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**

ΛΑΤΙΝΙΚΟΙ ΥΠΕΡΚΥΒΟΙ ΚΑΙ COMPUTER EXPERIMENTS

Χρυσούλα Κλάρα

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
Σεπτέμβριος 2016

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**

ΛΑΤΙΝΙΚΟΙ ΥΠΕΡΚΥΒΟΙ ΚΑΙ COMPUTER EXPERIMENTS

Χρυσούλα Ι. Κλάρα

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
Σεπτέμβριος 2016

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 Χ. Ευαγγελάρας (Επιβλέπων)
- Αναπληρωτής Καθηγητής Κ. Πολίτης
- Επίκουρος Καθηγητής Ε. Κοφίδης

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

U N I V E R S I T Y O F P I R A E U S

S c h o o l o f F i n a n c e a n d S t a t i s t i c s

Department of Statistics and Insurance Science

POSTGRADUATE PROGRAM IN

APPLIED STATISTICS

LATIN HYPERCUBES AND COMPUTER EXPERIMENTS

By

Chrysoula I. Klara

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

September 2016

Στους γονείς μου

Ιωάννη και Μαρία

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου κ. Χ. Ευαγγελάρα για την ανάθεση του θέματος και τη συνεχή στήριξη του με την καθοδήγηση που μου πρόσφερε. Καθώς επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τους γονείς μου, το σύζυγό μου και τους φίλους μου οι οποίοι με στηρίζουν σε κάθε μου προσπάθεια.

Περίληψη

Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η μελέτη και παρουσίαση των σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων, έτσι ώστε ο αναγνώστης να αντιληφθεί τη χρησιμότητα αυτών των ευέλικτων και οικονομικών σχεδιασμών στη διεξαγωγή των computer experiments. Στη συνέχεια παρουσιάζονται κάποια κριτήρια αξιολόγησης των σχεδιασμών, καθώς και κάποιες μέθοδοι μοντελοποίησης, με σκοπό ο εκάστοτε πειραματιστής να είναι σε θέση να επιλέξει τον κατάλληλο σχεδιασμό σύμφωνα με τις ανάγκες του πειράματος που διεξάγει.

Πιο συγκεκριμένα, στη διπλωματική αυτή πραγματοποιείται μελέτη, αξιολόγηση και επιλογή σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων για τη διενέργεια computer experiments δίνοντας μεγαλύτερη βαρύτητα στους ορθογώνιους Λατινικούς υπερκύβους. Αποτελείται από τέσσερα κεφάλαια, το πρώτο εκ των οποίων αναφέρεται σε κάποιες βασικές έννοιες των πειραματικών σχεδιασμών και των computer experiments, ενώ παράλληλα γίνεται μια πρώτη αναφορά στους Λατινικούς υπερκύβους. Στη συνέχεια, στο δεύτερο κεφάλαιο παρουσιάζονται ορισμένες μέθοδοι μοντελοποίησης για το συγκεκριμένο είδος πειραμάτων, όπως και κάποια κριτήρια αξιολόγησης για την επιλογή του βέλτιστου σχεδιασμού στον οποίο θα βασιστεί η συλλογή των δεδομένων. Στο τρίτο κεφάλαιο, προτείνονται διάφορες μέθοδοι κατασκευών σχεδιασμών ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων, ενώ κλείνοντας στο τέταρτο κεφάλαιο πραγματοποιείται η διεξαγωγή ενός computer experiment με τη βοήθεια ενός ορθογώνιου Λατινικού υπερκύβου 16 δοκιμών και 44 παραγόντων με σκοπό την καλύτερη κατανόηση της διαδικασίας που ακολουθούμε για τη διεξαγωγή των computer experiments.

Abstract

The purpose of this thesis is the study and the presentation of Latin hypercube designs, so that the reader can understand the usefulness of these flexible and economic designs in computer experiments. Then some evaluation criteria are presented, as well as some modelling techniques, so that it is possible for the experimenter to choose the appropriate design according to the needs of the experiment which is conducted.

More specifically, this thesis comprises the study, evaluation and selection of Latin hypercube designs in computer experiments giving more attention to orthogonal Latin hypercube designs. It consists of four chapters, the first of which refers to some basic information about experimental designs and computer experiments, while Latin hypercube designs are mentioned for first time. Then, in the second chapter some modelling techniques are presented for this kind of experiments, as well as some criteria for choosing the best design in which the data collection will be based. In the third chapter, it is proposed various methods for the construction of the orthogonal Latin hypercubes, while closing in the fourth chapter a computer experiments is conducted using an orthogonal Latin hypercube of 16 runs and 44 factor in order to better understand the process that someone have to follow to conduct a computer experiment.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Κατάλογος Πινάκων

Κατάλογος Συντομογραφιών

LHD	Latin Hypercube Designs (Σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου)
OLHD	Orthogonal Latin Hypercube Design (Σχεδιασμός ορθογώνιου Λατινικού υπερκύβου)
DRV	Design Run Vector
ANOVA	Analysis of Variance (Ανάλυση Διακύμανσης)
MSE	Mean Square Error (Μέσο τετραγωνικό σφάλμα)

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

Εισαγωγή

Η επιστήμη της στατιστικής είναι μια από τις πλέον σημαντικές επιστήμες, καθώς η χρήση των τεχνικών της είναι απαραίτητη σε πολλούς κλάδους της ανθρώπινης δραστηριότητας. Η ανάπτυξη της συγκεκριμένης επιστήμης δημιουργήθηκε από την ανάγκη για την πρόβλεψη και διαχείριση φυσικών ή μη διεργασιών που διέπονται από αβεβαιότητα. Φυσικά, η ιδέα στην οποία βασίζεται είναι η διεξαγωγή πειραμάτων, με σκοπό να παρατηρήσουμε τα αποτελέσματα αυτών και εν συνεχεία να τα ερμηνεύσουμε, έτσι ώστε να μπορούμε να χρησιμοποιούμε, σε μεταγενέστερο χρόνο, την πληροφορία που θα λάβουμε, είτε για την πρόβλεψη μελλοντικών αποτελεσμάτων, είτε για τη λήψη κάποιων σημαντικών αποφάσεων. Το γεγονός αυτό οδήγησε στην ανάπτυξη της περιοχής των Πειραματικών Σχεδιασμών, η χρήση των οποίων οδηγεί σε εξαγωγή συμπερασμάτων με το μικρότερο δυνατό πειραματικό κόστος.

1.1. Πειραματικοί Σχεδιασμοί

Η στατιστική θεωρείται η επιστήμη της αβεβαιότητας και σκοπός της είναι τόσο η ποσοτικοποίησή της όσο και ο περιορισμός της. Ο όρος της αβεβαιότητας έγκειται στο γεγονός ότι επαναλαμβάνοντας μια διαδικασία, υπό τις ίδιες συνθήκες κάθε φορά, θα λαμβάνουμε πάντοτε διαφορετικά αποτελέσματα. Πιο συγκεκριμένα, θα αναφέρουμε ένα αρκετά χαρακτηριστικό παράδειγμα από την καθημερινότητά μας με σκοπό να αντιληφθούμε το νόημα αλλά και τους όρους της στατιστικής. Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να μελετήσουμε τη χρονική διάρκεια της πορείας μας από το σπίτι για τη δουλειά. Ακόμα κι αν ακολουθούμε διαρκώς την ίδια διαδρομή και φεύγουμε πάντοτε την ίδια ακριβώς ώρα από το σπίτι δεν είμαστε βέβαιοι για το χρόνο που θα χρειαστούμε μέχρι να φτάσουμε στη δουλειά. Η αβεβαιότητα αυτή οφείλεται σε διάφορες αιτίες οι οποίες μπορούν να μεταβάλλουν το τελικό μας αποτέλεσμα όπως είναι το πλήθος των κόκκινων φαναριών που θα συναντήσουμε στην πορεία μας στο παράδειγμα που αναφέραμε.

Στη στατιστική, λοιπόν, καλούμε ως μεταβλητή απόκρισης ή αλλιώς εξαρτημένη μεταβλητή την ποσότητα που θέλουμε να προβλέψουμε (ο χρόνος που χρειαζόμαστε για να φτάσουμε στη δουλειά), ενώ ανεξάρτητες μεταβλητές ή παράγοντες ονομάζουμε τις ποσότητες εκείνες που θεωρούμε ότι μπορούν να επηρεάσουν τη μεταβλητότητα της εξαρτημένης μας μεταβλητής (πλήθος κόκκινων φαναριών κ.α.). Κάθε παράγοντας μπορεί να λάβει διάφορες τιμές από ένα σύνολο τιμών, τις τιμές αυτές τις ονομάζουμε επίπεδα του παράγοντα, ενώ ο συνδυασμός των επιπέδων των διαφόρων παραγόντων καλείται θεραπεία. Τέτοια πειράματα είναι γνωστά ως φυσικά πειράματα ή πειράματα τύχης.

Για να ποσοτικοποιήσουμε την αβεβαιότητα, με σκοπό να αποφασίσουμε για το ποιοι είναι οι παράγοντες που την προκαλούν, είναι απαραίτητη η καταγραφή δεδομένων τα οποία θα χρησιμοποιήσουμε στη συνέχεια για την ανάλυση και μελέτη του φαινομένου. Επαναλαμβάνουμε, συνεπώς, το πείραμα αρκετές φορές για διαφορετικές τιμές των ανεξάρτητων μεταβλητών μας, επίπεδα, και καταγράφουμε τις τιμές που προκύπτουν από το συνδυασμό των επιπέδων, θεραπείες, για την ποσότητα που μας ενδιαφέρει να μελετήσουμε. Τα δεδομένα των πειραμάτων συνηθίζεται να παρουσιάζονται σε έναν πίνακα στις στήλες του οποίου εμφανίζονται οι μεταβλητές που εξετάζουμε, τόσο οι ανεξάρτητες όσο και η εξαρτημένη με τα επίπεδα τους ενώ το πλήθος των γραμμών του ισούται με τον αριθμό των φορών που επαναλαμβάνουμε το πείραμα και ονομάζονται δοκιμές.

Έχοντας συλλέξει τα δεδομένα μας και επιλέξει ένα σύνολο ανεξάρτητων μεταβλητών που πιθανολογούμε ότι είναι υπαίτιες για τη μεταβλητότητα των τιμών της εξαρτημένης μεταβλητής καλούμαστε να πραγματοποιήσουμε στη συνέχεια μια στατιστική ανάλυση. Η ανάλυση μας βοηθάει να αποφανθούμε σχετικά με το ποιοι παράγοντες κρίνονται στατιστικά σημαντικοί για την πρόβλεψη της μεταβλητής απόκρισης αλλά και να αντιληφθούμε την ακριβή σχέση που συνδέει τις μεταβλητές μας, έτσι ώστε να είμαστε σε θέση να μοντελοποιήσουμε τη διαδικασία που εξετάζουμε. Σε αυτού του είδους τα πειράματα σπουδαίο ρόλο παίζει η παρουσία του όρου του τυχαίου σφάλματος, ο οποίος στην πραγματικότητα είναι η αιτία για την οποία θεωρούμε το αποτέλεσμα του πειράματος ως τυχαία μεταβλητή, αφού για όμοιες πειραματικές συνθήκες λαμβάνουμε διαφορετικές τιμές απόκρισης. Γίνεται εύκολα αντιληπτό λοιπόν ότι, τα τυχαία σφάλματα στα φυσικά πειράματα δημιουργούν μια πολυπλοκότητα στην ανάλυση αλλά και στη μοντελοποίηση των δεδομένων μας. Γι’ αυτό ο πειραματιστής είναι αναγκασμένος να επιλέξει μόνο ένα μικρό αριθμό παραγόντων για να μελετήσει και να διακρίνει τη σχέση με την οποία συνδέονται οι ανεξάρτητες μεταβλητές με τη μεταβλητή απόκρισης.

Καλός πειραματικός σχεδιασμός θεωρείται εκείνος που ελαχιστοποιεί στο μέγιστο βαθμό το πλήθος των δοκιμών που απαιτούνται για τη διεξαγωγή ενός πειράματος λαμβάνοντας όσο το δυνατόν περισσότερη πληροφορία. Φυσικά η στατιστική προσέγγιση ενός πειραματικού σχεδιασμού βασίζεται σε κάποιο στατιστικό μοντέλο. Υπάρχει πληθώρα στατιστικών μοντέλων που μπορούν να χρησιμοποιηθούν στους πειραματικούς σχεδιασμούς με πιο συνηθισμένα τους παραγοντικούς σχεδιασμούς οι οποίοι βασίζονται σε ένα μοντέλο ANOVA και οι βέλτιστοι σχεδιασμοί που βασίζονται σε κάποιο μοντέλο παλινδρόμησης. Τα μοντέλα αυτά περιλαμβάνουν διάφορες άγνωστες παραμέτρους όπως είναι οι κύριες επιδράσεις, οι αλληλεπιδράσεις, οι συντελεστές παλινδρόμησης και τα τυχαία σφάλματα. Επομένως καλοί πειραματικοί σχεδιασμοί καλούνται αυτοί που βελτιστοποιούν το στατιστικό μοντέλο που χρησιμοποιούμε για την ανάλυσή μας, δηλαδή εκείνοι που μας παρέχουν αμερόληπτες εκτιμήσεις των παραπάνω παραμέτρων με τις μικρότερες τόσο διακυμάνσεις όσο και συνδιακυμάνσεις.

1.2. Computer Experiments

Τα τελευταία χρόνια, η ραγδαία ανάπτυξη της τεχνολογίας βοήθησε πολύ στην εξέλιξη του τρόπου διεξαγωγής των πειραμάτων. Η απαίτηση μεγάλης διάρκειας χρόνου για τη διεξαγωγή κάποιων πειραμάτων, το μεγάλο κόστος, η αδυναμία διεξαγωγής συμπερασμάτων είτε λόγω έλλειψης αναλυτικού τύπου, είτε λόγω της ύπαρξης ενός πολύπλοκου μοντέλου, καθώς και διάφοροι άλλοι παράγοντες ήταν η αφορμή για την ανάπτυξη μιας νέας μεθόδου διεκπεραίωσης πειραμάτων, η οποία πραγματοποιείται με τη βοήθεια της προσομοίωσης σε ηλεκτρονικούς υπολογιστές, και ονομάστηκαν computer experiments.

Για να αντιληφθούμε καλύτερα την αναγκαιότητα των computer experiments και ποιες ήταν οι δυσκολίες αυτές που έφεραν αυτό το είδος των πειραμάτων στο προσκήνιο θα αναφέρουμε κάποια χαρακτηριστικά παραδείγματα. Τα computers experiments είναι ευρέως διαδεδομένα στο βιομηχανικό τομέα, εφόσον δεν είναι λίγες οι φορές που θέλουμε να καταλήξουμε σε κάποιο συμπέρασμα είτε επαναλαμβάνοντας μονάχα μια φορά ένα πείραμα ή ακόμα και καμία. Παραδείγματος χάριν στην αυτοκινητοβιομηχανία, οι κατασκευαστές θέλοντας να βελτιστοποιήσουν το μοντέλο ενός αυτοκινήτου ως προς την ασφάλειά του πραγματοποιούν crash tests. Βέβαια, όπως είναι εύκολα αντιληπτό είναι αδύνατον να επαναλάβουν το πείραμα μιας σύγκρουσης πολλές φορές για να λάβουν δεδομένα και να καταλήξουν σε κάποια συμπεράσματα, καθώς η οικονομική ζημιά της εταιρείας θα ήταν καταστροφική. Για το λόγο αυτό συνηθίζεται να πραγματοποιούν μόνον ένα πείραμα, δηλαδή επιλέγουν να καταστρέψουν μόνο ένα αυτοκίνητο, και έπειτα με προσομοιώσεις καταλήγουν στα συμπεράσματα που επιθυμούν. Ένα επίσης χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι πειράματα τα οποία έχουν να κάνουν με το περιβάλλον. Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να μελετήσουμε τις ζημιές που προκαλούνται από τους σεισμούς. Έχοντας επιλέξει έναν πειραματικό σχεδιασμό, ο οποίος θα αποτελείται από κάποιες ανεξάρτητες μεταβλητές, όπως μπορεί να είναι η απόσταση από τη θάλασσα, το υψόμετρο, η διάρκεια του σεισμού ή τα ρίχτερ κ.α., και τα επίπεδα τους, καλούμαστε στη συνέχεια να συλλέξουμε τα δεδομένα μας για να πραγματοποιήσουμε την ανάλυσή μας. Φυσικά κάτι τέτοιο είναι αδύνατον, αφού δεν μπορούμε να περιμένουμε πότε θα συμβεί ένας σεισμός με τα χαρακτηριστικά που έχουμε επιλέξει στον πειραματικός μας σχεδιασμό για να καταγράψουμε τις ζημιές που προκάλεσε. Επομένως, η διεξαγωγή ενός τέτοιου πειράματος αποκλείεται να πραγματοποιηθεί μέσω ενός φυσικού πειράματος και έτσι η λύση βρίσκεται και πάλι στην προσομοίωση του προβλήματος μας μέσω του υπολογιστική.

Οι διαφορές μεταξύ αυτών των δύο ειδών πειραμάτων είναι πολύ σημαντικές, γι' αυτό άλλωστε αντιμετωπίζονται με διαφορετικούς τρόπους τόσο στη διεξαγωγή όσο και στην ανάλυσή τους. Η σπουδαιότερη διαφορά των computer experiments από τα φυσικά πειράματα εντοπίζεται στο γεγονός ότι, τα μοντέλα τα οποία αναλύουμε στα computer experiments είναι ντετερμινιστικά, δηλαδή δεν περιέχουν τον τυχαίο παράγοντα. Λόγω της έλλειψης του τυχαίου όρου από τα μοντέλα μας, λοιπόν, δοκιμάζοντας όμοια πειραματικά στοιχεία λαμβάνουμε πάντοτε την ίδια απόκριση. Επιπλέον, μια ακόμα σημαντική διαφορά που έχει παρατηρηθεί είναι ότι το πλήθος των ανεξάρτητων μεταβλητών καθώς και ο χώρος πειραματισμού στα computer experiments είναι συγκριτικά πολύ μεγαλύτερα από εκείνα των φυσικών πειραμάτων. Η φιλοσοφία, λοιπόν, των computer experiments βασίζεται στη μοντελοποίηση της υπό εξέταση διαδικασίας μέσω κάποιων πολύπλοκων αλγορίθμων σύμφωνα με τους Santer, Williams και Nortz το 2003, δεδομένου ότι λόγο των οποιονδήποτε δυσκολιών αδυνατούμε να πραγματώσουμε με φυσικό τρόπο τα πειράματα. Επομένως, ένας από τους βασικότερους στόχους των computer experiments είναι η εύρεση ενός προσεγγιστικού μοντέλου, το οποίο θα είναι πολύ πιο εύκολο και γρήγορο στην ανάλυση και ερμηνεία του. Τα προσεγγιστικά αυτά μοντέλα είναι γνωστά με τις ονομασίες «model of the model» ή «metamodels» από τον Kleijnen το 1987.

