi)
        print(shapedarr[maxthesi])

        6144000.000000012 404940
        ['1234' '1243' '1342' '1432' '2314' '2413' '3214' '3241' '3412' '4213'
         '4231' '4312']

In [3]: d_apod=(pow(int(max),1/7))/12
        print(d_apod)

        0.7773158042814959

In [ ]:
```

Εξετάζοντας όλους τους σχεδιασμούς που μπορεί να σχηματιστούν, η μεγαλύτερη D – αποδοτικότητα, ίση με 0.7773 για το PWO μοντέλο προέκυψε από τον παρακάτω σχεδιασμό:

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

Η αποδοτικότητα του σχεδιασμού αυτού ομοιάζει με αυτή του πλήρους.

Συμπερασματικά, μέσω της παραπάνω μελέτης περίπτωσης καταφέραμε να κατασκευάσουμε πειράματα με λιγότερες εκτελέσεις (n = 7, 8,…, 12) λιγότερες δηλαδή από το πλήρη σχεδιασμό (24 εκτελέσεις) και να εντοπίσουμε αποδοτικούς οικονομικούς σχεδιασμούς για να μπορούμε να εντοπίσουμε τη βέλτιστη σειρά ανάμιξης m=4 συστατικών με τη χρήση του Paired – Wise Ordering (PWO) μοντέλου.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Ελληνική

1. Χ. Ευαγγελάρας, *Πειραματικοί Σχεδιασμοί*. Σημειώσεις παραδόσεων, ΠΜΣ στην Εφαρμοσμένη Στατιστική, Πανεπιστήμιο Πειραιώς.
2. Β. Ε. Τραπουζανλής, (2017). *Πειραματικοί Σχεδιασμοί και γραμμικά μοντέλα τυχαίων και μικτών επιδράσεων*, διπλωματική εργασία ΠΜΣ στην Εφαρμοσμένη Στατιστική, Πανεπιστήμιο Πειραιώς.
3. Δ. Π. Κομίλης, (2006). *Πειραματικός σχεδιασμός και στατιστική ανάλυση*, Σημειώσεις παραδόσεων, Δημοκρίτειο Πανεπιστήμιο Θράκης.
4. Γιώργος Χ. Μενεξές, (2006). *Πειραματικοί σχεδιασμοί στην ανάλυση δεδομένων*, Διδακτορική διατριβή, Πανεπιστήμιο Μακεδονίας.

Ξένη

5. Evangelaras, H., (2021). An easy construction of component orthogonal arrays for order-of-addition experiments, preprint.
6. Lin, D.K.J., Peng, J., (2019). Order-of-addition experiments: A review and some new thoughts, *Quality Engineering*, **31**, 49-59.
7. Montgomery, D.C., (2008). *Designs and Analysis of Experiments*, 8th ed., Wiley
8. Piepho, H.-P., Williams, E.R., (2021). Regression models for order-of-addition experiments, *Biometrical Journal*, **63**, 1673-1687.
9. Winker, P., Chen, J., Lin D.K.J., (2020). The construction of optimal design for order–of – addition experiments via threshold accepting, in: Fan, J., Pan, J. (eds) *Contemporary Experimental Design, Multivariate Analysis and Data Mining*, Springer, Cham.
10. Voelkel, J.C., (2019). The design of order-of-addition experiments, *Journal of Quality Technology*, **51**, 230-241,
11. J.-F. Yang, J.-F., Sun, F., Xu, H., (2020). A Component-Position Model, Analysis and Design for Order-of-Addition Experiments, *Technometrics*, **63**, 212-224
12. Zhao, Y., Lin, D.K.J., Liu, M.-Q., (2022). Optimal designs for order-of-addition experiments, *Computational Statistics and Data Analysis*, **165**, 107320.