



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών
Τομέας Ρευστών
Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών
Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής
& Βελτιστοποίησης

Σχεδιασμός Πειραμάτων και Εξωτερικά Μεταπρότυπα για την
Υποβοήθηση της Διαδικασίας Βελτιστοποίησης με Εξελικτικούς
Αλγορίθμους

Διπλωματική Εργασία

Καρούλης Δημήτριος

Επιβλέπων: Κυριάκος Χ. Γιαννάκογλου, Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, Αύγουστος 2014

Ευχαριστίες

Ολοκληρώνοντας αυτή τη διπλωματική εργασία αισθάνομαι την ανάγκη να εκφράσω τις ευχαριστίες μου σε ορισμένα άτομα, των οποίων η επιρροή τους ήταν βασικής σημασίας για την εκπόνησή της. Αρχικά, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή, κύριο Κυριάκο Χ. Γιαννάκογλου, ο οποίος μου έδωσε την ευκαιρία να ασχοληθώ με ενδιαφέροντα και καινοτόμα επιστημονικά θέματα. Ο χρόνος που αφιέρωσε από την στιγμή διατύπωσης του θέματος μέχρι και το τέλος των διορθώσεων του κειμένου της είχε καθοριστική σημασία για το αποτέλεσμα.

Πρέπει, επιπλέον, να ευχαριστήσω όλα τα μέλη της ΜΠΥΡ&Β του Εργαστηρίου Θερμικών Στροβιλομηχανών, τα οποία με βοήθησαν καθ' όλη την διάρκεια πραγματοποίησης της διπλωματικής εργασίας. Συγκεκριμένα, θα ήθελα να ευχαριστήσω την Δρ. Βαρβάρα Ασουτή, η οποία με βοήθησε με τις γνώσεις της να ολοκληρώσω την διπλωματική εργασία. Επιπλέον, την ευχαριστώ για τον πολύτιμο χρόνο που διέθεσε, τις συμβουλές καθώς και την ώθηση που μου έδωσε στις αρχές της εργασίας. Οι υποψήφιοι διδάκτορες Κωνσταντίνος Τσιάκας, Κωνσταντίνος Σαμούχος, Χρήστος Καμπέλος και ο διδάκτορας Ξενοφώντας Τρομπούκης βρίσκονταν πάντα δίπλα μου, πρόθυμοι να βοηθήσουν σε οποιοδήποτε θέμα μπορούσαν, παρά το ιδιαίτερα βεβαρημένο ημερήσιο πρόγραμμά τους. Θα ήταν παράλειψη να μην ευχαριστήσω τους υποψήφιους διδάκτορες Γιάννη Καββαδία, Χρήστο Βεζύρης και τον διδάκτορα Βαγγέλη Παπουτσή-Κιαχαγιά για τις πολύτιμες συμβουλές, ιδέες για την διπλωματική εργασία αλλά και για την ευχάριστη συντροφιά τους. Οι συμφοιτητές μου Μάριος Καψής, Χάρης Βαλλιάνος και Ζέρβας Νίκος με υποστήριξαν και μου παρείχαν παρέα καθ' όλη την διάρκεια όχι μόνο της διπλωματικής εργασίας αλλά και των πέντε χρόνων της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών.

Η ολοκλήρωση της διπλωματικής μου εργασίας αλλά και το τέλος της φοίτησής μου στην Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών είναι μία αφορμή για να ευχαριστήσω την οικογένεια μου αλλά και τα κοντινά μου πρόσωπα. Συγκεκριμένα, ευχαριστώ την μητέρα μου Αικατερίνη, τον πατέρα μου Ηλία οι οποίοι με υποστήριξαν σε όλα τα χρόνια των μέχρι τώρα σπουδών μου αλλά και με καθοδήγησαν προσφέροντάς μου τα απαραίτητα εφόδια. Ευχαριστώ την αδελφή μου Κωνσταντίνα και την φίλη μου Φοίβη, που μου προσέφεραν υποστήριξη, συντροφιά και κατανόηση, όποτε είχα ανάγκη.



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΡΕΥΣΤΩΝ
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΘΕΡΜΙΚΩΝ ΣΤΡΟΒΙΛΟΜΗΧΑΝΩΝ
ΜΟΝΑΔΑ ΠΑΡΑΛΛΗΛΗΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ
ΡΕΥΣΤΟΔΥΝΑΜΙΚΗΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ

Σχεδιασμός Πειραμάτων και Εξωτερικά Μεταπρότυπα για την Υποδομή της Διαδικασίας Βελτιστοποίησης με Εξελικτικούς Αλγορίθμους

Δημήτριος Καψούλης

Επιβλέπων: Κυριάκος Χ. Γιαννάκογλου, Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, Αύγουστος 2014

Περίληψη

Η παρούσα διπλωματική εργασία ασχολείται με το συνδυασμό τεχνικών σχεδιασμού πειραμάτων, προτύπων παλινδρόμησης και εξελικτικών αλγορίθμων (ΕΑ), στο πλαίσιο μεθόδων βελτιστοποίησης. Η αποτελεσματικότητα των μεθόδων διερευνάται σε διάφορα μαθηματικά και ρευστοδυναμικά προβλήματα.

Η βελτιστοποίηση με Εξελικτικούς Αλγορίθμους (ΕΑ) έχει αναπτυχθεί επαρκώς τα τελευταία χρόνια στη Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής & Βελτιστοποίησης (ΜΠΥΡ&Β) του Εργαστηρίου Θερμικών Στροβιλομηχανών (ΕΘΣ) του ΕΜΠ. Πλέον αποτελεί μια παγιωμένη και αξιόπιστη μέθοδο που μπορεί να εφαρμοστεί σε προβλήματα οποιασδήποτε φύσης. Το λογισμικό EASY, που αναπτύχθηκε στο ΜΠΥΡ&Β, συνδυαζόμενο με το κατάλληλο λογισμικό αξιολόγησης κάθε φορά, μπορεί να παρέχει τις βέλτιστες λύσεις του προβλήματος, που μελετάται. Παρόλα αυτά, οι ΕΑ απαιτούν μεγάλο αριθμό αξιολογήσεων για την εύρεση των βέλτιστων λύσεων, γεγονός που μπορεί να οδηγήσει σε μεγάλο υπολογιστικό κόστος, αναλόγως με το κόστος κάθε αξιολόγησης. Το πρόβλημα αυτό έχει ξεπεραστεί με τη χρήση μεταπροτύπων (Metamodel Assisted Evolutionary Algorithms, MAEAs), τα οποία προσεγγίζουν τις τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης που παρέχει το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης. Μέχρι τώρα, στον EASY είχαν χρησιμοποιηθεί μεταπρότυπα συνδεδεμένα με την εξέλιξη του ΕΑ, συνήθως, τεχνητά νευρωνικά δίκτυα. Αυτά εκπαιδεύονται με τα δεδομένα από πραγματικές αξιολογήσεις που πραγματοποιήθηκαν και, στη συνέχεια, προσεγγίζουν τα πραγματικά αποτελέσματα, με σκοπό να μην γίνουν οι αντίστοιχες πραγματικές αξιολογήσεις. Έτσι μειώνεται το υπολογιστικό κόστος καθώς τα μεταπρότυπα εκτελούνται σε μηδαμινό χρόνο σε σχέση με το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης.

Στην παρούσα διπλωματική εργασία, μελετώνται τα μεταπρότυπα, που είναι αποσυνδεδεμένα από την εξέλιξη του ΕΑ. Έμφαση δόθηκε στα πρότυπα παλινδρόμησης, τα οποία προσεγγίζουν τα πραγματικά αποτελέσματα με πολυωνυμικές συναρτήσεις.

Η μέθοδος εκπαίδευσης των προτύπων παλινδρόμησης είναι αυτή των ελαχίστων τετραγώνων. Για την εύρεση των αρχικών δεδομένων για την εκπαίδευση των μετα-προτύπων, χρησιμοποιείται ο σχεδιασμός πειραμάτων. Ο σχεδιασμός αυτός επιλέγει τα διανύσματα τιμών των μεταβλητών που θα χρησιμοποιηθούν για τις απαιτούμενες αξιολογήσεις. Τα είδη, που αναλύονται εκτενώς, είναι ο πλήρης και ο κλασματικός παραγοντικός, ο τυχαιοποιημένος και ο κεντρικής σύνθεσης σχεδιασμός. Κάθε είδος παρέχει συγκεκριμένα πλεονεκτήματα και χρησιμοποιείται σε κατάλληλες περιστάσεις. Οι μέθοδοι αυτοί καταλήγουν σε έναν ΕΑ ο οποίος πραγματοποιεί βελτιστοποίηση χρησιμοποιώντας ως λογισμικό αξιολόγησης τα εκπαιδευμένα μεταπρότυπα. Περιοδικά, ελέγχεται η προσέγγιση των μεταπροτύπων με το ακριβές λογισμικό αξιολόγησης, εμπλουτίζοντας τη σχετική βάση δεδομένων και εκπαιδεύοντας ξανά τα μεταπρότυπα με περισσότερα δεδομένα.

Η διαδικασία αυτή χρησιμοποιείται για την επίλυση διαφόρων προβλημάτων βελτιστοποίησης. Το υπολογιστικό κόστος και τα αποτελέσματα, που παρέχονται, συγκρίνονται με τη διαδικασία βελτιστοποίηση με απλό ΕΑ ή με ΜΑΕΑ συνδεδεμένο με την εξέλιξη, ώστε να παρατηρηθούν τα πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα της διαδικασίας αυτής.



NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS
SCHOOL OF MECHANICAL ENGINEERING
FLUIDS DEPARTMENT
LABORATORY OF THERMAL TURBOMACHINES
PARALLEL CFD & OPTIMIZATION UNIT

Design of Computational Experiments and External Metamodels in Evolutionary Algorithm Optimization

Dimitrios Kapsoulis

Advisor: Kyriakos C. Giannakoglou, Professor NTUA

Athens, August 2014

Abstract

The aim of this diploma thesis is to present optimization methods based on the combined use of design of experiments, regression models and evolutionary algorithms (EAs) for the solution of optimization problems. The effectiveness and efficiency of the methods is investigated with the application in several mathematical and fluid dynamics problems.

EA-based optimization has been adequately developed over the last years at the Parallel CFD & Optimization Unit (PCOpt) of the Laboratory of Thermal Turbomachines (LTT) NTUA. Nowadays, it is a reliable method, which can be implemented in almost any problem. Program EASY, which was developed by PCOpt, can compute the optimal solutions, provided that the corresponding evaluation tool is available. On the other hand, it is well known that EAs demand many evaluations, so as to find the optimal solutions. Depending on the CPU cost of evaluation tool, this might lead to prohibitively high optimization turnaround time. The use of Metamodel Assisted Evolutionary Algorithms (MAEAs) is a way to overcome this problem. The metamodels approximate the objective function values, the evaluation tool will produce. Til now, in EASY, artificial neural networks have been used as metamodels and these are trained online, which means that they were connected with the EA. The training is based on data from real evaluations. After the training, metamodels are used to approximate the real evaluations, instead of using the evaluation tool. This reduces the computational cost, because the evaluations with metamodels are done very quickly.

In this diploma thesis, the use of offline metamodels within an EA is investigated. Emphasis was laid on the regression models, which approximate the objective function using polynomial functions. For the process of training, the least squares method is used. Design of experiments is used for selecting the training data to train the metamodels, after being trained on the problem-specific evaluation

tool. The types analyzed in this diploma thesis are the full and partial/fractional factorial design, the randomized and central composite designs. Each design has each own advantages and is used in certain occasions. The EA uses the so-trained regression models as the only evaluation model and, occasionally, compares the outcome of the surrogate model with the exact one,so as to decide whether the database is to be enriched and the EA be repeated using an updated surrogate model.

In this diploma thesis, the above procedure is used to solve several optimization problems. The results and the computational cost are compared to this of EAs or MAEAs with online trained metamodels. By doing so, the advantages and disadvantages of the procedure are shown.

Ακρωνύμια

ΕΜΠ	Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
ΕΘΣ	Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών
ΜΠΥΡ&Β	Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής & Βελτιστοποίησης
ΥΡΔ	Υπολογιστική Ρευστοδυναμική
<hr/>	
CFD	Computational Fluid Dynamics
NTUA	National Technical University of Athens
PCopt	Parallel CFD & Optimization Unit

Περιεχόμενα

Περιεχόμενα	i
1 Εισαγωγή	1
1.1 Στόχος της Διπλωματικής Εργασίας	2
1.1.1 Δομή Εργασίας	2
2 Εξελικτικοί Αλγόριθμοι και Μεταπρότυπα	5
2.1 Εισαγωγή στη Βελτιστοποίηση	5
2.2 Βελτιστοποίηση με Εξελικτικούς Αλγορίθμους	6
2.2.1 Περιγραφή ενός (μ,λ) Εξελικτικού Αλγορίθμου	7
2.2.2 Λογισμικό EASY (Evolutionary Algorithm SYstem)	8
2.3 ΕΑ Υποβοηθούμενοι από Μεταπρότυπα	9
2.3.1 Εισαγωγή στους ΜΑΕΑ	9
2.3.2 ΕΑ υποβοηθούμενοι από μεταπρότυπα αποσυνδεδεμένα από την εξέλιξη	10
2.3.3 ΕΑ υποβοηθούμενοι από μεταπρότυπα συνδεδεμένα με την εξέλιξη	10
2.3.4 Είδη Μεταπροτύπων	12
3 Σχεδιασμός Υπολογιστικών Πειραμάτων	19
3.1 Πλήρης Παραγοντικός Σχεδιασμός	19
3.1.1 2^n Παραγοντικός Σχεδιασμός	21
3.1.2 Πλήρης Παραγοντικός σχεδιασμός τριών και περισσότερων επιπέδων	23
3.2 Κλασματικός Παραγοντικός Σχεδιασμός	28
3.2.1 2^{k-p} Κλασματικός Παραγοντικός Σχεδιασμός	29
3.2.2 Αναλυτική Τάξη Σχεδιασμού	35
3.2.3 3^{k-p} και l^{k-p} Κλασματικός Παραγοντικός Σχεδιασμός	35
3.3 Τυχαιοποιημένος Σχεδιασμός Πειραμάτων (Randomized design)	39
3.3.1 Στατιστική Ανάλυση του Τυχαιοποιημένου Σχεδιασμού	42
3.4 Σχεδιασμός Κεντρικής Σύνθεσης	45
3.5 Άλλα Είδη Σχεδιασμών	48
4 Ανάλυση Προγράμματος DoE	51
4.1 Χρησιμοποιούμενες Μεθόδους	52
4.2 Είσοδος Δεδομένων και Χειρισμός	53

5 Επίλυση Προβλημάτων Βελτιστοποίησης	63
5.1 Πολυωνυμικά Προβλήματα Ελαχιστοποίησης	63
5.1.1 Πολυωνυμικό Πρόβλημα Δύο Στόχων	64
5.1.2 Πολυωνυμικό Πρόβλημα Τριών Στόχων	68
5.2 Μη-Πολυωνυμικά Μαθηματικά Προβλήματα Ελαχιστοποίησης	71
5.2.1 Μη-Πολυωνυμικό Μαθηματικό Πρόβλημα Δύο Στόχων	71
5.2.2 Μη-Πολυωνυμικό Μαθηματικό Πρόβλημα Τριών Στόχων	74
5.3 Ρευστοδυναμικά Προβλήματα Βελτιστοποίησης	77
5.3.1 Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Αεροτομής Τεσσάρων Στοιχείων	78
5.3.2 Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Σχεδιασμού Διδιάστατης Πιερώγωσης Συμπιεστή	84
6 Ανακεφαλαίωση, συμπεράσματα και προτάσεις για περαιτέρω μελέτη	91
6.1 Βελτιώσεις	93
Α' Στατιστική Ανάλυση του Παραγοντικού Σχεδιασμού	95
Β' Ανάλυση Γραμμικού Προτύπου Παλινδρόμησης	99
Γ' Βασικά Χαρακτηριστικά της Γλώσσας Qt	103
Βιβλιογραφία	ιι

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Η βελτιστοποίηση είναι βασικό θέμα μελέτης της μηχανολογίας αλλά και άλλων επιστημονικών τομέων. Στόχος της διαδικασίας βελτιστοποίησης είναι η εύρεση των βέλτιστων λύσεων σε ένα πρόβλημα, δηλαδή των λύσεων οι οποίες, σε μηχανολογικά προβλήματα, χαρακτηρίζονται από χαμηλό κόστος και υψηλή λειτουργική αξία. Οι μηχανολόγοι προσπαθούν συνεχώς να βελτιώσουν τις μηχανολογικές κατασκευές, όπως για παράδειγμα να μεγιστοποιήσουν τον βαθμό απόδοσης ενός κινητήρα ή να ελαχιστοποιήσουν τις απώλειες ενός συστήματος. Απαραίτητο στοιχείο για την επίτευξη βελτιστοποίησης είναι ένας αλγόριθμος που, πραγματοποιώντας τα απαραίτητα βήματα, καταλήγει στο βέλτιστο αποτέλεσμα. Για έναν μηχανικό που καλείται να σχεδιάσει το βέλτιστο σύστημα, δουλειά του είναι να επιλέξει τον κατάλληλο αλγόριθμο που θα πραγματοποιήσει τη βελτιστοποίηση στον ελάχιστο δυνατό χρόνο.

Οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης χωρίζονται σε δυο μεγάλες κατηγορίες τους στοχαστικούς (stochastic) και τους αιτιοκρατικούς (deterministic). Για κάθε υποψήφια λύση οι πρώτοι δεν απαιτούν οποιαδήποτε άλλη πληροφορία, πέραν της τιμής της συνάρτησης στόχου που αυτή λαμβάνει, δηλαδή μπορούν να εφαρμοστούν σε οποιοδήποτε είδους προβλήματα. Βασίζονται στην τυχηματικότητα και σε μεθόδους που χειρίζονται πληθυσμούς λύσεων. Οι δεύτεροι απαιτούν τον υπολογισμό ή την προσέγγιση των παραγώνων της συνάρτησης-στόχου του προβλήματος. Χειρίζονται μια υποψήφια λύση κάθε φορά και πραγματοποιούν μια κατευθυνόμενη σύγκλιση προς το βέλτιστο. Γενικότερα, η εύρεση της βέλτιστης λύσης στους αιτιοκρατικούς αλγορίθμους πραγματοποιείται πιο γρήγορα από ότι στους στοχαστικούς, αλλά μπορεί να μην βρεθεί έτσι το ολικό βέλτιστο (δηλαδή, να εγκλωβιστεί σε τοπικό ακρότατο). Το τελευταίο δεν συμβαίνει στους στοχαστικούς αλγορίθμους, εκτός αν συμβεί πρόωρος τερματισμός. Κύριος εκ πρόσωπος των στοχαστικών αλγορίθμων είναι οι εξελικτικοί αλγόριθμοι (evolutionary algorithms) με τους οποίους θα ασχοληθεί η παρούσα διπλωματική εργασία.

Λόγω της αργής σύγκλισης των στοχαστικών αλγορίθμων στις βέλτιστες λύσεις, έχουν αναπτυχθεί μέθοδοι [1] [2] που αποσκοπούν στο να τους επιταχύνουν.

Η 'έξυπνη', επιλεκτική χρήση υποκατάστατων προτύπων αξιολόγησης (surrogate evaluation models, metamodels) είναι μια από αυτές. Στόχος τους είναι να προσομοιάσουν το πραγματικό πρόβλημα με συναρτήσεις οι οποίες μπορούν να υπολογιστούν σε μηδαμινό χρόνο σε σχέση με τον υπολογισμό της ακριβούς τιμής της συνάρτησης στόχου του πραγματικού προβλήματος. Για τη δημιουργία των μεταπροτύπων απαιτείται η εκπαίδευσή τους με ένα σύνολο ήδη αξιολογημένων λύσεων. Όμως, τα δεδομένα αυτά, αν επιλεγούν με συγκεκριμένες μεθόδους, είναι πιθανότερο να κατασκευαστούν περισσότερο αξιόπιστα μεταπρότυπα. Οι μέθοδοι αυτοί ονομάζονται **σχεδιασμοί πειραμάτων** (Design of Experiments) [3] [4]. Στη διπλωματική εργασία, τα πειράματα που πραγματοποιήθηκαν ήταν υπολογιστικά πειράματα, δηλαδή δεν περιέχουν στοχαστικότητα και οι αξιολογήσεις πραγματοποιούνται με κατάλληλο λογισμικό. Οι σχεδιασμοί καθορίζουν τα σύνολα τιμών των ανεξάρτητων μεταβλητών με τις οποίες θα επιλυθεί το πρόβλημα, καθώς και πόσες διαφορετικές φορές θα πραγματοποιηθεί η επίλυση με διαφορετικά διανύσματα τιμών των μεταβλητών. Τα διανύσματα αυτά επιλέγονται από τον σχεδιασμό με τέτοιο τρόπο ώστε να παράγουν αξιόπιστα και αντιπροσωπευτικά, για το πρόβλημα, αποτελέσματα.

1.1 Στόχος της Διπλωματικής Εργασίας

Ο σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η παρουσίαση μεθόδων βελτιστοποίησης που αυξάνουν την αποτελεσματικότητα των ΕΑ. Μελετώνται τα ευεργετικά αποτελέσματα που παρέχει η χρήση μεταπροτύπων στους ΕΑ και, ειδικότερα, των μεταπροτύπων που είναι αποσυνδεδεμένα από την εξέλιξη. Τα πρότυπα παλινδρόμησης (Regression Model) μελετήθηκαν για την εύκολη και γρήγορη προσέγγιση του πραγματικού προβλήματος με πολυώνυμα. Αναλύεται ο σχεδιασμός πειραμάτων που παρέχει μια καλά κατασκευασμένη βάση δεδομένων για τα μεταπρότυπα.

1.1.1 Δομή Εργασίας

Η παρούσα διπλωματική εργασία δομείται ως εξής:

- Στο κεφάλαιο 2 παρουσιάζονται οι γενικές έννοιες περί βελτιστοποίησης με ΕΑ. Συγκεκριμένα, ορίζονται οι ΕΑ με την περιγραφή της διαδικασίας βελτιστοποίησης που πραγματοποιούν και οι βασικές έννοιες γύρω από αυτούς. Αναλύονται τα μεταπρότυπα, τα είδη και οι κατηγορίες τους. Τα πρότυπα παλινδρόμησης μελετώνται εκτενέστερα καθώς παρέχουν τα βασικά μεταπρότυπα που χρησιμοποιήθηκαν. Παρουσιάστηκαν, επίσης, βασικά χαρακτηριστικά του λογισμικού EASY, που πραγματοποιεί την υλοποίηση της διαδικασίας βελτιστοποίησης. Γενικότερα, το κεφάλαιο στοχεύει στην κατανόηση από πλευράς του αναγνώστη όλων των βασικών εννοιών που θα χρησιμοποιηθούν στα επόμενα κεφάλαια.
- Στο κεφάλαιο 3 παρουσιάζονται οι παραλλαγές των σχεδιασμών πειραμάτων και

η λειτουργία τους. Αναλύονται όλοι οι σχεδιασμοί που χρησιμοποιήθηκαν, τα πλεονεκτήματα, τα μειονεκτήματά τους καθώς και ο τρόπος υλοποίησης τους. Στόχος είναι ο αναγνώστης να αντιληφθεί τη χρησιμότητα και τη λειτουργία τους.

- Στο κεφάλαιο 4 παρουσιάζεται το λογισμικό DoE που αναπτύχθηκε στο πλαίσιο της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Το λογισμικό αυτό υλοποιεί όλες τις μεθόδους που αναλύονται στα κεφάλαια και χρησιμοποιήθηκε για την επίλυση των προβλημάτων βελτιστοποίησης της διπλωματικής εργασίας. Αναλύεται ο χειρισμός του προγραμματισθέντος λογισμικού, οι λειτουργίες που παρέχει καθώς και κάποιες βασικές έννοιες για την κατανόηση των λειτουργιών του.
- Στο κεφάλαιο 5 παρουσιάζονται τα προβλήματα βελτιστοποίησης που επιλύθηκαν στην διπλωματική εργασία. Τα μαθηματικά προβλήματα αποσκοπούν στον έλεγχο της σωστής λειτουργίας του λογισμικού DoE και των επιμέρους μεθόδων που χρησιμοποιούνται. Τα πραγματικά προβλήματα αξιολογούν τη χρήση των μεθόδων σε μηχανολογικά προβλήματα. Τα αποτελέσματα και το υπολογιστικό κόστος των μεθόδων που χρησιμοποιούνται συγκρίνεται με αυτά των απλών ΕΑ. Έτσι ο αναγνώστης ποσοτικοποιεί τα πλεονεκτήματα των μεθόδων που αναλύθηκαν στην παρούσα διπλωματική εργασία.
- Στο κεφάλαιο 6 παρουσιάζονται τα συμπεράσματα για τις μεθόδους που χρησιμοποιήθηκαν. Διευκρινίζονται τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματά τους. Προτείνονται τρόποι βελτίωσης αυτών και του λογισμικού DoE.
- Στα παραρτήματα παρουσιάζονται στατιστικές αναλύσεις για τους σχεδιασμούς πειραμάτων, ειδικότερη ανάλυση του γραμμικού προτύπου παλινδρόμησης, καθώς και μια περιγραφή των χαρακτηριστικών της γλώσσας Qt C++ με την οποία αναπτύχθηκε το λογισμικό DoE και όλα τα υπόλοιπα υποπρογράμματα.