Συνήθως η επιφάνεια απόκρισης που ζητάμε να εντοπίσουμε είναι αρκετά πολύπλοκη και άγνωστη στον πειραματιστή και συνεπώς, καθώς είναι πολύ δύσκολο να εξετασθεί ικανοποιητικά με τις κλασσικές μεθόδους της στατιστικής, συνήθως χρησιμοποιούμε ένα σύνολο θεραπειών, με σκοπό να καλύψουμε με τον καλύτερο δυνατό τρόπο το χώρο πειραματισμού, ώστε να προσεγγίσουμε όσο γίνεται καλύτερα την επιφάνεια απόκρισης, για να μπορούμε να προβούμε στην περαιτέρω ανάλυσή της. Για το λόγο αυτό είναι συνήθης η χρήση των ομοιόμορφων (uniform space-filling) σχεδιασμών, οι οποίοι ικανοποιούν τις απαιτήσεις που χρειάζονται για τη διεργασία τέτοιων πειραμάτων.

Οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί προτάθηκαν πρώτη φορά από τον Fang το 1980 σύμφωνα με τον οποίο ομοιόμορφος καλείται ένας σχεδιασμός του οποίου τα στοιχεία διασπείρονται ομοιόμορφα στον πειραματικό χώρο, δηλαδή τα επίπεδα του κάθε παράγοντας είναι κατανεμημένα ομοιόμορφα στο χώρο τον οποίο λαμβάνει τιμές. Ένα από τα σημαντικότερα πλεονεκτήματα των συγκεκριμένων σχεδιασμών είναι ότι με ένα μικρό αριθμό δοκιμών μπορούμε να αποσπάσουμε σημαντικό ποσοστό πληροφορίας σχετικά με τη σχέση που υπάρχει μεταξύ των παραγόντων και της μεταβλητής απόκρισης. Επιπλέον έχει αποδειχθεί ότι έχουν αρκετά καλή εφαρμογή και για την ανάλυση παλινδρόμησης όταν δεν διαθέτουμε κάποιο συγκεκριμένο στατιστικό μοντέλο.

Ένα εξαιρετικά χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι ότι το συγκεκριμένο είδος πειραματικών σχεδιασμών έχει το πλεονέκτημα ότι δεν διαθέτει επαναλαμβανόμενες θεραπείες, κάτι το οποίο επιθυμούμε στα computer experiments λόγω του ντετερμινιστικού τους χαρακτήρα, καθώς επίσης παρέχουν προβλέψεις με μεγάλη ακρίβεια σε μη δοκιμασμένες θεραπείες. Οι πιο γνωστοί space filling σχεδιασμοί είναι οι Λατινικοί Υπερκύβοι.

1.3. Λατινικοί Υπερκύβοι

Σύμφωνα με τον McKay το 1979 ένας σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου είναι ένας πίνακας διαστάσεων $n * m$, όπου με n συμβολίζουμε το πλήθος των δοκιμών και με m το πλήθος των παραγόντων και εν συντομία αναφέρεται ως $LHD(n, m)$. Κάθε μία από τις στήλες του σχεδιασμού είναι μια μετάθεση των n πρώτων φυσικών αριθμών και επομένως, τα επίπεδα κάθε παράγοντα εμφανίζονται αυστηρά μόνο μια φορά σε κάθε στήλη και είναι ομοιόμορφα κατανεμημένα στο χώρο πειραματισμού. Στο σημείο αυτό να σημειώσουμε ότι, τα επίπεδα των παραγόντων θα συμβολίζονται με το γράμμα s και έτσι, το πλήθος τους θα πρέπει να ισούται με το πλήθος των n δοκιμών, $n = s$.

Χρησιμοποιώντας τους σχεδιασμούς Λατινικών υπερκύβων έχουμε μια ευελιξία ως προς το μέγεθος του δείγματος που χρησιμοποιείται. Επίσης, πέρα από την ευελιξία ως προς το μέγεθος του δείγματος, οι συγκεκριμένοι σχεδιασμοί φαίνεται να προσφέρουν και σχετικά μικρές διακυμάνσεις, σύμφωνα με τον Sacks το 1989.

Οι Λατινικοί υπερκύβοι πλεονεκτούν επιπρόσθετα στο γεγονός ότι ικανοποιούν την μονοδιάστατη space filling ιδιότητα. Η συγκεκριμένη ιδιότητα έχει το εξής χαρακτηριστικό, σε όποια διάσταση και εάν προβάλουμε το συγκεκριμένο σχεδιασμό, πάντοτε θα υπάρχει ένα πειραματικό σημείο σε κάθε μέρος του πειραματικού χώρου, με αποτέλεσμα να διατηρείται η ιδιότητα της ομοιομορφίας στο σχεδιασμό.

Παρόλα αυτά, θα πρέπει να επισημάνουμε ότι η μονοδιάστατη space filling ιδιότητα πολλές φορές μας οδηγεί σε λανθασμένα συμπεράσματα. Ενώ μπορεί να έχουμε ένα σχεδιασμό ο οποίος εάν προβληθεί στη μία διάστασή του να συμπεραίνουμε ότι είναι κατάλληλος και ισορροπημένος, υπάρχει μεγάλη πιθανότητα στη δυσδιάστατη απεικόνισή του, ή και σε μεγαλύτερη διάσταση, να καταλήγουμε σε τελείως διαφορετικά συμπεράσματα.

Στην προσπάθεια βελτίωσης των σχεδιασμών των Λατινικών υπερκύβων προτάθηκαν διάφοροι άλλοι σημαντικοί και χρήσιμοι σχεδιασμοί όπως είναι οι ομοιόμορφοι σχεδιασμοί από τον Fang το 1980, οι τυχαιοποιημένες ορθογώνιες διατάξεις από τους Owen (1992) και Tang (1993), οι modified central composite σχεδιασμοί από τους Koch, Mavris και Mistree το 1998 και πολλοί άλλοι. Θα μιλήσουμε πιο αναλυτικά για τους σχεδιασμούς Λατινικών υπερκύβων σε επόμενο Κεφάλαιο στο οποίο θα παρουσιάσουμε κάποιες μεθόδους κατασκευής σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων καθώς επίσης θα δώσουμε ιδιαίτερη σημασία στους αποδεδειγμένα πιο συνηθισμένους και χρήσιμους από αυτούς που είναι οι ορθογώνιοι Λατινικοί υπερκύβοι.

Στην εργασία αυτή θα αναλύσουμε εκτενώς τη διαδικασία διεκπεραίωσης των computer experiments. Πιο συγκεκριμένα η δομή της εργασίας έχεις ως εξής. Στο δεύτερο Κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε κάποια από τα σημαντικότερα κριτήρια αξιολόγησης των σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων αλλά και κάποιες σημαντικές μεθόδους μοντελοποίησης που χρησιμοποιούμε για την ανάλυσή τους. Στο τρίτο κεφάλαιο όπως προαναφέραμε θα ασχοληθούμε με κάποιες μεθόδους που έχουν προταθεί για την κατασκευή ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων που φαίνεται να είναι οι πιο αποτελεσματικοί για τη διεξαγωγή των computer experiments. Θα περιγράψουμε επίσης ένα από τα πιο χαρακτηριστικά παραδείγματα που χρησιμοποιούνται για την καλύτερη κατανόηση των computer experiments. Κλείνοντας θα πραγματοποιήσουμε μια στατιστική ανάλυση πάνω σε αυτό το παράδειγμα με σκοπό να παρουσιάσουμε και να σχολιάσουμε τη χρησιμότητα των ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

Λατινικοί Υπερκύβοι και computer experiments

Το σημαντικότερο πρόβλημα στο οποίο καλούμαστε να δώσουμε λύση στη διεξαγωγή των computer experiments είναι η εύρεση του καλύτερου πειραματικού σχεδιασμού. Όπως αναφέραμε και προηγουμένως οι καταλληλότεροι και πιο συνηθισμένοι σχεδιασμοί είναι οι space – filling σχεδιασμοί. Η φιλοσοφία των space-filling σχεδιασμών όπως παρουσίασαν οι Kai-Tai Fang, Runze Li και Agus Sudjianto το 2006 στο βιβλίο τους Design and Modeling for computer experiments έχει ως εξής. Εάν θεωρήσουμε έναν s-διάστατο κύβο ως μια πειραματική περιοχή, όπου s ο αριθμός των εξεταζόμενων μεταβλητών μας, και επιλέξουμε κάποιο συγκεκριμένο αριθμό δοκιμών n, το ενδιαφέρον μας στρέφεται στην αναζήτηση ενός καλού σχεδιασμού. Πιο αναλυτικά, όπως προείπαμε, τα computer experiments αντιμετωπίζονται μέσω κάποιων προσεγγιστικών μοντέλων. Τα προσεγγιστικά μοντέλα είναι στατιστικά μοντέλα τα οποία κατασκευάζονται έτσι ώστε να περιγράφουν με τον καλύτερο δυνατό τρόπο τα πραγματικά μοντέλα που περιγράφουν τη διαδικασία που μελετάμε. Η χρησιμότητά τους έγκειται στο γεγονός ότι είναι πιο εύκολα και γρήγορα από το πραγματικό μοντέλο τόσο στο υπολογιστικό κομμάτι όσο και στην ανάλυσή τους. Στην πραγματικότητα, λοιπόν, οι space filling σχεδιασμοί ψάχνουν τους σχεδιασμούς εκείνους οι οποίοι θα μας δίνουν τη μικρότερη απόκλιση μεταξύ των αρχικών μοντέλων και των προσεγγιστικών τους.

Ας συμβολίσουμε, λοιπόν, με $C^m = [0,1]^m$ τον πειραματικό μας χώρο και με n το πλήθος των δοκιμών μας. Επιθυμούμε να βρούμε το σχεδιασμό εκείνο $D_n = \{x_1, \dots, x_n\}$, όπου $\boldsymbol{x}_i \in C^m$, που θα μας δίνει τη μικρότερη δυνατή απόκλιση γιά όλο το $\boldsymbol{x} \in C^m$ του προσεγγιστικού μας μοντέλου $g(\boldsymbol{x})$ από το πραγματικό μας μοντέλο $f(\boldsymbol{x})$

$$Dev(\boldsymbol{x}; f, g) = f(\boldsymbol{x}) - g(\boldsymbol{x}).$$

Δεδομένου ότι υπάρχει πληθώρα σχεδιασμών οι οποίοι μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη διενέργεια των computer experiments, ένα από τα σημαντικότερα στάδια στη διεξαγωγή τους είναι η επιλογή ενός βέλτιστου σχεδιασμού χρησιμοποιώντας διάφορα κριτήρια βελτιστοποίησης.

2.1. Κριτήρια Αξιολόγησης σχεδιασμών

2.1.1. Κριτήριο συνολικής συσχέτισης (Total pairwise correlation)

Ένα από τα πιο διαδεδομένα κριτήρια είναι αυτό των Iman και Conover (1982), με το οποίο ασχολήθηκαν αργότερα ο Owen το 1994 αλλά και ο Tang το 1998, οι οποίοι πρότειναν την ελαχιστοποίηση των συσχετίσεων ανάμεσα στους παράγοντες. Πιο συγκεκριμένα, ο Owen πρότεινε τη χρήση του παρακάτω μέτρου για τον υπολογισμό της συσχέτισης μεταξύ των παραγόντων

$$\rho^2 = \frac{\sum_{i=2}^{s} \sum_{j=1}^{i-1} \rho_{ij}^2}{s(s-1)2^{-1}}$$

όπου με ρ_{ij} συμβολίζουμε τη γραμμική συσχέτιση μεταξύ των στηλών i και j. Εφόσον έχουμε υπολογίσει τα ρ^2 για όλο το πλήθος των σχεδιασμών μας ,είμαστε πλέον σε θέση να επιλέξουμε το βέλτιστο σχεδιασμό, βάσει του συγκεκριμένου μέτρου, ο οποίος θα είναι εκείνος με την μικρότερη τιμή.

Φυσικά εξετάζοντας προσεκτικά το παραπάνω κριτήριο αξιολόγησης των σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων και αναλογιζόμενοι την ιδέα στην οποία βασίστηκε είναι εύκολο να αντιληφθούμε τη σπουδαιότητα και χρησιμότητα της κατασκευής ορθογώνιων σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων, για τους οποίους θα μιλήσουμε αναλυτικά στο επόμενο κεφάλαιο, μιας και με τον τρόπο αυτό κατορθώνουμε να λαμβάνουμε ασυσχέτιστες εκτιμήσεις των γραμμικών επιδράσεων καθενός από τους παράγοντες τους οποίους εξετάζουμε.

2.1.2. Minimax and maximin distance κριτήρια:

Τα maximin ή minimax distance κριτήρια προτάθηκαν από τον Johnson το 1990 και μας βοηθούν να μετρήσουμε πόσο ομοιόμορφα κατανέμονται οι θεραπείες μας (πειραματικά σημεία) στο πειραματικό χώρο. Πιο αναλυτικά, ας θεωρήσουμε ένα σχεδιασμό $D_n = \{x_1, \dots, x_n\}$ με διαστάσεις $n * m$ στο C και με $\boldsymbol{u}$ και $\boldsymbol{v}$ οποιαδήποτε δύο πειραματικά σημεία. Χρησιμοποιούμε, λοιπόν, ως μέτρο απόστασης των σημείων αυτών το $d(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = \left\{\sum_{j=1}^{k} \left|u_j - v_j\right|^p\right\}^{1/p}$, για το οποίο γνωρίζουμε ότι με $p = 1$ λαμβάνουμε τις ορθογώνιες αποστάσεις, ενώ για $p = 2$ τις Ευκλείδιες αποστάσεις.

Ένας *minimax distance σχεδιασμός D^** ελαχιστοποιεί τη μέγιστη απόσταση μεταξύ οποιουδήποτε $x \in C$ και D.

$$\min_{D} \max_{x \in C} d(\boldsymbol{x}, D) = \max_{x \in C} d(\boldsymbol{x}, D^*)$$

όπου $d(\boldsymbol{x}, D) = max\{d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_1), \dots, d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_n)\}$.

Ενώ, ένας *maximin distance σχεδιασμός D^** μεγιστοποιεί την ελάχιστη inter-site απόσταση

$$\max_{D} \min_{\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in D} d(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = \min_{\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in D^*} d(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}).$$

Σχεδιασμοί βασισμένοι στα συγκεκριμένα κριτήρια μας διαβεβαιώνουν ότι, κανένα σημείο στη πειραματική περιοχή δεν είναι πολύ μακριά από το πειραματικό σημείο (design point). Ένα επιπλέον πλεονέκτημα των συγκεκριμένων σχεδιασμών είναι ότι, μας επιτρέπουν να πραγματοποιούμε αξιόπιστες προβλέψεις σε οποιοδήποτε μέρος της πειραματικής περιοχής.

Λόγω του μεγάλου αριθμού από maximin και minimax distance σχεδιασμούς που προκύπτουν, ο Johnson την ίδια χρονιά (1990) θέλησε να σημειώσει τους απλούστερους εξ αυτών.Το 1995 οι Morris και Mitchell επέκτειναν λίγο τον ορισμό του κριτηρίου που σχετίζεται με τη μεγαλύτερη ελάχιστη απόσταση των σημείων (maximin distance criterion), καθώς υπήρχαν πολλοί σχεδιασμοί οι οποίοι επιβεβαίωναν το συγκεκριμένο κριτήριο. Θέλησαν, επομένως, να το βελτιώσουν με σκοπό να βρουν τον καλύτερο σχεδιασμό Λατινικού υπερκύβου. Για ένα δεδομένο, λοιπόν, πλήθος δοκιμών ταξινομούν σε αύξουσα σειρά τις inter-site αποστάσεις ως εξής $d_1 < d_2 < \dots < d_m$, ενώ τους αντίστοιχους δείκτες τους συμβολίζουμε ως εξής $(J_1, J_2, \dots, J_m)$, όπου με J_i συμβολίζουμε το πλήθος των ζευγαριών των σημείων του σχεδιασμού που χωρίζονται από την απόσταση d_i. Ισχυρίστηκαν, λοιπόν, ότι ένας σχεδιασμός λέγεται maximin distance εάν μεγιστοποιεί τα $d_i's$ και ελαχιστοποιεί τα $J_i's$ με την ακόλουθη σειρά: $d_1, J_1, d_2, J_2, \dots, d_m, J_m$. Εν συνεχεία, πρότειναν τη χρήση μιας βαθμωτής συνάρτησης (scalar-value), η οποία θα μας δίνει την ευχέρεια να ταξινομούμε τους ανταγωνιζόμενους σχεδιασμούς με τρόπο τέτοιο ώστε, ο maximin σχεδιασμός να λαμβάνει την υψηλότερη «βαθμολογία». Έτσι λοιπόν οδηγηθήκαμε στο $\boldsymbol{\varphi_p - criterion}$,

$$\varphi_p(D_n) = \left[\sum_{i=1}^{m} J_i d_i^{-p}\right]^{1/p}$$

όπου με p συμβολίζουμε έναν θετικό ακέραιο και τα J_i, d_i χαρακτηρίζουν το σχεδιασμό μας. Συνεπώς, για σχετικά μεγάλο p, maximin σχεδιασμός θεωρείται εκείνος που ελαχιστοποιεί τη συνάρτηση φ_p.

2.1.3. Κριτήριο ομοιομορφίας

Όπως έχουμε αναφέρει και προηγουμένως οι σχεδιασμοί Λατινικών υπερκύβων είναι από τους πιο δημοφιλής στη διεξαγωγή των computer experiments καθώς κατανέμουν μονοδιάστατα ομοιόμορφα τα πειραματικά σημεία στο χώρο πειραματισμού. Ωστόσο ελέγχοντας την ομοιομορφία των σημείων σε μεγαλύτερες διαστάσεις παρατηρούμε ότι μπορεί να υπάρχουν σχεδιασμοί οι οποίοι να συμπεριφέρονται καλύτερα. Για το λόγο αυτό είναι συνήθης η χρήση κάποιου κριτηρίου ομοιομορφίας, όπως το L_2– μέτρο ομοιομορφίας του Hickernell (1998), για την αξιολόγηση των σχεδιασμών.

Σύμφωνα με τον Hickernell καλούμαστε να υπολογίσουμε την ακόλουθη ποσότητα

$$CD^2 = \left(\frac{13}{12}\right)^k - \frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n}\prod_{j=1}^{k}\left(1 + \frac{1}{2}\left|z_{ij} - 0.5\right| + \frac{1}{2}\left|z_{ij} - 0.5\right|^2 + \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\prod_{l=1}^{k} 1 + \frac{1}{2}\left|z_{il} - 0.5\right| + \frac{1}{2}\left|z_{jl} - 0.5\right| - \frac{1}{2}\left|z_{il} - z_{jl}\right|\right)$$

όπου $z_{ij} = \frac{c_{ij} - 0.5}{n}$, $i = 1, 2, \dots, n$, $j = 1, 2, \dots, k$. Ένας σχεδιασμός λοιπόν καλείται βέλτιστος ως προς το συγκεκριμένο κριτήριο όταν η ποσότητα αυτή, CD^2, λαμβάνει τη μικρότερη τιμή σε σχέση με όλους τους συγκρινόμενους σχεδιασμούς.