Κεφάλαιο 2

Εξελικτικοί Αλγόριθμοι και Μεταπρότυπα

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζονται οι ΕΑ. Αυτοί βρίσκουν εφαρμογή σε προβλήματα αναζήτησης της βέλτιστης λύσης. Για τη μείωση του χρόνου εκτέλεσης και του υπολογιστικού κόστους των ΕΑ, υποβοηθούνται συχνά από μεταπρότυπα (metamodels), δηλαδή προσεγγιστικά πρότυπα αξιολόγησης (surrogate evaluation models) τα οποία υποκαθιστούν το εξειδικευμένο για το πρόβλημα λογισμικό αξιολόγησης. Η εκπαίδευση και η χρήση μεταπροτύπων, στο πλαίσιο των ΕΑ, αποτελεί βασική συνιστώσα της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

2.1 Εισαγωγή στη Βελτιστοποίηση

Για την επίλυση ποσοτικών προβλημάτων σε τομείς διάφορων επιστημών, όπως η μηχανική, η φυσική, τα οικονομικά και άλλοι χρησιμοποιούνται μέθοδοι βελτιστοποίησης [5]. Τα προς επίλυση προβλήματα μπορεί να είναι ενός στόχου (Single Objective Optimization - SOO Problems), είτε περισσότερων (Multi Objective Optimization - MOO Problems). Οι μέθοδοι βελτιστοποίησης έχουν ως στόχο την εύρεση των τιμών των ελεύθερων παραμέτρων του προβλήματος ώστε οι συναρτήσεις στόχοι να λαμβάνουν την ελάχιστη ή τη μέγιστη τιμή ανάλογα με τις απαιτήσεις του προβλήματος (προβλήματα ελαχιστοποίησης ή μεγιστοποίησης). Η παρούσα διπλωματική εργασία ασχολείται με προβλήματα ελαχιστοποίησης. Αυτό δεν είναι περιοριστικό, δεδομένου ότι ένα πρόβλημα μεγιστοποίησης μπορεί εύκολα να μετατραπεί σε ελαχιστοποίησης. Οι ελεύθερες παράμετροι είναι μια ή περισσότερες και ονομάζονται μεταβλητές σχεδιασμού [6]. Πολλές φορές υπάρχουν περιορισμοί, ισότητας ή ανισο-ισότητας, οι οποίοι πρέπει να ικανοποιούνται ώστε η λύση που παράγεται να είναι αποδεκτή.

Η μαθηματική διατύπωση ενός προβλήματος ελαχιστοποίησης M στόχων που υπό-

κεινται σε M_C περιορισμούς ανισότητας είναι η εξής:

$$\min \vec{f}(\vec{x}) = \min[\vec{f}_1(\vec{x}), \dots, \vec{f}_M(\vec{x})] \quad (2.1)$$

$$c_j(\vec{x}) \leq c_j^{thres}, j = 1, \dots, M_C$$

όπου \vec{x} είναι το διάνυσμα των N μεταβλητών σχεδιασμού, c_j είναι η τιμή του περιορισμού j και c_j^{thres} είναι το επιθυμητό όριο των περιορισμών. Καθεμία από τις N μεταβλητές σχεδιασμού έχουν κάτω x_{low}^i και άνω x_{upp}^i όρια (καθορισμένα από το χρήστη) τα οποία καθορίζουν το πεδίο ορισμού τους.

2.2 Βελτιστοποίηση με Εξελικτικούς Αλγορίθμους

Μια κατηγορία μεθόδων βελτιστοποίησης είναι οι στοχαστικές μέθοδοι, οι οποίες βασίζονται σε τυχηματική, όχι όμως τυχαία, αναζήτηση των βέλτιστων λύσεων [7] [8]. Βασικός εκπρόσωπός τους είναι οι Εξελικτικοί Αλγόριθμοι (EA). Αυτοί χειρίζονται πληθυσμούς υποψήφιων λύσεων σε κάθε γενιά και όχι μεμονωμένες λύσεις γεγονός που αποτελεί βασικό πλεονέκτημα σε σχέση με τις άλλες μεθόδους. Επιπλέον, δεν "εγκλωβίζονται" σε τοπικά ακρότατα αλλά υπολογίζουν ολικά ακρότατα και δεν χρειάζονται ιδιαίτερο μαθηματικό υπόβαθρο για την υλοποίησή τους. Αντιθέτως, προσαρμόζονται εύκολα σε οποιοδήποτε πρόβλημα και για αυτό και έχουν βρει εφαρμογή σε πολλούς διαφορετικούς τομείς των επιστημών. Το μόνο που χρειάζονται είναι ένα λογισμικό αξιολόγησης.

Οι EA απαιτούν μεγάλο αριθμό αξιολογήσεων. Η κάθε αξιολόγηση μπορεί να είναι χρονοβόρα και ακριβή διαδικασία (π.χ. αριθμητική επίλυση εξισώσεων Navier-Stokes) και ο μεγάλος αριθμός αξιολογήσεων καθιστά ακριβή τη διαδικασία του EA. Υπάρχουν παράμετροι που απαιτούν διαφορετική ρύθμιση ανάλογα με τη φύση του προβλήματος και απαιτείται εμπειρία, γνώση και δοκιμές για τη σωστή ρύθμισή τους.

Οι EA μιμούνται τη βιολογική εξέλιξη των ειδών, που παρατηρήθηκε από τον Δαρβίνο [9]. Με τον όρο "εξέλιξη" εννοούμε τη διαδικασία αυτόματης προσαρμογής κάθε συστήματος στο περιβάλλον του, δηλαδή στις εξωτερικές συνθήκες που επιδρούν πάνω στο σύστημα. Μηχανισμοί όπως αναπαραγωγή, γονιδιακή διασταύρωση, μετάλλαξη και φυσική επιλογή αποτελούν εξελικτικούς τελεστές των EA. Σύμφωνα με τη θεωρία του Δαρβίνου, τα άτομα ενός πληθυσμού συναγωνίζονται μεταξύ τους για να αποκτήσουν πόρους όπως στέγη, τροφή, σύντροφο. Τα καλύτερα προσαρμοσμένα στο περιβάλλον τους άτομα έχουν περισσότερες πιθανότητες να διαιωνιστούν και να αναπαραχθούν. Αυτό οδηγεί στην επιβίωση των πετυχημένων γονιδίων σε μετέπειτα γενιές και σε περισσότερους απογόνους. Ο συνδυασμός των καλών γονιδίων από διαφορετικούς γονείς έχει μεγάλες πιθανότητες να καταλήξει σε απογόνους με ακόμα καλύτερα γονίδια. Με τον τρόπο αυτό γίνεται η εξέλιξη και η προσαρμογή

των πληθυσμών στο εκάστοτε περιβάλλον.

Κατ' αναλογία με τα παραπάνω, τα γονίδια αποτελούν τις μεταβλητές σχεδιασμού του κάθε προβλήματος και η καταλληλότητα των υποψηφίων αντιστοιχίζεται στις αποκρίσεις των συναρτήσεων στόχων. Όταν οι αποκρίσεις των συναρτήσεων στόχων είναι χαμηλές (για προβλήματα ελαχιστοποίησης), τα διανύσματα μεταβλητών που παράγουν αυτές τις αποκρίσεις μεταφέρουν χαρακτηριστικά τους στις επόμενες γενιές και συμμετέχουν στις διαδικασίες εξέλιξης (όπως γίνεται με τα παιδιά και τους γονείς). Αν οι απογόνοι έχουν ακόμα καλύτερες αποκρίσεις των συναρτήσεων στόχων, αντικαθιστούν τους γονείς και προκρίνονται σε επόμενες γενιές διατηρώντας την κληρονομικότητα του "καλού" γονέα. Με τον τρόπο αυτό, γίνεται η εξέλιξη σε επόμενες γενιές μέχρι να βρεθούν τα βέλτιστα διανύσματα μεταβλητών σχεδιασμού.

2.2.1 Περιγραφή ενός (μ,λ) Εξελικτικού Αλγορίθμου

Οι (μ,λ) ΕΑ χρησιμοποιούν τρεις πληθυσμούς, τους γονείς P_{μ}^g , τους απογόνους P_{λ}^g και τους επίλεκτους ή elite P_e^g της κάθε γενιάς (g). Οι γονείς είναι ο πληθυσμός που διασταυρώνεται για να δώσει τους απογόνους της επόμενης γενιάς. Οι επίλεκτοι αποτελούν τα καλύτερα άτομα (καλύτερες λύσεις) που έχουν προκύψει κατά τη διαδικασία της εξέλιξης μέχρι και την τρέχουσα γενιά. Αυτοί χρησιμοποιούνται για την ενίσχυση των καλών χαρακτηριστικών των μελών της νέας γενιάς (διαδικασία ελιτισμού) και παρέχουν τις βέλτιστες λύσεις όποια στιγμή και να σταματήσει ο εξελικτικός αλγόριθμος[6].

Η διαδικασία ενός εξελικτικού αλγορίθμου παρουσιάζεται στα ακόλουθα βήματα[6]:

1. Αρχικοποίηση: Ο πληθυσμός της μηδενικής γενιάς ($g = 0$) αρχικοποιείται μέσω μιας γεννήτριας ψευδοτυχαίων αριθμών $PRNG$ (Pseudo Random Number Generator). Κάθε άτομο του πληθυσμού λαμβάνει τιμές για όλες τις μεταβλητές σχεδιασμού, που παράγονται τυχαία από τη γεννήτρια. Αυτές πρέπει να βρίσκονται ανάμεσα στα όρια που έχει ορίσει ο χρήστης. Ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να δώσει προκαθορισμένες τιμές για τη μηδενική γενιά.
2. Αξιολόγηση: Το σύνολο του πληθυσμού των απογόνων P_{λ}^g αξιολογείται με το κατάλληλο λογισμικό αξιολόγησης. Δηλαδή, για κάθε διάνυσμα μεταβλητών σχεδιασμού εκτελείται το πρόγραμμα αξιολόγησης, που ο χρήστης έχει ορίσει και δίνεται ως αποτέλεσμα το διάνυσμα τιμών των συναρτήσεων στόχων. Στην περίπτωση προβλήματος με περιορισμούς, αυτοί πρέπει να υπολογισθούν και να συμπεριληφθούν στις συναρτήσεις-στόχων. Η χρήση συναρτήσεων ποινής απαιτείται για τη διαχείριση των περιορισμών ανισο-ισότητας της μορφής $c_k(\vec{x}) \leq c_k^{thres}$. Ανάλογα με το μέγεθος της παραβίασης των περιορισμών, προστίθεται στις συναρτήσεις στόχων ένας (εκθετικός, συχνά) όρος ποινής της μορφής,

$$\exp\left(a_k \frac{c_k(x) - c_k^{thres}}{d_k^* - c_k^{thres}}\right) \quad (2.2)$$

όπου a_k είναι ο συντελεστής και δείχνει πόσο έντονη θα είναι η ποινή που θα επιβληθεί, $c_k(x)$ είναι η τιμή του περιορισμού για το αντίστοιχο διάνυσμα μεταβλητών, c_k^{thres} είναι η μέγιστη τιμή που επιτρέπεται να λάβει ένας περιορισμός, d_k^* είναι το όριο χαλάρωσης, που ορίζει την τιμή πέραν της οποίας θα επιβάλλεται ποινή θανάτου στο διάνυσμα των στόχων. Η ποινή θανάτου είναι μια πολύ μεγάλη ποινή, που προστίθεται στις συναρτήσεις στόχων (θεωρητικά ένας αριθμός που αγγίζει το άπειρο, άρα πρακτικά μια μεγάλη δύναμη του 10) ώστε να μην συμμετάσχουν ουσιωδώς στην υπόλοιπη διαδικασία αναπαραγωγής.

3. Ανανέωση πληθυσμού επίλεκτων: Ανανεώνονται οι επίλεκτοι P_e^g με όσα μέλη της νέας γενιάς έχουν καλύτερες αποκρίσεις. Ελέγχεται η κυριαρχία μιας λύσης του πληθυσμού πάνω στα μέλη των επίλεκτων. Αν κάποιο διάνυσμα μεταβλητών δεν υστερεί σε κανέναν στόχο και, ταυτόχρονα είναι καλύτερο σε έναν τουλάχιστον στόχο, τότε εισάγεται στην ομάδα των επίλεκτων, αντικαθιστώντας τον χειρότερο επίλεκτο.
4. Ελιτισμός: Επιλέγονται τυχαία άτομα από τους επίλεκτους για την αντικατάσταση μερικών ατόμων από τους απογόνους. Είναι επικρατέστερο να αντικαθίστανται απόγονοι με κακές αποδόσεις έτσι ώστε να μην υπάρχει περίπτωση στη νέα γενιά να βρεθούν χειρότερες λύσεις από ότι στην προηγούμενη. Η διαδικασία αυτή λέγεται ελιτισμός.
5. Επιλογή γονέων: Εφαρμόζοντας τον τελεστή επιλογής γονέων, σχηματίζεται ο νέος πληθυσμός γονέων. Στη διαδικασία αυτή συμμετέχουν οι απόγονοι της τρέχουσας γενιάς και οι γονείς της προηγούμενης.
6. Αναπαραγωγή: Η διαδικασία της αναπαραγωγής δημιουργεί την επόμενη γενιά απογόνων. Επιλέγονται δύο ή παραπάνω γονείς οι οποίοι διασταυρώνονται και μεταλλάσσονται για να παράξουν ένα νέο απόγονο.
7. Έλεγχος Σύγκλισης: Ελέγχεται αν πληρείται το κριτήριο τερματισμού, δηλαδή αν οι αξιολογήσεις έχουν φτάσει στο μέγιστο αριθμό ή αν η διαδικασία έχει συγκλίνει αδυνατώντας να παράξει καλύτερες λύσεις από τις τρέχουσες, για έναν λογικό αριθμό τελευταίων γενεών. Αν πληρείται, η διαδικασία σταματά, αλλιώς επιστρέφει στο βήμα 2 με τους απογόνους της νέας γενιάς.

2.2.2 Λογισμικό EASY (Evolutionary Algorithm SYstem)

Η βελτιστοποίηση με χρήση ΕΑ μπορεί να υλοποιηθεί με διάφορα εμπορικά και μη λογισμικά. Στην παρούσα διπλωματική εργασία χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό EASY (Evolutionary Algorithm SYstem). Το λογισμικό αυτό είναι ένα γενικής χρήσης λογισμικό βελτιστοποίησης. Αναπτύχθηκε και εξελίσσεται στη Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής & Βελτιστοποίησης του ΕΜΠ. Μπορεί να λύσει οποιασδήποτε φύσης πρόβλημα με έναν ή και περισσότερους συναρτήσεις στόχους, με ή χωρίς περιορισμούς, αρκεί να είναι διαθέσιμο το σχετικό λογισμικό αξιολόγησης. Το λογισμικό EASY εμπεριέχει μεθόδους στοχαστικές αλλά και

αιτιοκρατικές που, μαζί ή χωριστά, συμβάλλουν στη λύση κάθε προβλήματος. Εκτός από το λογισμικό αξιολόγησης, το λογισμικό έχει τη δυνατότητα να χρησιμοποιήσει χαμηλού κόστους μεταπρότυπα για την αξιολόγηση των ατόμων. Τα χρησιμοποιούμενα μεταπρότυπα είναι συνδεδεμένα με την εξέλιξη και εκτιμούν τις αποκρίσεις κάθε υποψήφιας λύσης. Με αυτόν τον τρόπο μειώνεται το υπολογιστικό κόστος, καθώς γίνονται λιγότερες αξιολογήσεις με το (πολλές φορές) χρονοβόρο λογισμικό αξιολόγησης. Για τη μείωση του υπολογιστικού κόστους και του χρόνου εκτέλεσης, παρέχεται η δυνατότητα υλοποίησης παράλληλων αξιολογήσεων σε κεντρικές μονάδες επεξεργασίας (*CPU*s) και σε μονάδες επεξεργασίας γραφικών (*GPU*s).

2.3 ΕΑ Υποβοηθούμενοι από Μεταπρότυπα

Πολλές φορές προβλήματα, των οποίων το λογισμικό αξιολόγησης είναι χρονοβόρο, όπως η επίλυση των εξισώσεων Navier-Stokes, έχουν απαγορευτικά μεγάλο υπολογιστικό κόστος. Τα μεταπρότυπα βοηθούν στη μείωση του αριθμού των αξιολογήσεων και κατ' επέκταση μείωση του υπολογιστικού χρόνου [10]. Το χαρακτηριστικό των μεταπρωτύπων είναι ότι δεν αξιολογούν ακριβώς την κάθε υποψήφια λύση, αλλά προσεγγίζουν το πραγματικό διάνυσμα στόχων με χρήση μηδαμινών υπολογιστικών πόρων. Τα πιο υποσχόμενα άτομα αξιολογούνται και με το λογισμικό ακριβούς αξιολόγησης. Η τεχνική αυτή ονομάζεται **Προσεγγιστική Προ-Αξιολόγησης (Inexact Pre-Evaluation)** των εξεταζόμενων λύσεων [11]. Η χρησιμοποίηση μεταπρωτύπων στη βελτιστοποίηση με ΕΑ δημιούργησε αυτό που ονομάζεται **Εξελικτικοί Αλγόριθμοι Υποβοηθούμενοι με Μεταπρότυπα (Metamodel Assisted Evolutionary Algorithms - MAEA)** [12] [13].

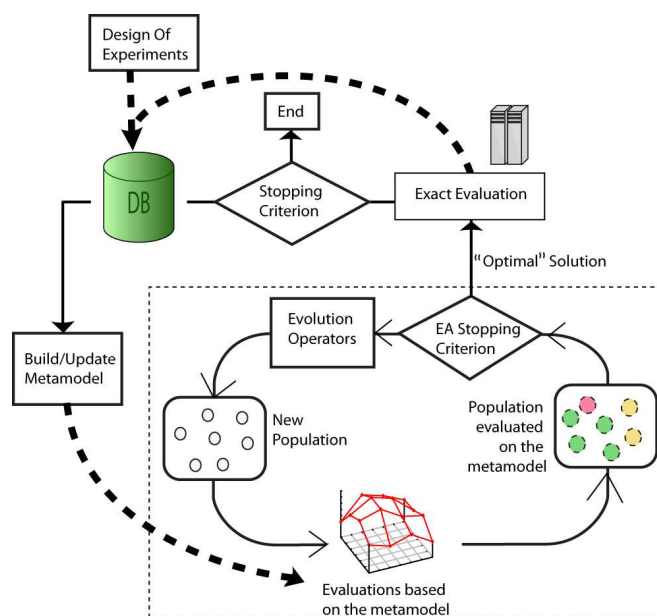
2.3.1 Εισαγωγή στους MAEA

Τα μεταπρότυπα πρέπει να εκπαιδευτούν κατάλληλα με ένα σύνολο δειγμάτων εκπαίδευσης για τα οποία προφανώς είναι διαθέσιμες και οι αποκρίσεις, πριν χρησιμοποιηθούν [14]. Η βάση δεδομένων (Database, DB) αποτελείται από διανύσματα μεταβλητών που έχουν αξιολογηθεί με το λογισμικό αξιολόγησης. Υποσύνολο αυτής αποτελεί το σύνολο των δειγμάτων εκπαίδευσης (training patterns) που διαλέγεται ανάλογα με τον τύπο του μεταπρωτύπου. Το μέγεθος του είναι καθοριστικής σημασίας για την εγκυρότητα του μεταπρωτύπου, ένα μη-αντιπροσωπευτικό δείγμα μπορεί να οδηγήσει σε εσφαλμένες εκτιμήσεις των διανυσμάτων μεταβλητών που προ-αξιολογούνται.

Τα μεταπρότυπα μπορεί να είναι τοπικά αλλά και καθολικά. Τα **τοπικά** προσεγγίζουν λύσεις μιας ορισμένης περιοχής του χώρου σχεδιασμού ενώ τα **καθολικά** παρέχουν αξιόπιστες λύσεις σε όλον τον χώρο σχεδιασμού. Μια ακόμα κατηγοριοποίηση των μεταπρωτύπων είναι ανάλογα με το αν είναι **αποσυνδεδεμένα από** ή **συνδεδεμένα με την εξέλιξη**.

2.3.2 ΕΑ υποβοηθούμενοι από μεταπρότυπα αποσυνδεδεμένα από την εξέλιξη

Τα μεταπρότυπα αυτής της κατηγορίας είναι συνήθως καθολικά. Το μεταπρότυπο εκπαιδεύεται μια φορά πριν την έναρξη του ΕΑ, δηλαδή είναι ανεξάρτητο από την εξέλιξη των λύσεων στη διάρκεια της βελτιστοποίησης. Το λογισμικό αξιολόγησης χρησιμοποιείται για να δημιουργήσει μια βάση δεδομένων από την οποία θα επιλεγούν αυτόματα τα δείγματα εκπαίδευση για την εκπαίδευσή του μεταπρότυπου. Σε προβλήματα πολλών στόχων δημιουργείται ένα διαφορετικό μεταπρότυπο για κάθε συνάρτηση στόχου. Κατά τη διάρκεια της βελτιστοποίησης, χρησιμοποιείται μόνο το προσεγγιστικό διάνυσμα στόχων που παρέχει το προ-εκπαιδευμένο μεταπρότυπο. Όταν η διαδικασία συγκλίνει, τα βέλτιστα διανύσματα μεταβλητών επαναξιολογούνται με το ακριβές λογισμικό αξιολόγησης, ώστε να βρεθεί το πραγματικό διάνυσμα τιμών των στόχων.

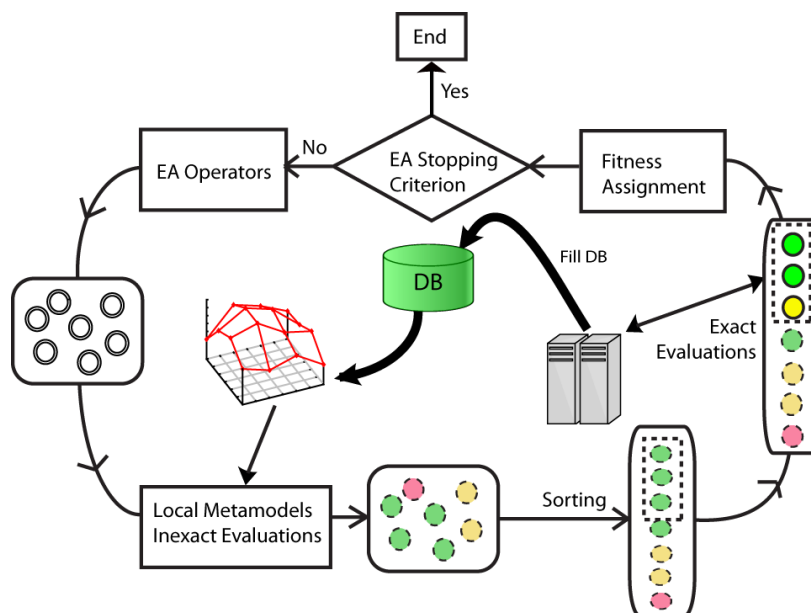


Σχήμα 2.1: Μεταπρότυπα αποσυνδεδεμένα από την εξέλιξη.

2.3.3 ΕΑ υποβοηθούμενοι από μεταπρότυπα συνδεδεμένα με την εξέλιξη

Σε αυτήν την κατηγορία ανήκουν τα μεταπρότυπα που εκπαιδεύονται κατά τη διάρκεια της διαδικασίας βελτιστοποίησης. Αρχικά, το μεταπρότυπο δημιουργείται από ένα δείγμα εκπαίδευσης που παράγεται από αξιολογήσεις από το λογισμικό αξιολόγησης. Στη συνέχεια, καθώς οι γενιές προχωρούν και έχουν πραγματοποιηθεί επιπλέον αξιολογήσεις, εκπαιδεύεται ξανά με ένα ανανεωμένο δείγμα εκπαίδευσης. Στην περίπτωση χρήσης μεταπρότυπων συνδεδεμένων με την εξέλιξη δίνεται εναλλάξ χρήση

λογισμικού αξιολόγησης και μεταπροτύπου. Ο τύπος αυτός υπερτερεί από τον παραπάνω, γιατί αλλάζει και προσαρμόζεται όσο προχωρούν οι γενιές. Κύριος αντιπρόσωπος του είναι τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (artificial neural networks). Σε επόμενη ενότητα θα παρουσιαστεί ο τρόπος εφαρμογής μεταπροτύπων συνδεδεμένων με την εξέλιξη που χρησιμοποιείται στη ΜΠΥΡ&Β του ΕΜΠ.