2.2. Μοντελοποίηση των computer experiments

Όπως αναφέραμε και προηγουμένως, βασικός στόχος των computer experiments είναι η εύρεση ενός κατάλληλου προσεγγιστικού μοντέλου, το οποίο θα προσεγγίζει όσο το δυνατόν καλύτερα το πραγματικό μας μοντέλο, έτσι ώστε να έχουμε έναν αναλυτικό τύπο ο οποίος θα είναι πιο εύκολος σε υπολογισμούς, για την πραγματοποίηση διαφόρων εφαρμογών. Παραδείγματος χάριν, με την εύρεση του κατάλληλου προσεγγιστικού μοντέλου θα είμαστε σε θέση να λαμβάνουμε γραφικές απεικονίσεις για την προκαταρκτική εξέταση του μοντέλου μας, θα μπορούμε να προβλέπουμε τη τιμή της μεταβλητής απόκρισης σε μη δοκιμασμένα σημεία, καθώς επίσης και να διενεργούμε πιθανοθεωρητικές αναλύσεις, αναλύσεις ευαισθησίας αλλά και να λαμβάνουμε ανθεκτικούς σχεδιασμούς.

Η κατασκευή ενός απλού και με μεγάλη ακρίβεια προσεγγιστικού μοντέλου, για να προσεγγίσουμε το πραγματικό μοντέλο, είναι πολύ σημαντική, ωστόσο συχνά αντιμετωπίζουμε το πρόβλημα ότι για ένα πραγματικό μοντέλο μπορούμε να κατασκευάσουμε πολλά προσεγγιστικά μοντέλα. Στην πλειοψηφία των φορών, λοιπόν, είναι δύσκολο να αποφασίσουμε σχετικά με το ποιο είναι το καλύτερο από αυτά τα metamodels. Σκοπός της μοντελοποίησης, λοιπόν, είναι η εύρεση των πιο χρήσιμων προσεγγιστικών μοντέλων.

Γενικότερα, υπάρχει μια πληθώρα μεθόδων στις οποίες μπορούμε να βασιστούμε για την κατασκευή των προσεγγιστικών μας μοντέλων, όπως τα πολυωνυμικά μοντέλα, τα πολυωνυμικά μοντέλα με splines, τα πολυωνυμικά μοντέλα κατά Fourier, τα πολυωνυμικά μοντέλα με Wavelets, τα Kriging μοντέλα και τα μοντέλα νευρωνικών δικτύων, κάποια από τα οποία θα δούμε με περισσότερες λεπτομέρειες στη συνέχεια.

2.2.1. Πολυωνυμικά μοντέλα:

Τα πολυωνυμικά μοντέλα είναι από τα πιο χρήσιμα μοντέλα στη βιβλιογραφία των computer experiments. Το μειονέκτημα της συγκεκριμένης μεθόδου μοντελοποίησης είναι ότι το πλήθος των συναρτήσεων των πολυωνυμικών όρων αυξάνεται σε πολύ μεγάλο βαθμό, όσο αυξάνεται το πλήθος των ανεξάρτητων μεταβλητών μας αλλά και η τάξη του πολυωνύμου.

Για το λόγο αυτό συνηθίζεται να προτιμώνται πολυώνυμα μικρής τάξης στην κατασκευή των προσεγγιστικών μοντέλων, με εξέχουσα θέση εκείνη του πολυωνύμου δευτέρου βαθμού. Βάσει των Myers και Montgomery αλλά και των Morris και Mitchell το 1995 τα μοντέλα αυτά λαμβάνουν την μορφή

$$g(\boldsymbol{x}) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{s} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{s} \beta_{ij} x_i x_j \ .$$

Κατά την εφαρμογή της μεθόδου αυτής, για την κατασκευή προσεγγιστικών μοντέλων, οι παράγοντες κεντροποιούνται πριν την πραγμάτωση της ανάλυσης, έτσι ώστε να αποφεύγονται προβλήματα πολυσυγγραμικότητας. Σε αυτή την περίπτωση το μοντέλο που χρησιμοποιούμε καλείται κεντροποιημένο μοντέλο 2^{ης} τάξης και έχει τη μορφή

$$g(\boldsymbol{x}) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{s} \beta_i (x_i - \overline{x_i}) + \sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{s} \beta_{ij} (x_i - \overline{x_i})(x_j - \overline{x_j})$$

όπου με $\overline{x_i}$ συμβολίζουμε το δειγματικό μέσο των τιμών του i παράγοντα του διανύσματος $\boldsymbol{x}$. Οι άγνωστοι συντελεστές του προσεγγιστικού μας μοντέλου εκτιμώνται με τη βοήθεια της μεθόδου των ελαχίστων τετραγώνων.

Τα πολυωνυμικά μοντέλα δευτέρου βαθμού είναι πολύ σημαντικά εργαλεία, καθώς έχουν την ικανότητα εξομάλυνσης (smoothing capability), ιδιότητα η οποία μας βεβαιώνει ότι θα έχουμε γρήγορη σύγκλιση των «θορυβώδη συναρτήσεων» (noisy functions) με αποτέλεσμα να είναι κατάλληλα για ολοκλήρωση σε οποιοδήποτε πλαίσιο βελτιστοποίησης. Επιπλέον, κατασκευάζοντας πολυωνυμικά μοντέλα είναι πολύ πιθανό να μπορούμε να ταυτοποιήσουμε τη σπουδαιότητα των παραγόντων μας από τους συντελεστές στο normalized regression model. Επομένως σε προβλήματα μεγάλων διαστάσεων είναι πολύ σημαντικό να χρησιμοποιούμε γραμμικά ή πολυωνυμικά μοντέλα δευτέρου βαθμού για να μπορούμε να περιορίζουμε το πλήθος των παραγόντων μόνο στους σημαντικούς.

Ωστόσο, η χρήση των συγκεκριμένων μοντέλων δημιουργούν μεγάλη αβεβαιότητα σε περιπτώσεις όπου επιθυμούμε να προσεγγίσουμε υψηλές μη γραμμικές συναρτήσεις. Σε αυτές τις περιπτώσεις η πρώτη σκέψη είναι να χρησιμοποιήσουμε πολυώνυμα μεγαλύτερου βαθμού, αλλά και πάλι αντιμετωπίζουμε το πρόβλημα ότι απαιτείται μεγάλος αριθμός δεδομένων για την προσαρμογή τους. Εκτός αυτού, με τη χρήση υψηλού βαθμού πολυωνύμων υποβόσκει ο κίνδυνος πολυσυγραμμικότητας, δηλαδή υπάρχει πιθανότητα να εμφανιστούν υψηλές συσχετίσεις μεταξύ των μεταβλητών που λαμβάνουν μέρος στη παλινδρόμηση. Για να αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα αυτό προτείνεται η χρήση των ορθογώνιων πολυωνυμικών μοντέλων.

2.2.2. Kriging μοντέλο:

Το Kriging μοντέλο αποτελεί ένα γενικό (global) μοντέλο παλινδρόμησης, αναλογικά με την απλή πολυωνυμική παλινδρόμηση, το οποίο είναι επαυξημένο με μια Gaussian διαδικασία, έτσι ώστε να ενσωματωθούν τα κατάλοιπα. Πιο συγκεκριμένα, αυτό το είδος μοντελοποίηση βασίζεται στη σχέση

$$y(\boldsymbol{x}) = \mu + z(\boldsymbol{x})$$

όπου μ είναι ο συνολικός μέσος των $y(\boldsymbol{x})$ και με $z(\boldsymbol{x})$ συμβολίζουμε την Gaussian διαδικασία, η οποία έχει μέση τιμή μηδέν, $E\{z(\boldsymbol{x})\} = 0$, ενώ η συνάρτηση για τη συνδιασπορά της έχει ως εξής:

$$Cov\left(z(\boldsymbol{x}_i), z(\boldsymbol{x}_j)\right) = \sigma^2 + R(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$$

όπου με σ^2 συμβολίζουμε την άγνωστη διακύμανση $z(\boldsymbol{x})$ και με R μια συνάρτηση συσχετίσεων με προκαθορισμένη συναρτησιακή μορφή και κάποιες άγνωστες παραμέτρους.

Μια από τις συνήθης συναρτησιακές μορφές που χρησιμοποιούνται είναι η ακόλουθη

$$r(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) = \exp\left\{-\sum_{k=1}^{s} \theta_i \left(\boldsymbol{x}_{k1} - \boldsymbol{x}_{k2}\right)^2\right\},$$

με τα θ_i να αποτελούν τις άγνωστες παραμέτρους. Βέβαια, υπάρχουν διαθέσιμοι διάφοροι τύποι συναρτήσεων συσχετίσεις όπου όλοι είναι καθορισμένοι από μια παράμετρο συσχέτισης θ με διαστάσεις ίσες με εκείνων του διανύσματος των παραγόντων. Οι συναρτήσεις αυτές μας ενημερώνουν σχετικά με το πόσο κοντά βρίσκονται τα δειγματικά σημεία, από τις τιμές που παίρνουν τα κατάλοιπα των συγκεκριμένων σημείων. Προφανώς, όσο μικρότερη είναι αυτή η απόσταση τόσο περισσότερο η πρόβλεψη ενός σημείου θα επηρεάζεται από το άλλο. Επομένως, το σημαντικό κομμάτι στη συγκεκριμένη μέθοδο είναι η επιλογή της ικανοποιητικότερης συνάρτησης, η οποία επιλέγεται από εμάς, καθώς και η επιλογή των καταλληλότερων τιμών για τις παραμέτρους συσχέτισης, οι οποίες καθορίζονται αυτόματα με τη μέθοδο εκτίμησης μεγίστης πιθανοφάνειας.

Το προσεγγιστικό μοντέλο που λαμβάνουμε, μέσω της μεθόδου μοντελοποίησης Kriging, μπορεί να γραφτεί στη μορφή

$$g(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} \beta_i r\left(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j\right)$$

όπου εάν θεωρήσουμε ως συνάρτηση βάσης το $r(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$ επανερχόμαστε και πάλι στην αρχική μορφή που δείξαμε για τα metamodels. Ένα από τα σημαντικότερα πλεονεκτήματα αυτής της μεθόδου, σύμφωνα με το Welch το 1992, αποτελεί το γεγονός ότι, η συνάρτηση των βάσεών της κατασκευάζεται απευθείας από τη συνάρτηση συσχέτισης, ενώ εξαιτίας του μεγάλου εύρους συναρτήσεων συσχέτισης θεωρείται και αρκετά ευέλικτη. Πέρα από όλα αυτά όμως, η μέθοδος Kriging πλεονεκτεί στο ότι μας παρέχει μια βάση η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε έναν «βήμα προς βήμα» (stepwise) αλγόριθμο, έτσι ώστε να πραγματοποιήσουμε το κρησάρισμα των παραγόντων, δηλαδή να εντοπίσουμε τους σημαντικούς παράγοντες, καθώς και στο γεγονός ότι μπορούν να χρησιμοποιηθούν τα ίδια δεδομένα για τη κατασκευή του μοντέλου πρόβλεψης. Σε συγκεκριμένες περιπτώσεις αποδεικνύεται ότι, προσεγγιστικά μοντέλα μέσω της συγκεκριμένης μεθόδου αποτελούν τους καλύτερους γραμμικούς αμερόληπτους εκτιμητές. Το μεγαλύτερο μειονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι η ανάγκη επίλυσης του προβλήματος μεγιστοποίησης, το οποίο τη καθιστά ακριβή υπολογιστικά, σε περίπτωση που το πλήθος των μεταβλητών μας είναι υψηλό.

Πρέπει, βέβαια, να σημειώσουμε ότι η Gaussian Kriging προσέγγιση «αποδεικνύει» και μια Μπευζιανή ερμηνεία. Η Μπευζιανή παρεμβολή προτάθηκε το 1991 από τους Currin, Mitchell, Moris και Ylvisaker για τη μοντελοποίηση των computer experiments και είναι αρκετά χρήσιμη, αφού μπορεί να ενσωματώσει δευτερεύουσα πληροφορία σε ορισμένες περιπτώσεις. Παραδείγματος χάριν, σύμφωνα με τον Morris (1993), χρησιμοποιώντας τη Bayesian Kriging μέθοδο για τη κατασκευή computer μοντέλων μπορούμε να λαμβάνουμε ταυτόχρονα, τόσο την απόκριση του μοντέλου, όσο και τις πρώτες μερικές παραγώγους.

2.3. Παράδειγμα

Στην συνέχεια θα παρουσιάσουμε ένα παράδειγμα σχετικά με το πώς διαχειριζόμαστε ένα computer experiment. Αρχικά θα αναλύσουμε τα βασικά βήματα ενός computer experiment τα οποία σύμφωνα με τον Simpson το 2001 είναι η επιλογή ενός πειραματικού σχεδιασμού, η επιλογή μιας μεθόδου για τη στατιστική μοντελοποίησή του, εν συνεχεία η εφαρμογή του προσεγγιστικού μοντέλου στα δεδομένα που διαθέτουμε και τέλος η αξιολόγηση του προσεγγιστικού αυτού μοντέλου. Πιο αναλυτικά τα βήματα που ακολουθούμε είναι τα εξής.

2.3.1. Επιλογή παραγόντων

Ένα από τα σπουδαιότερα βήματα είναι η επιλογή των παραγόντων που θα χρησιμοποιηθούν στην ανάλυση του πειράματος. Είναι γεγονός ότι σε κάθε πείραμα υπάρχει ένα μεγάλο πλήθος παραγόντων που ανήκουν στην πειραματική περιοχή και οι οποίοι ενδέχεται να είναι σημαντικοί για την ερμηνεία της εξαρτημένης μεταβλητής. Συνεπώς κρίνεται επιτακτική η ανάγκη ο αναλυτής να «απομακρύνει» εκείνους τους παράγοντες που φαίνεται να μην επηρεάζουν σημαντικά τη μεταβλητή απόκρισης και να επικεντρωθεί μονάχα σε αυτούς που αποδεικνύεται ότι είναι στατιστικά σημαντικοί.

2.3.2. Κατασκευή σχεδιασμού

Εξίσου ιδιαίτερη σημασία δίνεται και στην επιλογή του καταλληλότερου σχεδιασμού, δηλαδή η επιλογή του πλήθους των δοκιμών αλλά και των επιπέδων για τη κάθε μεταβλητή, έτσι ώστε να διασφαλισθεί η καλύτερη κάλυψη του πειραματικού μας χώρου. Όπως αναφέραμε και παραπάνω υπάρχει πληθώρα διαθέσιμων σχεδιασμών, ωστόσο η επιλογή του αριθμού των δοκιμών που θα πραγματοποιηθούν και των επιπέδων των μεταβλητών μας εξαρτάται από την πολυπλοκότητα του πραγματικού μοντέλου που επιθυμούμε να αναλύσουμε.

2.3.3. Επιλογή προσεγγιστικού μοντέλου

Εν συνεχεία, καλούμαστε να επιλέξουμε την ιδανικότερη τεχνική μοντελοποίησης του πραγματικού μας μοντέλου από την οποία θα λάβουμε το προσεγγιστικό μοντέλο έτσι ώστε να είμαστε σε θέση να εκτιμήσουμε τις παραμέτρους του μοντέλου μας και με το οποίο θα συνεχίσουμε την στατιστική μας ανάλυση. Φυσικά υπάρχει η δυνατότητα για ένα σύνολο δεδομένων να χρησιμοποιήσουμε διάφορες τεχνικές μοντελοποίησης.

2.3.4. Επαλήθευση προσεγγιστικού μοντέλου

Στην περίπτωση λοιπόν όπου έχουμε επιλέξει να δοκιμάσουμε διάφορες τεχνικές μοντελοποίησης για τη δημιουργία του προσεγγιστικού μας μοντέλου καλούμαστε να επιλέξουμε το καλύτερο εξ αυτών. Θέλοντας λοιπόν να συγκρίνουμε τα διάφορα προσεγγιστικά μοντέλα στα οποία έχουμε καταλήξει κάνουμε χρήση του μέσου τετραγωνικού σφάλματος σε μη δοκιμασμένα πειραματικά σημεία με σκοπό να ελέγξουμε την ικανότητα πρόβλεψης του μοντέλου και σε μη δοκιμασμένα σημεία.

Πιο συγκεκριμένα, επιλέγουμε με τυχαίο τρόπο n σημεία $x_k, k = 1, \dots, n$ στην πειραματική μας περιοχή και υπολογίζουμε τις τιμές της μεταβλητής απόκρισης $y(x_k)$ του πραγματικού μοντέλου αλλά και τις εκτιμώμενες τιμές $\widehat{y(x_k)}$ με τη βοήθεια του προσεγγιστικού μοντέλου. Το μέσο τετραγωνικό σφάλμα δίνεται από τον ακόλουθο τύπο

$$MSE = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left(y(x_k) - \widehat{y(x_k)}\right)^2.$$

Όπως είναι λογικό όσο μικρότερη είναι η τιμή που λαμβάνουμε για το μέσο τετραγωνικό σφάλμα τόσο καλύτερο κρίνεται το προσεγγιστικό μοντέλο. Φυσικά στην πλειοψηφία των περιπτώσεων δεν υπάρχει η ευκολία χρήσης μεγάλου δείγματος για να εφαρμόσουμε τη συγκεκριμένη διαδικασία «αξιολόγησης» εξαιτίας του μεγάλου υπολογιστικού χρόνου που απαιτείται και για το λόγο αυτό κάνουμε χρήση μικρότερων δειγμάτων.

2.3.5. Ερμηνεία μοντέλου και εφαρμογή ανάλυσης ευαισθησίας

Η ικανότητα ερμηνείας του τελικά επιλεγμένου μοντέλου είναι ένα ακόμα πολύ ιδιαίτερο και σημαντικό βήμα στη διενέργεια των computer experiments. Δεν είναι υπερβολή να αναφέρουμε ότι η δυνατότητα ερμηνείας του προσεγγιστικού μοντέλου, δηλαδή να αντιλαμβανόμαστε ορθά τη σχέση μεταξύ των ανεξάρτητων μεταβλητών και της εξαρτημένης είναι τόσο σημαντική όσο και το να μας δίνει ακριβείς προβλέψεις το προσεγγιστικό μας μοντέλο.

2.3.6. Περαιτέρω μελέτη

Στην περίπτωση όπου κρίνουμε ότι το προσεγγιστικό μας μοντέλο δεν είναι ικανό να ερμηνεύσει κατάλληλα το πραγματικό για το σύνολο των δεδομένων μας πιθανότατα αυτό οφείλεται είτε στην λάθος επιλογή τεχνικής μοντελοποίησης είτε στην εσφαλμένη επιλογή σχεδιασμού. Εάν το πρόβλημα έγκειται στην τεχνική μοντελοποίησης η λύση είναι να δοκιμάσουμε κάποια άλλη μέθοδο. Εάν όμως το πρόβλημα εντοπίζεται στον πειραματικό σχεδιασμό που έχουμε επιλέξει είτε θα πρέπει να εμπλουτίσουμε το σύνολο των δεδομένων μας, είτε να επιλέξουμε εξαρχής ένα νέο σχεδιασμό με νέο πλήθος επιπέδων έτσι ώστε να διασφαλίσουμε τη συγραμμικότητα των μεταβλητών μας και το κατάλληλο πλήθος δοκιμών για να βελτιώσουμε την κάλυψη του πειραματικού μας χώρου.