Σχήμα 2.2: Μεταπρότυπα συνδεδεμένα με την εξέλιξη.

ΜΑΕΑ με Προσεγγιστική Προ-Αξιολόγηση

Η Προσεγγιστική Προ-Αξιολόγηση ΠΠΑ (Inexact Pre-Evaluation -IPE) [11] λειτουργεί ως ένα επίπεδο διαχωρισμού/κατάταξης των διανυσμάτων μεταβλητών κάθε γενιάς, χαμηλού υπολογιστικού κόστους. Τα διανύσματα μεταβλητών με τις πλέον αξιόλογες αποκρίσεις των συναρτήσεων στόχων που προκύπτουν από το μεταπρότυπο, επαναξιολογούνται από το ακριβές λογισμικό. Μετά από πολλές εφαρμογές και χρήσεις, έχει αποδειχθεί ότι τα τοπικά μεταπρότυπα παρέχουν καλύτερες προβλέψεις όταν ο χώρος των διανυσμάτων στόχων είναι πολύπλοκος.

Τα βήματα που ακολουθούνται στον αλγόριθμο βελτιστοποίησης με ΠΠΑ είναι τα εξής:

1. Η διαδικασία βελτιστοποίησης ξεκινά την εξέλιξη με τον συμβατικό (μ,λ) ΕΑ, δηλαδή αξιολογούνται οι πρώτες γενιές με το ακριβές λογισμικό που παρέχεται από τον χρήστη. Τα άτομα αυτών των γενιών καταγράφονται στη βάση δεδομένων που χρησιμοποιείται αργότερα για την εκπαίδευση του μεταπροτύπου.
2. Αφού η βάση δεδομένων αποκτήσει ένα ικανοποιητικό μέγεθος, επιτρέπεται η εκπαίδευση των μεταπροτύπων. Οι υποψήφιας λύσεις στις υπόλοιπες γενιές

αξιολογούνται με το μεταπρότυπο που εκτελείται σε μηδαμινό χρόνο σε σχέση με το ακριβό λογισμικό αξιολόγησης. Στα τοπικά μεταπρότυπα, η απόκριση της συνάρτησης στόχου που θα αποδοθεί στην υποψήφια λύση εξαρτάται από τα πιο κοντινά σημεία της βάσης δεδομένων σε αυτή και τις αντίστοιχες αποκρίσεις.

3. Τα διανύσματα στόχων, που προκύπτουν από την αξιολόγηση κάθε γενιάς, κατατάσσονται σε φθίνουσα σειρά καταλληλότητας. Η κατάταξη αυτή είναι αυτονόητη και εύκολη σε προβλήματα που έχουν έναν μόνο στόχο. Αντιθέτως, σε προβλήματα πολλών στόχων, η σύγκριση και κατάταξη είναι πιο πολύπλοκη διαδικασία. Στην τελευταία περίπτωση, το μεταπρότυπο επιστρέφει μια απόκριση τη φορά [15] [16] [17].
4. Οι καλύτερες λύσεις που προκύπτουν από κάθε γενιά αξιολογούνται με το ακριβές λογισμικό αξιολόγησης. Ο αριθμός των αξιολογήσεων αυτών, που δίνεται εμμέσως από τον χρήστη, καθορίζει το υπολογιστικό κόστος κάθε γενιάς. Οι επακριβώς αξιολογημένες υποψήφιες λύσεις εμπλουτίζουν τη βάση δεδομένων, για να χρησιμοποιηθούν στην εκπαίδευση του μεταπροτύπου σε επόμενες γενιές.
5. Σε κάθε διάνυσμα μεταβλητών αντιστοιχίζεται το διάνυσμα στόχων του. Ελέγχεται το κριτήριο σύγκλισης. Αν πληρείται το κριτήριο, τότε η διαδικασία βελτιστοποίησης σταματά, αλλιώς δημιουργείται μια νέα γενιά και συνεχίζεται η διαδικασία.

2.3.4 Είδη Μεταπροτύπων

Στην ενότητα αυτή, παρουσιάζονται τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (Artificial Neural Networks) και τα Πρότυπα Παλινδρόμησης (Regression Model), τα οποία χρησιμοποιήθηκαν ως μεταπρότυπα στην παρούσα διπλωματική εργασία. Παρότι, τα δύο αυτά μεταπρότυπα μπορούν να χρησιμοποιηθούν τόσο ως συνδεδεμένα όσο και ως αποσυνδεδεμένα από την εξέλιξη, εδώ χρησιμοποιήθηκε το πρότυπο παλινδρόμησης ως μεταπρότυπο αποσυνδεδεμένο από την εξέλιξη, ενώ τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα χρησιμοποιήθηκαν ως συνδεδεμένα με την εξέλιξη.

Πρότυπο Παλινδρόμησης

Το πρότυπο παλινδρόμησης (regression model) [4], το οποίο αποτελεί κλασική κατηγορία μεταπροτύπων, χρησιμοποιήθηκε κατά κύριο λόγο στην παρούσα διπλωματική εργασία. Η μέθοδος αυτή έχει ως στόχο την προσέγγιση της πραγματικής τιμής της συνάρτησης στόχου με τη βοήθεια πολυωνυμικών εκφράσεων. Εισάγονται άγνωστοι παράμετροι και η εύρεσή τους καθορίζει την ποιότητα προσαρμογής της πολυωνυμικής συνάρτησης στα αποτελέσματα του πραγματικού προτύπου. Οι

παράμετροι αυτοί υπολογίζονται λύνοντας μια γραμμική μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων (least squares), η οποία συνιστά μια πολύ ευκολότερη διεργασία από τη μη-γραμμική επίλυση που απαιτείται από τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα που θα αναλυθούν παρακάτω. Το πολυωνυμικό πρότυπο παλινδρόμησης είναι χρήσιμο για την αφαίρεση θορύβου από τα πειραματικά δεδομένα, αλλά έχει το μειονέκτημα ότι δεν μπορεί να προσομοιάσει αποτελεσματικά σύνθετες συναρτήσεις.

Αν έχουμε ένα διάνυσμα με N ανεξάρτητες μεταβλητές x , το πρώτης τάξεως πρότυπο παλινδρόμησης γράφεται:

$$\hat{y}(\vec{x}) = b_0 + \sum_{n=1}^N b_n x_n + \epsilon \quad (2.3)$$

όπου b_n , $n = 0, \dots, N$ είναι οι άγνωστες παράμετροι του προτύπου και ϵ είναι το σφάλμα. Με παρόμοιο τρόπο γράφεται και το δεύτερης τάξης πρότυπο παλινδρόμησης:

$$\hat{y}(\vec{x}) = b_0 + \sum_{n=1}^N b_n x_n + \sum_{i=1}^N b_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N b_{ij} x_i x_j + \epsilon \quad (2.4)$$

όπου b_{ij} είναι οι επιπλέον άγνωστες παράμετροι του προτύπου.

Το γινόμενο των μεταβλητών σχεδιασμού $x_i x_j$ δείχνει την αλληλεπίδραση των μεταβλητών μεταξύ τους και αποτελεί πολύ σημαντικό παράγοντα σε πολύπλοκα προβλήματα με αλληλεξαρτήσεις. Τα συνηθέστερα μοντέλα είναι τα δύο παραπάνω. Όμως, εκτός από αυτά, μπορεί να δημιουργηθεί οποιοδήποτε άλλο πρότυπο με μεγαλύτερο βαθμό πολυωνύμου και διαφορετικές αλληλεπιδράσεις. Ο βαθμός καθώς και οι αλληλεπιδράσεις των μεταβλητών, που πρέπει να χρησιμοποιηθούν στη δημιουργία του προτύπου παλινδρόμησης, επηρεάζεται από το πρόβλημα και ο ορισμός τους εξαρτάται από την εμπειρία και τις γνώσεις του χρήστη.

Για τον προσδιορισμό των παραμέτρων b_i του προτύπου παλινδρόμησης, χρησιμοποιείται η **Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων Least Squares Method** [18], η οποία ελαχιστοποιεί το σφάλμα ϵ . Έστω ότι διατίθενται K τιμές απόκρισης y_1, y_2, \dots, y_K για τα διανύσματα μεταβλητών $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_K$. Μαζί με την απόκριση της αντικειμενικής συνάρτησης y_i , είναι γνωστά και τα αντίστοιχα διανύσματα μεταβλητών x_{ij} , όπου i αντιπροσωπεύει τη λύση και j υποδηλώνει την αντίστοιχη μεταβλητή σχεδιασμού. Υποθέτουμε ότι ϵ_i είναι το σφάλμα ανάμεσα στο αποτέλεσμα της μεθόδου ελαχίστων τετραγώνων και στο πραγματικό αποτέλεσμα που αντιστοιχεί στην i παρατήρηση. Η ανάλυση της μεθόδου θα πραγματοποιηθεί με το πρότυπο παλινδρόμησης πρώτης τάξης, χάριν απλότητας. Χρησιμοποιώντας το πρότυπο πρώτης τάξης και λύνοντας ως προς το σφάλμα προκύπτει η εξίσωση για κάθε απόκριση:

$$\epsilon_i = y_i - b_0 - \sum_{j=1}^N b_j x_{ij} \quad (2.5)$$

Η συνάρτηση ελαχίστων τετραγώνων γράφεται ως εξής:

$$L = \sum_{i=1}^K \epsilon^2 = \sum_{i=1}^K (y_i - b_0 - \sum_{j=1}^N b_j x_{ij})^2 \quad (2.6)$$

Η συνάρτηση L πρέπει να ελαχιστοποιηθεί ως προς τις παραμέτρους b_i . Άρα, πρέπει να μηδενιστούν οι παράγωγοι της συνάρτησης ως προς τις παραμέτρους:

$$\frac{\partial L}{\partial b_j} = -2 \sum_{i=1}^K (y_i - b_0 - \sum_{j=1}^N b_j x_{ij}) x_{ij} = 0 \quad j = 1, 2, \dots, k \quad (2.7)$$

Αυτές οι εξισώσεις είναι πιο εύκολο να λυθούν αν εκφραστούν με μητρική μορφή. Η αρχική εξίσωση των παρατηρήσεων μπορεί να γραφτεί:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \boldsymbol{\epsilon} \quad (2.8)$$

$$\text{,όπου } \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_K \end{bmatrix} \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1N} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{K1} & x_{K2} & \dots & x_{KN} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_K \end{bmatrix}$$

Γενικά, το \mathbf{y} είναι ένα διάνυσμα διάστασης K , όσα τα πειράματα, \mathbf{X} είναι ένας πίνακας ($K \times N$) με N ανεξάρτητες μεταβλητές, \mathbf{b} είναι ένα διάνυσμα διάστασης N και $\boldsymbol{\epsilon}$ είναι ένα διάνυσμα διάστασης K τυχαίων σφαλμάτων.

Η συνάρτηση L γράφεται:

$$\begin{aligned} L &= \sum_{i=1}^K \epsilon^2 = \boldsymbol{\epsilon}'\boldsymbol{\epsilon} \\ &= (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b})'(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b}) \\ &= \mathbf{y}'\mathbf{y} - 2\mathbf{b}'\mathbf{X}'\mathbf{y} + \mathbf{b}'\mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{b} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Τονίζεται ότι με το σύμβολο ($'$) συμβολίζονται ο ανάστροφος του πίνακα. Παραγωγίζοντας την παραπάνω συνάρτηση ακολουθώντας την ίδια φιλοσοφία με προηγούμενως, προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{b}} &= -2\mathbf{X}'\mathbf{y} + 2\mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{b} = 0 \\ \mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{b} &= \mathbf{X}'\mathbf{y} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Η τελευταία εξίσωση είναι ίδια με την 2.7. Οπότε, η εύρεση των στοιχείων του

διανύσματος \mathbf{b} θα γίνει με τη λύση της εξίσωσης 2.10 που είναι σε μητρική μορφή.

$$\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y} \quad (2.11)$$

Ο πίνακας $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ είναι διάστασης $(N \times N)$, ενώ το $\mathbf{X}'\mathbf{y}$ είναι διάνυσμα διάστασης (N) και οι δύο εκ των οποίων υπολογίζονται με ευκολία. Η επίλυση του συστήματος μπορεί να γίνει με διάφορες μεθόδους, όπως απαλοιφή κατά *Gauss*. Επειδή όμως, ο πίνακας $\mathbf{X}\mathbf{X}$ είναι συμμετρικός, ο πιο αποδοτικός τρόπος επίλυσης είναι η μέθοδος Cholesky.

Μετά την επίλυση, το μοντέλο παλινδρόμησης γράφεται σε μορφή πίνακα:

$$\hat{y}_i = \mathbf{X}\hat{\mathbf{b}} \quad (2.12)$$

Το \hat{y}_i είναι η πρόβλεψη του προτύπου που θα παράγεται για κάθε διάνυσμα $\hat{\mathbf{b}}$.

Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα

Τα πιο γνωστά μεταπρότυπα για τη χρήση στη βελτιστοποίηση με ΜΑΕΑ είναι τα **Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (ΤΝΔ Artificial Neural Networks - ANN)** [19]. Το πλεονέκτημά τους είναι ότι είναι ευέλικτα στην προσομοίωση σύνθετων συναρτήσεων.

Υπάρχουν πολλά είδη ΤΝΔ, από τα οποία τα πιο γνωστά είναι τα Πολυεπίπεδα Αντιληπτά, τα Δίκτυα Συναρτήσεων Ακτινικής Βάσης, το μοντέλο Kriging [20] και οι Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης. Εδώ θα αναλυθούν τα Δίκτυα Συναρτήσεων Ακτινικής Βάσης - ΔΣΑΒ (Radial Basis Function Networks - RBFN) επειδή αυτά χρησιμοποιούνται στην παρούσα διπλωματική εργασία.

Δίκτυα Συναρτήσεων Ακτινικής Βάσης

Τα ΔΣΑΒ είναι ΤΝΔ που λειτουργούν με πρόσω διάδοση σήματος. Δηλαδή, το σήμα προχωρά από το επίπεδο εισόδου προς το επίπεδο εξόδου περνώντας από τα επιμέρους επίπεδα. Το τελικό σήμα έχει περάσει από επεξεργασία μέσα από όλα τα ενδιάμεσα επίπεδα. Το ΔΣΑΒ χρησιμοποιείται για την πρόβλεψη χρονοσειρών, συναρτήσεων και τον αυτόματο έλεγχο. Περιέχει τρία διακριτά νευρωνικά επίπεδα:

1. **Επίπεδο εισόδου** Το επίπεδο εισόδου υποδέχεται το σημείο πρόβλεψης, αντιστοιχίζοντας κάθε συνιστώσα του διανύσματος σχεδιασμού (\vec{x} του χώρου R_N) με ένα νευρώνα του και συνδέει, με αυτόν τον τρόπο, το δίκτυο με το περιβάλλον.
2. **Κρυφό επίπεδο** Το κρυφό επίπεδο αποτελείται από k νευρώνες, καθένας από τους οποίους είναι συσχετισμένος με ένα διάνυσμα $\vec{c}_{(k)} \in R_N$ ίδιας διάστασης με το χώρο σχεδιασμού. Τα διανύσματα $\vec{c}_{(k)}$ ονομάζονται κέντρα ακτινικής βάσης. Κάθε νευρώνας του κρυφού επιπέδου εφαρμόζει έναν μη-γραμμικό μετασχηματισμό G συναρτήσεως της απόστασης του εκάστοτε διανύσματος εισόδου

από το κέντρο του και της ακτίνας βάσης r_k ως:

$$h_k = G(\|\vec{x} - \vec{c}_{(k)}\|, r_k) \quad (2.13)$$

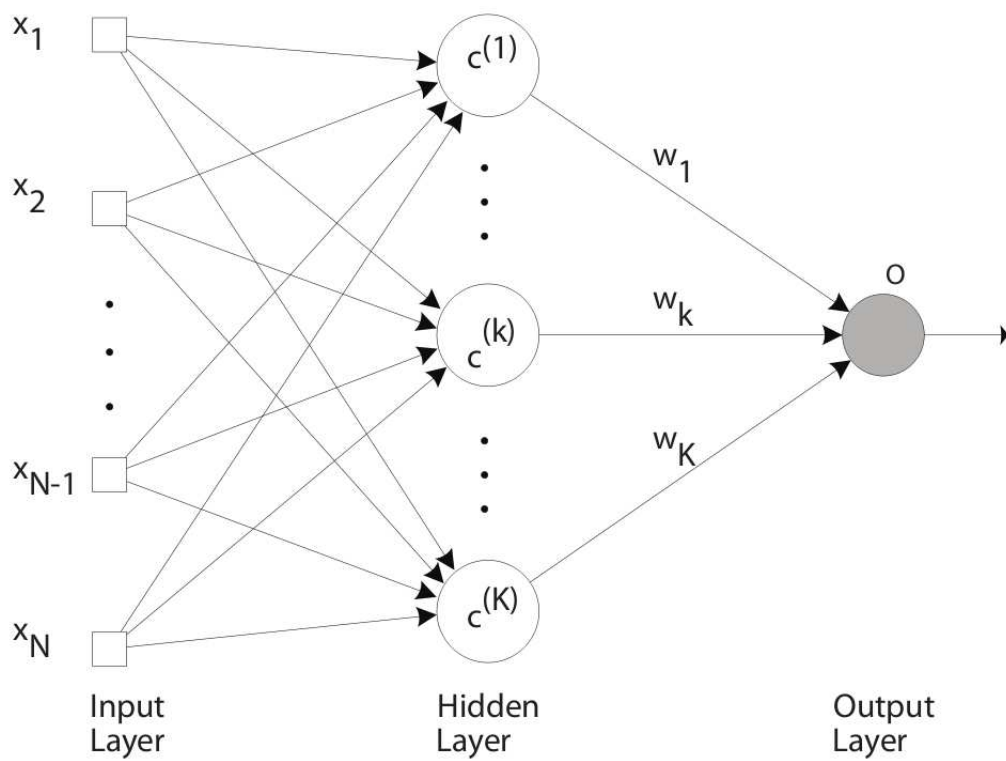
3. **Επίπεδο εξόδου** Το επίπεδο εξόδου, υλοποιεί έναν γραμμικό μετασχηματισμό αθροίζοντας τις εξόδους του κρυφού επιπέδου σταθμισμένων με τις τιμές των συνοπτικών βαρών w_k . Το αποτέλεσμα είναι η έξοδος του δικτύου $\vec{o} \in R^M$.

$$o^{(m)} = \sum_{k=1}^K w_k h_k = \sum_{k=1}^K w_k G(\|\vec{x} - \vec{c}_{(k)}\|, r_k) \quad (2.14)$$

Σύμφωνα με τα παραπάνω, τα σήματα στο επίπεδο εισόδου δέχονται έναν μη-γραμμικό μετασχηματισμό στο κρυφό επίπεδο και έναν γραμμικό στο επίπεδο εξόδου, ο οποίος εισάγει βάρη w_k . Τα βάρη αυτά υπολογίζονται κατά τη διάρκεια εκπαίδευσης του ΔΣΑΒ και εξαρτώνται από τον αριθμό των διαθέσιμων δειγμάτων. Το επίπεδο εισόδου δέχεται τόσα σήματα όσα είναι και οι μεταβλητές σχεδιασμού. Ο μη-γραμμικός μετασχηματισμός υπολογίζεται από μια ακτινικής-βάσης συνάρτηση ενεργοποίησης G , η οποία δέχεται εισόδους και τις μετατρέπει σε μια τιμή. Η συνάρτηση αυτή εφαρμόζεται λαμβάνοντας υπόψη την απόσταση του διανύσματος εισόδου \vec{x} από το αντίστοιχο κέντρο. Όποια συνάρτηση ενεργοποίησης και να χρησιμοποιηθεί, πρέπει να παράγει αντιστρέψιμο μητρώο εκπαίδευσης, το οποίο βοηθά τον υπολογισμό των βαρών. Μία τέτοια συνάρτηση είναι η συνάρτηση του *Gauss* [21]:

$$G(u, r) = \exp\left(-\frac{(\|x - c_{(k)}\|)^2}{r^2}\right) \quad (2.15)$$

Η ακτίνα r έχει σημαντική επίπτωση στην ικανότητα πρόβλεψης του νευρωνικού δικτύου. Στο επίπεδο εξόδου, οι κόμβοι είναι ίσοι με τις αναμενόμενες εξόδους από τις συναρτήσεις στόχους. Αυτά τα μεταπρότυπα δεν αναλύθηκαν σε περισσότερο και η μέθοδος υλοποίησής τους δεν διερευνήθηκε καθώς είχε ήδη πραγματοποιηθεί σε άλλες εργασίες του Εργαστηρίου Θερμικών Στροβιλομηχανών του ΕΜΠ [21] [22].



Σχήμα 2.3: Σχηματική Αναπαράσταση ενός ΤΝΔ με N εισόδους και μια έξοδο και τρία επίπεδα.

Κεφάλαιο 3

Σχεδιασμός Υπολογιστικών Πειραμάτων

Μερικές μελέτες και πειράματα γίνονται έχοντας μια μόνο ανεξάρτητη μεταβλητή. Ο πειραματιστής αλλάζει σε κάθε εκτέλεση του πειράματος την τιμή της μεταβλητής και περιμένει να δει την επιρροή της στο αποτέλεσμα του πειράματος. Πλέον, οι ανεξάρτητες μεταβλητές ενός προβλήματος έχουν αυξηθεί σε παραπάνω από μια. Ο πειραματιστής μπορεί να αλλάζει μία προς μία τις μεταβλητές του και να εκτελεί το πείραμα. Υπάρχει, όμως, μια καλύτερη μέθοδος. Μπορεί κατά την εκτέλεση ενός πειράματος να αλλάξει πάνω από μία μεταβλητές ταυτόχρονα. Το πλεονέκτημα είναι ότι :

1. Το πείραμα εκτελείται λιγότερες φορές και, άρα, θα σπαταληθεί και λιγότερος χρόνος και μικρότερο κόστος.
2. Αναπαριστά την πολυπλοκότητα της πραγματικότητας. Συνήθως αλλάζουν πολλές παράμετροι ταυτόχρονα στα φυσικά προβλήματα.
3. Δίνει πληροφορίες για την εξάρτηση του αποτελέσματος του προβλήματος από τον συνδυασμό των ανεξάρτητων μεταβλητών που έχουν αλλάξει.

Τον τρόπο με τον οποίο θα αλλάζουν οι τιμές των μεταβλητών, τον καθορίζει ο **‘σχεδιασμός πειραμάτων’ (design of experiments)**, έτσι ώστε οι εκτελέσεις των πειραμάτων να παρέχουν πληροφορίες χρήσιμες για αναλύσεις. Το κεφάλαιο αυτό παρουσιάζει διάφορα είδη σχεδιασμών, τρόπους εφαρμογής τους και πλεονεκτήματα που παρέχουν.

3.1 Πλήρης Παραγοντικός Σχεδιασμός

Ο πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός (Full Factorial Design) [4] [3] περιλαμβάνει τις περισσότερες εκτελέσεις του υπολογιστικού πειράματος συγκριτικά με τα άλλα είδη

σχεδιασμού, για ίδιο επίπεδο διακριτοποίησης του χώρου σχεδιασμού. Σε αυτήν την περίπτωση, αν υπάρχουν k μεταβλητές σχεδιασμού, καθεμιά από τις οποίες έχει διακριτοποιηθεί σε l_i ισαπέχοντα επίπεδα μεταξύ των δύο ορίων της, το πλήθος των πειραμάτων που απαιτούνται δίνεται από το γινόμενο $l_1 l_2 \dots l_k$. Για παράδειγμα, για τρεις μεταβλητές A,B,C με τέσσερα, τρία και πέντε επίπεδα αντίστοιχα ανά μεταβλητή, σε έναν πλήρη σχεδιασμό πρέπει να εκτελεστούν $4 \times 3 \times 5 = 60$ πειράματα. Παρακάτω, παρατίθεται ο πίνακας 3.1 ενός τέτοιου σχεδιασμού:

0	0	0	3	0	1	2	1	2	1	2	3
1	0	0	0	1	1	3	1	2	2	2	3
2	0	0	1	1	1	0	2	2	3	2	3
3	0	0	2	1	1	1	2	2	0	0	4
0	1	0	3	1	1	2	2	2	1	0	4
1	1	0	0	2	1	3	2	2	2	0	4
2	1	0	1	2	1	0	0	3	3	0	4
3	1	0	2	2	1	1	0	3	0	1	4
0	2	0	3	2	1	2	0	3	1	1	4
1	2	0	0	0	2	3	0	3	2	1	4
2	2	0	1	0	2	0	1	3	3	1	4
3	2	0	2	0	2	1	1	3	0	2	4
0	0	1	3	0	2	2	1	3	1	2	4
1	0	1	0	1	2	3	1	3	2	2	4
2	0	1	1	1	2	0	2	3	3	2	4

(3.1)

Κάθε τριάδα τιμών καθορίζει μονοσήμαντα ένα (υπολογιστικό) πείραμα. Στην πρώτη στήλη, οι τιμές (0,1,2,3) αντιστοιχούν στα 4 ισαπέχοντα επίπεδα της μεταβλητής A. Άρα, 0 είναι το κάτω όριο και 3 είναι το άνω όριο της μεταβλητής, έτσι όπως τα όρισε ο χρήστης. Στη δεύτερη στήλη, οι τιμές (0,1,2) είναι τα 3 επίπεδα της B, κ.ο.κ.