2.4. Παράδειγμα ανάλυσης

Θα περιγράψουμε ένα από τα συνηθέστερα παραδείγματα που χρησιμοποιούνται για την καλύτερη κατανόηση της ανάλυσης των computer experiments. Το συγκεκριμένο παράδειγμα παρουσιάζεται στο άρθρο των Steinberg και Lin (2014) και αφορά το ποσοστό ροής νερού σε μια γεώτρηση από έναν ανώτερο υδροφόρο σε έναν κατώτερο υδροφόρο τα οποία διαχωρίζονται από ένα αδιαπέραστο στρώμα πετρώματος. Όπως αναφέρουν, το ποσοστό ροής της γεώτρησης μπορεί να μελετηθεί με ένα αναλυτικό μοντέλο που προκύπτει από το νόμο του Bernoulli κάνοντας την υπόθεση ότι η ροή που πραγματοποιείται είναι σταθερή και ισοθερμική. Η μεταβλητή απόκρισης y, δηλαδή το ποσοστό ροής από τη γεώτρηση το οποίο έχει μονάδα μέτρησης το $\frac{m^3}{yr}$, δίνεται από την ακόλουθη σχέση

$$y = \frac{2\pi T_u [H_u - H_l]}{\ln\left(\frac{r}{r_w}\right)\left[1 + \frac{2LT_u}{\ln\left(\frac{r}{r_w}\right) r_w^2 K_w} + \frac{T_u}{T_l}\right]}$$

ενώ οι οκτώ επεξηγηματικές μεταβλητές που λαμβάνουν μέρος περιγράφονται αναλυτικά στον παρακάτω πίνακα.

ΠΙΝΑΚΑΣ 1

Περιγραφή των ανεξάρτητων μεταβλητών του παραδείγματος

Μεταβλητή	*Περιγραφή*	*Μονάδα Μέτρησης*	*Κάτω Όριο*	*Άνω Όριο*
r_w	*Radius of borehole (Ακτίνα γεώτρησης)*	*m*	*0,05*	*0,15*
r	*Radius of influence*	*m*	*100*	*50.000*

	(Ακτίνα ροής)			
T_u	*Transmissivity of upper aquifer (Μεταδοτικότητα ανώτερου υδροφόρου)*	m^3/yr	*63.070*	*115.600*
T_l	*Transmissivity of lower aquifer (Μεταδοτικότητα κάτω υδροφόρου)*	m^3/yr	*63,1*	*116*
H_u	*Potentionmetric head of upper aquifer*	m	*990*	*1110*
H_l	*Potentionmetric head of lower aquifer*	m	*700*	*820*
L	*Length of borehole (Μήκος γεώτρησης)*	m	*1120*	*1680*
K_w	*Hydraulic conductivity of borehole (Υδραυλική αγωγιμότητα γεώτρησης)*	m/yr	*9855*	*12.045*

Το 2008 οι Ho και Xu χρησιμοποίησαν για τη μελέτη του συγκεκριμένου προβλήματος έναν ομοιόμορφο σχεδιασμό ο οποίος αποτελούταν από 32 δοκιμές και τις 8 επεξηγηματικές μας μεταβλητές. Ο συνολικός σχεδιασμός παρουσιάζεται στον ακόλουθο πίνακα.

ΠΙΝΑΚΑΣ 2

Δεδομένα του πειραματικού σχεδιασμού των Ho και Xu

N_0	r_w	r	T_u	T_l	H_u	H_l	L	K_w	y
1	0,0500	33366,67	63070	116,00	1110,00	768,57	1200	11732,14	26,18
2	0,0500	100,00	80580	80,73	1092,86	802,86	1600	10167,86	14,46
3	0,0567	100,00	98090	80,73	1058,57	717,14	1680	11106,43	22,75

4	0,0567	33366,67	98090	98,37	1110,00	734,29	1280	10480,71	30,98
5	0,0633	100,00	115600	80,73	1075,71	751,43	1600	11106,43	28,33
6	0,0633	16733,33	80580	80,73	1058,57	785,71	1680	12045,00	24,60
7	0,0700	33366,67	63070	98,37	1092,86	768,57	1200	11732,14	48,65
8	0,0700	16733,33	115600	116,00	990,00	700,00	1360	10793,57	35,36
9	0,0767	100,00	115600	80,73	1075,71	751,43	1520	10793,57	42,44
10	0,0767	16733,33	80580	80,73	1075,71	802,86	1120	9855,00	44,16
11	0,0833	50000,00	98090	63,10	1041,43	717,14	1600	10793,57	47,49
12	0,0833	50000,00	115600	63,10	1007,14	768,57	1440	11419,29	41,04
13	0,0900	16733,33	63070	116,00	1075,71	751,43	1120	11419,29	83,77
14	0,0900	33366,67	115600	116,00	1007,14	717,14	1360	11106,43	60,05
15	0,0967	50000,00	80580	63,10	1024,29	820,00	1360	9855,00	43,15
16	0,0967	16733,33	80580	98,37	1058,57	700,00	1120	10480,71	97,98
17	0,1033	50000,00	80580	63,10	1024,29	700,00	1520	10480,71	74,44
18	0,1033	16733,33	80580	98,37	1058,57	820,00	1120	10167,86	72,23
19	0,1100	50000,00	98090	63,10	1024,29	717,14	1520	10793,57	82,18
20	0,1100	100,00	63070	98,37	1041,43	802,86	1600	12045,00	68,06
21	0,1167	33366,67	63070	116,00	990,00	785,71	1280	12045,00	81,63
22	0,1167	100,00	98090	98,37	1092,86	802,86	1680	9855,00	72,54
23	0,1233	16733,33	115600	80,73	1092,86	734,29	1200	11419,29	161,35
24	0,1233	16733,33	63070	63,10	1041,43	785,71	1680	12045,00	86,73
25	0,1300	33366,67	80580	116,00	1110,00	768,57	1280	11732,14	164,78
26	0,1300	100,00	98090	98,37	1110,00	820,00	1280	10167,86	121,76
27	0,1367	50000,00	98090	63,10	1007,14	820,00	1440	10167,86	76,51
28	0,1367	33366,67	98090	116,00	1024,29	700,00	1200	10480,71	164,75
29	0,1433	50000,00	63070	116,00	990,00	785,71	1440	9855,00	89,54
30	0,1433	50000,00	115600	63,10	1007,14	734,29	1440	11732,14	141,09
31	0,1500	33366,67	63070	98,37	990,00	751,43	1360	11419,29	139,94
32	0,1500	100,00	115600	80,73	1041,43	734,29	1520	11106,43	157,59

Έχοντας επιλέξει λοιπόν το συγκεκριμένο σχεδιασμό οι Ho και Xu και χρησιμοποιώντας για τη μοντελοποίηση ένα πολυωνυμικό μοντέλο οδηγήθηκαν στο παρακάτω προσεγγιστικό μοντέλο.

$$\begin{aligned}\widehat{\log(y)} = {} & 4.1560 + 1.9903(\log(r_w) + 2.3544) - 0.0007292 * (L - 1400) - 0.003554 * (H_l - 760) \\ & + 0.0035068 * (H_u - 1050) + 0.000090868 * (K_w - 10950) + 0.000015325 \\ & * (H_u - 1050) * (H_l - 760) + 0.00000026487(L - 1400)^2 - 0.0000071759 \\ & * (H_l - 760)^2 - 0.0000068021 * (H_u - 1050)^2 - 0.00087286 * (\log(r) - 8.8914).\end{aligned}$$

Στη συνέχεια θέλοντας να αξιολογήσουν το προσεγγιστικό μοντέλο στο οποίο οδηγήθηκαν επέλεξαν ένα νέο δείγμα μεγέθους 2000 για το οποίο υπολόγισαν την τιμή της μεταβλητής απόκρισης και ακολούθως το μέσο τετραγωνικό σφάλμα του μοντέλου το οποίο και υπολογίστηκε ίσο με 0.2578156.

Εμείς στη συνέχεια της διπλωματικής μας εργασίας θα πραγματοποιήσουμε μια στατιστική ανάλυση του συγκεκριμένου παραδείγματος κάνοντας χρήση ενός ορθογώνιου Λατινικού υπερκύβου δεκαέξι δοκιμών και οκτώ παραγόντων, ενώ για τη μοντελοποίηση θα κάνουμε κι εμείς χρήση του πολυωνυμικού μοντέλου. Αναλυτικά η διαδικασία και τα αποτελέσματα της δικής μας προσέγγισης για την ανάλυση του συγκεκριμένου προβλήματος θα παρουσιαστούν στο τέταρτο κεφάλαιο.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

Κατασκευή ορθογώνιων Λατινικών Υπερκύβων για διάφορα μεγέθη δοκιμών

Όπως αναφέραμε και παραπάνω ένα από τα σημαντικότερα ζητήματα που τίθενται στη διεξαγωγή των computer experiments είναι η δημιουργία του κατάλληλου σχεδιασμού, έτσι ώστε να μπορέσουμε γρήγορα και οικονομικά να ερευνήσουμε τον πολύπλοκο χώρο των πειραμάτων μας. Στο κεφάλαιο αυτό λοιπόν θα αναφερθούμε σε κάποιες από τις μεθόδους που ανακαλύφθηκαν για το σκοπό αυτό.

Αρχικά θα συζητήσουμε για μια μέθοδο που παρουσίασαν οι Lin, Bingham, Sitter και Tang το 2010 με την οποία είμαστε σε θέση να κατασκευάσουμε Λατινικούς υπερκύβους κατάλληλους για τη διεξαγωγή των computer experiments. Η ιδέα πάνω στην οποία βασίστηκε η μέθοδος αυτή είναι η δημιουργία ενός μεγάλου Λατινικού υπερκύβου, εκμεταλλευόμενοι μικρότερους, διατηρώντας φυσικά τις ιδιότητες που κρίνονται απαραίτητες. Το σπουδαιότερο πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι το γεγονός ότι μπορεί να χρησιμοποιηθεί τόσο για την κατασκευή Λατινικών υπερκύβων, όπως προαναφέραμε, όσο και για την κατασκευή ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων.

Προτού ξεκινήσουμε λοιπόν με την περιγραφή της μεθόδου θα πρέπει να σημειώσουμε τα ακόλουθα. Με $D(n, s^m)$ συμβολίζουμε ένα σχεδιασμό n δοκιμών με m παράγοντες σε s επίπεδα και τον παρουσιάζουμε σε έναν $n * m$ πίνακα, όπου $D = (d_{ij})$ είναι τα στοιχεία του πίνακα. Θα πρέπει να τονίσουμε βέβαια ότι, όταν το πλήθος των επιπέδων είναι περιττός αριθμός τα επίπεδα των παραγόντων κεντροποιούνται στο μηδέν $\left\{-\frac{(s-1)}{2}, \dots, 0, \dots, \frac{(s-1)}{2}\right\}$ και μάλιστα όλα τα επίπεδα, εκτός του μηδενικού (0), επαναλαμβάνονται τον ίδιο αριθμό φορών σε κάθε στήλη του σχεδιασμού με σκοπό την εξασφάλιση της ορθογωνιότητας των κύριων γραμμικών επιδράσεων. Στην περίπτωση όπου το πλήθος των επιπέδων είναι άρτιο έχουμε $\left\{-\frac{(s-1)}{2}, \dots, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{(s-1)}{2}\right\}$, ενώ και στι δύο περιπτώσεις γνωρίζουμε ότι τα επίπεδα κατανέμονται ομοιόμορφα στο χώρο. Στην ειδική περίπτωση, φυσικά, που το πλήθος των δοκιμών ισούται με εκείνο των επιπέδων, $n = s$, ο σχεδιασμός που προκύπτει είναι ένας Λατινικός υπερκύβος.

3.1. Κατασκευή σχεδιασμών Λατινικών υπερκύβων

Ας θεωρήσουμε επομένως ως $A = (a_{ij})$ έναν $n_1 * m_1$ πίνακα με στοιχεία εισόδου $a_{ij} = \pm 1$, ως $B = (b_{ij})$ ένα σχεδιασμό $D(n_2, {s_2}^{m_2})$, ως $C = (c_{ij})$ ένα $D(n_1, {s_1}^{m_1})$ σχεδιασμό, ως $D = (d_{ij})$ έναν πίνακα $n_2 * m_2$ με στοιχεία εισόδου $d_{ij} = \pm 1$ και γ οποιονδήποτε πραγματικό αριθμό. Χρησιμοποιώντας το γινόμενο Kroncker $\otimes$ οδηγούμαστε στη κατασκευή του ακόλουθου σχεδιασμού

$$L = A \otimes B + \gamma C \otimes D \tag{3.1}$$

όπου οι σχεδιασμοί B και C καλούνται σχεδιασμοί βάσης (base designs), ενώ οι A και D είναι σχεδιασμοί δύο επιπέδων οι οποίοι χρησιμοποιούνται τεχνικά ώστε να δημιουργούνται επαναλήψεις των πρώτων δύο σχεδιασμών αντίστοιχα. Με τη μέθοδο αυτή οδηγούμαστε στη κατασκευή του σχεδιασμού L με $n = n_1 n_2$ δοκιμές και $m = m_1 m_2$ παράγοντες.

Επιλέγοντας με τον κατάλληλο τρόπο τους σχεδιασμούς αυτούς, όπως και τον πραγματικό αριθμό γ, έτσι ώστε τα επίπεδα του τελικού σχεδιασμού L να είναι ομοιόμορφα κατανεμημένα και να μην επαναλαμβάνονται, μπορούμε να καταλήξουμε στη δημιουργία ενός Λατινικού υπερκύβου. Εκτός αυτού, έχουμε τη δυνατότητα να κατασκευάσουμε και ορθογώνιους Λατινικούς υπερκύβους στην περίπτωση όπου οι σχεδιασμοί A, B, C και D είναι ορθογώνιοι. Πιο συγκεκριμένα, ορίζουμε την ορθογωνιότητα του σχεδιασμού L που κατασκευάσαμε εξετάζοντας τις συσχετίσεις μεταξύ των στηλών των σχεδιασμών A και C και εκείνες των σχεδιασμών B και D.

Οι Lin, Bingham, Sitter και Tang, λοιπόν, διατύπωσαν τον παρακάτω ορισμό σύμφωνα με το οποίο ένας σχεδιασμός L σχηματισμένος βάσει του (3.1) καλείται Λατινικός υπερκύβος εάν ικανοποιεί τις ακόλουθες συνθήκες:

1. $\gamma = n_2$

2. $s_1 = n_1$ και $s_2 = n_2$, δηλαδή θέλουμε οι σχεδιασμοί B και C να είναι Λατινικοί υπερκύβοι
3. Οι σχεδιασμοί A και C να ικανοποιούν τη συνθήκη ότι, για κάθε i, εάν υπάρχει p και p', έτσι ώστε $c_{pi} = -c_{p'i}$, τότε και $a_{pi} = -a_{p'i}$.

   ή

   Οι σχεδιασμοί B και D να ικανοποιούν τη συνθήκη ότι, για κάθε j, εάν υπάρχει q και q', έτσι ώστε $b_{qj} = -b_{q'j}$, τότε και $d_{qj} = -d_{q'j}$.

Η πρώτη συνθήκη σε συνδυασμό με τη δεύτερη, δηλαδή ότι ο σχεδιασμός C πρέπει να είναι Λατινικός υπερκύβος, μας εγγυάται το γεγονός ότι, μετά τη μετατόπιση των n_1 ομάδων οποιεσδήποτε δύο διαδοχικές ομάδες έχουν απόσταση ίση με τη μονάδα. Ενώ η τρίτη συνθήκη χρειάζεται ώστε να αποφευχθεί η επανάληψη επιπέδων στις στήλες του σχεδιασμού L. Η συνθήκη αυτή ικανοποιείται σε περιπτώσεις όπου, είτε ο σχεδιασμός A, είτε ο D ή και οι δύο μαζί είναι ταυτοτικοί πίνακες ή σε περίπτωση όπου ή ο B ή ο C σχεδιασμός είναι ένας συμμετρικός Λατινικός υπερκύβος.

Για να κατανοήσουμε καλύτερα τη συγκεκριμένη μέθοδο κατασκευής Λατινικών υπερκύβων θα παρουσιάσουμε το ακόλουθο παράδειγμα. Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να κατασκευάσουμε ένα 16*2 Λατινικό υπερκύβο, να παράγουμε δηλαδή ένα Λατινικό υπερκύβο δύο παραγόντων με δεκαέξι δοκιμές. Υπάρχουν διάφορες επιλογές από n_1, n_2, m_1 και m_2 έτσι ώστε να δημιουργήσουμε ένα Λατινικό υπερκύβο με $n = n_1 n_2 = 16$ και $m = m_1 m_2 = 2$. Επιλέγουμε λοιπόν ως σχεδιασμούς βάσεις τους Λατινικούς υπερκύβους **B** και **C** που παρουσιάζονται από κάτω.

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} -1,5 \\ -0,5 \\ 0,5 \\ 1,5 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} -1,5 & 0,5 \\ -0,5 & -1,5 \\ 0,5 & 1,5 \\ 1,5 & -0,5 \end{bmatrix}$$

Να σημειώσουμε βέβαια ότι, τα στοιχεία που παρουσιάζονται στους παραπάνω πίνακες προκύπτουν έπειτα από κεντροποίηση των αρχικών επιπέδων των στοιχείων των πινάκων, όπου οι αρχικοί πίνακες είχαν ως εξής $\mathbf{B} = \{(1,2,3,4)^T\}$ και $\boldsymbol{C} = \{(1,2,3,4)^T, (3,1,4,2)^T\}$.