Συχνά, ο αριθμός και ο χρόνος των εκτελέσεων του υπολογιστικού πειράματος παίρνει απαγορευτικά μεγέθη μιας και αυτό περιλαμβάνει όλους τους δυνατούς συνδυασμούς των μεταβλητών σε όλα τα επίπεδά τους. Με αυτού του τύπου τον σχεδιασμό, λαμβάνονται όλες οι πιθανές αποκρίσεις, αν οι μεταβλητές είναι διακριτές και συμπεριληφθούν όλα τα επίπεδά τους. Στην περίπτωση που οι μεταβλητές είναι συνεχείς, η ακρίβεια του σχεδιασμού επηρεάζεται από την επιλεγείσα διακριτοποίηση των μεταβλητών καθώς και από το πλήθος των επιπέδων. Οι συνεχείς μεταβλητές παρουσιάζονται συχνότερα και αυτές εμπλέκονται στα προβλήματα της διπλωματικής εργασίας. Για την καλύτερη κατανόηση του σχεδιασμού, θα παρουσιαστούν στη συνέχεια παραδείγματα με περιορισμένες μεταβλητές και επίπεδα.

3.1.1 2^n Παραγοντικός Σχεδιασμός

Αυτή η περίπτωση του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού είναι η απλούστερη δυνατή και ουσιαστικά λαμβάνει υπόψη μόνο τα κάτω και άνω όρια των μεταβλητών. Ο σχεδιασμός αυτός προτιμάται σε προβλήματα με ποιοτικές μεταβλητές, όπως επίσης και αν απαιτείται μια γρήγορη εποπτεία των αποκρίσεων του πειράματος. Έστω ένα πρόβλημα με δυο ανεξάρτητες μεταβλητές A και B, καθεμιά από τις οποίες έχει δυο επίπεδα. Τότε, όλοι οι πιθανοί συνδυασμοί τους σύμφωνα με τον 2^2 παραγοντικό σχεδιασμό είναι οι: 00, 01, 10, 11. Αν οι πραγματικές τιμές που αντιστοιχούν στα επίπεδα των μεταβλητών είναι a_1, a_2 και b_1, b_2 αντίστοιχα, τότε οι πιθανοί συνδυασμοί μπορούν να γραφούν στη μορφή $(a_1b_1, a_1b_2, a_2b_1, a_2b_2)$. Το αποτέλεσμα του πειράματος που εκτελείται με έναν συνδυασμό των επιπέδων των μεταβλητών συμβολίζεται με $f(\cdot)$, όπου στην παρένθεση τοποθετούνται τα επίπεδα των μεταβλητών. Επομένως, τα πιθανά πειράματα θα δώσουν τις αποκρίσεις $f(a_1b_1), f(a_1b_2), f(a_2b_1), f(a_2b_2)$. Ο σχεδιασμός καλείται 2^2 **συμμετρικός**. Επειδή, όμως, υπάρχουν μόνο δύο επίπεδα, συνηθίζεται εναλλακτικά το κάθε επίπεδο να αντιπροσωπεύεται με - και +, τα οποία αντιστοιχούν στο 0 και στο 1. Σύμφωνα με το νέο συμβολισμό, ο πίνακας ενός πλήρους σχεδιασμού θα είναι:

<i>Factors</i>	
A	B
-	-
-	+
+	-
+	+

Για να βρεθεί η **κύρια επιρροή** (main effect) της μεταβλητής A και B, χρησιμοποιούνται οι εξής σχέσεις:

$$\begin{aligned}
 F_A &= \frac{1}{2}[(f(a_2b_1) - f(a_1b_1)) + (f(a_2b_2) - f(a_1b_2))] \\
 F_B &= \frac{1}{2}[(f(b_2a_1) - f(b_1a_1)) + (f(b_2a_2) - f(b_1a_2))]
 \end{aligned}
 \tag{3.2}$$

Το κεφαλαίο F δείχνει την κύρια επιρροή. Για την εύρεση των κύριων επιρροών χρειάζονται τέσσερα διαφορετικά πειράματα. Η κύρια επιρροή δείχνει αν η αντίστοιχη μεταβλητή επηρεάζει σε μικρό ή μεγάλο βαθμό το αποτέλεσμα του πειράματος.

Σε πειράματα με στοχαστικότητα, το κάθε πείραμα εκτελείται p φορές ώστε να βρεθεί ένα καλύτερο δείγμα. Τα αποτελέσματα αθροίζονται και υπολογίζεται ο μέσος όρος τους, ο οποίος τοποθετείται στην εξίσωση 3.2 για τον υπολογισμό των κύριων επιρροών και η εξίσωση γίνεται:

$$\begin{aligned}
F_A &= \frac{\sum_{i=1}^p (f_i(a_2b_1) - f_i(a_1b_1))}{2p} + \frac{\sum_{i=1}^p (f_i(a_2b_2) - f_i(a_1b_2))}{2p} \\
F_B &= \frac{\sum_{i=1}^p (f_i(b_2a_1) - f_i(b_1a_1))}{2p} + \frac{\sum_{i=1}^p (f_i(b_2a_2) - f_i(b_1a_2))}{2p}
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Η παρούσα διπλωματική εργασία δεν ασχολείται με στοχαστικά πειράματα, αλλά απλώς αναφέρθηκε για την πληρότητα της ανάλυσης.

Η **αλληλεπίδραση** (interaction) [23] AB ορίζεται ως ο μέσος όρος της διαφοράς της επιρροής της B όταν η A βρίσκεται στο επίπεδο 1 (με τιμή a_2) και της επιρροής της B όταν η A βρίσκεται στο επίπεδο 0 (με τιμή a_1):

$$F_{AB} = \frac{(f(a_2b_2) + f(a_1b_1))}{2} - \frac{(f(a_2b_1) + f(a_1b_2))}{2} \tag{3.4}$$

Εδώ, το κεφαλαίο γράμμα F συμβολίζει την επιρροή της αλληλεπίδρασης. Αποδεικνύεται ότι η ίδια σχέση ισχύει και για την αλληλεπίδραση BA. Στο παράρτημα Β' αναλύεται η σύνδεση των βασικών επιρροών και των αλληλεπιδράσεων ενός πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού και ενός γραμμικού προτύπου παλινδρόμησης.

Γενικά, η μέθοδος που αναπτύχθηκε παραπάνω έχει εφαρμογή και σε περιπτώσεις με k ανεξάρτητες μεταβλητές και ο αντίστοιχος σχεδιασμός ονομάζεται 2^k συμμετρικός. Οι συνολικές κύριες επιρροές ενός τέτοιου σχεδιασμού είναι k , οι αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων θα είναι $\binom{k}{2}$, οι αλληλεπιδράσεις τριών παραγόντων $\binom{k}{3}$ κ.ο.κ. Υπενθυμίζεται ότι, [24],

$$\binom{k}{i} = \frac{k!}{i!(k-i)!} \tag{3.5}$$

Οι συνολικές επιδράσεις θα είναι $2^k - 1$. Η ιδιότητα των διωνυμικών συντελεστών παράγουν την σχέση $\sum_{i=1}^k \binom{k}{i} = 2^k - 2$ από την οποία φαίνεται ότι αν προστεθεί και η επίδραση ενός σταθερού παράγοντα, οι συνολικές επιδράσεις είναι $2^k - 1$. Η επίδραση του σταθερού παράγοντα περιλαμβάνει όλες τις επιρροές που δεν μελετώνται και θεωρούνται σταθερές. Με το όρο επιδράσεις εννοείται το σύνολο των κύριων επιρροών και των αλληλεπιδράσεων. Για παράδειγμα, με τέσσερις ($k = 4$) μεταβλητές σχεδιασμού, ο 2^4 παραγοντικός σχεδιασμός έχει τις εξής επιδράσεις: $F_0, F_a, F_b, F_{ab}, F_c, F_{ac}, F_{bc}, F_{abc}, F_d, F_{ad}, F_{bd}, F_{abd}, F_{acd}, F_{cd}, F_{bcd}, F_{abcd}$. Η επίδραση F_0 δείχνει την επίδραση του σταθερού παράγοντα που παράγεται από μεταβλητές που δεν μελετώνται. Κατά κάποια έννοια, δεν αποτελεί επίδραση καθώς δεν περιλαμβάνει κάποιες από τις μεταβλητές που μελετώνται.

Πρέπει να σημειωθεί ότι σε πειράματα που είναι στοχαστικά, κάθε πείραμα εκτελείται n φορές και, στη συνέχεια, πραγματοποιείται στατιστική ανάλυση των αποτελεσμάτων (βλ. ΠαράρτημαΑ). Τα πειράματα αυτά δεν θα απασχολήσουν την παρούσα διπλωματική εργασία.

3.1.2 Πλήρης Παραγοντικός σχεδιασμός τριών και περισσότερων επιπέδων

Είναι γεγονός ότι, συχνά στη βιομηχανία, οι μεταβλητές χωρίζονται σε δύο επίπεδα, για τη γρήγορη εποπτεία των αποτελεσμάτων, δηλαδή για μια εκτίμηση των τιμών στα οποία κυμαίνονται τα αποτελέσματα. Παρόλα αυτά είναι απαραίτητο να αναλυθεί η περίπτωση χωρισμού των μεταβλητών σε περισσότερα από δύο επίπεδα. Χρησιμοποιούνται περισσότερα επίπεδα όταν είναι επιθυμητό να είναι η ακρίβεια προσέγγισης των αποτελεσμάτων αυξημένη και, άρα, επιχειρείται η προσέγγισή τους με επιφάνεια παλινδρόμησης μεγαλύτερου βαθμού.

3^k παραγοντικός σχεδιασμός

Αρχικά, θα συζητηθεί η περίπτωση ενός πειράματος με τρία επίπεδα μεταβλητών και k ανεξάρτητες μεταβλητές σχεδιασμού. Υπάρχουν 3^k συνολικά πειράματα, τα οποία πρέπει να εκτελεστούν αν ο παραγοντικός σχεδιασμός είναι πλήρης, με $3^k - 1$ επιδράσεις. Οι εκτελέσεις του πειράματος αυξάνονται εκθετικά σε έναν τέτοιο σχεδιασμό. Για τρεις μεταβλητές απαιτούνται $3^3 = 27$ εκτελέσεις πειράματος, ενώ για πέντε $3^5 = 243$, γεγονός που αυξάνει το συνολικό χρόνο και κόστος του σχεδιασμού.

Οι κύριες επιρροές των μεταβλητών είναι k . Οι αλληλεπιδράσεις τους είναι δύο, τριών ... k παραγόντων. Η ανάγκη ύπαρξης προτύπου προσέγγισης με βαθμό μεγαλύτερο του ένα οδηγεί στην αύξηση του βαθμού των αλληλεπιδράσεων. Δημιουργούνται αλληλεπιδράσεις της μορφής $AB^{c_2}C^{c_3} \dots K^{c_k}$, με τα c_i να είναι ακέραιοι αριθμοί που δείχνουν τη δύναμη της εκάστοτε μεταβλητής με την οποία συμμετέχει στην αλληλεπίδραση. Για παράδειγμα, σε ένα πρόβλημα τεσσάρων μεταβλητών, δημιουργούνται οι αλληλεπιδράσεις

$ABCD, ABCD^2, ABC^2D, AB^2CD, ABC^2D^2, AB^2C^2D, AB^2CD^2, AB^2C^2D^2$.

Λόγω σύμβασης που γίνεται επιθυμείται να μην λαμβάνονται αλληλεπιδράσεις με την πρώτη μεταβλητή να έχει δύναμη μεγαλύτερη της μονάδας. Οι αλληλεπιδράσεις αυτές είναι χρήσιμες για τη δημιουργία μπλοκ (περιλαμβάνεται σε ένα είδος σχεδιασμού που δεν θα αναλυθεί στην παρούσα διπλωματική εργασία), για τον κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό και για τα προσεγγιστικά πρότυπα. Δεν έχουν καμία φυσική σημασία. Η επιλογή των αλληλεπιδράσεων που θα αναλυθούν γίνεται από τον χρήστη/αναλυτή και τις απαιτήσεις του πειράματος. Βασικό κριτήριο για μία τέτοια επιλογή αποτελεί η σημαντικότητα των μεταβλητών που περιέχονται σε κάθε αλληλεπίδραση, η ακρίβεια με την οποία επιθυμείται να μελετηθεί το πείραμα καθώς και το κόστος εκτέλεσης του πειράματος (αν είναι αυξημένο, θα υπάρχει η δυνατότητα λίγων εκτελέσεων του και άρα μελέτη λίγων αλληλεπιδράσεων). Η στατιστική του παραρτήματος Α' ισχύει και σε πειράματα με περισσότερα επίπεδα των δύο. Οι αλληλεπιδράσεις θα αναλυθούν ξεχωριστά λόγω της πολυπλοκότητάς τους.

Σύνθετος πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός πολλών επιπέδων

Μέχρι τώρα αναλύθηκαν συμμετρικοί σχεδιασμοί, δηλαδή σχεδιασμοί που οι μεταβλητές διακριτοποιούνται στον ίδιο αριθμό επιπέδων. Υπάρχουν, όμως, και σχεδιασμοί που απαιτούν τον συνδυασμό μεταβλητών με διαφορετικό αριθμό επιπέδων και ονομάζονται μη-συμμετρικοί σχεδιασμοί. Σε ένα μη-συμμετρικό σχεδιασμό με πολλά και διαφορετικά επίπεδα μεταβλητών, η διαδικασία δημιουργίας του πίνακα των διάνυσμάτων μεταβλητών του σχεδιασμού δυσκολεύει, καθώς απαιτείται προσοχή για να μην ξεχαστεί κάποια πιθανή εκτέλεση του πειράματος. Η μέθοδος που αναλύεται εφαρμόστηκε στη διπλωματική εργασία αυτή λόγω της εύκολης υλοποίησής της σε μορφή κώδικα.

Ο πίνακας του σχεδιασμού θα έχει διαστάσεις $(N_{runs} \times k)$, όπου N_{runs} είναι ο συνολικός αριθμός των προς εκτέλεση πειραμάτων και k είναι ο αριθμός των μεταβλητών σχεδιασμού. Στην πρώτη στήλη αντιστοιχίζεται η πρώτη μεταβλητή, στη δεύτερη στήλη η δεύτερη μεταβλητή και ούτω καθεξής. Βασικό της στοιχείο, είναι η σταδιακή δημιουργία των στηλών του πίνακα και όχι η άμεση δημιουργία των γραμμών. Σημειώνεται ότι κάθε γραμμή αποτελεί ένα διάνυσμα μεταβλητών. Κάθε διάνυσμα χρησιμοποιείται σε διαφορετική εκτέλεση του πειράματος. Οι στήλες αντιστοιχίζονται στις μεταβλητές σχεδιασμού. Αρχικά, υπολογίζεται ο συνολικός αριθμός των απαιτούμενων πειραμάτων, που δίνεται από τον τύπο:

$$N_{runs} = l_1 l_2 \dots l_k = \prod_{i=1}^k l_i \quad (3.6)$$

όπου l_i είναι τα επίπεδα της i μεταβλητής σχεδιασμού.

Στην πρώτη στήλη, τοποθετούνται τα επίπεδα της πρώτης μεταβλητής με αύξουσα σειρά $(0, 1, 2, 3 \dots, l_1)$. Μετά ξεκινά από την αρχή πάλι η τοποθέτησή τους μέχρι να ολοκληρωθούν οι N_{runs} γραμμές του πίνακα. Ουσιαστικά, υπάρχει N_{runs}/l_1 φορές η

ίδια ομάδα, όπου κάθε ομάδα έχει στη σειρά όλα τα επίπεδα της πρώτης μεταβλητής.

$$\left. \begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ l_1 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ l_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ l_1 \end{array} \right\} N_{runs}/l_1$$

Δημιουργήθηκε έτσι η πρώτη στήλη του πίνακα. Για τη δεύτερη στήλη, τοποθετούνται τα επίπεδα της δεύτερης μεταβλητής αλλά, αυτήν τη φορά, κάθε επίπεδο επαναλαμβάνεται l_1 φορές. Δηλαδή, για το πρώτο τμήμα της δεύτερης στήλης θα ισχύει:

$$\left. \begin{array}{c} 0_1 \\ 0_2 \\ \vdots \\ 0_{l_1} \end{array} \right\} l_1$$

$$\left. \begin{array}{c} 1_1 \\ 1_2 \\ \vdots \\ 1_{l_1} \end{array} \right\} l_1$$

⋮

$$\left. \begin{array}{c} l_{2_1} \\ l_{2_2} \\ \vdots \\ l_{2_{l_1}} \end{array} \right\} l_1$$

Οι δείκτες $0, 1, \dots, l_1$ δείχνουν πόσες φορές έχει τοποθετηθεί το στοιχείο στη στήλη

και χρησιμοποιούνται εδώ για την καλύτερη κατανόηση. Στην πραγματική στήλη του σχεδιασμού τοποθετούνται μόνο οι αριθμοί των επιπέδων. Για να συμπληρωθούν όλες οι γραμμές του πίνακα, θα χρειαστεί να επαναληφθεί $N_{runs}/l_1/l_2$ φορές.

Κατ' αναλογία γίνονται και οι υπόλοιπες στήλες. Για την τρίτη μεταβλητή, δημιουργείται πρώτα μία στήλη με το κάθε επίπεδο της τρίτης μεταβλητής να επαναλαμβάνεται $l_1 l_2$ φορές και όλη η στήλη επαναλαμβάνεται $N_{runs}/l_1/l_2/l_3$ φορές. Η τελευταία στήλη έχει τα επίπεδα της k μεταβλητής $l_1 l_2 \dots l_{k-1}$ φορές και η στήλη, που δημιουργείται, καλύπτει όλες τις γραμμές του πίνακα, άρα δεν επαναλαμβάνεται καμία φορά.

Στο τέλος, οι γραμμές του πίνακα περιέχουν τα επίπεδα των μεταβλητών με τα οποία θα πραγματοποιηθεί το πείραμα, δηλαδή το διάνυσμα μεταβλητών. Ο πίνακας έχει την ακόλουθη μορφή:

0	0_1	0_1	...	0_1
1	0_2	0_2	...	0_2
\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots
l_1	0_{l_1}	0_{l_1}	...	0_{l_1}
0	1_1	0_{l_1+1}	...	0_{l_1+1}
\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots
l_1	l_{2l_1}	$0_{l_1 l_2}$...	$0_{l_1 l_2}$
0	0_1	1_1	...	$0_{l_1 l_2+1}$
\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots
l_1	l_{2l_1}	$l_{3l_1 l_2}$...	$0_{l_1 l_2 l_3}$
0	0_1	0_1	...	1_1
\vdots	\vdots	\vdots	...	\vdots
l_1	$l_2 l_1$	$l_{3l_1 l_2}$...	$l_{k l_1 l_2 l_3 \dots l_{k-1}}$

Η σειρά των γραμμών δεν έχουν ιδιαίτερη σημασία καθώς τα πειράματα μπορούν να εκτελεστούν με τυχαία σειρά για να αφαιρεθούν τυχόν μεταβλητές "θορύβου". Αυτές επηρεάζουν τα αποτελέσματα των πειραμάτων με αρνητικό τρόπο, καθώς η επιρροή τους δεν επιτρέπει την ακριβή μελέτη των μεταβλητών, που ενδιαφέρουν τον ερευνητή. Υπάρχει ο τυχηματικός σχεδιασμός που αναλύει καλύτερα τις μεταβλητές "θορύβου". Με αυτήν τη διαδικασία, μπορεί να δημιουργηθεί οποιοσδήποτε πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός με μεταβλητές που έχουν ή ίδιο ή διαφορετικό πλήθος επιπέδων.

Αλληλεπιδράσεις

Η ανάλυση των αλληλεπιδράσεων [23] είναι βασικό στοιχείο και βοηθά στην καλύτερη κατανόηση του κλασματικού παραγοντικού σχεδιασμού που αναλύεται στη συνέχεια. Οι αλληλεπιδράσεις αποτελούν τη βάση στην οποία κατασκευάζεται ο κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός, βοηθά στον σχεδιασμό με μπλοκ και δείχνει τη

σημαντικότητα των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των μεταβλητών σχεδιασμού. Κάποια παραδείγματα είναι απαραίτητα καθώς η άμεση γενίκευση δυσκολεύει την κατανόηση. Έστω ότι αναλύεται ένα πείραμα με δύο μεταβλητές και τρία επίπεδα η καθεμιά. Οι αλληλεπιδράσεις είναι AB , AB^2 και προκύπτουν επειδή οι μεταβλητές έχουν τρία επίπεδα και άρα υπάρχει η δυνατότητα να αυξηθεί η δύναμη των μεταβλητών. Η δύναμη των μεταβλητών πρέπει να είναι μικρότερη από το επίπεδο της αντίστοιχης μεταβλητής. Η AB^2 δείχνει την αλληλεπίδραση υψηλότερου βαθμού για τη μεταβλητή B . Η AB μπορεί να γραφεί με την εξίσωση $x_1 + x_2$ και η AB^2 με την $x_1 + 2x_2$. Στη συγκεκριμένη γραφή, τα x_1, x_2 δεν δηλώνουν την τιμή της μεταβλητής αλλά το επίπεδο στο οποίο βρίσκεται η μεταβλητή και οι συντελεστές μπροστά τους δείχνουν με ποια δύναμη συμμετέχει η κάθε μεταβλητή. Στην προκειμένη περίπτωση επιτρέπεται να λάβουν τις τιμές 0, 1, 2, θεωρώντας ότι το 0 είναι το πρώτο επίπεδο. Δημιουργούνται δύο σύνολα (*block*), ένα για κάθε αλληλεπίδραση, τα οποία περιέχουν όλα τα προς εκτέλεση πειράματα. Επειδή τα επίπεδα είναι τρία, χρησιμοποιούνται τρία αθροίσματα Q, R, S , καθένα από τα οποία χαρακτηρίζονται από μια εξίσωση. Οι εξισώσεις αυτές ονομάζονται **χαρακτηριστικές εξισώσεις** καθώς χαρακτηρίζουν την κάθε άθροιση. Για την αλληλεπίδραση AB οι χαρακτηριστικές εξισώσεις είναι:

$$Q : \text{mod}\left(\frac{x_1 + x_2}{3}\right) = 0 \quad R : \text{mod}\left(\frac{x_1 + x_2}{3}\right) = 1 \quad S : \text{mod}\left(\frac{x_1 + x_2}{3}\right) = 2 \quad (3.7)$$

Για την αλληλεπίδραση AB^2 οι χαρακτηριστικές εξισώσεις είναι:

$$Q : \text{mod}\left(\frac{x_1 + 2x_2}{3}\right) = 0 \quad R : \text{mod}\left(\frac{x_1 + 2x_2}{3}\right) = 1 \quad S : \text{mod}\left(\frac{x_1 + 2x_2}{3}\right) = 2 \quad (3.8)$$

Το υπόλοιπο της διαίρεσης με το 3 ($\text{mod}(\frac{\cdot}{3})$) υλοποιείται για να δίνει αποτέλεσμα μέσα στο εύρος των επιπέδων των μεταβλητών. Το 3 δείχνει το επίπεδο των μεταβλητών, δηλαδή αν οι μεταβλητές είχαν 4 επίπεδα τότε θα υπολογίζονταν το υπόλοιπο της διαίρεσης με το 4. Κάθε άθροιση αποτελείται από τα επίπεδα των μεταβλητών που ικανοποιούν την αντίστοιχη εξίσωση. Για παράδειγμα, για την άθροιση Q στην αλληλεπίδραση AB , αθροίζονται τα στοιχεία 00, 21, 12. Η αντίστοιχη έκφραση της εξίσωσης 3.4 γράφεται:

$$F_{AB} = (Q - R + S)/3 \quad (3.9)$$

Επομένως, υπάρχει η δυνατότητα να ελεγχθεί η σημαντικότητα των αλληλεπιδράσεων και, αν είναι μεγάλη, αυτές θα υπολογισθούν και στις επόμενες εκτιμήσεις που θα γίνουν για το πείραμα (στατιστική ανάλυση, συναρτήσεις προσέγγισης). Τα αθροίσματα των τετραγώνων της απόκλισης (Sum of Squares of Deviation) της κάθε

αλληλεπίδρασης υπολογίζονται από τον τύπο 3.10:

$$SS_{interaction} = (Q^2 + R^2 + S^2)/3 - \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 y_{ij}/9 \quad (3.10)$$

όπου y_{ij} είναι η απόκριση της κάθε εκτέλεσης του πειράματος που πραγματοποιήθηκε και ουσιαστικά το δεύτερο άθροισμα δείχνει την μέση απόκριση των πειραμάτων. Στη γενική περίπτωση, υπάρχουν αλληλεπιδράσεις της μορφής $AB^{c_2}C^{c_3} \dots K^{c_k}$ με τις δυνάμεις c_i να είναι μικρότερες από το επίπεδο της αντίστοιχης μεταβλητής. Η εξίσωση των αλληλεπιδράσεων θα είναι της μορφής $x_1 + d_2x_2 + d_3x_3 \dots d_kx_k$. Για αποφυγή ασαφειών, θα χρησιμοποιηθεί η σύμβαση ότι ο συντελεστής της πρώτης μη-μηδενικής μεταβλητής που συμμετέχει στην αλληλεπίδραση είναι ίσος με τη μονάδα και για αυτό και δεν τον συμβολίζουμε. Οι συντελεστές c_i περιορίζονται από το επίπεδο της i μεταβλητής, παρόλα αυτά οι συνηθέστερες τιμές είναι 1 ή 2. Για τη μετατροπή των δυνάμεων c_i σε d_i χρησιμοποιείται ο τύπος: $d_i = (l_i - c_i)c_i$ όπου l_i είναι τα επίπεδα των μεταβλητών. Ο τύπος αυτός χρησιμοποιήθηκε παραπάνω για τη μετατροπή της αλληλεπίδρασης AB^2 στη σχέση $x_1 + 2x_2$.