Για τη δημιουργία επαναλήψεων των σχεδιασμών **B** και $\boldsymbol{C}$ επιλέγουμε να χρησιμοποιήσουμε τους ακόλουθους πίνακες $\boldsymbol{A}$ και $\boldsymbol{D}$.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ -1 & 1 \\ -1 & -1 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{D} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Συνοψίζοντας, λοιπόν, έχουμε έναν $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ πίνακα 4*2 με στοιχεία εισόδου $a_{ij} = \pm 1$, έναν $\boldsymbol{D} = (d_{ij})$ πίνακα 4*1 με στοιχεία εισόδου $d_{ij} = \pm 1$, έναν πίνακα $\boldsymbol{B} = (b_{ij})$ διαστάσεων 4*1 ο οποίος είναι ένας σχεδιασμό $D(4, 4^1)$ και έναν πίνακα διαστάσεων 4*2 $\boldsymbol{C} = (c_{ij})$ ο οποίος είναι ένας $D(4, 4^2)$ σχεδιασμός. Βάσει του παραπάνω ορισμού επιλεγουμε $\boldsymbol{\gamma} = 4$ και χρησιμοποιώντας το γινόμενο Kroncker $\otimes$ οδηγούμαστε στη κατασκευή του σχεδιασμού L όπου $L = A \otimes B + \gamma C \otimes D$.

$$\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} -1{,}5 & -1{,}5 \\ -0{,}5 & -0{,}5 \\ 0{,}5 & 0{,}5 \\ 1{,}5 & 1{,}5 \\ -1{,}5 & 1{,}5 \\ -0{,}5 & 0{,}5 \\ 0{,}5 & -0{,}5 \\ 1{,}5 & -1{,}5 \\ 1{,}5 & -1{,}5 \\ 0{,}5 & -0{,}5 \\ -0{,}5 & 0{,}5 \\ -1{,}5 & 1{,}5 \\ 1{,}5 & 1{,}5 \\ 0{,}5 & 0{,}5 \\ -0{,}5 & -0{,}5 \\ -1{,}5 & -1{,}5 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\gamma C} \otimes \boldsymbol{D} = \begin{bmatrix} -6 & 2 \\ 6 & -2 \\ 6 & -2 \\ -6 & 2 \\ -2 & -6 \\ 2 & 6 \\ 2 & 6 \\ -2 & -6 \\ 2 & 6 \\ -2 & -6 \\ -2 & -6 \\ 2 & 6 \\ 6 & -2 \\ -6 & 2 \\ -6 & 2 \\ 6 & -2 \end{bmatrix}$$

Και καταλήγουμε λοιπόν στην κατασκευή του Λατινικού υπερκύβου για 2 παράγοντες με 16 δοκιμές

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} -7{,}5 & 0{,}5 \\ 5{,}5 & -2{,}5 \\ 6{,}5 & -1{,}5 \\ -4{,}5 & 3{,}5 \\ -3{,}5 & -4{,}5 \\ 1{,}5 & 6{,}5 \\ 2{,}5 & 5{,}5 \\ -0{,}5 & -7{,}5 \\ 3{,}5 & 4{,}5 \\ -1{,}5 & -6{,}5 \\ -2{,}5 & -5{,}5 \\ 0{,}5 & 7{,}5 \\ 7{,}5 & -0{,}5 \\ -5{,}5 & 2{,}5 \\ -6{,}5 & 1{,}5 \\ 4{,}5 & -3{,}5 \end{bmatrix}$$

Ο παραπάνω ορισμός βέβαια δεν είναι σπουδαίας σημασίας, αφού είναι αρκετά εύκολο να κατασκευάσουμε ένα Λατινικό υπερκύβο απλώς συνδυάζοντας διάφορες εναλλαγές των επιπέδων των παραγόντων. Η σημαντικότητά του έγκειται στο γεγονός ότι, οι Λατινικοί υπερκύβοι που κατασκευάζονται και έχουν τη συγκεκριμένη μορφή παρέχουν την μελλοντική δυνατότητα δημιουργίας ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων. Κλείνοντας, θα πρέπει να σημειώσουμε το γεγονός ότι, με τη συγκεκριμένη μέθοδο κατασκευής μπορούμε να αποκτήσουμε υψηλής τάξης καινούριους σχεδιασμούς Λατινικών υπερκύβων απλώς εφαρμόζοντας διαφορετικές εναλλαγές γραμμών, στηλών και προσήμων κάθε φορά.

3.2. Κατασκευή ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων

Βέλτιστοι σχεδιασμοί θεωρούνται εκείνοι στους οποίους εξασφαλίζεται η εκτίμηση των παραμέτρων να πραγματοποιείται χωρίς καμία συσχέτιση, γνωστοί και ως σχεδιασμοί ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων για τους οποίους θα μιλήσουμε ακολούθως.

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε έναν ορθογώνιο Λατινικό υπερκύβο n δοκιμών με πλήθος παραγόντων μεγαλύτερο ή ίσο με 2, $m \geq 2$. Όπως είναι γνωστό, το μέγεθος του δείγματος δεν μπορεί να λάβει τις τιμές δύο ή τρία, αντιθέτως πρέπει να είναι μεγαλύτερο ή ίσο με τέσσερα, $n \geq 4$. Συνεπώς, με τη βοήθεια του επόμενου θεωρήματος θα διευκρινίσουμε πότε μπορούμε να αναφέρουμε την ύπαρξη ενός ορθογώνιου Λατινικού υπερκύβου.

<u>Θεώρημα 3.1 :</u>

Η ύπαρξη ενός ορθογώνιου Λατινικού Υπερκύβου με μέγεθος δείγματος $n \geq 4$ και πλήθος παραγόντων περισσότερο από έναν υφίσταται όταν και μόνο όταν $n \neq 4k + 2$ για οποιοδήποτε ακέραιο αριθμό k.

Για να αποφανθούμε, επομένως, σχετικά με την ορθογωνιότητα ενός σχεδιασμού βασιζόμαστε στον ακόλουθο ορισμό των Lin, Bingham, Sitter και Tang (2010) σύμφωνα με το οποίο ο σχεδιασμός L (3.1) καλείται ορθογώνιος εάν ισχύουν τα εξής:

- Οι A, B, C και D είναι συνολικά ορθογώνιοι
- Ισχύει είτε ότι $A^T C = 0$ ή ότι $B^T D = 0$.

Παρατηρούμε, επομένως, ότι με τη βοήθεια του πρώτου ορισμού έχουμε τη δυνατότητα να κάνουμε το σχεδιασμό L Λατινικό υπερκύβο, ενώ με το δεύτερο ορισμό τον καθιστούμε ορθογώνιο. Είναι προφανές ότι, ο συνδυασμός των δύο αυτών ορισμών μας οδηγεί στην απόκτηση ενός ορθογώνιου Λατινικού υπερκύβου.

Στην κατασκευή ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων μας οδηγεί βέβαια και το ακόλουθο θεώρημά τους.

<u>Θεώρημα 3.2 :</u>

Ένας σχεδιασμός L σχηματισμένος βάσει του τύπου (3.1) καλείται ορθογώνιος Λατινικός υπερκύβος εάν ικανοποιεί τις ακόλουθες συνθήκες:

1. $\gamma = n_2$
2. Οι σχεδιασμοί A και D να είναι ορθογώνιοι πίνακες με στοιχεία ± 1 (ορθογώνιοι ως προς τις στήλες, «column-orthogonal»)
3. Οι σχεδιασμοί B και C να είναι ορθογώνιοι Λατινικοί υπερκύβοι
4. Να ισχύει είτε ότι $A^T C = 0$, είτε $B^T D = 0$ ή και τα δύο
5. Οι σχεδιασμοί A και C να ικανοποιούν τη συνθήκη ότι, για κάθε i, εάν υπάρχει p και p', έτσι ώστε $c_{pi} = -c_{p'i}$, τότε και $a_{pi} = -a_{p'i}$.

   ή

   Οι σχεδιασμοί B και D να ικανοποιούν τη συνθήκη ότι, για κάθε j, εάν υπάρχει q και q', έτσι ώστε $b_{qj} = -b_{q'j}$, τότε και $d_{qj} = -d_{q'j}$.

Η πρώτη συνθήκη σε συνδυασμό με την πέμπτη είναι απαραίτητες για την απόκτηση ενός Λατινικού υπερκύβου, ενώ το γεγονός της ορθογωνιότητας των σχεδιασμών B και C και η τέταρτη συνθήκη μας οδηγούν στην κατασκευή του ορθογώνιου σχεδιασμού L. Πιο συγκεκριμένα, με τη μέθοδο αυτή από μικρούς ορθογώνιους Λατινικούς υπερκύβους B και C κατορθώνουμε να λάβουμε ένα μεγαλύτερο ορθογώνιο Λατινικό υπερκύβο τον L, με τη βοήθεια των ορθογώνιων πινάκων A και D. Βέβαια, το μεγαλύτερο κομμάτι της προσοχής μας στρέφεται στην ορθή κατασκευή του τελικού σχεδιασμού η οποία επιτυγχάνεται με την πρώτη και τις δύο τελευταίες συνθήκες.

Εξαιτίας της ορθογώνιας ιδιότητας των στηλών των σχεδιασμών A και D θα πρέπει το πλήθος των δοκιμών τους να είναι ίσο με δύο ή με πολλαπλάσιο του τέσσερα με αποτέλεσμα το συνολικό πλήθος των δοκιμών για το σχεδιασμό L να έχει τη μορφή $n = 8k$ όπου $k = 1, 2, \ldots$.

3.3. Κατασκευή ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων για διαφορετικά μεγέθη δείγματος

Παρατηρούμε, λοιπόν, πως βάσει του θεωρήματος 3.1 είμαστε σε θέση να κατασκευάσουμε έναν ορθογώνιο Λατινικό υπερκύβο του οποίου το μέγεθος του δείγματος θα πρέπει είτε να είναι περιττός είτε πολλαπλάσιο του 4. Από την άλλη πλευρά, λαμβάνοντας υπόψη το θεώρημα 3.2 έχουμε τη δυνατότητα κατασκευής ενός ορθογώνιου Λατινικού υπερκύβου με $n = 8k$. Στην υποενότητα αυτή θα αναλύσουμε δύο μεθόδους του Lin 2010 με τις οποίες καθίσταται δυνατή η κατασκευή ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων και άλλων μεγεθών δείγματος.

Έστω ότι με S συμβολίζουμε έναν Λατινικό υπερκύβο με s πλήθος επιπέδων και n πλήθος δοκιμών. Ας υποθέσουμε ότι $S = S_a \cup S_b$ όπου $S_a \cap S_b = \emptyset$ και τα στοιχεία των S_a και S_b είναι τα n_a και n_b αντίστοιχα. Υποθέτουμε επίσης ότι, υπάρχει ένας $n_a * m$ ορθογώνιος σχεδιασμός D_a με επίπεδα στο S_a και ένας $n_b * m$ ορθογώνιος σχεδιασμός D_b με επίπεδα στο S_b. Τότε ο

$$L = \binom{D_a}{D_b} \tag{3.2}$$

είναι ένας $n * m$ ορθογώνιος Λατινικός υπερκύβος όπου $n = n_a + n_b$. Θα πρέπει βέβαια να τονίσουμε στο σημείο αυτό ότι, δεν είναι απαραίτητο οι σχεδιασμοί D_a και D_b να είναι από μόνοι τους Λατινικοί υπερκύβοι.

- **<u>1η stacking μέθοδος:</u>**

Στη συγκεκριμένη μέθοδο επιλέγουμε εκείνα τα n_a και n_b για τα οποία ισχύει η σχέση $|n_a - n_b| = 1$ με τα αντίστοιχα $S_a = \{-(n_a-1), -(n_a-3), \dots, n_a-3, n_a-1\}$ και $S_b = \{-(n_b-1), -(n_b-3), \dots, n_b-3, n_b-1\}$. Με τον τρόπο αυτό είμαστε σίγουροι ότι και ο $D_a/2$ και ο $D_b/2$ είναι ορθογώνιοι Λατινικοί υπερκύβοι. Μπορούμε να υποθέσουμε βέβαια ότι, το n_a είναι περιττός αριθμός και το n_b άρτιος. Σύμφωνα, λοιπόν, και με το Θεώρημα 3.1 αντιλαμβανόμαστε ότι το n_b είναι της μορφής $4k$ με αποτέλεσμα το n_a να έχει τη μορφή $4k-1$ ή $4k+1$. Επομένως, αντιλαμβανόμαστε ότι με τη μέθοδο αυτή καταλήγουμε στη δημιουργία ενός ορθογώνιου Λατινικού υπερκύβου με μέγεθος δείγματος το $8k-1$ ή το $8k+1$.

Ας υποθέσουμε, για παράδειγμα, ότι έχουμε τους παρακάτω σχεδιασμούς D_a και D_b όπου το n_a ισούται με 5, περιττός αριθμός και το n_b με 4, άρτιος αριθμός για τα οποία ισχύει η σχέση $|n_a - n_b| = 1$.

$$D_a = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ -1 & -2 \\ 0 & 0 \\ 1 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix}$$

$$D_b = \begin{bmatrix} -1.5 & 0.5 \\ -0.5 & -1.5 \\ 0.5 & 1.5 \\ 1.5 & -0.5 \end{bmatrix}$$

Προκύπτει, λοιπόν, ένας $9 * 2$ ορθογώνιος Λατινικός υπερκύβος ο $L = \binom{D_a}{D_b}$.

$$L = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ -1 & -2 \\ 0 & 0 \\ 1 & 2 \\ 2 & -1 \\ -1.5 & 0.5 \\ -0.5 & -1.5 \\ 0.5 & 1.5 \\ 1.5 & -0.5 \end{bmatrix}$$

- **<u>2η stacking μέθοδος:</u>**

Η δεύτερη μέθοδος η οποία διατυπώθηκε από τον Lin έχει μια πιο γενική μορφή σε σχέση με την πρώτη. Στη συγκεκριμένη επιλέγουμε το $S_a = \left\{-\frac{(n_a-1)}{2}, -\frac{(n_a-3)}{2}, \dots, \frac{n_a-3}{2}, \frac{n_a-1}{2}\right\}$ και το $S_b = \left\{-\frac{(n-1)}{2}, \dots, \frac{-(n_a+1)}{2}, \frac{(n_a+1)}{2}, \dots, \frac{(n-1)}{2}\right\}$ όπου $n = n_a + n_b$. Οι επιλογές αυτές μα οδηγούν ο D_a να είναι ένας ορθογώνιος Λατινικός υπερκύβος, ενώ ο D_b όχι. Επομένως, η προσοχή μας πλέον στρέφεται στη δημιουργία ενός ορθογώνιου σχεδιασμού D_b με επίπεδα S_b της μορφής που δόθηκε προηγουμένως. Για το σκοπό αυτό θα χρησιμοποιήσουμε τους πίνακες που παρουσιάζονται παρακάτω.

ΠΙΝΑΚΑΣ 3

Τέσσερις χρήσιμοι πίνακες για την κατασκευή ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων για διάφορα μεγέθη δείγματος με τη μέθοδο stacking

n														
2	***4***		***8***				***16***							
x_1	x_1	x_2	x_1	$-x_2$	x_4	x_3	x_1	$-x_2$	$-x_4$	$-x_3$	$-x_8$	x_7	x_5	x_6
$-x_1$	x_2	$-x_1$	x_2	x_1	x_3	$-x_4$	x_2	x_1	$-x_3$	x_4	$-x_7$	$-x_8$	$-x_6$	x_5
	$-x_1$	$-x_2$	x_3	$-x_4$	$-x_2$	$-x_1$	x_3	$-x_4$	x_2	x_1	$-x_6$	$-x_5$	x_7	$-x_8$
	$-x_2$	x_1	x_4	x_3	$-x_1$	x_2	x_4	x_3	x_1	$-x_2$	$-x_5$	x_6	$-x_8$	$-x_7$
			$-x_1$	x_2	$-x_4$	$-x_3$	x_5	$-x_6$	$-x_8$	x_7	x_4	x_3	$-x_1$	$-x_2$
			$-x_2$	$-x_1$	$-x_3$	x_4	x_6	x_5	$-x_7$	$-x_8$	x_3	$-x_4$	x_2	$-x_1$
			$-x_3$	x_4	x_2	x_1	x_7	$-x_8$	x_6	$-x_5$	x_2	$-x_1$	$-x_3$	x_4
			$-x_4$	$-x_3$	x_1	$-x_2$	x_8	x_7	x_5	x_6	x_1	x_2	x_4	x_3
							$-x_1$	x_2	x_4	x_3	x_8	$-x_7$	$-x_5$	$-x_6$
							$-x_2$	$-x_1$	x_3	$-x_4$	x_7	x_8	x_6	$-x_5$
							$-x_3$	x_4	$-x_2$	$-x_1$	x_6	x_5	$-x_7$	x_8
							$-x_4$	$-x_3$	$-x_1$	x_2	x_5	$-x_6$	x_8	x_7
							$-x_5$	x_6	x_8	$-x_7$	$-x_4$	$-x_3$	x_1	x_2
							$-x_6$	$-x_5$	x_7	x_8	$-x_3$	x_4	$-x_2$	x_1
							$-x_7$	x_8	$-x_6$	x_5	$-x_2$	x_1	x_3	$-x_4$
							$-x_8$	$-x_7$	$-x_5$	$-x_6$	$-x_1$	$-x_2$	$-x_4$	$-x_3$

Οι τέσσερις αυτοί πίνακες που παρουσιάζονται πιο πάνω έχουν τις εξής σημαντικές ιδιότητες:

- Έχουν πραγματικές τιμές εισόδου $\pm x_1, \dots, \pm x_{n/2}$.
- Τόσο το x_i όσο και το $-x_i$ εμφανίζονται ακριβώς μια φορά σε κάθε στήλη.
- Κάθε δύο στήλες είναι ορθογώνιες.

Βέβαια, θα πρέπει να ξεκαθαρίσουμε ότι οι συγκεκριμένοι πίνακες ναι μεν σχετίζονται, αλλά είναι διαφορετικοί από τους ορθογώνιους σχεδιασμούς. Η χρησιμότητα των πινάκων αυτών έγκειται στο γεγονός ότι μας βοηθούν στην κατασκευή ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων μεγέθους δείγματος n θέτοντας ως $x_i = \frac{2i-1}{2}$ για $i = 1, \dots, n/2$, ενώ εάν επιλέξουμε ως $x_i = \frac{n_a+2i-1}{2}$, για κάθε $i = 1, \dots, n_b/2$, είμαστε σε θέση να κατασκευάσουμε ορθογώνιους σχεδιασμούς D_b με το επιθυμητό σετ επιπέδων S_b. Το μεγαλύτερο πλεονέκτημα που αποκτούμε με τη χρήση των πινάκων αυτών είναι ότι μας επιτρέπουν να κατασκευάσουμε σχεδιασμούς D_b με το σετ επιπέδων S_b που παρουσιάσαμε παραπάνω για ένα πιο γενικό πλήθος δοκιμών n_b βάσει του παρακάτω λήμματος.

Έστω ότι $\gamma = 1$, τότε ο σχεδιασμός L (2.1) είναι ένας ορθογώνιος σχεδιασμός με σετ επιπέδων $\left\{-\frac{(n_a+n-1)}{2}, \dots, -\frac{(n_a+1)}{2}, \frac{(n_a+1)}{2}, \frac{(n_a+n-1)}{2}\right\}$ εάν:

- οι A και D είναι ορθογώνιοι πίνακες με στοιχεία ± 1
- ο B είναι ορθογώνιος Λατινικός υπερκύβος και ο C ένας ορθογώνιος σχεδιασμός με επίπεδα της μορφής $\pm\frac{(n_a+n_2)}{2}, \pm\frac{n_a+3n_2}{2}, \dots, \pm\frac{(n_a+(n_1-1)n_2)}{2}$
- ισχύει είτε $A^T C = 0$ είτε $B^T D = 0$
- οι σχεδιασμοί A και C να ικανοποιούν τη συνθήκη ότι, για κάθε i, εάν υπάρχει p και p', έτσι ώστε $c_{pi} = -c_{p'i}$, τότε και $a_{pi} = -a_{p'i}$.

  ή

  οι σχεδιασμοί B και D να ικανοποιούν τη συνθήκη ότι, για κάθε j, εάν υπάρχει q και q', έτσι ώστε $b_{qj} = -b_{q'j}$, τότε και $d_{qj} = -d_{q'j}$.