Σε ένα πρόβλημα με k μεταβλητές, οι αλληλεπιδράσεις δημιουργούνται σταδιακά. Πρώτα δημιουργούνται οι αλληλεπιδράσεις των δύο παραγόντων και κατασκευάζεται πίνακας με τις αλληλεπιδράσεις αφαιρώντας τις αντίστοιχες μεταβλητές. Μετά δημιουργούνται οι αλληλεπιδράσεις των τριών παραγόντων, κ.ο.κ.

3.2 Κλασματικός Παραγοντικός Σχεδιασμός

Ένας πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός μπορεί να οδηγήσει σε απαγορευτικά μεγάλο χρόνο και κόστος εκτέλεσης των υπολογιστικών πειραμάτων, καθώς ο πίνακας του σχεδιασμού λαμβάνει μεγάλες διαστάσεις. Για παράδειγμα, για δυο επίπεδα σε κάθε μεταβλητή, με έξι μεταβλητές χρειάζονται $2^6 = 64$ εκτελέσεις πειραμάτων, με δέκα μεταβλητές χρειάζονται $2^{10} = 1024$ εκτελέσεις κ.ο.κ. Προκειμένου να μειωθεί το πλήθος των αναπαραγωγών του πειράματος χρησιμοποιείται ο **Κλασματικός Παραγοντικός Σχεδιασμός** (Partial/Fractional Factorial Design) [4] [3]. Αν ο σχεδιασμός είναι 2^k , τότε μπορούν να πραγματοποιηθούν 2^{k-1} πειράματα, δημιουργώντας έναν σχεδιασμό που απαιτεί λιγότερα πειράματα. Με αυτόν τον τρόπο, ο αριθμός των εκτελέσεων μειώνεται στα μισά. Ένας τέτοιος σχεδιασμός θα μπορούσε να ονομαστεί 1/2 κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός. Για παράδειγμα, αντί για $2^{10} = 1024$ εκτελέσεις για δέκα μεταβλητές και δύο επίπεδα, θα εκτελεστούν $2^9 = 512$. Γενικότερα, υπάρχει η δυνατότητα αποκοπής περισσότερων πειραμάτων, δηλαδή δημιουργία ενός 2^{k-p} σχεδιασμού, με το μειονέκτημα ότι επηρεάζεται η αξιοπιστία του σχεδιασμού. Ο σχεδιασμός αυτός αποτελείται από έναν πίνακα με 2^{k-p} γραμμές και k στήλες. Για να γίνει, αυτό αποκόπτονται οι p μεταβλητές, δημιουργείται ένας πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός με τις $k - p$ μεταβλητές που έχουν μείνει και οι υπόλοιπες λαμβάνουν τιμές με τη βοήθεια των τιμών που έχουν οι $k - p$ μεταβλητές.

Οι μεταβλητές που θα αποκοπούν εξαρτώνται από τη φύση του πειράματος και τον αριθμό των μεταβλητών σχεδιασμού. Είναι λογικό να συνηθίζεται να αφαιρούνται οι μεταβλητές με τη μικρότερη επιρροή στα αποτελέσματα. Οι επιρροές μπορεί να είναι γνωστές από προηγούμενες αναλύσεις ή από εμπειρικές γνώσεις για τις μεταβλητές του πειράματος.

Η επιτυχία ενός κλασματικού παραγοντικού σχεδιασμού βασίζεται σε τρεις ιδέες:

1. **Σποραδικότητα των επιδράσεων (sparsity of effects):** Σε ένα πείραμα με πολλές ανεξάρτητες μεταβλητές, ορισμένες από αυτές καθορίζουν και επηρεάζουν τα αποτελέσματα περισσότερο έντονα από τις προηγούμενες.
2. **Προβολική ιδιότητα (projective property):** Ο κλασματικός σχεδιασμός που θα δημιουργηθεί μπορεί να προβληθεί σε έναν μεγαλύτερο και στιβαρό σχεδιασμό.
3. **Ακολουθιακός πειραματισμός (sequential experimentation):** Οι σχεδιασμοί μπορούν να συνδυασθούν ώστε να παράγουν ένα καλύτερο σχεδιασμό με περισσότερες εκτελέσεις και, άρα, μεγαλύτερη ακρίβεια στις εκτιμήσεις των αποκρίσεων και των επιδράσεων.

Η κυριότερη χρήση των κλασματικών σχεδιασμών είναι σε πειράματα κρησαρίσματος (screening experiments). Σε τέτοιου είδους πειράματα μετέχουν πολλές μεταβλητές με σκοπό την αναγνώριση εκείνων των μεταβλητών που έχουν μεγάλες επιδράσεις και εκείνων που έχουν μικρές. Τα πειράματα κρησαρίσματος χρησιμοποιούνται στα αρχικά στάδια της έρευνας, όπου είναι πολύ πιθανό πολλές μεταβλητές να έχουν ελάχιστη ή μηδενική επίδραση στην απόκριση. Στα επόμενα στάδια της έρευνας, μελετώνται οι μεταβλητές που αναγνωρίστηκαν να έχουν μεγάλες επιδράσεις, ενώ αμελούνται αυτές που, στο προηγούμενο στάδιο της έρευνας, βρέθηκαν να έχουν μικρή επίδραση.

Η ανάλυση που θα ακολουθήσει είναι παρόμοια με του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού (3.1) και περιέχει παραδείγματα που οδηγούν σε ευκολότερη κατανόηση.

3.2.1 2^{k-p} Κλασματικός Παραγοντικός Σχεδιασμός

Ένας 2^k παραγοντικός σχεδιασμός στον οποίο οι p μεταβλητές δημιουργούνται από τις υπόλοιπες, ονομάζεται 2^{k-p} Κλασματικός Παραγοντικός Σχεδιασμός ή διαφορετικά $1/2^p$ κλάσμα του 2^k παραγοντικού σχεδιασμού. Οι p μεταβλητές που θα δημιουργηθούν καθορίζουν την ακρίβεια και εγκυρότητα του σχεδιασμού. Για καθεμιά από αυτές τις μεταβλητές χρειάζεται μια ανεξάρτητη γεννήτρια, άρα γενικότερα ο σχεδιασμός απαιτεί p γεννήτριες. Οι γεννήτριες αποτελούν τις αλληλεπιδράσεις που μελετήθηκαν παραπάνω 3.1.2 και συνδυάζουν τις $k - p$ μεταβλητές για να παράξουν τις υπόλοιπες.

Για παράδειγμα, σε ένα πείραμα τεσσάρων μεταβλητών σχεδιασμού A,B,C,D, ο σχε-

διασμός 2^{4-1} δηλώνει τη δημιουργία της μεταβλητής D από αλληλεπίδραση των υπολοίπων. Σε αυτό το σημείο, πρέπει να σημειωθεί ότι μπορεί να αποκοπεί οποιαδήποτε μεταβλητή, είτε η πρώτη είτε η τελευταία, χωρίς να επηρεαστεί ο σχεδιασμός. Στη συνέχεια, για λόγους τυποποίησης, θα αποκόπτονται οι τελευταίες μεταβλητές του διανύσματος μεταβλητών. Τα δύο επίπεδα των μεταβλητών θα συμβολίζονται με 0 και 1. Ο πίνακας του σχεδιασμού περιέχει όλα τα διανύσματα μεταβλητών με τα οποία θα γίνουν οι εκτελέσεις των πειραμάτων καθώς και τις αλληλεπιδράσεις που δημιουργούνται και έχει την εξής μορφή:

Runs	A	B	C	AB	BC	AC	D=ABC	I
1	0	0	0	0	0	0	0	1
2	1	0	0	1	0	1	1	1
3	0	1	0	1	1	0	1	1
4	1	1	0	0	1	1	0	1
5	0	0	1	0	1	1	1	1
6	1	0	1	1	1	0	0	1
7	0	1	1	1	0	1	0	1
8	1	1	1	0	0	0	1	1

Ο πίνακας εξηγείται στη συνέχεια. Κατ' αρχάς, οι τρεις πρώτες στήλες αποτελούν ένα πίνακα πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού. Οι υπόλοιπες στήλες αποτελούν αλληλεπιδράσεις, όπου ο αριθμός τους παράγεται με την σχέση $\text{mod}(\frac{x_i+x_j+\dots+x_k}{2})$, όπου x_i, x_j, x_k δείχνουν τα επίπεδα των μεταβλητών που συμμετέχουν στην αλληλεπίδραση και το υπόλοιπο της διαίρεσης με το 2 γίνεται, επειδή οι μεταβλητές έχουν δύο επίπεδα. Για παράδειγμα, για την 6η στήλη του πίνακα, εφαρμόστηκε η σχέση $\text{mod}(\frac{x_1+x_2}{2})$, όπου x_1 είναι το επίπεδο της A μεταβλητής και x_2 το επίπεδο της C μεταβλητής. Η σχέση αυτή εφαρμόζεται για κάθε γραμμή του πίνακα. Σε όλους τους σχεδιασμούς υπάρχει η λεγόμενη **ορίζουσα σχέση** (defining relation) I η οποία αντιπροσωπεύει την αλληλεπίδραση όλων των μεταβλητών μεταξύ τους. Η ορίζουσα σχέση μπορεί να περιλαμβάνει και άλλο συνδυασμό μεταβλητών σε πειράματα όπου οι μεταβλητές έχουν μεγαλύτερο αριθμό επιπέδων. Η βασικότερη ιδιότητά της είναι ότι αποτελεί τη μεγαλύτερη αλληλεπίδραση (με τις περισσότερες μεταβλητές) και πρέπει να δημιουργείται με γνώμονα αυτήν την ιδιότητα. Σε αυτό το παράδειγμα, το I είναι ίσο με ABCD. Οι ανεξάρτητες μεταβλητές που υπολογίζονται άμεσα είναι οι A,B,C και παράγουν της αλληλεπιδράσεις: AB, BC, AC, ABC. Για την παραγωγή της μεταβλητής D χρησιμοποιείται η πολυπλοκότερη αλληλεπίδραση ABC. Αυτή αποτελεί και τη μοναδική γεννήτρια του σχεδιασμού. **Γεννήτριες** (generators) είναι οι σχέσεις που χρησιμοποιούνται για να παραχθούν οι αποκομμένες μεταβλητές. Ουσιαστικά, είναι ταυτόσημες με τις αλληλεπιδράσεις, απλά έχουν διαφορετική ονομασία που υποδηλώνει τη χρήση τους. Θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί, ως γεννήτρια, οποιαδήποτε άλλη αλληλεπίδραση AB, AC, με το μειονέκτημα της πώσης της ακρίβειας του σχεδιασμού. Επιθυμείται να λαμβάνονται ως γεννήτριες, αλληλεπιδράσεις με όσο το δυνατόν περισσότερες μεταβλητές ώστε να λαμβάνεται όσο το δυνατόν περισσότερη πληροφορία από τις ανεξάρτητες και σημαντικές μεταβλητές. Επιπλέον, για το 2^3 σχεδιασμό, η αλληλεπίδραση ABC αποτελεί την ορίζουσα

σχέση του και αυτό την καθιστά την καλύτερη αλληλεπίδραση για την παραγωγή της αποκομμένης μεταβλητής.

Με τη χρήση της σχέσης ορισμού, υπολογίζονται οι **ταυτόσημες (aliases) επιδράσεις**. Ταυτόσημες επιδράσεις είναι αυτές που έχουν την ίδια τιμή σε κάθε εκτέλεση του πειράματος. Για παράδειγμα, αν πολλαπλασιαστεί η ορίζουσα σχέση $ABCD$ με τη μεταβλητή A , προκύπτει :

$$AI = A^2BCD = BCD \Leftrightarrow A = BCD$$

Το A^2 γίνεται μηδέν για όλες τις τιμές του επειδή έχει δύο επίπεδα. Αυτό, ουσιαστικά, αποτελεί μια σύμβαση και γίνεται για να περιορίζονται οι δυνάμεις των μεταβλητών των αλληλεπιδράσεων στα όρια των επιπέδων των μεταβλητών. Στην υπόψη περίπτωση, η μεγαλύτερη δύναμη είναι το 1, οπότε πολλαπλασιάζοντας το A με τον εαυτό του δεν μπορεί να δώσει A^2 γιατί δεν επιτρέπεται και άρα γίνεται μονάδα.

Ομοίως, προκύπτει :

$$B = ACD$$

$$C = ABD$$

$$D = ABC$$

Συνεπώς είναι αδύνατο να ξεχωρίσουμε τις A και BCD , τις B και ACD , τις C και ABD , τις D και ABC . Γνωρίζοντας τα επίπεδα των A, B, C, D , ουσιαστικά είναι γνωστά τα επίπεδα των υπόλοιπων αλληλεπιδράσεων τριών μεταβλητών. Ο πίνακας 3.1 δείχνει αυτή τη σχέση ταύτισης:

Runs	A	B	C	D	ABC	BCD	ACD	ABD
1	0	0	0	0	0	0	0	0
2	1	0	0	1	1	1	0	0
3	0	1	0	1	1	0	1	0
4	1	1	0	0	0	1	1	0
5	0	0	1	1	1	0	0	1
6	1	0	1	0	0	1	0	1
7	0	1	1	0	0	0	1	1
8	1	1	1	1	1	1	1	1

Πίνακας 3.1: Κλασματικός Παραγοντικός Σχεδιασμός 4 Μεταβλητών, με δύο επίπεδα καθεμιά και οι αλληλεπιδράσεις τριών παραγόντων.

Οι ταυτόσημες επιδράσεις μπορούν να βρεθούν από τον πίνακα που περιέχει όλα τα διανύσματα μεταβλητών που χρησιμοποιήθηκαν στα πειράματα (πίνακα του σχεδια-

σμού του πειράματος), μαζί με τις αντίστοιχες τιμές των αλληλεπιδράσεων. Αν υπάρχει διπλή στήλη τότε οι αντίστοιχες αλληλεπιδράσεις είναι ταυτόσημες. Η επιλογή των γεννητριών πρέπει να γίνεται με τέτοιο τρόπο ώστε να μην υπάρχουν ταυτόσημες, δηλαδή η κάθε γεννήτρια πρέπει να δίνει αποτέλεσμα που να μην δίνει καμία άλλη του ίδιου σχεδιασμού.

Για τη δημιουργία του πίνακα που περιέχει όλα τα διανύσματα μεταβλητών για τις απαραίτητες εκτελέσεις του πειράματος που μελετάται (τρεις μεταβλητές με δυο επίπεδα) ακολουθούνται τα βήματα :

1. Κατασκευάζεται ένας 2^3 πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός.
2. Η τελευταία μεταβλητή παράγεται από τη γεννήτρια του σχεδιασμού, που είναι μόνο μια γιατί δεν χρειάζεται άλλη. Για τον υπολογισμό της τελευταίας μεταβλητής, η γεννήτρια παίρνει τη μορφή: $mod(\frac{x_1+x_2+x_3}{2})$ όπου x_i είναι τα επίπεδα των μεταβλητών.

Από το προηγούμενο απλό παράδειγμα, μπορεί να προκύψει η γενίκευση της διαδικασίας.

Για να δημιουργηθεί ένας 2^{k-p} κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός, απαιτούνται p ανεξάρτητες γεννήτριες. Αρχικά, επιλέγονται οι μεταβλητές που θα αποκοπούν. Οι βέλτιστες μεταβλητές που θα αποκοπούν είναι αυτές με τη μικρότερη επιρροή στα αποτελέσματα του πειράματος. Οι επιρροές αυτές πρέπει να είναι γνωστές από προηγούμενες έρευνες ή από γνώση του πειράματος. Δημιουργείται ο πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός των $k - p$ μεταβλητών. Επιλέγεται η οριζουσα σχέση, η οποία περιέχει όλες τις μεταβλητές του πειράματος και έχει τη μορφή:

$$I = ABC \dots K \quad (3.11)$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι για πειράματα των οποίων οι μεταβλητές έχουν πάνω από δύο επίπεδα μπορούν να δημιουργηθούν παραπάνω από μια οριζουσες σχέσεις. Αυτό βοηθά στη δημιουργία συνόλων (blocks) που χρειάζονται σε άλλου είδους σχεδιασμούς (block design).

Η οριζουσα σχέση λύνεται ως προς μια ή περισσότερες μεταβλητές προκειμένου να βρεθούν οι ταυτόσημες επιδράσεις. Λύνοντας τη σχέση 3.11 ως προς τη μεταβλητή K , προκύπτει:

$$K = ABC \dots (K - 1) \quad (3.12)$$

Η εξίσωση 3.12 είναι κωδικοποιημένη ως προς τις μεταβλητές. Για τη μετατροπή της σε μια γραφή που περιέχει τα επίπεδα μεταβλητών, υπολογίζεται:

$$x_k = x_1 + x_2 + \dots + x_{k-1} \quad (3.13)$$

Στην περίπτωση που ο σχεδιασμός απαιτεί την αποκοπή μιας μόνο μεταβλητής, η οριζουσα σχέση λυμένη ως προς την αντίστοιχη μεταβλητή αποτελεί την τέλεια γεννήτρια για τη μεταβλητή K . Σε αντίθετη περίπτωση, η διαδικασία προχωρά στο επόμενο βήμα.

Καταγράφονται όλες οι αλληλεπιδράσεις που μπορούν να σχηματιστούν με τις $k - p$ μεταβλητές του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού. Επιλέγονται p αλληλεπιδράσεις οι οποίες θα γίνουν γεννήτριες για την παραγωγή των επιπέδων των p αποκομμένων μεταβλητών. Οι αλληλεπιδράσεις πρέπει να έχουν το μεγαλύτερο δυνατό αριθμό μεταβλητών χωρίς να αλληλοκαλύπτονται. Δηλαδή, δεν είναι ορθό να επιλεγθούν οι αλληλεπιδράσεις ABC , AB , επειδή η ABC εμπεριέχει την άλλη AB . Γενικά, η επιλογή των γεννητριών είναι μια δύσκολη διαδικασία που απαιτεί γνώση του πειράματος και του σχεδιασμού.

Αφού έχουν ορισθεί οι γεννήτριες, χρησιμοποιούν για να παράξουν τις p αποκοπόμενες μεταβλητές. Για κάθε γραμμή του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού που έχει δημιουργηθεί από τις $k - p$ μεταβλητές, εφαρμόζονται οι τύποι των γεννητριών και παράγουν την αντίστοιχη μεταβλητή.

Ένα παράδειγμα θα διευκολύνει την κατανόηση της διαδικασίας. Έστω ένα πείραμα με 6 μεταβλητές (A, B, C, D, E, F) απαιτεί 2^{6-2} κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό. Δημιουργείται ο πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός για τις πρώτες τέσσερις μεταβλητές βλ. Πίνακα 3.2.

Runs	A	B	C	D
1	0	0	0	0
2	1	0	0	0
3	0	1	0	0
4	1	1	0	0
5	0	0	1	0
6	1	0	1	0
7	0	1	1	0
8	1	1	1	0
9	0	0	0	1
10	1	0	0	1
11	0	1	0	1
12	1	1	0	1
13	0	0	1	1
14	1	0	1	1
15	0	1	1	1
16	1	1	1	1

Πίνακας 3.2: Πλήρης Παραγοντικός Σχεδιασμός 4 Μεταβλητών, με δύο επίπεδα καθεμιά

Επιλέγεται η οριζουσα σχέση $I = ABCDEF$, που περιέχει όλες τις μεταβλητές του

πειράματος. Ο σχεδιασμός απαιτεί δύο γεννήτριες που να περιέχουν συνδυασμό των τεσσάρων πρώτων μεταβλητών. Απαιτούνται δύο μόνο γεννήτριες γιατί αυτός είναι και ο αριθμός των αποκοιπόμενων μεταβλητών. Οι γεννήτριες, που θα οδηγήσουν στον καλύτερο σχεδιασμό, είναι $E = ABC$, $F = BCD$ ($x_5 = x_1 + x_2 + x_3$, $x_6 = x_2 + x_3 + x_4$), γιατί δεν αλληλοκαλύπτονται και περιέχουν όσο το δυνατόν περισσότερες μεταβλητές. Δεν επιλέγεται η γεννήτρια $ABCD$ γιατί η επόμενη γεννήτρια που θα επιλεγθεί θα εμπεριέχεται ολόκληρη στην πρώτη γεννήτρια. Σε αυτήν την περίπτωση, λέγεται ότι οι γεννήτριες αλληλοκαλύπτονται και οδηγεί σε αύξηση των ταυτόσημων επιδράσεων. Στη συνέχεια, για κάθε γραμμή του πίνακα 3.2 εφαρμόζονται οι γεννήτριες για την παραγωγή των τιμών των άλλων δύο μεταβλητών. Το αποτέλεσμα της κάθε γεννήτριας διαιρείται με το 2 (επίπεδο της μεταβλητής) και λαμβάνεται το υπόλοιπο της διαίρεσης ως η τιμή της αντίστοιχης μεταβλητής. Για την πρώτη γραμμή, η μεταβλητή E λαμβάνει την τιμή 0 ($x_5 = \text{mod}^{\frac{0+0+0}{2}} = 0$) και η F την τιμή 0 ($x_6 = \text{mod}^{\frac{0+0+0}{2}} = 0$). Για τη δεύτερη γραμμή, η μεταβλητή E λαμβάνει την τιμή 1 ($x_5 = \text{mod}^{\frac{1+0+0}{2}} = 1$) και η F την τιμή 0 ($x_6 = \text{mod}^{\frac{0+0+0}{2}} = 0$). Με παρόμοιο τρόπο συμπληρώνονται και οι υπόλοιπες γραμμές. Ο τελικός πίνακας θα έχει την μορφή 3.3.

Runs	A	B	C	D	E=ABC	F=BCD
1	0	0	0	0	0	0
2	1	0	0	0	1	0
3	0	1	0	0	1	1
4	1	1	0	0	0	1
5	0	0	1	0	1	1
6	1	0	1	0	0	1
7	0	1	1	0	0	0
8	1	1	1	0	1	0
9	0	0	0	1	0	1
10	1	0	0	1	1	1
11	0	1	0	1	1	0
12	1	1	0	1	0	0
13	0	0	1	1	1	0
14	1	0	1	1	0	1
15	0	1	1	1	0	1
16	1	1	1	1	1	1

Πίνακας 3.3: Κλασματικός Παραγοντικός Σχεδιασμός 2^{6-2} , με δύο επίπεδα ανά μεταβλητή

Παρατηρείται ότι ο σχεδιασμός έχει 16 εκτελέσεις του πειράματος αντί για $2^6 = 64$ που θα περιείχε ο πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός. Κατά παρόμοιο τρόπο, δημιουργούνται και σχεδιασμοί περισσότερων μεταβλητών σχεδιασμού.

3.2.2 Αναλυτική Τάξη Σχεδιασμού

Οι σχεδιασμοί έχουν **αναλυτική τάξη** R [25], αν καμία επίδραση p μεταβλητών δεν είναι ταυτόσημη με άλλη επίδραση που περιέχει λιγότερες από $R - p$ μεταβλητές. Οι αναλυτική τάξη συμβολίζεται με τη Ρωμαϊκή αρίθμηση. Βασικές αναλυτικές τάξεις είναι οι εξής:

1. **Σχεδιασμοί αναλυτικής τάξης III:** Οι κύριες επιδράσεις μπορεί να είναι ταυτόσημες με αλληλεπιδράσεις δύο μεταβλητών και οι αλληλεπιδράσεις δύο μεταβλητών μπορεί να είναι ταυτόσημες μεταξύ τους. Επομένως, επιδράσεις μιας (1) μεταβλητής δεν είναι ταυτόσημες με επιδράσεις λιγότερων από $3 - 1$ μεταβλητών. Για παράδειγμα, ένας σχεδιασμός 2^{3-1} με ορίζουσα σχέση $I = ABC$ είναι αναλυτικής τάξης III.
2. **Σχεδιασμοί αναλυτικής τάξης IV:** Οι αλληλεπιδράσεις δύο μεταβλητών μπορεί να είναι ταυτόσημες με αλληλεπιδράσεις τριών και πάνω μεταβλητών. Οι κύριες επιδράσεις (μια μεταβλητή $p = 1$) δεν είναι ταυτόσημες με αλληλεπιδράσεις δύο παραγόντων $R - p > 2 \Leftrightarrow R = 4$. Για παράδειγμα, ένας σχεδιασμός 2^{4-1} με ορίζουσα σχέση $I = ABCD$ είναι αναλυτικής τάξης IV.
3. **Σχεδιασμοί αναλυτικής τάξης V:** Οι αλληλεπιδράσεις δύο μεταβλητών μπορεί να είναι ταυτόσημες με αλληλεπιδράσεις τριών μεταβλητών και πάνω. Οι κύριες επιδράσεις (μια μεταβλητή $p = 1$) δεν είναι ταυτόσημες με αλληλεπιδράσεις τριών παραγόντων $R - p > 3 \Leftrightarrow R = 5$. Για παράδειγμα, ένας σχεδιασμός 2^{4-1} με ορίζουσα σχέση $I = ABCDE$ είναι αναλυτικής τάξης V.

Η υψηλότερη δυνατή αναλυτική τάξη ενός κλασματικού παραγοντικού σχεδιασμού προσφέρει καλύτερο σχεδιασμό, αξιοπιστία στα δεδομένα και απαιτούνται λιγότεροι περιορισμοί σχετικά με υποθέσεις περί αμελητέων αλληλεπιδράσεων. Η αναλυτική τάξη παρέχει πληροφορίες για την εγκυρότητα του σχεδιασμού και την ακρίβειά του.

3.2.3 3^{k-p} και l^{k-p} Κλασματικός Παραγοντικός Σχεδιασμός

Πολλές φορές υπάρχει ανάγκη ανάλυσης πειραμάτων με μεταβλητές που έχουν περισσότερα από δύο επίπεδα, κατ' αντιστοιχία με αυτά που αναφέρθηκαν στον πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό. Με τον τρόπο αυτό, ο σχεδιασμός δίνει καλύτερη εποπτεία του πειράματος και προσφέρει τη δυνατότητα δημιουργίας προτύπων παλινδρόμησης μεγαλύτερου βαθμού.

Κατ' αντιστοιχία με τα πειράματα μεταβλητών δύο επιπέδων, ένας Κλασματικός Παραγοντικός Σχεδιασμός με k μεταβλητές τριών επιπέδων και p μεταβλητές που θα αποκοπούν ονομάζεται είτε 3^{k-p} κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός, είτε $1/3^p$ κλάσμα του 3^k παραγοντικού σχεδιασμού. Πάλι, για τη δημιουργία των p μεταβλητών που θα αποκοπούν χρειάζονται p γεννήτριες. Σε αυτήν την περίπτωση, οι γεννήτριες είναι περισσότερες επειδή οι αλληλεπιδράσεις (ουσιαστικά είναι ταυτόσημες με τις

γεννήτριες) μπορούν να λάβουν διαφορετικούς συντελεστές. Στην υποενότητα 3.1.2 των αλληλεπιδράσεων αναφέρθηκαν αλληλεπιδράσεις της μορφής

$$A^{c_1} B^{c_2} C^{c_3} \dots K^{c_k} \quad (3.14)$$

όπου τα c_k είναι δυνάμεις που υποδηλώνουν την τάξη της αλληλεπίδρασης. Υπενθυμίζεται ότι οι συντελεστές c_k παίρνουν τιμές μικρότερες του επιπέδου της μεταβλητής στην οποία αντιστοιχούν ($c_k < l_k$). Η ουσιαστική διαφορά που υπάρχει με τον σχεδιασμό δύο επιπέδων 2^{k-p} είναι οι αλληλεπιδράσεις-γεννήτριες. Η διαδικασία θα αναλυθεί όπως προηγουμένως, παρουσιάζοντας τη γενική διαδικασία και ένα παράδειγμα παράλληλα. Το παράδειγμα θα αφορά ένα πείραμα με έξι μεταβλητές, τρία επίπεδα καθεμιά και δυο μεταβλητές που πρέπει να αποκοπούν. Πρόκειται, δηλαδή, για ένα σχεδιασμό 3^{5-2} . Η διαδικασία είναι η ακόλουθη:

1. Επιλέγονται οι p μεταβλητές που θα αποκοπούν. Οι βέλτιστες μεταβλητές που θα αποκοπούν είναι αυτές με τη μικρότερη επιρροή στα αποτελέσματα του πειράματος. Η επιρροή των μεταβλητών είτε έχει βρεθεί από άλλη ανάλυση είτε από γνώση του πειράματος. Στο παράδειγμα θα επιλεγθούν οι δύο τελευταίες χωρίς να εμποδίσει την γενικότητα της διαδικασίας.
2. Δημιουργείται ο πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός των $k-p$ μεταβλητών. Αυτός θα περιέχει 3^{k-p} διανύσματα μεταβλητών για τις αντίστοιχες εκτελέσεις του πειράματος. Στο παράδειγμα που χρησιμοποιείται απαιτούνται 27 εκτελέσεις, άρα ο αντίστοιχος πίνακας του σχεδιασμού έχει 27 γραμμές και θα είναι ο ακόλουθος φαίνεται στον Πίνακα 3.4.
3. Ορίζεται η ορίζουσα σχέση. Αυτή πρέπει να περιέχει όλες τις μεταβλητές που πειράματος και, ουσιαστικά, αποτελεί τη μεγαλύτερη αλληλεπίδραση. Έχει τη μορφή:

$$I = A^{c_1} B^{c_2} C^{c_3} \dots K^{c_k} \quad (3.15)$$

όπου τα c_k είναι δυνάμεις που υποδηλώνουν την τάξη της αλληλεπίδρασης.

4. Επιλέγονται οι p γεννήτριες του σχεδιασμού. Στην περίπτωση που απαιτείται η αποκοπή μίας μεταβλητή ($p = 1$), τότε η ορίζουσα σχέση επιλύεται ως προς την επιθυμητή μεταβλητή:

$$K = A^{c_1} B^{c_2} C^{c_3} \dots (K-1)^{c_{k-1}} \quad (3.16)$$

Ο συντελεστής c_k δεν λαμβάνεται υπόψη για να δημιουργηθεί η επιθυμητή γεννήτρια. Συνηθίζεται η πρώτη μεταβλητή που περιέχεται στη γεννήτρια ή/και στην αλληλεπίδραση να έχει συντελεστή c_k ίσο με την μονάδα. Η εξίσωση 3.16 είναι γραμμένη με τέτοιο τρόπο ώστε τα αποτελέσματα παίρνουν τιμές μικρότερες του επιπέδου των μεταβλητών. Η μετατροπή της σε αυτή την γραφή δίνεται από τη σχέση:

$$x_k = d_1 x_1 + d_2 x_2 + \dots + d_{k-1} x_{k-1} \quad (3.17)$$

Runs	A	B	C
1	0	0	0
2	1	0	0
3	2	0	0
4	0	1	0
5	1	1	0
6	2	1	0
7	0	2	0
8	1	2	0
9	2	2	0
10	0	0	1
11	1	0	1
12	2	0	1
13	0	1	1
14	1	1	1
15	2	1	1
16	0	2	1
17	1	2	1
18	2	2	1
19	0	0	2
20	1	0	2
21	2	0	2
22	0	1	2
23	1	1	2
24	2	1	2
25	0	2	2
26	1	2	2
27	2	2	2

Πίνακας 3.4: Πλήρης Παραγοντικός Σχεδιασμός 3^{5-2} , με τρία επίπεδα.

όπου $d_i = [(l_k - c_k)c_i] \bmod (l_k)$ για κάθε i από 1 έως και $k - 1$. Η μετατροπή του c_k σε d_k γίνεται έτσι ώστε τα αποτελέσματα να είναι μικρότερα των επιπέδων της αντίστοιχης μεταβλητή. Δηλαδή, αν η μεταβλητή K είχε τέσσερα (4) επίπεδα, ο d_i θα πρέπει να κυμαίνεται από 0 έως και 3. Στην περίπτωση που ο σχεδιασμός απαιτεί την αποκοπή μιας μόνο μεταβλητής, η ορίζουσα σχέση λυμένη ως προς την αντίστοιχη μεταβλητή αποτελεί την καλύτερη δυνατή γεννήτρια για τη μεταβλητή k .

Σε αντίθετη περίπτωση, η διαδικασία προχωρά στην εύρεση των γεννητριών. Καταγράφονται όλες οι αλληλεπιδράσεις που μπορούν να σχηματιστούν με τις $k - p$ μεταβλητές του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού. Επιλέγονται p αλληλεπιδράσεις οι οποίες θα γίνουν γεννήτριες για την παραγωγή των επιπέδων των p αποκοπόμενων μεταβλητών. Οι αλληλεπιδράσεις πρέπει να

έχουν το μεγαλύτερο δυνατό αριθμό μεταβλητών χωρίς όμως να αλληλοκαλύπτονται. Δηλαδή, δεν πρέπει οι επιδράσεις που πιθανά ενδιαφέρουν να είναι ταυτόσημες μεταξύ τους. Για παράδειγμα, οι αλληλεπιδράσεις του πειράματος του παραδείγματος (σχεδιασμός 3^{5-2}) ABC , ABC^2 περιέχουν ακριβώς τις ίδιες μεταβλητές, άρα αλληλοκαλύπτονται και δεν θα παρέχουν καλή ποιότητα στον σχεδιασμό αν ληφθούν και οι δυο ταυτόχρονα. Γενικά, η επιλογή των γεννητριών είναι δύσκολη διαδικασία που απαιτεί γνώση του πειράματος και του σχεδιασμού. Πρώτα επιλέγονται γεννήτριες με συντελεστές c_k μονάδα, καθώς αυτοί έχουν αποδειχθεί, μέσω δοκιμών και πειραμάτων, ότι έχουν τις μεγαλύτερες επιρροές. Οι γεννήτριες μετατρέπονται σε σχέσεις της μορφής $(x_1 + c_2x_2 + \dots + c_kx_k)$ όπως έγινε και παραπάνω. Οι γεννήτριες μετατρέπονται σε σχέσεις της μορφής: $(x_1 + c_2x_2 + \dots + c_kx_k)$ Το αποτέλεσμα τους πρέπει να είναι μικρότερο του μεγαλύτερου επιπέδου της μεταβλητής που θα παράγουν, για αυτό και υπολογίζεται το υπόλοιπο της διαίρεσης της σχέσης της αλληλεπίδρασης με το επίπεδο της αντίστοιχης μεταβλητής. Γενικότερα, σε πειράματα με πολλές μεταβλητές και (κατά επέκταση) επιδράσεις υποθέτουμε ότι οι υψηλής τάξης αλληλεπιδράσεις είναι αμελητέες. Στο παράδειγμα που χρησιμοποιείται, υπάρχουν οι αλληλεπιδράσεις ABC , AB , BC , AC με συντελεστές μονάδα στο καθένα και AB^2C^2 , ABC^2 , AB^2C , AB^2 , BC^2 , AC^2 με συντελεστές 1 και 2. Παρατηρείται αμέσως πόσες διαφορετικές αλληλεπιδράσεις δημιουργούν σε σχέση με αυτές των πειραμάτων με δύο επίπεδα. Χρειάζονται δύο γεννήτριες για την παραγωγή των μεταβλητών D και E . Επιλέγονται οι γεννήτριες $D = AB$ και $E = BC$, επειδή δεν αλληλοκαλύπτονται. Μετατρέπονται σε επίπεδα μεταβλητών:

$$x_4 = x_1 + x_2 \quad (3.18)$$

$$x_5 = x_2 + x_3 \quad (3.19)$$

Οι σχέσεις αυτές χρησιμοποιούνται στο επόμενο βήμα.

5. Δημιουργούνται οι αποκοπτόμενες μεταβλητές με τη βοήθεια των γεννητριών. Η μετατροπή της γεννήτριας σε μορφή επιπέδων έχει ήδη πραγματοποιηθεί από το προηγούμενο βήμα. Λαμβάνονται οι μεταβλητές κάθε γραμμής και εφαρμόζοντας τις γεννήτριες παράγονται οι αντίστοιχες μεταβλητές της αντίστοιχης γραμμής. Η συνέχεια του παραδείγματος δίνει μια καλύτερη εποπτεία του βήματος. Εφαρμόζεται η σχέση 3.18 για τη δημιουργία της μεταβλητής D και η 3.19 για την E . Συμπληρώνεται ο πίνακας 3.4 και κατασκευάζεται ο τελικός πίνακας 3.5 του 3^{5-2} κλασματικού παραγοντικού σχεδιασμού.

Η διαδικασία είναι παρόμοια και για πειράματα με μεταβλητές που χωρίζονται σε περισσότερα επίπεδα. Σε πειράματα όπου οι μεταβλητές δεν έχουν τον ίδιο αριθμό επιπέδων, εφαρμόζεται όλη η διαδικασία που αναλύθηκε πριν, με τη διαφορά ότι ο αρχικός πίνακας του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού δημιουργείται με τη διαδικασία του κεφαλαίου 3.1.2.

Runs	A	B	C	D=AB	E=BC
1	0	0	0	0	0
2	1	0	0	1	0
3	2	0	0	2	0
4	0	1	0	1	1
5	1	1	0	2	1
6	2	1	0	0	1
7	0	2	0	2	2
8	1	2	0	0	2
9	2	2	0	1	2
10	0	0	1	0	1
11	1	0	1	1	1
12	2	0	1	2	1
13	0	1	1	1	2
14	1	1	1	2	2
15	2	1	1	0	2
16	0	2	1	2	0
17	1	2	1	0	0
18	2	2	1	1	0
19	0	0	2	0	2
20	1	0	2	1	2
21	2	0	2	2	2
22	0	1	2	1	0
23	1	1	2	2	0
24	2	1	2	0	0
25	0	2	2	2	1
26	1	2	2	0	2
27	2	2	2	1	1

Πίνακας 3.5: Κλασματικός Παραγοντικός Σχεδιασμός 3^{5-2}

3.3 Τυχαιοποιημένος Σχεδιασμός Πειραμάτων (Randomized design)

Σε ένα πείραμα, χρησιμοποιείται ο τυχαιοποιημένος (μπορεί να ονομαστεί και τυχαυματικός) σχεδιασμός (Randomized design) [4] [26] για να μελετηθεί η επιρροή των ανεξάρτητων μεταβλητών, χωρίς να λαμβάνονται υπόψη μεταβλητές θορύβου. Καταφέρει να μειώσει το θόρυβο και τη μεγάλη διακύμανση των δεδομένων. Με τον όρο 'θόρυβο' νοείται μια παράμετρος που επηρεάζει την απόκριση του πειράματος και δεν επιθυμείται να ληφθεί υπόψη. Ουσιαστικά, οι ενοχλητικές μεταβλητές θα έπρεπε να απουσιάζουν από το πείραμα ώστε να μελετηθεί με ακρίβεια η επιρροή των μεταβλητών που ενδιαφέρουν τον πειραματιστή. Η χρήση του τυχαιοποιημένου σχεδιασμού μειώνει την επίδραση ενοχλητικών μεταβλητών (θόρυβος) που οδηγεί

ταυτόχρονα και σε μείωση του πειραματικού σφάλματος.

Υπάρχει ο **πλήρης τυχαιοποιημένος σχεδιασμός** (Completely Randomized Design). Σε έναν τέτοιο σχεδιασμό, οι τιμές των μεταβλητών εκλέγονται τυχαία, με τη βοήθεια μιας γεννήτριας τυχαίων αριθμών. Για κάθε μεταβλητή, εκλέγεται τυχαία μια τιμή μέσα στο πεδίο ορισμού της. Δημιουργείται, έτσι, ένα διάνυσμα μεταβλητών για μία εκτέλεση του πειράματος. Αυτό επαναλαμβάνεται για όσες εκτελέσεις του πειράματος επιθυμούνται να πραγματοποιηθούν. Δημιουργείται ο πίνακας σχεδιασμού που περιέχει όλα τα διανύσματα μεταβλητών για τις εκτελέσεις. Πραγματοποιούνται οι εκτελέσεις και, στη συνέχεια, ακολουθεί η υπόλοιπη διαδικασία κατασκευής του σχεδιασμού (δημιουργία μεταπροτύπων, ανάλυση επιρροών κ.τ.λ.). Ο σχεδιασμός αυτός δεν εμπεριέχει επίπεδα και δεν χρειάζεται η διακριτοποίηση των μεταβλητών όπως γίνεται στους παραγοντικούς σχεδιασμούς.

Υπάρχει και ένας συνδυασμός παραγοντικού και τυχαιοποιημένου σχεδιασμού. Στον σχεδιασμό αυτό, δημιουργείται πρώτα ένας πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός. Για τον λόγο αυτό, απαιτείται ο χωρισμός των μεταβλητών σε επίπεδα. Ο πίνακας του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού αποτελείται από όλα τα διανύσματα των μεταβλητών με τα οποία θα γίνουν οι εκτελέσεις του πειράματος. Η τυχαιότητα της μεθόδου έγκειται στη σειρά που θα πραγματοποιηθούν οι εκτελέσεις. Μια γεννήτρια τυχαίων αριθμών αποφασίζει ποιο διάνυσμα μεταβλητών από τον πίνακα θα χρησιμοποιηθεί για κάθε εκτέλεση, δηλαδή καθορίζει τη σειρά με την οποία θα χρησιμοποιηθούν τα διανύσματα μεταβλητών για κάθε εκτέλεση. Αυτό μπορεί να γίνει με οποιοδήποτε πίνακα παραγοντικού σχεδιασμού, είτε πλήρους είτε κλασματικού. Ο σχεδιασμός αυτού του τύπου έχει λιγότερη τυχαιότητα και κατ'επέκταση έχει καλύτερη ποιότητα και αξιοπιστία από τον προηγούμενο σχεδιασμό. Η υπόλοιπη ενότητα εστιάζει περισσότερο σε αυτό το είδος σχεδιασμού καθώς αυτός αναπτύχθηκε στο λογισμικό DoE. Έτσι και αλλιώς, η διαδικασία που ακολουθείται και στις δύο μεθόδους είναι παρόμοια.

Με τον τρόπο κατασκευής των τυχαιοποιημένων σχεδιασμών, αν μια ανεπιθύμητη μεταβλητή επηρεάζει τα αποτελέσματα του πειράματος, η επιρροή της χάνεται μέσα στην τυχαιότητα των εκτελέσεων του πειράματος. Στην περίπτωση που οι ενοχλητικές μεταβλητές είναι άγνωστες και μη-ελέγξιμες, ο σχεδιασμός δεν τις λαμβάνει υπόψη του, εκτελεί κανονικά τις εκτελέσεις, αλλά με τυχαία σειρά. Για την καλύτερη κατανόηση του παρουσιάζεται ένα απλό παράδειγμα. Έστω ότι ένα πείραμα έχει δύο μεταβλητές με τρία επίπεδα η καθεμιά. Υπάρχουν εννιά (9) διαφορετικοί συνδυασμοί

επιπέδων μεταβλητών (βλ. παρακάτω πίνακα).

0	0
0	1
0	2
1	0
1	1
1	2
2	0
2	1
2	2

Ο πίνακας αυτός αποτελεί τον πίνακα εκτελέσεων ενός πλήρους παραγοντικού συνδυασμού. Σε ένα μη-τυχαιοποιημένο σχεδιασμό, η απλούστερη επιλογή θα ήταν να γίνουν τα πειράματα με τη σειρά που βρίσκονται στον πίνακα. Σε ένα τυχαιοποιημένο σχεδιασμό, πριν από κάθε εκτέλεση θα επιλεγόταν ένας συνδυασμός επιπέδων τυχαία από τον παραπάνω πίνακα και θα εκτελούταν το πείραμα. Αυτό θα επαναλαμβανόταν μέχρι να έχουν εκτελεστεί όλοι οι συνδυασμοί. Στην πράξη, η τυχαία αυτή επιλογή γίνεται με τη βοήθεια ηλεκτρονικών υπολογιστών και με ειδικά προγράμματα παραγωγής τυχαίων αριθμών. Η σειρά με την οποία θα εκτελεστούν έχει $6!$ (το θαυμαστικό δηλώνει τον παραγοντικό αριθμό, δηλαδή στο παράδειγμα $6! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6$) διαφορετικούς συνδυασμούς. Βασικοί παράγοντες που επηρεάζουν τον σχεδιασμό είναι:

1. Ανεξάρτητες μεταβλητές.
2. Επίπεδα κάθε μεταβλητής.
3. Επαναλήψεις κάθε πειράματος (εδώ, δεν ασχολούμαστε με στοχαστικά πειράματα, απλά αναφέρεται για πληρότητα).
4. Μέγεθος του δείγματος των εκτελέσεων που θα πραγματοποιηθούν.

Σημειώνεται ότι, για λόγους ομοιομορφίας, υπαγορεύεται ο αριθμός των επαναλήψεων να είναι ίδιος για όλες τις εκτελέσεις του πειράματος. Το δείγμα των εκτελέσεων μπορεί να είναι όλοι οι συνδυασμοί των επιπέδων των μεταβλητών, δηλαδή αυτό που γίνεται σε ένα πλήρες παραγοντικό σχεδιασμό. Επειδή πολλές φορές αυτό είναι χρονοβόρο και με μεγάλο κόστος, το δείγμα μπορεί να είναι ένα υποσύνολο των πιθανών συνδυασμών. Σε αυτήν την περίπτωση, υπάρχει η πιθανότητα να μην ληφθεί αντιπροσωπευτικό δείγμα συνδυασμών, γεγονός που μπορεί να οδηγήσει σε λανθασμένο σχεδιασμό πειράματος.

Στην περίπτωση που οι ενοχλητικές μεταβλητές είναι γνωστές και ελέγξιμες, εφαρμόζεται ο τυχαιοποιημένος σχεδιασμός κατά μπλοκ (block). Κάθε ενοχλητική μεταβλητή χωρίζεται σε επίπεδα. Κάθε επίπεδο μιας μεταβλητής αποτελεί το κύριο χαρακτηριστικό ενός μπλοκ. Υπάρχει ένας γενικός κανόνας: "Δημιούργησε μπλοκ με ότι μπορείς, τυχαιοποίησε ότι δεν μπορείς". Τα μπλοκ δημιουργούνται για να

αφαιρέσουν την επιρροή των βασικότερων μεταβλητών θορύβου. Η τυχαιοποίηση χρησιμοποιείται για να μειώσει την επιρροή των υπόλοιπων μεταβλητών θορύβου, που δεν μπορούν να ελεγχθούν. Σε ένα μπλοκ, κρατάται σταθερή η ενοχλητική μεταβλητή και εκτελούνται όλα τα πειράματα. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα, σε κάθε μπλοκ να υπάρχουν όλοι οι συνδυασμοί επιπέδων των ανεξάρτητων μεταβλητών και να σταθεροποιείται η επιρροή των ενοχλητικών μεταβλητών. Μετά το πέρας των πειραμάτων, γίνεται στατική ανάλυση των μπλοκ, ώστε να εξαχθεί η επιρροή των ενοχλητικών μεταβλητών. Ο σχεδιασμός με μπλοκ μπορεί να είναι χρήσιμος για να αποκλειστούν από το πείραμα μεταβλητές θορύβου, αλλά οδηγεί και στην ενδυνάμωση των επιρροών των άλλων μεταβλητών. Για παράδειγμα, κρατάται σταθερή μια μεταβλητή σε κάθε μπλοκ και οι υπόλοιπες μεταβλητές παραμένουν τυχαίες έτσι ώστε να εξακριβωθεί η επιρροή της μεταβλητής του μπλοκ. Ο σχεδιασμός αυτός έχει την ευελιξία να μπορούν να εκτελεστούν όσα πειράματα επιθυμούνται χωρίς κάποιο περιορισμό. Αυτό παρέχει πλεονέκτημα σε πειράματα όπου οι μεταβλητές έχουν χωρισθεί σε πολλά επίπεδα.