Ο ορθογώνιος σχεδιασμός C που αναφέρεται στο παραπάνω λήμμα μπορεί να προκύψει με τη βοήθεια των τεσσάρων πινάκων που παρουσιάσαμε προηγουμένως. Εάν θέσουμε $n = n_b$ στο παραπάνω λήμμα , ο σχεδιασμός L μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως ο D_b καθώς έχει τα επιθυμητά επίπεδα S_b. Με τον τρόπο αυτό αντιλαμβανόμαστε ότι, το μέγεθος του δείγματος n_b του σχεδιασμού D_b έχει τη μορφή $n_b = 8k$ και δεδομένου ότι δεν υπάρχει κανένας περιορισμός σχετικά με το μέγεθος του δείγματος n_a του D_a, πέρα από το ότι θέλουμε να είναι ορθογώνιος Λατινικός υπερκύβος, η δεύτερη αυτή μέθοδος μας επιτρέπει να δημιουργήσουμε ορθογώνιους Λατινικούς υπερκύβους οποιουδήποτε μεγέθους δείγματος $n \neq 4k + 2$.

.

3.4. Κατασκευή μη ισόμορφων σχεδιασμών

Πριν προχωρήσουμε παρακάτω θα ήταν καλό να υπενθυμίσουμε στο σημείο αυτό ότι, δύο Λατινικοί υπερκύβοι ονομάζονται ισόμορφοι στην περίπτωση όπου ο ένας έχει κατασκευασθεί από μια σειρά εναλλαγών στις γραμμές και/ή στις στήλες του άλλου και/ή από την αντανάκλαση των επιπέδων σε σχέση με το μέσο μίας ή και περισσοτέρων στηλών. Σε αντίθετη περίπτωση οι Λατινικοί Υπερκύβοι καλούνται μη ισόμορφοι. Στη συνέχεια του συγκεκριμένου κεφαλαίου θα συμβολίζουμε με $OLHD_1(n,m)$ το σετ των μη ισομορφικών ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων με n δοκιμές και m παράγοντες στις οποίες οι εκτιμήσεις των γραμμικών επιδράσεων είναι ασυσχέτιστες μεταξύ τους. Η συγκεκριμένη μέθοδος κατασκευής προτάθηκε από τον Ευαγγελάρα το 2016, σύμφωνα με τον οποίο, στην περίπτωση των μη ισομορφικών ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων $OLHD_1(n,m)$ ενδιαφερόμαστε για την αποτελεσματική εκτίμηση μιας ομάδας παραμέτρων ενός πολυωνυμικού μοντέλου δευτέρου βαθμού

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^{k} \beta_j x_j + \sum_{j=1}^{k} \beta_{jj} x_j^2 + \varepsilon$$

όπου λαμβάνονται υπόψιν και οι δευτεροβάθμιες επιδράσεις ή

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^{k} \beta_j x_j + \sum_{j=1}^{k} \beta_{jj} x_j^2 + \sum_{j=1}^{k-1} \sum_{m=j+1}^{k} \beta_{jm} x_j x_m + \varepsilon \qquad (3)$$

όπου λαμβάνονται υπόψιν τόσο οι δευτεροβάθμιες επιδράσεις όσο και οι αλληλεπιδράσεις. Με σεβασμό στο τελευταίο μοντέλο, καλύτεροι σχεδιασμοί θεωρούνται εκείνοι που εγγυώνται τη μη συσχέτιση τόσο μεταξύ των εκτιμήσεων των επιδράσεων πρώτων παραγόντων όσο και των εκτιμήσεων των επιδράσεων πρώτων παραγόντων με τις εκτιμήσεις των επιδράσεων παραγόντων δεύτερης τάξης. Η ιδιότητα αυτή αποκτάται στην περίπτωση όπου, οι ανεξάρτητες μεταβλητές που χρησιμοποιούνται για τις εκτιμήσεις των επιδράσεων πρώτων παραγόντων είναι ορθογώνιοι μεταξύ τους άλλα και σε σχέση με τις ανεξάρτητες μεταβλητές που χρησιμοποιούνται για την εκτίμηση των επιδράσεων παραγόντων δεύτερης τάξης. Για ευκολία στη συνέχεια θα συμβολίζουμε ένα σετ μη ισομορφικών ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων με n δοκιμές και m παράγοντες, οι οποίοι μας εξασφαλίζουν ότι θα έχουμε ασυσχέτιστες εκτιμήσεις των επιδράσεων πρώτων παραγόντων και μεταξύ των εκτιμήσεων πρώτων παραγόντων αλλά και με τις εκτιμήσεις όλων των παραγόντων δευτέρου βαθμού, δηλαδή τόσο τις τετραγωνικές επιδράσεις όσο και τις αλληλεπιδράσεις, με $OLHD_3(n,m)$. Με ανάλογο τρόπο συμβολίζουμε με $OLHD_2(n,m)$ ένα σετ μη ισομορφικών ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων με n δοκιμές και m παράγοντες στους οποίους εξασφαλίζονται οι ασυσχέτιστες εκτιμήσεις των επιδράσεων πρώτων παραγόντων, αλλά και οι εκτιμήσεις των επιδράσεων πρώτων παραγόντων σε σχέση με της εκτιμήσεις των επιδράσεων μόνο των τετραγώνων. Επομένως είναι απόλυτα προφανές ότι ισχύει η ακόλουθη σχέση $OLHD_3(n,m) \subseteq OLHD_2(n,m) \subseteq OLHD_1(n,m)$.

Στην συγκεκριμένη παράγραφο θα εστιάσουμε την προσοχή μας στην βέλτιστη επιλογή ενός Λατινικού υπερκύβου όταν έχουμε ένα πολυωνυμικό μοντέλο και για το σκοπό αυτό θα ερευνήσουμε διάφορους μικρούς Λατινικού υπερκύβους. Σε πρώτη φάση θα περιγράψουμε μια γενικά απλοϊκή διαδικασία κατασκευής μιας ολοκληρωμένης λίστας μη ισομορφικών ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων με n δοκιμές και m παράγοντες. Στη συνέχεια θα κατασκευάσουμε όλους τους μη ισομορφικούς ορθογώνιους Λατινικούς υπερκύβους με $n \leq 16$ δοκιμές η χρήση των οποίων θα μας εξασφαλίζει τη μη συσχέτιση των εκτιμήσεων των επιδράσεων πρώτων παραγόντων και τη μη συσχέτιση μεταξύ των εκτιμήσεων πρώτων παραγόντων με τις εκτιμήσεις των επιδράσεων παραγόντων δευτέρου βαθμού, δηλαδή τα στοιχεία των συνόλων $OLHD_2(n,m)$ και τα στοιχεία των υποσυνόλων $OLHD_3(n,m)$. Ακολούθως, θα απαριθμήσουμε τους κατασκευασμένους σχεδιασμούς χρησιμοποιώντας κριτήρια συσχέτισης και μοναδικότητας έτσι ώστε να μπορέσουμε να τους ταξινομήσουμε και να αναγνωρίσουμε τους βέλτιστους σε κάθε εύρος δοκιμών. Ενώ, τελειώνοντας θα χρησιμοποιήσουμε την προτεινόμενη διαδικασία αναγνώρισης μη ισομορφικών Λατινικών υπερκύβων στις οποίες οι εκτιμήσεις των επιδράσεων πρώτων παραγόντων αποκτώνται μόνο έτσι ώστε να είναι ασυσχέτιστες μεταξύ τους.

Σύμφωνα λοιπόν με τον Evangelaras (2016) η προτεινόμενη διαδικασία κατασκευής είναι βασισμένη στη μοναδικότητα των Λατινικών υπερκύβων με n δοκιμές και 1 παράγοντα και στο γεγονός ότι οποιοσδήποτε παράγοντας αποτελείται από τους πρώτους n φυσικούς αριθμούς. Θα συμβολίζουμε με $P(n)$ το σύνολο όλων των πιθανών στηλών ενός Λατινικού υπερκύβου, όπου στη περίπτωση αυτή ισχύει η σχέση $|P(n)| = n!$. Επιπλέον με $C(n)$ θα συμβολίζουμε ένα υποσύνολο του $P(n)$ το οποίο αποτελείται από στήλες του $P(n)$ που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την κατασκευή ενός Λατινικού υπερκύβου με n δοκιμές και δύο στήλες η χρήση των οποίων επιβεβαιώνει την επιθυμητή ιδιότητα της μη συσχέτισης μεταξύ των εκτιμήσεων συγκεκριμένων παραγόντων, τόσο γραμμικών όσο τετραγώνων και αλληλεπιδράσεων, σε ένα πολυωνυμικό μοντέλο. Το σύνολο όλων των μη ισομορφικών σχεδιασμών με n δοκιμές και m στήλες που διαθέτουν την σημαντική αυτή ιδιότητα θα συμβολίζεται με $D(n,m)$, ενώ η βασική ιδέα με την οποία από έναν $D(n,m)$ θα αποκτούμε έναν $D(n,m+1)$ έχει ως εξής.

<u>Βήμα 1ο</u> Αυξάνουμε κάθε στοιχείο του σχεδιασμού $D(n,m)$ με κάθε στοιχείο του σχεδιασμού $C(n)$ και κρατάμε μόνο εκείνους τους συνδυασμούς οι οποίοι δίνουν ως αποτέλεσμα ένα επιθυμητό σχεδιασμό με $m+1$ στήλες σε ένα ξεχωριστό σύνολο το $A(n,m+1)$. Αναβαθμίζουμε στη συνέχεια το σύνολο $C(n)$ που οδηγεί στον επιθυμητό σχεδιασμό.

<u>Βήμα 2ο</u> Κατασκευάζουμε το σύνολο των σχεδιασμών $D(n,m+1)$ τσεκάροντας τους σχεδιασμούς $A(n,m+1)$ εάν είναι ισομορφικοί με τη βοήθεια του ορισμού.

Ο παραπάνω αλγόριθμος ξεκινά με το μοναδικό Λατινικό υπερκύβο μιας στήλης και τερματίζεται όταν το σύνολο $A(n,m+1)$ μένει χωρίς κανένα στοιχείο. Είναι προφανές ότι η διαδικασία αυτή έχει τη δυνατότητα να σου παρέχει το σύνολο όλων των μη ισομορφικών ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων οι οποίοι εγγυόνται τη μη συσχέτιση μεταξύ των εκτιμήσεων ειδικών παραγόντων σε ένα πολυωνυμικό μοντέλο. Στην περίπτωση όπου θελήσουμε να μειώσουμε το πλήθος των πιθανών στηλών που θα πρέπει να εξετάσουμε στην εφαρμογή του πρώτου βήματος της παραπάνω διαδικασίας θα πρέπει να απορρίψουμε όσο το δυνατόν περισσότερα στοιχεία από το $P(n)=n!$. Αυτό μπορεί να γίνει ελέγχοντας το πρώτο στοιχείο της στήλης να μην υπερβαίνει τη μέση τιμή $\bar{c}$. Όταν το n είναι άρτιος αριθμός τότε το πλήθος των υποψήφιων στηλών ισούται με το μισό της πραγματικής τιμής $n!$ καθώς κάποια στοιχεία του $P(n)$ θεωρούνται αντικατοπτρίσεις άλλων. Από την άλλη, όταν το n είναι περιττός αριθμός και πάλι κατορθώνουμε να μειώσουμε σημαντικά το πλήθος των πιθανών στηλών που θα πρέπει να εξετάσουμε, ωστόσο είναι σίγουρα μικρότερη η μείωση που θα πραγματοποιήσουμε καθώς η τιμή $\bar{c}$ μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να δημιουργήσουμε μια υποψήφια στήλη αλλά δεν μπορεί να συνδυαστεί με κάποιο άλλο στοιχείο του σχεδιασμού $P(n)$. Παρόλα αυτά ακόμα και με αυτή τη μείωση το πλήθος των υποψήφιων στηλών για τη δημιουργία του επιθυμητού σχεδιασμού με δύο στήλες μπορεί να αυξηθεί ραγδαία όσο αυξάνεται το n.

Ένα ακόμα ζήτημα το οποίο χρειάζεται να σχολιάσουμε στη συγκεκριμένη διαδικασία για την πιο γρήγορη εφαρμογή της είναι ο έλεγχος που απαιτείται να εφαρμοστεί στο 2ο βήμα σχετικά με το εάν ο σχεδιασμός μας είναι ισομορφικός. Να τονίσουμε στο σημείο αυτό ότι όταν θέλουμε να τσεκάρουμε εάν δύο σχεδιασμοί είναι ισομορφικοί θα πρέπει να παράγουμε όλους τους ισομορφικούς τύπους του πρώτου σχεδιασμού, δηλαδή ένα σύνολο από $n!\,m!\,2^m$ διατάξεις, και εν συνεχεία να τσεκάρουμε εάν υπάρχει ένας τύπος από τον πρώτο σχεδιασμό ο οποίος θα μπορεί να «ταιριάξει» με ένα σύνολο από το δεύτερο σχεδιασμό. Μπορούμε να αποφύγουμε το γινόμενο $n!$, το οποίο οφείλεται στο γεγονός ότι εναλλάσσουμε σειρές όταν κατασκευάζουμε ισομορφικές διατάξεις, κατασκευάζοντας μόνο $m!\,2^m$ διατάξεις από τον πρώτο σχεδιασμό και ταξινομώντας λεξικολογικά τις δοκιμές σε φθίνουσα σειρά με την προϋπόθεση ότι η δεύτερη διάταξη είναι ταξινομημένη ακριβώς με τον ίδιο τρόπο. Βέβαια, είναι γεγονός ότι, παρόλο που με αυτή την πράξη μειώνουμε σε πολύ σημαντικό βαθμό το χρόνο που χρειάζεται για να ελέγξουμε εάν δύο σχεδιασμοί είναι ισομορφικοί, παραμένει ακόμα απαιτητικό το 2ο βήμα του αλγορίθμου από άποψη χρόνου για να ολοκληρωθεί διότι αυτό εξαρτάται από τον αριθμό των διατάξεων που ανήκουν στο σύνολο $A(n, m+1)$.

Το μειονέκτημα της μεγάλης απαίτησης σε χρόνο της συγκεκριμένης διαδικασίας μπορεί να μειωθεί αποτελεσματικά εφαρμόζοντας ένα απλό κριτήριο με το οποίο θα μπορούμε να χωρίσουμε εύκολα τις διατάξεις του συνόλου $A(n, m+1)$ σε μερικές μη ισομορφικές τάξεις. Το συγκεκριμένο κριτήριο εφαρμόζεται σε οποιοδήποτε σχεδιασμό και καλείται design run vector (DRV). Το διάνυσμα αυτό είναι μεγέθους n και τα στοιχεία του $DRV_i, i = 1, 2, \dots, n$ υπολογίζονται με τη βοήθεια των τυποποιημένων τιμών x_{ij} των μεταβλητών του μοντέλου πρώτων παραγόντων βάσει του τύπου

$$DRV_i = \left|\prod_{j=1}^{k} x_{ij}\right|.$$

Είναι εύκολο να επαληθεύσουμε ότι, εάν υπολογίσουμε τα DRV_s δύο ισομορφικών σχεδιασμών θα πάρουμε το ίδιο στοιχείο, αλλά πιθανότατα σε διαφορετική θέση.

Κλείνοντας τη συγκεκριμένη ενότητα θα πρέπει να αναφέρουμε ότι, ο προτεινόμενος αυτός αλγόριθμος δουλεύει σωστά εάν το σύνολο $A(n, m+1)$ μπορεί να κατασκευαστεί σε ένα λογικό χρονικό περιθώριο. Η κατασκευή του συνόλου πραγματοποιείται επεκτείνοντας τις διατάξεις οι οποίες ανήκουν στο σύνολο $D(n, m)$ με στήλες από το σύνολο $C(n)$, όμως όταν το σύνολο

$D(n, m)$ περιέχει αρκετούς μη ισομορφικούς σχεδιασμούς και το σύνολο $C(n)$ περιέχει πολλές χιλιάδες υποψήφιες στήλες ο αλγόριθμος θα απαιτεί πολύ χρόνο και στη περίπτωση όπου το πλήθος των δοκιμών είναι μεγάλο καθίσταται πρακτικά ανέφικτος.

Η προτεινόμενη τεχνική κατασκευής μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον εντοπισμό στοιχείων του συνόλου $OLHD_2(n, k)$ για συγκεκριμένο πλήθος δοκιμών n. Οι σχεδιασμοί αυτοί όταν υπάρχουν εγγυώνται την ασυσχέτιστη εκτίμηση των επιδράσεων πρώτων παραγόντων μεταξύ τους και επιπλέον οι εκτιμήσεις αυτές είναι ασυσχέτιστες με τις εκτιμήσεις των επιδράσεων των τετραγώνων των παραγόντων. Εάν συμβολίσουμε με $C_2(n)$ το υποσύνολο του σχεδιασμού $P(n)$ το οποίο περιέχει τις στήλες του $P(n)$ που μας οδηγούν στην κατασκευή ενός Λατινικού υπερκύβου με n δοκιμές και $m = 2$ στήλες με την επιθυμητή ιδιότητα, τότε για να εφαρμόσουμε την παραπάνω διαδικασία χρειάζεται μόνον η ταυτοποίηση των στοιχείων του συνόλου $C_2(n)$. Το πλήθος των στηλών που ανήκουν στο σχεδιασμό $C_2(n)$ για $7 \leq n \leq 16$ παρουσιάζονται στον πρώτο πίνακα. Να σημειώσουμε βέβαια ότι δεν υπάρχει Λατινικός υπερκύβος για το σύνολο $OLHD_2(7,2)$.

ΠΙΝΑΚΑΣ 4

Πλήθος στηλών στο σχεδιασμό $C_2(n)$ για $7 \leq n \leq 16$

$\boldsymbol{n}$	7	8	9	11	12	13	15	16
$\lvert \boldsymbol{C_2(n)} \rvert$	0	10	13	47	296	838	64.439	318.768

ΠΙΝΑΚΑΣ 5

Πλήθος μη ισομορφικών ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων για $8 \leq n \leq 16$

	$\boldsymbol{m}$								
$\boldsymbol{n}$		2	3	4	5	6	7	8	9
	8	8(5)	4(3)	2 (1)	Δ/Υ				
	9	8(5)	3(1)	3 (1)	Δ/Υ				
	11	20(17)	1(1)	Δ/Υ					
	12	159(103)	Δ/Υ						
	13	304(223)	14(13)	Δ/Υ					

	15	15.498 (14028)	5586 (5093)	137 (127)	Δ/Υ				
	16	84.722 (76.088)	430.841 (380.914)	370.822 (322.574)	79.280 (62.152)	36.349 (12.716)	20.474 (1105)	1407 (84)	Δ/Υ

Δ/Υ: δεν υπάρχει

Στον δεύτερο πίνακα παρουσιάζουμε το πλήθος των μη ισομορφικών ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων που βρέθηκαν για $8 \leq n \leq 16$. Ο αριθμός που φαίνεται μέσα σε παρένθεση μας δηλώνει τον αριθμό των μη ισομορφικών τάξεων που βρέθηκαν εφαρμόζοντας το $SDRV$ στο σύνολο $A(n, m+1)$ το οποίο περιέχει όλους τους κατασκευασμένους σχεδιασμούς με $m+1$ στήλες. Υπενθυμίζουμε ότι η διάσπαση του συνολικού πλήθους των κατασκευασμένων σχεδιασμών σε μικρότερο και σε μη ισομορφικές τάξεις είναι το σημαντικότερο εφεύρημα για την γρήγορη υλοποίηση του δεύτερου βήματος του αλγορίθμου.