3.3.1 Στατιστική Ανάλυση του Τυχαιοποιημένου Σχεδιασμού

Block 1	Block 2	...	Block b	
y_{11}	y_{12}		y_{1b}	(3.20)
y_{21}	y_{22}		y_{2b}	
y_{31}	y_{32}		y_{3b}	
\vdots	\vdots		\vdots	
y_{a1}	y_{a2}		y_{ab}	

Έστω ότι υπάρχουν ab αποκρίσεις μίας αντικειμενικής συνάρτησης, τότε χωρίζονται σε b μπλοκ έτσι ώστε κάθε μπλοκ να περιέχει αποκρίσεις από διαφορετικούς συνδυασμούς μεταβλητών. Ουσιαστικά, υπάρχουν b επαναλήψεις των εκτελέσεων του πειράματος με το ίδιο διάνυσμα μεταβλητών αλλά διαφορετικές μεταβλητές θορύβου. Οι εκτελέσεις μέσα στα μπλοκ γίνονται τυχαία και για αυτό τα μπλοκ αποτελούν περιορισμό στην τυχειότητα. Το κλασικό πρότυπο για τη στατιστική μοντελοποίηση του πλήρους τυχαιοποιημένου σχεδιασμού με μπλοκ είναι το πρότυπο επιρροής [;]:

$$y_{ij} = \mu + \tau_i + \beta_j + \epsilon_{ij} \begin{cases} i = 1, 2, \dots, a \\ j = 1, 2, \dots, b \end{cases} \quad (3.21)$$

όπου μ είναι ο συνολικός μέσος, τ_i είναι η επίδραση της i εκτέλεσης, β_j είναι η επίδραση του j μπλοκ και ϵ_{ij} τα γνωστά τυχαία λάθη. Συνήθως, θεωρείται ότι η

επιδράσεις ορίζονται ως αποκλίσεις από το συνολικό μέσο μ , άρα ισχύουν οι τύποι :

$$\sum_{i=1}^a \tau_i = 0 \quad \sum_{j=1}^b \beta_j = 0 \quad (3.22)$$

Πρέπει να ελεγχθεί η υπόθεση :

$$H_0 : \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_a \quad (3.23)$$

$$H_0 : \text{at least one } \mu_i \neq \mu_j \quad (3.24)$$

όπου $\mu_i = (1/b) \sum_{j=1}^b (\mu + \tau_i + \beta_j) = \mu + \tau_i$ και άρα η εξίσωση μπορεί να γραφεί ως :

$$H_0 : \tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_a \quad (3.25)$$

$$H_0 : \text{at least one } \tau_i \neq \tau_j \quad (3.26)$$

Ορίζονται ορισμένα μεγέθη :

$$y_{i.} = \sum_{j=1}^b y_{ij} \quad i = 1, 2, \dots, a \quad (3.27)$$

$$y_{.j} = \sum_{i=1}^a y_{ij} \quad j = 1, 2, \dots, b \quad (3.28)$$

$$y_{..} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b y_{ij} \quad (3.29)$$

Η συνολική διακύμανση αποτελείται από τρεις ποσότητες, την διακύμανση των αναπαραγωγών $SS_{treatment}$, των επαναλήψεων/μπλοκ SS_{blocks} και του σφάλματος SS_{error} . Η διακύμανση του σφάλματος είναι το άθροισμα των τετραγώνων μεταξύ των παρατηρήσεων μείον το άθροισμα των τετραγώνων των αναπαραγωγών και των μπλοκ. Υπάρχουν ab συνολικές παρατηρήσεις με $ab - 1$ βαθμούς ελευθερίας, οπότε η διακύμανση του σφάλματος έχει $ab - 1 - (a - 1) - (b - 1) = (a - 1)(b - 1)$ βαθμούς ελευθερίας.

Οι ποσότητες $SS_{treatment}/s^2$, SS_{blocks}/s^2 , SS_{error}/s^2 είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές με κατανομή Χ. Η προβλεπόμενη τιμή του μέσου τετραγώνων μπορεί να αποδειχθεί :

$$E(MS_{treatments}) = \sigma^2 + \frac{b \sum_{i=1}^a \tau_i^2}{a-1} \quad (3.30)$$

$$E(MS_{blocks}) = \sigma^2 + \frac{a \sum_{j=1}^b \beta_j^2}{b-1} \quad (3.31)$$

$$E(MS_{error}) = \sigma^2 \quad (3.32)$$

Επομένως, για να ελεγχθεί υπόθεση, χρησιμοποιείται ο στατιστικός όρος

$$F_0 = \frac{MS_{treatment}}{MS_{error}} \quad (3.33)$$

Η υπόθεση H_0 της σχέσης 3.25 θα απορρίπτεται όταν ισχύει :

$$F_0 > F_{a,a-1,(a-1)(b-1)} \quad (3.34)$$

Ο έλεγχος αυτός ονομάζεται έλεγχος F . Πολλές φορές, ερευνάται ο λόγος του MS_{blocks} με το MS_{error} αντί να γίνει ο έλεγχος F . Αν ο λόγος είναι μεγάλος, υπονοείται ότι η μεταβλητή του μπλοκ έχει μεγάλη επιρροή και ότι η μείωση του θορύβου που προέκυψε από το μπλοκ ήταν χρήσιμη για τη βελτίωση της σύγκρισης των μέσων αναπαραγωγών.

<i>Source of Variation</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Degrees of Freedom</i>	<i>Mean Square</i>	F_0
<i>Treatments</i>	$SS_{treatments}$	$a - 1$	$\frac{SS_{treatments}}{a-1}$	$\frac{MS_{treatments}}{MS_{error}}$
<i>Blocks</i>	SS_{blocks}	$b - 1$	$\frac{SS_{blocks}}{b-1}$	
<i>Error</i>	SS_{error}	$(a - 1)(b - 1)$	$\frac{SS_{error}}{(a-1)(b-1)}$	
<i>Total</i>	SS_{total}	$N - 1$		

Η διαδικασία που ακολουθείται είναι ο υπολογισμός των στοιχείων του πίνακα. Για τον υπολογισμό του, οι παρακάτω τύποι είναι χρήσιμοι.

$$SS_{total} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b y_{ij}^2 - \frac{y_{..}^2}{N} \quad (3.35)$$

$$SS_{treatments} = \frac{1}{b} \sum_{i=1}^a y_{i.}^2 - \frac{y_{..}^2}{N} \quad (3.36)$$

$$SS_{total} = \frac{1}{a} \sum_{j=1}^b y_{.j}^2 - \frac{y_{..}^2}{N} \quad (3.37)$$

$$SS_{error} = SS_{total} - SS_{treatments} - SS_{blocks} \quad (3.38)$$

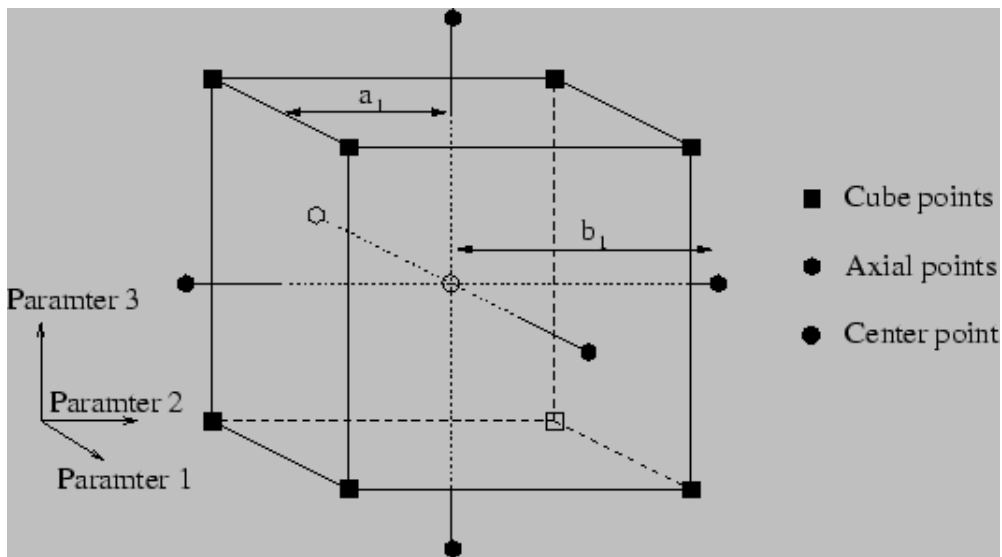
3.4 Σχεδιασμός Κεντρικής Σύνθεσης

Ο σχεδιασμός κεντρικής σύνθεσης (Central Composite Design) [4] [27] είναι ένας σχεδιασμός πειραμάτων, που επιφέρει μεγαλύτερη ακρίβεια στο πρότυπο που θα χρησιμοποιηθεί στη συνέχεια, χωρίς όμως να αυξάνει τα επίπεδα των μεταβλητών. Εφαρμόζεται μόνο σε ποσοτικές ανεξάρτητες μεταβλητές σχεδιασμού που είναι συνεχείς στο πεδίο ορισμού τους. Ο σχεδιασμός αυτός αποτελείται από [28]:

1. Έναν παραγοντικό σχεδιασμό, όπως αυτός αναλύθηκε σε παραπάνω ενότητα. Ο σχεδιασμός αυτός μπορεί να είναι κλασματικός ή πλήρης αλλά, ανεξάρτητα από αυτό, χρησιμοποιείται όταν υπάρχει πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός με λίγα επίπεδα και επιθυμείται να αυξηθεί η ακρίβεια του σχεδιασμού. Ο σχεδιασμός αυτός ονομάζεται αρχικός σχεδιασμός.
2. Μια ομάδα από κεντρικά σημεία, των οποίων οι τιμές είναι το μέσο των τιμών κάθε μεταβλητής πολλαπλασιασμένο με έναν παράγοντα. Για την καλύτερη κατανόηση των σημείων, σε ένα πρόβλημα τριών μεταβλητών σχεδιασμού, η κατασκευή σχεδιασμού κεντρικής σύνθεσης από έναν πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό θα τοποθετούσε τα κεντρικά σημεία στο κέντρο των τετραγώνων που δημιουργεί ο χώρος των τριών μεταβλητών.
3. Μία ομάδα από αξονικά σημεία, των οποίων οι τιμές βρίσκονται από τα κεντρικά σημεία, αυξάνοντας κάθε φορά κατά ένα παράγοντα την τιμή της αντίστοιχης μεταβλητής.

Για την καλύτερη κατανόηση των σημείων παρουσιάζεται το σχήμα 3.1.

Σε περίπτωση που υπάρχουν δύο επίπεδα σε κάθε μεταβλητή, τα κεντρικά σημεία υπολογίζονται με τον μέσο όρο των επιπέδων κάθε μεταβλητής. Ένας παράγοντας πολλαπλασιάζεται στην κάθε συντεταγμένη των κεντρικών σημείων για να παραχθούν τα αξονικά σημεία. Ο παράγοντας αυτός είναι η ακτίνα του κύκλου που σχηματίζουν τα αξονικά σημεία σε σχέση με τα κεντρικά (δηλαδή, τα αξονικά σημεία βρίσκονται σε έναν κύκλο σε σχέση με τα κέντρα). Αποτελεί σημαντική παράμετρο στον σχεδιασμό

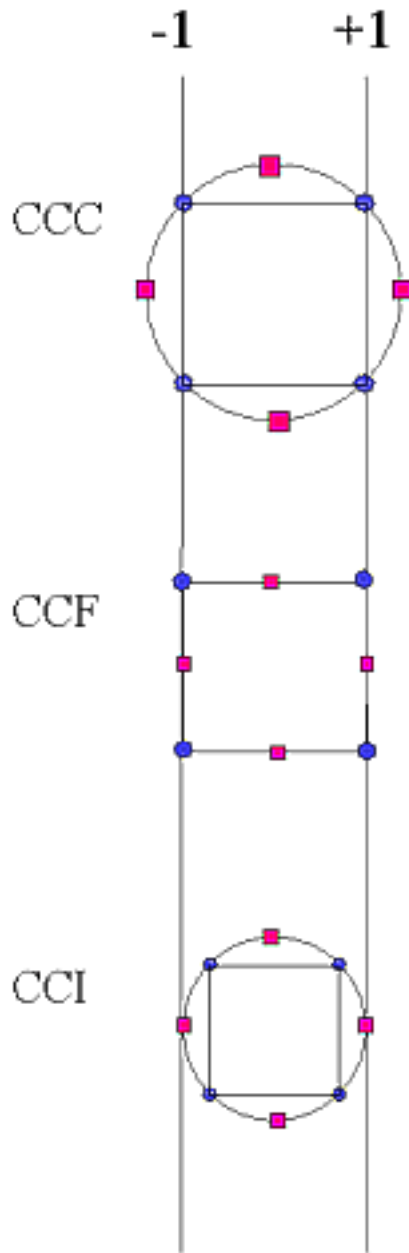


Σχήμα 3.1: Σχεδιασμός κεντρικής σύνθεσης για τρία μεταβλητές με δύο επίπεδα.

αυτού του τύπου και η τιμή της αλλάζει ανάλογα με το πρόβλημα και την περιοχή προσέγγισης. Σε ένα 2^p παραγοντικό σχεδιασμό, οι τιμές των αξονικών σημείων σε κάθε κατεύθυνση υποδηλώνει τα νέα μέγιστα και ελάχιστα κάθε μεταβλητής, αν η ακτίνα είναι μεγαλύτερη της μονάδας. Σημειώνεται ότι η ακτίνα καθορίζεται αδιαστατοποιημένη σε σχέση με τις τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού.

Υπάρχουν τριών ειδών διαφορετικοί σχεδιασμοί :

1. **Οριοθετημένος (Circumscribed, CCC):** Αυτός είναι ο πιο συνηθισμένος σχεδιασμός. Τα αξονικά σημεία απέχουν από το κέντρο κατά μία απόσταση (a), η οποία εξαρτάται από το πρόβλημα και το ποια σημεία του χώρου των μεταβλητών ενδιαφέρουν τον σχεδιασμό. Τα αξονικά σημεία διευρύνουν τα όρια κάθε μεταβλητής. Υπάρχει κυκλική, σφαιρική, υπερσφαιρική κ.τ.λ. συμμετρία ανάλογα με τις μεταβλητές. Παράγεται από ένα υπάρχοντα παραγοντικό σχεδιασμό επαυξάνοντας τον με αξονικά σημεία και κεντρικά.
2. **Εγγεγραμμένος (Inscribed, CCI):** Τα αρχικά όρια των μεταβλητών δεν παραβιάζονται. Χρησιμοποιούνται τα αξονικά σημεία ως τα όρια των μεταβλητών και δημιουργεί έναν παραγοντικό σχεδιασμό στο εσωτερικό τους. Η διαφορά εδώ έγκειται στο γεγονός ότι ο παραγοντικός σχεδιασμός δεν είναι στα όρια των μεταβλητών. Ουσιαστικά είναι το παραπάνω είδος σχεδιασμού διαιρεμένο με έναν αριθμό, κατάλληλο ώστε να οριοθετήσει τον σχεδιασμό στα όρια των μεταβλητών, δηλαδή είναι ως να παράγεται μια κλίμακα του παραπάνω είδους.
3. **Τετραγωνικός (Face Centered, CCF):** Στο είδος αυτό, τα αξονικά σημεία βρίσκονται στο μέσο κάθε ακμής των τετραγώνων που σχηματίζονται από τον παραγοντικό σχεδιασμό. Η ακτίνα του κεντρικού σχεδιασμού είναι ίση με την μονάδα.



Σχήμα 3.2: Διαφορετικά είδη σχεδιασμού κεντρικής σύνθεσης για δύο μεταβλητές.

Το σχήμα 3.2 παρουσιάζει τη γραφική απεικόνιση των τριών παραπάνω σχεδιασμών για δύο ανεξάρτητες μεταβλητές. Ο οριοθετημένος σχεδιασμός καταλαμβάνει το μεγαλύτερο εύρος του χώρου των μεταβλητών σχεδιασμού, ενώ ο εγγεγραμμένος καλύπτει το μικρότερο. Οι σχεδιασμοί αυτού του τύπου είναι περιστροφικοί. Η επιλογή της ακτίνας είναι πολύ σημαντική για την ρύθμιση του σχεδιασμού. Για να διατηρηθεί η περιστροφική τους ιδιότητα, η ακτίνα εξαρτάται από τον αριθμό των

εκτελέσεων του πειράματος και από τις μεταβλητές σχεδιασμού.

$$a = [\text{number of factorial runs}]^{1/4} \quad (3.39)$$

Για παράδειγμα, σε έναν πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό k μεταβλητών σχεδιασμού με δυο επίπεδα στην καθεμιά ακτίνα, μπορεί να υπολογιστεί :

$$a = [2^k]^{1/4} \quad (3.40)$$

Τα αξονικά σημεία βρίσκονται αντίστοιχα σε απόσταση $+a$, $-a$ σε σχέση με το κεντρικό σημείο αλλά και την μεταβλητή που αλλάζει. Αν η ακτίνα είναι ίση με την μονάδα, τότε τα αξονικά σημεία πέφτουν στα όρια των μεταβλητών. Για έναν σχεδιασμό με δύο επίπεδα, η απόσταση επιλέγεται από τη σχέση 3.40 και έτσι δημιουργείται ένας κύκλος γύρω από το κέντρο. Για έναν σχεδιασμό με τρία επίπεδα, η απόσταση επιλέγεται από τη σχέση $a = [3^k]^{1/4}$ και δημιουργεί μία σφαίρα.

3.5 Άλλα Είδη Σχεδιασμών

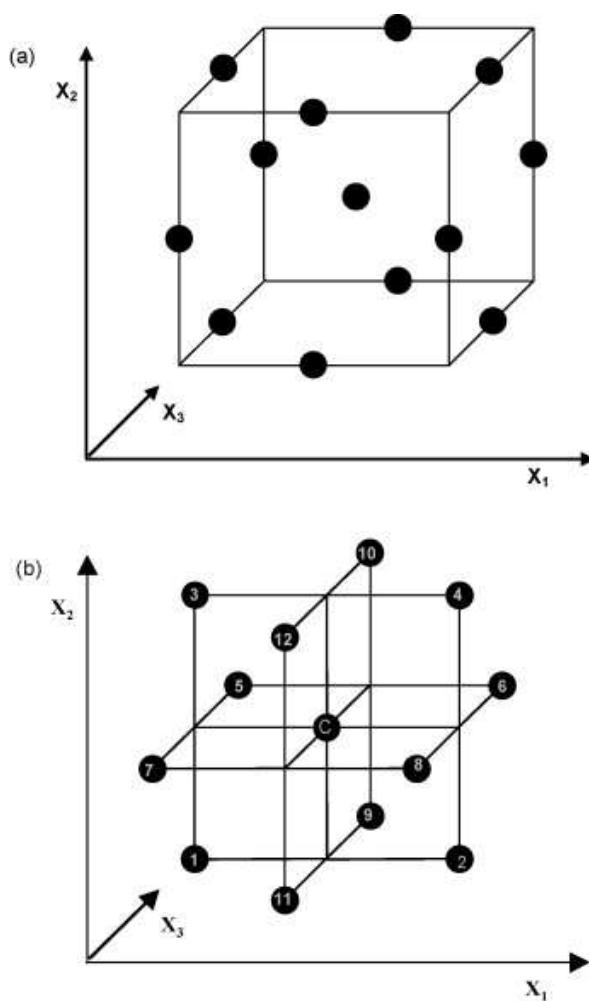
Τα βασικότερα είδη του σχεδιασμού πειραμάτων έχουν ήδη αναλυθεί. Υπάρχουν και άλλα είδη που δεν έχουν αναλυθεί.

Υπάρχει σχεδιασμός με **μπλοκ** (block design). Ο σχεδιασμός αυτός βασίζεται στους παραγοντικούς σχεδιασμούς. Βασικό χαρακτηριστικό του είναι η χρήση ομαδοποιήσεων (block) που ταξινομεί τις εκτελέσεις σε ομάδες. Ο πίνακας ενός παραγοντικού σχεδιασμού κατασκευάζεται για αρχή. Στη συνέχεια, εφαρμόζοντας κάποιες ειδικές σχέσεις, που ονομάζονται αλληλεπιδράσεις και μελετήθηκαν παραπάνω, για να ομαδοποιηθούν οι εκτελέσεις που περιέχονται στον πίνακα του παραγοντικού σχεδιασμού. Ο σχεδιασμός αυτός μπορεί να κατευθύνει την έρευνα σε ένα συγκεκριμένο εύρος του χώρου των μεταβλητών σχεδιασμού, να αφαιρέσει ανεπιθύμητους 'θορύβους' και να μειώσει τον αριθμό των εκτελέσεων του πειράματος.

Η **μέθοδος Taguchi** δημιουργήθηκε για στατιστικούς λόγους από τον ιαπωνέζο Genichi Taguchi στα τέλη της δεκαετίας του 1980 και βελτιώνει την ποιότητα των στατιστικών μελετών [29]. Η μέθοδος αυτή παρέχει έναν συμμετρικό και αποδοτικό τρόπο για τη βελτίωση σχεδιασμών που στοχεύουν στην απόδοση, ποιότητα και μείωση του κόστους. Πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι το μικρό πλήθος των εκτελέσεων που χρησιμοποιεί για να εξαχθούν στατιστικά ορθά αποτελέσματα, ακόμα και σε περιπτώσεις πολλών ανεξάρτητων μεταβλητών σχεδιασμού. Αυτό σημαίνει ότι, με λίγες μόνο εκτελέσεις του πειράματος, μπορούν να εκπαιδευτούν μεταπρότυπα με καλή ακρίβεια σε σχέση με το υπολογιστικό κόστος, που επενδύθηκε για τις εκτελέσεις. Βασίζεται σε ορθογωνικά διανύσματα, τα οποία είναι πίνακες προκαθορισμένοι και επηρεάζονται μόνο από τον αριθμό των μεταβλητών και των επιπέδων τους. Έχει το μειονέκτημα ότι δεν μπορεί να εφαρμοστεί άμεσα σε προβλήματα με μεταβλητές που

δεν έχουν τον ίδιο αριθμό επιπέδων.

Ο Box-Behnken σχεδιασμός είναι μια παραλλαγή του σχεδιασμού κεντρικής σύνθεσης. Είναι περιστροφικός δευτέρου βαθμού και, ενώ βασίζεται σε παραγοντικό σχεδιασμό, τα στοιχεία του δεν απαρτίζονται από αυτόν, γεγονός που του κάνει να διαφέρει από τους άλλους σχεδιασμούς [30]. Για την κατασκευή του χρησιμοποιεί τα μέσα των ακμών που δημιουργούν τα επίπεδα των μεταβλητών (βλ. Σχήμα 3.3) και για αυτό το λόγο δεν μπορεί να κατασκευαστεί αν οι μεταβλητές έχουν λιγότερα από τρία επίπεδα.



Σχήμα 3.3: Γραφική απεικόνιση ενός Box-Behnken σχεδιασμού.

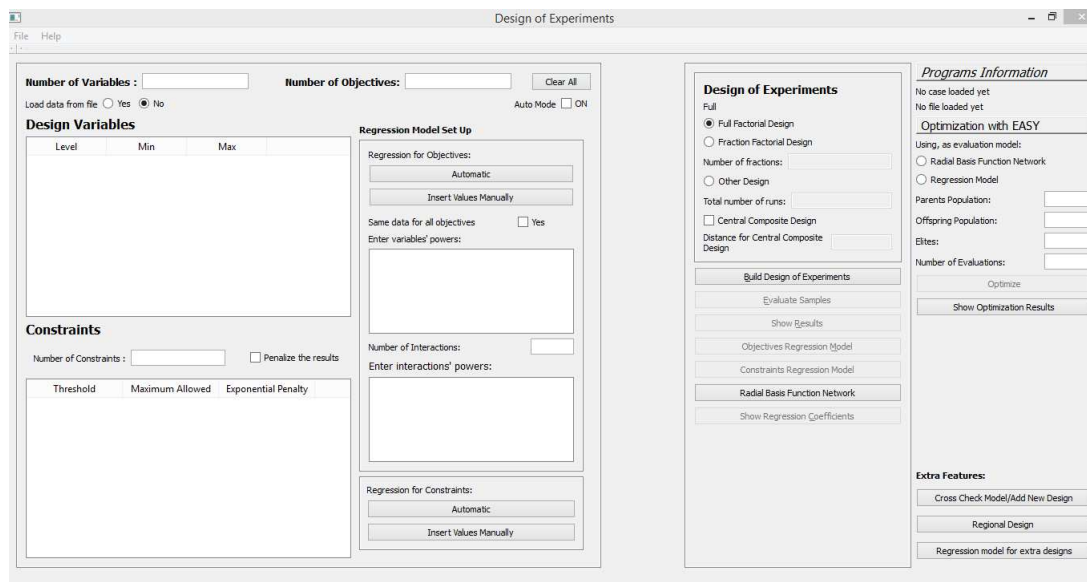
Από μελέτες και συγκρίσεις που έχουν γίνει, ο Box-Behnken σχεδιασμός αποδείχτηκε πολύ πιο αποδοτικός από τον πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό. Τέλος, δεν συμπεριλαμβάνει διανύσματα τιμών των μεταβλητών με όλες τις μεταβλητές σε ακραίες τιμές (δηλαδή, να βρίσκονται όλες οι μεταβλητές πάνω στα όριά τους) και έτσι δεν μελετώνται ακραίες καταστάσεις όπου το πείραμα μπορεί να μην συμπεριφέρεται σωστά.