Η αναγνώριση του συνολικού πλήθους μη ισομορφικών ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων οι οποίοι μας παρέχουν τη βεβαιότητα ότι οι ανεξάρτητες μεταβλητές των επιδράσεων πρώτων παραγόντων είναι ορθογώνιοι μεταξύ τους καθώς και με τις ανεξάρτητες μεταβλητές που χρησιμοποιούνται για τις επιδράσεις τετραγώνων μας οδηγούν στην ταυτοποίηση εκείνων των σχεδιασμών όπου κι αυτοί μας εξασφαλίζουν την ορθογωνιότητα μεταξύ των ανεξάρτητων μεταβλητών των επιδράσεων πρώτων παραγόντων με τις ανεξάρτητες μεταβλητές των αλληλεπιδράσεων στο πολυωνυμικό μοντέλο και γι’ αυτό ορίζουμε τα στοιχεία του συνόλου ως $OLHD_3(n, m)$. Το μόνο που χρειάζεται είναι να ελέγξουμε εάν οι σχεδιασμοί του συνόλου $OLHD_2(n, m)$ ικανοποιούν την επιπλέον προυπόθεση για τις αλληλεπδράσεις καθώς $OLHD_3(n, m) \subseteq OLHD_2(n, m)$. Ο τρίτο πίνακας ο οποίος επισυνάπτεται παρακάτω μας δείχνει τον αριθμό των μη ισομορφικών ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων οι οποίοι ικανοποιούν τον επιπλέον αυτό περιορισμό για $8 \leq n \leq 16$.

ΠΙΝΑΚΑΣ 6

Πλήθος μη ισομορφικών ορθογώνιων Λατινικών υπερκύβων για $8 \leq n \leq 16$ με ορθογώνιες αλληλεπιδράσεις

	$\boldsymbol{k}$								
$\boldsymbol{n}$		2	3	4	5	6	7	8	9
	8	8	4	2	Δ/Υ				
	9	8	3	3	Δ/Υ				
	11	20	1						
	12	159	Δ/Υ						
	13	304	14	Δ/Υ					
	15	15.498	5493	137	Δ/Υ				
	16	84.722	430.067	379.546	79.280	36.349	20.474	1407	Δ/Υ

Δ/Υ: δεν υπάρχει

Ένα πολύ σημαντικό χαρακτηριστικό το οποίο προκύπτει από τη μελέτη των συγκεκριμένων περιπτώσεων είναι ότι οι σχεδιασμοί οι οποίοι ανήκουν στο σύνολο $OLHD_2(n,k)$ ανήκουν και στο σύνολο $OLHD_3(n,k)$. Οι μόνες περιπτώσεις όπου υπάρχουν Λατινικοί υπερκύβοι η χρήση των οποίων εξασφαλίζουν ότι οι εκτιμήσεις των επιδράσεων πρώτων παραγόντων είναι ασυσχέτιστες μεταξύ τους και με τις εκτιμήσεις των επιδράσεων των τετραγώνων, αλλά όχι με τις εκτιμήσεις των αλληλεπιδράσεων είναι για $n = 15$ δοκιμές και $m = 3$ παράγοντες ή για $n = 16$ δοκιμές και $m = 4$ παράγοντες.

Στο επόμενο κεφάλαιο λοιπόν θα πραγματοποιήσουμε μια στατιστική ανάλυση του παραδείγματος που παρουσιάσαμε στο δεύτερο κεφάλαιο της εργασίας μας χρησιμοποιώντας έναν από τους προτεινόμενους ορθογώνιους σχεδιασμούς για $n = 16$ και $m = 8$ και θα συγκρίνουμε τα αποτελέσματά μας με εκείνα που παρουσίασαν οι Li, Fang και Sudjianto στο βιβλίο τους το 2006.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

Εφαρμογή ορθογώνιου Λατινικού υπερκύβου στα computer experiments

Στο κεφάλαιο αυτό θα πραγματοποιήσουμε τη διενέργεια ενός computer experiment το οποίο περιγράψαμε και παραπάνω. Το μοντέλο της γεώτρησης έχει μελετηθεί με πολλές διαφορετικές προσεγγίσεις όπως του Worley to 1987 ο οποίος επέλεξε τέσσερις διαφορετικούς σχεδιασμούς μεγέθους δείγματος ίσο με 10 οι οποίοι είναι ένας σχεδιασμός Λατινικού υπερκύβου, ένας maximin Λατινικός υπερκύβος, ένας maximin σχεδιασμός και ένας τροποποιημένος maximin σχεδιασμός. Μια ακόμα προσέγγιση ήταν εκείνη του HO και Xu οι οποίοι χρησιμοποίησαν για τη μελέτη του μοντέλου έναν ομοιόμορφο σχεδιασμό, ενώ οι Steinberg και Lin χρησιμοποίησαν έναν τυχαίο Λατινικό υπερκύβο, έναν maximin και έναν σχεδόν ορθογώνιο για τη μελέτη τους. Εμείς θα πραγματοποιήσουμε την ανάλυση μας βασισμένοι σε ένα βέλτιστο σχεδιασμό μεγέθους δείγματος ίσο με 16 και πλήθος παραγόντων 8 ο οποίος προτάθηκε από τον Evangelaras το 2016. Για την ακρίβεια ο συγκεκριμένος μη ισομορφικός ορθογώνιος Λατινικός υπερκύβος θεωρείται βέλτιστος ως προς το maximin κριτήριο. Θα πραγματοποιήσουμε, επομένως τη στατιστική μας ανάλυση έτσι ώστε να αποφανθούμε σχετικά με το ποιες μεταβλητές φαίνεται να είναι στατιστικά σημαντικές για την περιγραφή του συγκεκριμένου μοντέλου, καθώς και ποιο είναι το στατιστικό μοντέλο πρόβλεψης το οποίο θα το περιγράφει. Στη συνέχεια θα συγκρίνουμε το μοντέλο το οποίο θα προκύψει από την ανάλυσή μας με εκείνο των Li, Fang και Sudjianto θέλοντας να δούμε ποιο προσφέρει καλύτερα αποτελέσματα.

Με *D* συμβολίζουμε τον ορθογώνιο Λατινικό υπερκύβο που θα χρησιμοποιήσουμε για την ανάλυσή μας (Evangelaras 2016) ο οποίος παρουσιάζεται αναλυτικά με τα επίπεδα που λαμβάνει ο κάθε παράγοντας ακολούθως.

Σχεδιασμός

	D_1	D_2	D_3	D_4	D_5	D_6	D_7	D_8
1	1	1	4	4	6	6	7	7
2	2	15	3	14	5	12	8	9
3	3	12	16	10	9	2	6	4
4	4	6	15	8	10	16	5	14
5	5	14	7	1	15	8	13	11
6	6	4	8	15	16	10	14	5
7	7	7	11	11	4	4	16	16
8	8	9	12	5	3	14	15	2
9	9	8	5	12	14	3	2	15
10	10	10	6	6	13	13	1	1
11	11	13	9	2	1	7	3	12
12	12	3	10	16	2	9	4	6
13	13	11	2	9	7	1	12	3
14	14	5	1	7	8	15	11	13
15	15	2	14	3	12	5	9	8
16	16	16	13	13	11	11	10	10

Στο τέλος του δευτέρου κεφαλαίου περιγράψαμε σε έναν πίνακα την ερμηνεία των μεταβλητών μας, τη μονάδα μέτρησής τους αλλά και το εύρος τιμών στο οποίο λαμβάνουν τιμές. Με τη βοήθεια λοιπόν αυτών των στοιχείων δημιουργήσαμε τις 16 τιμές που παίρνει η κάθε ανεξάρτητη μεταβλητή. Για την παραγωγή των δεδομένων χρησιμοποιήσαμε το ακόλουθο βήμα

$$w_i = \frac{max - min}{15}$$

δεδομένου ότι θέλουμε τα στοιχεία μας να είναι ομοιόμορφα κατανεμημένα στο χώρο πειραματισμού. Έτσι ξεκινώντας από τη χαμηλότερη τιμή που λαμβάνει η εκάστοτε ανεξάρτητη μεταβλητή και αυξάνοντας κάθε φορά με το αντίστοιχο βήμα που υπολογίστηκε από την παραπάνω σχέση παρήγαμε τα δεδομένα μας.

Στη συνέχεια, λοιπόν, δημιουργήσαμε έναν νέο πίνακα, τον L, στον οποίο αντιστοιχήσαμε τις πραγματικές τιμές του πειράματος που δημιουργήσαμε με τη διαδικασία που περιγράψαμε με τα επίπεδα του προτεινόμενου βέλτιστου σχεδιασμού D. Πιο συγκεκριμένα, για να γίνει πιο εύκολα αντιληπτή η διαδικασία, ας επισημάνουμε ότι η τιμή 1 στον σχεδιασμό D αντιστοιχεί στη χαμηλότερη πραγματική τιμή που μπορεί να λάβει η εκάστοτε ανεξάρτητη μεταβλητή, η τιμή 2 στην αμέσως επόμενη τιμή ενώ η τιμή 16 αντιστοιχεί στη μεγαλύτερη τιμή. Για να συμπληρώσουμε λοιπόν τα στοιχεία του πίνακα L, ο οποίος αποτελείται από οκτώ στήλες, τις οκτώ μεταβλητές μας και 16 γραμμές, τις δοκιμές μας, κάναμε χρήση της επόμενης σχέσης

$$l_i(j) = min + w_i * (j-1), \qquad i = 1,..,8, \qquad j = 1,\dots,16$$

ενώ με τον τύπο που παρουσιάσαμε στο δεύτερο κεφάλαιο, ο οποίος μοντελοποιεί τη συγκεκριμένη διαδικασία, υπολογίσαμε την τιμή της μεταβλητής απόκρισης για την κάθε θεραπεία, λαμβάνοντας τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στον επόμενο πίνακα.

	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5	L_6	L_7	L_8	Y
1	0,050	100,000	73576	73,680	1030	740	1344,000	10731	18,16693
2	0,057	46673,333	70074	108,947	1022	788	1381,333	11023	18,80729
3	0,063	36693,333	115600	94,840	1054	708	1306,667	10293	34,26953
4	0,070	16733,333	112098	87,787	1062	820	1269,333	11753	34,38315
5	0,077	43346,667	84082	63,100	1102	756	1568,000	11315	45,90047
6	0,083	10080,000	87584	112,473	1110	772	1605,333	10439	47,83847
7	0,090	20060,000	98090	98,367	1014	724	1680,000	12045	52,71728
8	0,097	26713,333	101592	77,207	1006	804	1642,667	10001	35,93743
9	0,103	23386,667	77078	101,893	1094	716	1157,333	11899	129,5077
10	0,110	30040,000	80580	80,733	1086	796	1120,000	9855	96,20516
11	0,117	40020,000	91086	66,627	990	748	1194,667	11461	98,0483
12	0,123	6753,333	94588	116,000	998	764	1232,000	10585	95,48661
13	0,130	33366,667	66572	91,313	1038	700	1530,667	10147	118,0593
14	0,137	13406,667	63070	84,260	1046	812	1493,333	11607	105,6743
15	0,143	3426,667	108596	70,153	1078	732	1418,667	10877	169,3004
16	0,150	50000,000	105094	105,420	1070	780	1456,000	11169	155,6256

Δεδομένου ότι στην πολλαπλή γραμμική παλινδρόμηση πρέπει να δίνουμε ιδιαίτερη προσοχή ώστε να μην υπάρχει πολυσυγγραμικότητα, δηλαδή να μην υπάρχει γραμμική συσχέτιση μεταξύ των ανεξάρτητων μεταβλητών, συνηθίζεται να κεντροποιούνται οι παρατηρήσεις με σκοπό το εσωτερικό γινόμενο οποιονδήποτε δύο μεταβλητών να είναι μηδενικό και οι εκτιμήσεις των επιδράσεων των παραγόντων ασυσχέτιστες. Η κεντροποίηση γίνεται αφαιρώντας τον μέσο των παρατηρήσεων κάθε μεταβλητής από κάθε παρατήρησή της. Για να δημιουργήσουμε, επομένως, τον τελικό πίνακα X με τον οποίο θα πραγματοποιήσουμε και την ανάλυσή μας χρησιμοποιήσαμε την παρακάτω σχέση

$$X_{ij} = \frac{l_{ij} - \bar{l}}{w_i}$$

για να κεντροποιήσουμε τα δεδομένα μας. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν για τον τελικό πίνακα X παρουσιάζονται στον επόμενο πίνακα.

	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	Y
1	-7,5	-7,5	-4,5	-4,5	-2,5	-2,5	-1,5	-1,5	18,1669
2	-6,5	6,5	-5,5	5,5	-3,5	3,5	-0,5	0,5	18,8073
3	-5,5	3,5	7,5	1,5	0,5	-6,5	-2,5	-4,5	34,2695
4	-4,5	-2,5	6,5	-0,5	1,5	7,5	-3,5	5,5	34,3831
5	-3,5	5,5	-1,5	-7,5	6,5	-0,5	4,5	2,5	45,9005
6	-2,5	-4,5	-0,5	6,5	7,5	1,5	5,5	-3,5	47,8385
7	-1,5	-1,5	2,5	2,5	-4,5	-4,5	7,5	7,5	52,7173
8	-0,5	0,5	3,5	-3,5	-5,5	5,5	6,5	-6,5	35,9374
9	0,5	-0,5	-3,5	3,5	5,5	-5,5	-6,5	6,5	129,5077
10	1,5	1,5	-2,5	-2,5	4,5	4,5	-7,5	-7,5	96,2052
11	2,5	4,5	0,5	-6,5	-7,5	-1,5	-5,5	3,5	98,0483
12	3,5	-5,5	1,5	7,5	-6,5	0,5	-4,5	-2,5	95,4866
13	4,5	2,5	-6,5	0,5	-1,5	-7,5	3,5	-5,5	118,0593
14	5,5	-3,5	-7,5	-1,5	-0,5	6,5	2,5	4,5	105,6743
15	6,5	-6,5	5,5	-5,5	3,5	-3,5	0,5	-0,5	169,3004
16	7,5	7,5	4,5	4,5	2,5	2,5	1,5	1,5	155,6256

Έχοντας κεντροποιήσει, λοιπόν, τα επίπεδα των παραγόντων και έχοντας λάβει τις αντίστοιχες τιμές για τη μεταβλητή απόκρισης θα πραγματοποιήσουμε μια πολλαπλή γραμμική παλινδρόμηση, κάνοντας χρήση του στατιστικού πακέτου SPSS, στην οποία εκτός από τις κύριες επιδράσεις, οκτώ στο σύνολο, θα μελετήσουμε τόσο τις οκτώ επιδράσεις των τετραγώνων των παραγόντων όσο και τις εικοσιοκτώ αλληλεπιδράσεις τους, βάσει του ακόλουθου πολυωνυμικού μοντέλου

$$\ln(y) = \beta_0 + \sum_{j=1}^{8} \beta_j x_j + \sum_{j=1}^{8} \beta_{jj} x_j^2 + \sum_{j=1}^{7} \sum_{m=j+1}^{8} \beta_{jm} x_j x_m + \varepsilon$$

συνεπώς, για την ανάλυσή μας θα χρησιμοποιήσουμε συνολικά 44 ανεξάρτητες μεταβλητές και 16 δοκιμές για την κάθε μία, καταλήγοντας ο πίνακας των δεδομένων μας να είναι ένας πίνακας διαστάσεων 16*45.

Για να πραγματοποιήσουμε την ανάλυσή μας βασιστήκαμε στη μέθοδο βηματικής παλινδρόμησης. Η λογική της συγκεκριμένης μεθόδου έχει ως εξής. Αρχικά ελέγχουμε όλο το πλήθος των ανεξάρτητων μεταβλητών με σκοπό να ανιχνεύσουμε εκείνη τη μεταβλητή που θα έχει το μεγαλύτερο συντελεστή συσχέτισης με την εξαρτημένη μεταβλητή. Στη συνέχεια, λοιπόν, έχοντας επιλέξει την πρώτη μας μεταβλητή εξετάζουμε το ενδεχόμενο να υπάρχει ένα μοντέλο κατάλληλο για την περιγραφή του προβλήματος το οποίο θα διαθέτει δύο ανεξάρτητες μεταβλητές, η μια φυσικά θα είναι εκείνη που επιλέξαμε αρχικά κ.ο.κ. Διεξήγαμε την ανάλυση μας και παρατηρήσαμε ότι, η μεταβλητή που φαίνεται να έχει το μεγαλύτερο συντελεστή συσχέτισης είναι η X_1, η οποία μας πληροφορεί σχετικά με την ακτίνα της γεώτρησης. Η βηματική παλινδρόμηση ολοκληρώθηκε έπειτα από δέκα βήματα προτείνοντάς μας εννιά διαφορετικά μοντέλα για τη μελέτη του συγκεκριμένου φαινομένου, τα οποία βέβαια διαφέρουν ως προς το πόσο καλά προσαρμόζονται τα δεδομένα στο εκάστοτε μοντέλο. Η αξιολόγηση αυτή των μοντέλων βασίζεται σε κάποιες κατάλληλες ποσότητες όπως είναι ο συντελεστής προσδιορισμού και το τυπικό σφάλμα. Βάσει των συγκεκριμένων ποσοτήτων, λοιπόν, αποφασίσαμε να εξετάσουμε εκτενέστερα τα τρία τελευταία μοντέλα που προτείνονται από τη βηματική παλινδρόμηση καθώς φαίνεται να έχουν σχεδόν το ίδιο καλές αποδόσεις στην προσαρμογή των δεδομένων. Στους επόμενους δύο πίνακες παρουσιάζονται πιο αναλυτικά τα αποτελέσματα σχετικά με τα μοντέλα που προέκυψαν από τη βηματική παλινδρόμηση καθώς και η αξιολόγηση αυτών μέσω κάποιων σημαντικών στατιστικών ποσοτήτων.

Μοντέλο	Μεταβλητή απόκρισης	Επεξηγηματικές μεταβλητές
1ο	y_1	$X_1, X_5, X_6, X_7, X_1^2, X_8$
2ο	y_2	$X_1, X_5, X_6, X_7, X_1^2, X_8, X_5X_6$
3ο	y_3	$X_1, X_5, X_6, X_7, X_1^2, X_8, X_5X_6, X_3$

Μοντέλο	R	R^2	R_{adj}^2	Std. Error of the Estimate
1ο	1,000	0,999	0,999	0,024913764
2ο	1,000	1,000	0,999	0,018713143
3ο	1,000	1,000	1,000	0,012708249

Παρατηρούμε, λοιπόν, όπως ήταν αναμενόμενο, πως το κάθε μοντέλο διαφέρει από το άλλο κατά μια μεταβλητή. Κάτι τέτοιο το περιμέναμε λόγω της λογικής στην οποία βασίζεται η διαδικασία της βηματικής παλινδρόμησης. Βλέπουμε, επομένως, ότι στο πρώτο μοντέλο οι ανεξάρτητες μεταβλητές οι οποίες εισήχθησαν είναι οι $X_1, X_5, X_6, X_7, X_1^2$ και X_8, στο δεύτερο μοντέλο προστέθηκε και η αλληλεπίδραση X_5X_6 ενώ στο τρίτο εκτός από την αλληλεπίδραση έχουμε και την εισαγωγή της κύριας επίδρασης της X_3.

Από το δεύτερο πίνακα πληροφορούμαστε σχετικά με τη σημαντικότητα του κάθε μοντέλου από όπου παρατηρούμε ότι οι τιμές για τις διάφορες στατιστικές ποσότητες είναι σχετικά κοντά. Πιο συγκεκριμένα, παρατηρούμε ότι και τα τρία μοντέλα μας δίνουν πολύ υψηλό συντελεστή προσδιορισμού για την ακρίβεια για τα δύο τελευταία το R^2 ισούται με τη μονάδα, ενώ για το πρώτο είναι σχεδόν ίσο με τη μονάδα, αφού υπολογίζεται ίσο με 0,999. Για να κατανοήσουμε τη σπουδαιότητα αυτών των αριθμών ας υπενθυμίσουμε ότι ο συντελεστής προσδιορισμού μας δείχνει πόσο καλή είναι η προσαρμογή της γραμμικής παλινδρόμησης στα δεδομένα μας. Δηλαδή εκφράζει το ποσοστό της διακύμανσης της εξαρτημένης μεταβλητής το οποίο ερμηνεύεται από τη διακύμανση των τιμών των ανεξάρτητων μεταβλητών που είναι εισηγμένες στο κάθε μοντέλο. Επομένως, αντιλαμβανόμαστε ότι, το δεύτερο και τρίτο μοντέλο που προκύπτει από τη βηματική παλινδρόμηση προσαρμόζονται τέλεια στα δεδομένα μας και ερμηνεύουν το 100% της διακύμανσης της εξαρτημένης μας μεταβλητής από τις ανεξάρτητες μεταβλητές που υπάρχουν στα δύο αυτά μοντέλα. Ενώ σχεδόν τέλεια είναι και η προσαρμογή των δεδομένων για το πρώτο μοντέλο, αφού το 99,90% της διακύμανσης της μεταβλητής απόκρισης ερμηνεύεται από τις έξι ανεξάρτητες μεταβλητές που υπάρχουν στο μοντέλο αυτό.

Για να ενισχύσουμε την απόφασή μας σχετικά με την καλή προσαρμογή των μοντέλων μας μπορούμε να προσέξουμε επίσης και την τιμή της τυπικής απόκλισης της εκτίμησης που λαμβάνουν τα τρία μοντέλα μας. Οι τιμές αυτές βρίσκονται στην τελευταία στήλη του δεύτερου πίνακα και μας δείχνουν τη μέση απόκλιση μεταξύ της πραγματική τιμής και τη εκτιμώμενης τιμής της μεταβλητής απόκρισης. Όταν το τυπικό σφάλμα της εκτίμησης είναι μικρό σημαίνει ότι οι παρατηρούμενες και οι εκτιμώμενες τιμές δεν διαφέρουν πολύ και συνεπώς η ευθεία παλινδρόμησης που προκύπτει μας δίνει μια καλή περιγραφή της σχέσης που υπάρχει μεταξύ της εξαρτημένης μας μεταβλητής και των ανεξάρτητων μεταβλητών. Παρατηρούμε, λοιπόν, ότι παρά το γεγονός ότι αρχικά είχαμε εισάγει 44 ανεξάρτητες μεταβλητές για την περιγραφή του μοντέλου μας, λαμβάνουμε τρία πολύ καλά στατιστικά μοντέλα με σχεδόν τέλεια προσαρμογή στα δεδομένα μας τα οποία χρειάζονται μονάχα 5,6 ή 7 από τις 44 ανεξάρτητες μεταβλητές για να μας περιγράψουν ικανοποιητικά το πρόβλημά μας.

Αφού λοιπόν αξιολογήσαμε τα μοντέλα μας και καταλήξαμε στο συμπέρασμα ότι είναι στατιστικά σημαντικά με σχεδόν άψογη προσαρμογή θα παρουσιάσουμε ακολούθως τη μορφή του κάθε μοντέλου όπως προκύπτει από το στατιστικό πακέτο SPSS

1ο Μοντέλο

$$\ln(y) = 4{,}253 + 0{,}141X_1 + 0{,}030X_5 - 0{,}027X_6 - 0{,}025X_7 - 0{,}005X_1^2 + 0{,}014X_8$$

2ο Μοντέλο

$$\ln(y) = 4{,}253 + 0{,}141X_1 + 0{,}030X_5 - 0{,}027X_6 - 0{,}025X_7 - 0{,}005X_1^2 + 0{,}014X_8 + 0{,}001X_5X_6$$

3ο Μοντέλο

$$\begin{aligned}\ln(y) = {} & 4{,}253 + 0{,}141X_1 + 0{,}030X_5 - 0{,}027X_6 - 0{,}025X_7 - 0{,}005X_1^2 + 0{,}014X_8 + 0{,}001X_5X_6 \\ & + 0{,}002X_3.\end{aligned}$$

Ωστόσο δεδομένου ότι, οι μεταβλητές X_i είναι κωδικοποιημένες βάσει του τύπου που παρουσιάσαμε αρχικά, τα τελικά στατιστικά μοντέλα που προκύπτουν με αποκωδικοποίηση αυτών μέσω της σχέσης

$$L_i = \frac{X_i - \overline{X_i}}{w_i}$$

είναι τα ακόλουθα

1ο Μοντέλο

$$\begin{aligned}\ln(y) = {} & 4{,}253 + 21{,}1489425(r_w - 0{,}1) + 0{,}00375(H_u - 1050) - 0{,}003375(H_l - 760) \\ & - 0{,}000669643(L - 1400) - 112{,}4887508(r_w - 0{,}1)^2 \\ & + 0{,}0000958904(K_w - 10950)\end{aligned}$$

2ο Μοντέλο

$$\begin{aligned}\ln(y) = {} & 4{,}253 + 21{,}1489425(r_w - 0{,}1) + 0{,}00375(H_u - 1050) - 0{,}003375(H_l - 760) \\ & - 0{,}000669643(L - 1400) - 112{,}4887508(r_w - 0{,}1)^2 \\ & + 0{,}0000958904(K_w - 10950) + 0{,}00015625(H_u - 1050)(H_l - 760)\end{aligned}$$

3ο Μοντέλο

$$\begin{aligned}\ln(y) = {} & 4{,}253 + 21{,}1489425(r_w - 0{,}1) + 0{,}00375(H_u - 1050) - 0{,}003375(H_l - 760) \\ & - 0{,}000669643(L - 1400) - 112{,}4887508(r_w - 0{,}1)^2 \\ & + 0{,}0000958904(K_w - 10950) + 0{,}00015625(H_u - 1050)(H_l - 760) \\ & + 0{,}00000571102(T_u - 89335).\end{aligned}$$

Θέλοντας λοιπόν να σιγουρευτούμε για την ικανοποιητική απόδοση του προσεγγιστικού μας μοντέλου σε μη δοκιμασμένα πειραματικά στοιχεία καθώς και για τη γενική του απόδοση θα βασιστούμε στη στατιστική ποσότητα του μέσου τετραγωνικού σφάλματος.

Γενικά η διαδικασία υπολογισμού του μέσου τετραγωνικού σφάλματος έχει ως ακολούθως. Επιλέγουμε ένα τυχαίο δείγμα μεγέθους N, $\boldsymbol{x}_m, i = 1, \dots, N$ στην πειραματική περιοχή και υπολογίζουμε την τιμή που μας δίνουν για τη μεταβλητή απόκρισης. Στη συνέχεια υπολογίζουμε το μέσο τετραγωνικό σφάλμα μέσω του τύπου

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^{N} \left(y(x_m) - \hat{y}(x_m) \right)^2$$

σύμφωνα με το οποίο, όσο μικρότερη είναι η τιμή που λαμβάνει τόσο καλύτερο κρίνεται το προσεγγιστικό μοντέλο.

Για να υπολογίσουμε, λοιπόν, τη συγκεκριμένη ποσότητα δημιουργήσαμε ένα νέο σετ ομοιόμορφων παρατηρήσεων πλήθους ίσο με 200 με τη βοήθεια του στατιστικού πακέτου Minitab. Στη συνέχεια για το καινούριο σετ δεδομένων υπολογίσαμε τη πραγματική τιμή της εξαρτημένης μας μεταβλητής για τη κάθε δοκιμή καθώς και τις εκτιμώμενες τιμές που προκύπτουν τόσο από τα τρία προσεγγιστικά μοντέλα που παρουσιάσαμε παραπάνω όσο και από το προτεινόμενο προσεγγιστικό μοντέλο των Li, Fang και Sudjianto που παρουσίασαν στο βιβλίο τους Design and Modeling for Computer experiments το 2006. Στη συνέχεια βάσει του παραπάνω τύπου υπολογίσαμε το μέσο τετραγωνικό σφάλμα για το κάθε μοντέλο ενώ τα αποτελέσματα στα οποία καταλήξαμε παρουσιάζονται στον επόμενο πίνακα.

Περίπτωση	***Μοντέλα***	***MSE***
1η	ln(y)	0,00080072
2η	ln(y)	0,00047251
3η	ln(y)	0,00051250
Li, Fang, Sudjianto	ln(y)*	**0,00003509**

$\ln(y)^*$ το προσεγγιστικό μοντέλο των Li, Fang και Sudjianto

Συνοψίζοντας, λοιπόν, όπως παρουσιάσαμε και σε προηγούμενο κεφάλαιο τα βήματα για τη διεξαγωγή των computer experiments έχουν ως εξής. Ένα από τα σημαντικότερα βήματα είναι η επιλογή των παραγόντων που θα χρησιμοποιηθούν στην ανάλυση του πειράματος, δεδομένου του μεγάλου πλήθους παραγόντων που ανήκουν στην πειραματική περιοχή. Με σκοπό, λοιπόν, να «απομακρύνουμε» τους παράγοντες που φαίνεται να μην είναι στατιστικά σημαντικοί για την ερμηνεία της μεταβλητής απόκρισης πραγματοποιήσαμε μια πολλαπλή γραμμική παλινδρόμηση με τη μέθοδο της βηματικής παλινδρόμησης (stepwise method) ελέγχοντας τις κύριες επιδράσεις των παραγόντων, τις τετραγωνικές τους επιδράσεις άλλα και τις αλληλεπιδράσεις τους.

Στη συνέχεια θέλοντας να καλύψουμε με τον καλύτερο δυνατό τρόπο τον πολύπλοκο πειραματικό χώρο του αρχικού μας μοντέλου επιλέξαμε να βασίσουμε την ανάλυσή μας σε έναν ορθογώνιο σχεδιασμό Λατινικού υπερκύβου μεγέθους δείγματος ίσο με δεκαέξι και με οκτώ παράγοντες. Η αιτία της επιλογής του συγκεκριμένου σχεδιασμού ήταν ότι το πλήθος των δοκιμών του είναι σχετικά μικρό, επομένως εξοικονομούμε χρόνο και κόστος για τη διενέργεια του πειράματός μας, καθώς επίσης μας προσφέρει ασυσχέτιστες εκτιμήσεις των επιδράσεων των παραγόντων λόγω της ορθογωνιότητάς του.

Για να κατασκευάσουμε, λοιπόν, το προσεγγιστικό μας μοντέλο χρησιμοποιήσαμε ως τεχνική μοντελοποίησης του πραγματικού μοντέλου το πολυωνυμικό, έτσι ώστε να είμαστε σε θέση να εκτιμήσουμε τις παραμέτρους του μοντέλου με το οποίο θα συνεχίσουμε τη στατιστική μας ανάλυση. Έχοντας καταλήξει σε τρία διαφορετικά προσεγγιστικά μοντέλα με τη μέθοδο της βηματικής παλινδρόμησης και δεδομένου ότι πρέπει να επιλέξουμε το καλύτερο εξ αυτών παρήγαμε 200 νέα πειραματικά σημεία βάσει των οποίων υπολογίσαμε το μέσο τετραγωνικό σφάλμα και επιλέξαμε ως προσεγγιστικό μοντέλου εκείνο που έλαβε την μικρότερη τιμή.

Παρατηρούμε, λοιπόν, ότι συγκρίνοντας και τα τρία προσεγγιστικά μοντέλα μας με εκείνο των Li, Fang και Sudjianto το μέσο τετραγωνικό σφάλμα του δικού τους μοντέλου υπολογίζεται πάντοτε μικρότερο από το αντίστοιχο δικό μας. Επομένως, με μια πρώτη ματιά καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι το προσεγγιστικό μοντέλο στο οποίο καταλήξανε οι Li, Fang και Sudjianto φαίνεται να είναι καλύτερο και από τα τρία δικά μας προσεγγιστικά μοντέλα.

Ωστόσο θα πρέπει να τονίσουμε ότι, η μελέτη που πραγματοποιήθηκε από τους Li, Fang και Sudjianto είναι σαφώς πολυπλοκότερη, καθώς παρατηρούμε να υπάρχουν και λογάριθμοι κάποιων ανεξάρτητων μεταβλητών στο μοντέλο τους σε σχέση με τη δική μας στην οποία εισήγαμε τις κύριες επιδράσεις των μεταβλητών, τις τετραγωνικές τους επιδράσεις και τις αλληλεπιδράσεις. Επιπλέον, θα πρέπει να επισημάνουμε το γεγονός ότι, ο σχεδιασμός στον οποίο βασίστηκε η ανάλυσή τους δεν είναι λατινικός υπερκύβος (με τον τρόπο που ορίστηκε στην παρούσα εργασία) καθώς παρατηρούμε τα επίπεδα των μεταβλητών τους να εμφανίζονται περισσότερες από μία φορές σε κάθε στήλη, και πιθανόν δεν είναι και ορθογώνιος Αντιθέτως, στη στατιστική ανάλυση που πραγματοποιήσαμε εμείς επιλέξαμε να βασιστούμε σε έναν ορθογώνιο Λατινικό υπερκύβο, έτσι ώστε να διασφαλίσουμε τόσο την ασυσχέτιστη εκτίμηση των κύριων επιδράσεων όσο και για το λόγο ότι οι ορθογώνιοι σχεδιασμοί θεωρούνται κατάλληλοι για περιπτώσεις όπου εξετάζεται ένας μεγάλος αριθμός παραγόντων από τους οποίους περιμένουμε μονάχα ένα μικρό υποσύνολο να έχει σημαντική επίδραση στην εξαρτημένη μεταβλητή. Επιπρόσθετα αξιοσημείωτο είναι και το μέγεθος του δείγματος που χρησιμοποιήθηκε στην εκάστοτε ανάλυση. Οι Li, Fang και Sudjianto για τη στατιστική τους ανάλυση χρησιμοποίησαν 32 δοκιμές, ενώ εμείς πραγματοποιήσαμε την ανάλυση σε μέγεθος δείγματος ίσο με 16, χρησιμοποιήσαμε δηλαδή μονάχα τις μισές παρατηρήσεις λαμβάνοντας αρκετά ικανοποιητικά αποτελέσματα τόσο για την προσαρμογή των δεδομένων μας στο μοντέλο όσο και για το ποιες μεταβλητές φαίνονται να επηρεάζουν στατιστικά σημαντικά τη μεταβλητή απόκρισης. Λαμβάνοντας, λοιπόν υπόψιν τα παραπάνω θα μπορούσαμε να πούμε ότι τα προσεγγιστικά μοντέλα στα οποία καταλήξαμε φαίνεται να ερμηνεύουν σε αρκετά ικανοποιητικό βαθμό το αρχικό πολύπλοκο μοντέλο επιλέγοντας από τα τρία προτεινόμενα προσεγγιστικά μοντέλα το δεύτερο, καθώς είναι αυτό που υπολογίζεται με το μικρότερο μέσο τετραγωνικό σφάλμα.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Bursztyn, D. and Steinberg, D. M. (2006). Comparison of designs for computer experiments, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **136**, 1103-1119

Butler, N. A. (2001). Optimal and orthogonal Latin hypercubes designs for computer experiments, *Biometrica*, **88**, 847-857

Evangelaras, H. (2016). Enumeration and Evaluation of Small Orthogonal Latin Hypercubes Designs for Polynomial Regression Models, *Quality and Reliability Engineering International*, to appear.

Fang, K. T., Li, R. and Sudjianto, A. (2006). Design and Modeling for Computer Experiments, in *Computer Science and Data Analysis Series*, Edited by Taylor & Francis Group, London

Fasheng, S., Liu, M. Q. and Lin, D. K. J. (2009). Construction of orthogonal Latin hypercubes designs, *Biometrica*, **96**, 971-974

Fasheng, S., Liu, M. Q. and Lin, D. K. J. (2010). Construction of orthogonal Latin hypercubes designs with flexible run sizes, *Journal of Statistical Planning and Inference* **140**, 3236-3242

Gelder, L. V., Das, P., Janssen, H. and Roels, S. (2014). Comparative study of metamodeling techniques in building energy simulation: Guidelines for practitioners, *Simulation Modelling Practice and Theory*, **49**, 245-257

Jack, P.C., Kleijnen, (2015). *Design and Analysis of Simulation Experiments*, Spinger

Jin, R., Chen, W. and Simpson, T. W. (2001). Comparative studies of metamodeling techniques under multiple modelling criteria, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **23**, 1-13

Koehler, J. R. and Owen, A. B. (1996). Computer Experiment, *Design and Analysis of Experiments*, **13**, 261-308

Lin, C. D. (2004). *New development in designs for computer experiments and physical experiments*

Lin, C. D., Bingham, D., Sitter, R. R. and Tang B. (2010). A new and flexible method for constructing designs for computer experiments, *The Annals of Statistics*, **3**, 1460-1477

Nik, M. A., Fayazbakhsh, K., Pasini, D. and Lessard, L. (2014). A comparative study for metamodeling methods for the design optimization of variable stiffness composites, *Composite Structures*, **107**, 494-501

Prescott, P. (2009). Orthogonal-column Latin hypercubes designs with small samples, *Computational Statistics and Data Analysis*, **53**, 1191-1200

Ranjan, P. and Spencer, N. (2014). Space-filling Latin hypercube designs based on randomization restrictions in factorial experiments, *Statistics & Probability Letters*, **94**, 239-247

Roshan, V. J. and Hung, Y. (2008). Orthogonal-maximin Latin hypercubes designs, *Statistica Sinica*, **18**, 171-186

Runze, L., D. K. J. Lin and Chen, Y. (2004). Uniform design: design, analysis and applications, *International Journal of Materials and Product Technology*, **20**, 16802-2111

Steinberg, D. M. and Lin, D. K. J. (2006). A construction method for orthogonal Latin hypercubes designs, *Biometrica*, **93**, 279-288

Steinberg, D. M. and Lin. D. (2015). Construction of Orthogonal Nearly Latin Hypercubes, *Quality and Reliability Engineering International*, **31**, 1397-1406

Timothy, W. Simpson, Dennis K. J. Lin and Wei Chen, (2001). *Sampling Strategies for Computer Experiments: Design and Analysis, International Journal of Reliability and Applications*, **2**, 209-240

Victoria, C. P., Kwok-Leung Tsui, Russell R. Barton and Janet K. Allen, (2003). A review of design and modelling in computer experiments, *Statistics in Industry*, **22,** 231-261

Ye, K. Q. (1997). Orthogonal Column Latin Hypercubes and Their Application in Computer Experiments, *Journal of the American Statistical Association*, **93**, 1430-1439