Βέλτιστος σχεδιασμός (Optimal Design) δημιουργείται με τη βοήθεια υπολογιστών και, συνήθως, ο πίνακας του δεν είναι ορθογωνικός σε αντίθεση με τους άλλους σχεδιασμούς [31]. Χρησιμοποιεί λίγες εκτελέσεις του πειράματος σε σχέση με τους παραγοντικούς σχεδιασμούς. Η επιλογή του είναι ιδανική όταν ο χώρος των μεταβλητών του πειράματος περιέχει περιορισμούς, δηλαδή μεταβλητές, που αν λάβουν κάποιες τιμές, το πείραμα δεν θα βγάλει αποτελέσματα. Για την κατασκευή του πίνακα του σχεδιασμού, αρχικά, παράγεται ο πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός και στην συνέχεια επιλέγονται από τον πίνακά του οι γραμμές που θα δώσουν τον καλύτερο σχεδιασμό. Η επιλογή τους περιορίζεται από τον αριθμό των εκτελέσεων που ο σχεδιαστής του πειράματος επιθυμεί να πραγματοποιήσει. Αυτή η επιλογή γίνεται με διάφορους τρόπους, ανάλογα με το κόστος του υπολογιστικού λογισμικού. Γενικά, πρέπει να γίνει με τέτοιο τρόπο ώστε να καλύπτεται όσο το δυνατόν περισσότερος όγκος στον χώρο σχεδιασμού των μεταβλητών. Τελικά, είναι κατάλληλος όταν υπάρχουν περιορισμοί τόσο στις μεταβλητές όσο και στον αριθμό των εκτελέσεων που μπορούν να πραγματοποιηθούν.

Κεφάλαιο 4

Ανάλυση Προγράμματος DoE

Η υλοποίηση των μεθόδων του σχεδιασμού των πειραμάτων καθώς και τα μετα-πρότυπα αποσυνδεδεμένα με την εξέλιξη που χρησιμοποιήθηκαν υλοποιήθηκαν με το λογισμικό το οποίο αναπτύχθηκε στο πλαίσιο της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Το λογισμικό αυτό έχει σκοπό τον σχεδιασμό πειραμάτων καθώς και την εκπαίδευση μεταπροτύπων αποσυνδεδεμένων από την εξέλιξη. Υπάρχει και δυνατότητα βελτιστοποίησης του προβλήματος με ΕΑ μέσω του λογισμικού *EASY* που καλείται εσωτερικά από το λογισμικό που αναπτύχθηκε. Το λογισμικό αυτό ονομάστηκε (προσωρινά) DoE (βλ. Σχήμα 4.1).



Σχήμα 4.1: Κύριο παράθυρο του DoE.

Το DoE χειρίζεται προβλήματα πολλών στόχων με ή χωρίς περιορισμούς. Για την υλοποίηση των λειτουργιών του, απαραίτητο εργαλείο αποτελεί το λογισμικό αξιολόγησης που διαφοροποιείται ανάλογα με το πρόβλημα. Η λογική που ακολουθείται

είναι παρόμοια με τη λογική που ακολουθεί το λογισμικό *EASY*. Το λογισμικό DoE αναπτύχθηκε σε γλώσσα προγραμματισμού C++ και η ανάπτυξη του γραφικού περιβάλλοντος υποβοηθήθηκε από τη γλώσσα προγραμματισμού Qt. Η γλώσσα προγραμματισμού Qt είναι βασισμένη στην C++ και εμπεριέχει βιβλιοθήκες που διευκολύνουν τον προγραμματισμό γραφικού περιβάλλοντος.

4.1 Χρησιμοποιούμενες Μεθόδους

Το λογισμικό DoE χειρίζεται τις βασικότερες από τις μεθόδους που αναλύθηκαν σε προηγούμενα κεφάλαια. Από τους σχεδιασμούς πειραμάτων χρησιμοποιεί τους πλήρεις και κλασματικούς παραγοντικούς σχεδιασμούς, τον σχεδιασμό κεντρικής σύνθεσης και μια μορφή τυχαιοποιημένου σχεδιασμού που βασίζεται στο κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό. Η επιλογή ανάμεσα σε αυτούς τους σχεδιασμούς γίνεται ανάλογα με τις απαιτήσεις του προβλήματος, τις εκτελέσεις του πειράματος που επιθυμείται να πραγματοποιηθούν καθώς και τη γνώση και εμπειρία του χρήστη τόσο στο πρόβλημα που αναλύεται όσο και στο σχεδιασμό πειραμάτων. Οι σχεδιασμοί υλοποιούνται με τη λογική που αναλύθηκε στα αντίστοιχα κεφάλαια.

Τα μεταπρότυπα που χρησιμοποιούνται είναι αποσυνδεδεμένα από την εξέλιξη, καθώς το λογισμικό DoE δεν έχει ως αυτοσκοπό τη διαδικασία της βελτιστοποίησης και μπορεί να λειτουργήσει ανεξάρτητα από αυτή. Δηλαδή, το DoE μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη μελέτη ενός πειράματος και την προσομοίωσή του με μεταπρότυπα για ερευνητικούς λόγους. Μπορούν να χρησιμοποιηθούν δύο είδη, τα πρότυπα παλινδρόμησης και τα νευρωνικά δίκτυα ακτινικής βάσης.

Για τα πρότυπα παλινδρόμησης αναπτύχθηκε κώδικας υλοποίησης τους. Η θεωρία τους παρουσιάζεται στο κεφάλαιο 2.3.4 και κατά αναλογία διαρθρώθηκε και ο αντίστοιχος κώδικας. Τα πρότυπα παλινδρόμησης είναι ίσα σε αριθμό με τις συναρτήσεις-στόχους του προβλήματος. Αυτό οδηγεί σε καλύτερη ακρίβεια της πρόβλεψης για κάθε συνάρτηση στόχου, καθώς γίνεται διαχείριση κάθε συνάρτησης-στόχους διαφορετικά, με διαφορετικές παραμέτρους και πολυώνυμα. Επιπλέον, δίνεται η δυνατότητα προσέγγισης των περιορισμών με κατάλληλο πρότυπο παλινδρόμησης, στην ίδια έννοια με τα πρότυπα των συναρτήσεων στόχων.

Το λογισμικό των νευρωνικών δικτύων ακτινικής βάσης είχε ήδη αναπτυχθεί στο ΜΠΥΡ&Β. Ενσωματώθηκε λοιπόν το υπάρχον λογισμικό στο DoE, δίνοντας τη δυνατότητα στον χρήστη του DoE να προσεγγίσει τις συναρτήσεις στόχων. Οι περιορισμοί δεν μπορούν να προσεγγιστούν με αυτού του είδους το μεταπρότυπο καθώς δεν έχει προστεθεί ακόμα αυτή η λειτουργία στο λογισμικό.

Στο τμήμα της βελτιστοποίησης, το λογισμικό *EASY* υλοποιεί τη βελτιστοποίηση με έναν (μ,λ) ΕΑ. Στον (μ,λ) ΕΑ χρησιμοποιεί ως λογισμικό αξιολόγησης τα μεταπρότυπα που έχουν κατασκευαστεί. Το λογισμικό DoE ζητά από τον χρήστη τις βασικές παραμέτρους που χρειάζεται το λογισμικό *EASY* για την υλοποίηση του

(μ,λ) ΕΑ. Καλείται το λογισμικό EASY και πραγματοποιείται η βελτιστοποίηση. Οι βέλτιστες λύσεις επαναξιολογούνται με το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης και αποτελούν τις βέλτιστες λύσεις που βρέθηκαν με την παραπάνω διαδικασία. Επειδή το μεταπρότυπο μπορεί να μην έχει μεγάλη ακρίβεια, δηλαδή μεγάλη διαφορά των προβλέψεων από τις πραγματικές τιμές, οι βέλτιστες τιμές μπορεί να μην αντιπροσωπεύουν τις καθολικά βέλτιστες τιμές. Δηλαδή, μπορεί να χρειάζεται να γίνουν και άλλες αλλαγές για να βρεθούν οι πραγματικά βέλτιστες τιμές. Για αυτόν τον λόγο, μπορεί να τροποποιηθεί ο πίνακας του αρχικού σχεδιασμού και να προστεθούν νέα στοιχεία. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την αύξηση της ακρίβειας του μεταπρωτύπου και, μετά από τη διαδικασία της βελτιστοποίησης που θα πραγματοποιηθεί ξανά, οι βέλτιστες τιμές είναι πιθανότερο να βρίσκονται πιο κοντά στις πραγματικές βέλτιστες τιμές.

4.2 Είσοδος Δεδομένων και Χειρισμός

Δεδομένα Μεταβλητών

Η αρχική οθόνη του λογισμικού DoE εμπεριέχει όλες τις βασικές λειτουργίες. Εκκινώντας την εισαγωγή δεδομένων, απαιτείται η καταχώρηση του αριθμού των ανεξάρτητων μεταβλητών σχεδιασμού. Για κάθε μεταβλητή πρέπει να ορισθεί το άνω και κάτω όριο της (max,min). Ποιοτικές μεταβλητές δεν υποστηρίζονται άμεσα και για αυτό πρέπει να μετατρέπονται σε ποσοτικές, αναθέτοντας έναν αριθμό σε κάθε επίπεδο τους. Η εγκυρότητα των ορίων ελέγχεται από το λογισμικό DoE ώστε να μην υπάρξει πρόβλημα στις παρακάτω διαδικασίες. Προφανώς, ο έλεγχος έγκειται στο να είναι το κάτω όριο μικρότερο του άνω ορίου.

	Level	Min	Max
1	6	1	6
2	7	0.2	0.9
3	5	-2.02	2.52

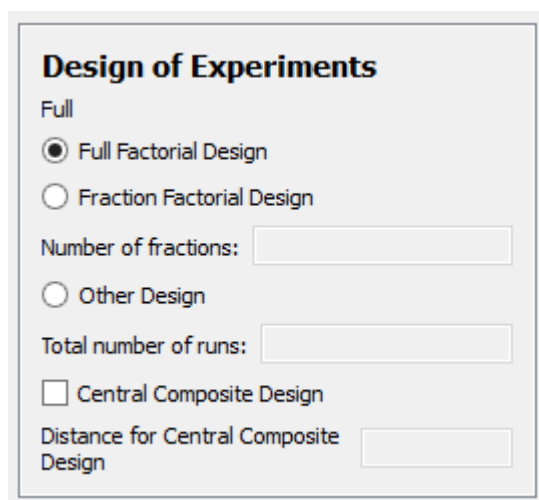
Σχήμα 4.2: Κεντρικός Πίνακας DoE. Εδώ, δηλαδή, τα όρια για την πρώτη μεταβλητή είναι (1,6) και το διάστημα αυτό χωρίζεται σε 6 επίπεδα.

Για τον σχεδιασμό των αξιολογήσεων που θα γίνουν απαιτούνται και τα επίπεδα

των μεταβλητών. Τα επίπεδα ορίζουν το πως θα διακριτοποιηθεί το πεδίο ορισμού της κάθε μεταβλητής. Αυτά καθορίζουν το πλήθος των αξιολογήσεων που θα γίνουν καθώς και την ακρίβεια κάθε μεταβλητής. Σε προβλήματα που οι μεταβλητές σχεδιασμού είναι συνεχείς, πρέπει να γίνει διακριτοποίησή τους σύμφωνα με τα παραπάνω κριτήρια. Μερικές φορές, σε προβλήματα πολλών μεταβλητών τα επίπεδα είναι δύο και αντιπροσωπεύουν την ελάχιστη και μέγιστη τιμή της μεταβλητής. Με αυτόν τον τρόπο, περιορίζονται οι μετέπειτα αξιολογήσεις. Τα δεδομένα αυτά είναι απαραίτητα και, για το λόγο αυτό, τοποθετούνται στον κεντρικό πίνακα του λογισμικού DoE (βλ. Σχήμα 4.2).

Στη συνέχεια, καθορίζεται ο αριθμός των συναρτήσεων στόχων. Αυτός παρέχει τις απαραίτητες πληροφορίες για τις αξιολογήσεις, τα μεταπρότυπα και τη βελτιστοποίηση που θα ακολουθήσει.

Ο χρήστης καθορίζει το είδος του σχεδιασμού του πειράματος που θα πραγματοποιηθεί (βλ. Σχήμα 4.3).



The image shows a software dialog box titled "Design of Experiments". Under the "Full" section, there are three radio button options: "Full Factorial Design" (which is selected), "Fraction Factorial Design", and "Other Design". Below these are three input fields: "Number of fractions:", "Total number of runs:", and "Distance for Central Composite Design". There is also a checkbox option for "Central Composite Design" which is currently unchecked.

Σχήμα 4.3: Επιλογή μεθόδου σχεδιασμού πειραμάτων.

1. Ο **πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός** θα δημιουργήσει όλους τους συνδυασμούς των επιπέδων των μεταβλητών, άρα απαιτεί μεγάλο αριθμός αξιολογήσεων σε σχέση με τους άλλους σχεδιασμούς.
2. Ο **κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός** μειώνει τις αξιολογήσεις κατά ένα κλάσμα του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού και παράλληλα μειώνεται η ακρίβεια και η αξιοπιστία του σχεδιασμού. Για αυτόν τον σχεδιασμό καθορίζεται ο αριθμός των αποκοπόμενων μεταβλητών που αποτελεί βασικό στοιχείο για την κατασκευή του. Σημειώνεται ότι οι μεταβλητές αυτές θα αφαιρεθούν από το τέλος του πίνακα των μεταβλητών, γεγονός που ο χρήστης πρέπει να λάβει υπόψη του για να εκτελέσει ορθά τον επιθυμητό σχεδιασμό. Δηλαδή, οι μεταβλητές που θα αποκοπούν οφείλουν να τοποθετηθούν στο τέλος του πίνακα ορισμού των μεταβλητών.

3. Ο **τυχαιοποιημένος σχεδιασμός** δίνει την δυνατότητα καθορισμού του ακριβούς αριθμού των αξιολογήσεων. Εισάγεται ο αριθμός των αξιολογήσεων στο αντίστοιχο κελί. Το λογισμικό, στη συνέχεια, επιλέγει μόνο του τα κατάλληλα διανύσματα τιμών μεταβλητών για τα οποία θα γίνουν οι εκτελέσεις του πειράματος. Επιλέγεται αυτόματα ο κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός του οποίου το σύνολο των εκτελέσεων έχει τη μικρότερη δυνατή διαφορά με τις επιθυμητές εκτελέσεις, ενώ οι υπόλοιπες επιλέγονται τυχαία από τον πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό. Αν ο αριθμός των εκτελέσεων του υπολογιστικού πειράματος είναι μεγαλύτερος ή ίσος με αυτόν του πλήρη παραγοντικού σχεδιασμού, τότε εκτελείται ο πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός. Η επιλογή αυτή είναι γενικής χρήσης και δεν απαιτεί από τον χρήστη γνωστικό υπόβαθρο στην επιστήμη σχεδιασμού πειραμάτων, απλά επιλέγει τον αριθμό των αξιολογήσεων τις οποίες προτίθεται να πραγματοποιήσει. Έχει το μειονέκτημα ότι ο σχεδιασμός που θα προκύψει είναι αμφιβόλου ποιότητας.
4. Ο **σχεδιασμός κεντρικής σύνθεσης** είναι επιπρόσθετο είδος σχεδιασμού και για αυτό επιλέγεται ξεχωριστά. Δηλαδή, αρχικά επιλέγεται ένας από τους παραπάνω σχεδιασμούς και, αν επιθυμείται μεγαλύτερη ακρίβεια, επιλέγεται και ο σχεδιασμός κεντρικής σύνθεσης. Απαιτεί μια ακτίνα. Η έννοια και η χρησιμότητά της αναφέρθηκε στο αντίστοιχο κεφάλαιο. Ο σχεδιασμός αυτός απαιτεί, συνήθως, περισσότερες αξιολογήσεις από τον πλήρη παραγοντικό σχεδιασμό, επειδή λαμβάνει και τις ενδιάμεσες τιμές από τα επίπεδα των μεταβλητών. Οι εκτελέσεις που απαιτούνται είναι περίπου διπλάσιες από τον αντίστοιχο σχεδιασμό που έχει επιλεγεί, αυξάνοντας την ακρίβεια του σχεδιασμού. Κατά κάποια έννοια, είναι ως να διπλασιάζονται τα επίπεδα των μεταβλητών.

Ο πίνακας του σχεδιασμού παράγεται πατώντας το κουμπί **Start** και αμέσως μετά, είναι έτοιμος για να χρησιμοποιηθεί.

Περιορισμοί

Τα περισσότερα προβλήματα εμπεριέχουν περιορισμούς. Το λογισμικό DoE υποστηρίζει και προβλήματα με περιορισμούς. Πρέπει να εισαχθεί ο αριθμός των περιορισμών που επιβάλλονται και τρεις ακόμα τιμές για κάθε περιορισμό (βλ. Σχήμα 4.4), οι εξής:

1. Όριο χαλάρωσης
2. Μέγιστο όριο
3. Όρος ποινής

Η έννοιά τους αναλύθηκε στο κεφάλαιο 2.2.1. Με την επιλογή **Penalize Results**, προστίθεται ποινή σε κάθε αντικειμενική συνάρτηση, αν δεν πληρούνται κάποιοι περιορισμοί. Η ποινή αυτή εξαρτάται εκθετικά από το πόσο παραβιάζεται ο περιορισμός και δίνεται από τη σχέση 2.2. Υπάρχει και η επιλογή να μην υποβληθεί ποινή, αλλά το διάνυσμα περιορισμών για κάθε διάνυσμα μεταβλητών να αποθηκεύεται για μετέπειτα χρήση. Η επιλογή αυτή προτείνεται όταν θα πραγματοποιηθεί βελτιστο-

Constraints

Number of Constraints : Penalize the results

	Threshold	Maximum Allowed	Exponential Penalty
1	10	15	3
2	0	1	5

Σχήμα 4.4: Ρύθμιση περιορισμών. Π.χ. για τον πρώτο περιορισμό ($c \leq 0$), δίνεται όριο χαλάρωσης 10, μέγιστο όριο 15 και όρος ποινής 3

ποίηση. Με τα διανύσματα των περιορισμών θα εκπαιδευτούν τόσο μεταπρότυπα όσα και οι περιορισμοί. Τα μεταπρότυπα των περιορισμών ενσωματώνονται μαζί με τα μεταπρότυπα των συναρτήσεων στόχων και όλα μαζί χρησιμοποιούνται στη διαδικασία της βελτιστοποίησης με το λογισμικό EASY. Δηλαδή, αντί να εκτελείται το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης κατά τον ΕΑ, εκτελείται ένα λογισμικό αξιολόγησης που περιέχει τα μεταπρότυπα που έχουν κατασκευαστεί.

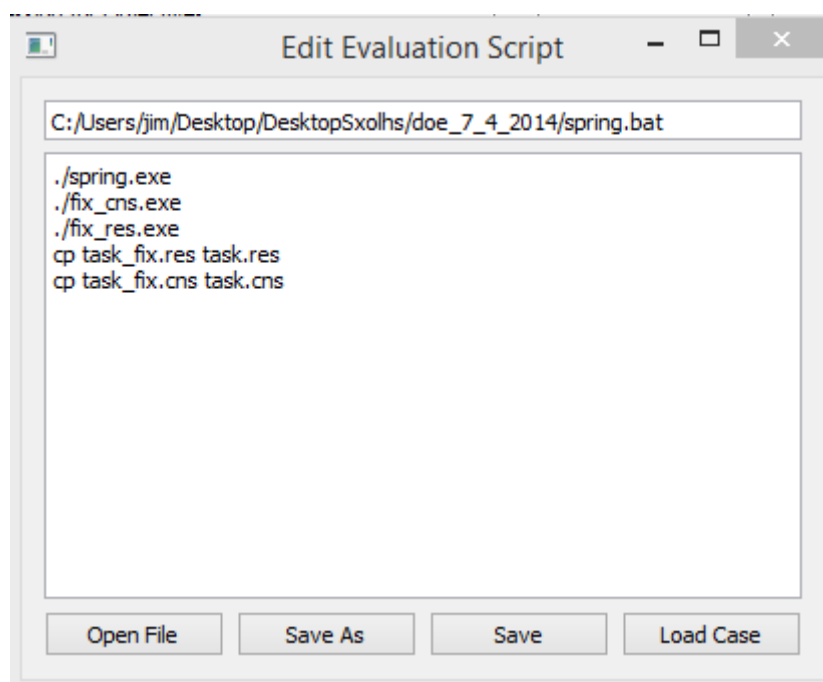
Αξιολογήσεις

Για να γίνει η αξιολόγηση των διανυσμάτων των τιμών των μεταβλητών του πίνακα του σχεδιασμού, απαιτείται ο καθορισμός του αριθμού των συναρτήσεων στόχων. Ο αριθμός αυτός παρέχει τις απαραίτητες πληροφορίες για τις αξιολογήσεις, τα μεταπρότυπα και τη διαδικασία βελτιστοποίησης που θα ακολουθήσει.

Οι αξιολογήσεις γίνονται με έτοιμο λογισμικό το οποίο παρέχεται από τον χρήστη. Το λογισμικό αυτό, για να λειτουργήσει σε συνεργασία με το λογισμικό DoE, πρέπει να δέχεται ως είσοδο ένα αρχείο με τις τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού και να παράγει ένα αρχείο με το διάνυσμα τιμών των αντικειμενικών συναρτήσεων. Σε περίπτωση που το πρόβλημα περιέχει περιορισμούς, οι τιμές τους πρέπει να καταγράφονται σε ένα αρχείο περιορισμών. Η ονοματολογία των αρχείων εισόδου, εξόδου και περιορισμών είναι ίδια με αυτήν του λογισμικού EASY, για λόγους συνεργασίας των δύο λογισμικών αλλά και για τυποποίηση. Το αρχείο εισόδου ονομάζεται task.dat και σε κάθε γραμμή του έχει την τιμή κάθε μεταβλητής. Το αρχείο εξόδου ονομάζεται task.res και σε κάθε γραμμή του έχει την τιμή της αντίστοιχης αντικειμενικής συνάρτησης. Το αρχείο περιορισμών ονομάζεται task.cns και σε κάθε γραμμή του έχει την τιμή κάθε συνάρτησης περιορισμού.

Το λογισμικό DoE παράγει τα αρχεία εισόδου σύμφωνα με τα δεδομένα του πίνακα σχεδιασμού που έχει δημιουργηθεί προηγουμένως, τρέχοντας το εξωτερικό λογισμικό αξιολόγησης. Παράγεται το αρχείο με το διάλυσμα τιμών των συναρτήσεων-στόχων, το οποίο χωρίζεται σε ξεχωριστά αρχεία για κάθε αντικειμενική συνάρτηση. Στο τέλος της διαδικασίας, σε κάθε διάλυσμα μεταβλητών σχεδιασμού αντιστοιχίζονται οι τιμές των συναρτήσεων-στόχων που έχουν βρεθεί από την αξιολόγηση.

Το λογισμικό αξιολόγησης μπορεί να δοθεί από το menu επιλογών έτοιμο ή να δημιουργηθεί/τροποποιηθεί μέσα από το λογισμικό DoE με εντολές φλοιού. Με την τροποποίηση που γίνεται μέσα από την αντίστοιχη επιλογή, ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να προσαρμόσει το λογισμικό του στις παραπάνω απαιτήσεις χωρίς να αλλάξει τον κώδικα του (βλ. Σχήμα 4.5).



Σχήμα 4.5: Παράθυρο σύνταξης εντολών εκτέλεσης του λογισμικού αξιολόγησης.

Επειδή, πολλές φορές, η κάθε διαδικασία αξιολόγησης είναι χρονοβόρα και ακριβή, ο χρήστης ενημερώνεται για το πέρας της διαδικασίας με κατάλληλο μήνυμα. Ο χρόνος ολοκλήρωσης της διαδικασίας αξιολόγησης εξαρτάται από τον χρόνο εκτέλεσης του λογισμικού αξιολόγησης και από το πλήθος των πειραμάτων που απαιτεί ο επιλεγμένος σχεδιασμός.

Τα αποτελέσματα της διαδικασίας παρουσιάζονται σε ξεχωριστό παράθυρο, όπου ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να ελέγξει τη σωστή ολοκλήρωση των παραπάνω διαδικασιών και να κάνει μια γρήγορη αποτίμηση των αποτελεσμάτων. Το παράθυρο περιέχει ένα πίνακα, του οποίου η κάθε γραμμή δείχνει τις αποκρίσεις και τις μεταβλητές σχεδιασμού μίας εκτέλεσης του λογισμικού αξιολόγησης. Άρα υπάρχουν τόσες γραμμές όσες και ο αριθμός των εκτελέσεων που έχουν πραγματοποιηθεί. Στις

πρώτες στήλες του πίνακα εμφανίζονται οι τιμές των συναρτήσεων-στόχων, ακολουθούν οι τιμές των περιορισμών και το αντίστοιχο διάνυσμα τιμών των μεταβλητών. Υπάρχει η δυνατότητα εμφάνισης των επιπέδων των μεταβλητών σχεδιασμού, για την καλύτερη εκτίμηση ή κατανόηση των αποτελεσμάτων και του σχεδιασμού.

Μεταπρότυπα

Το επόμενο βήμα είναι η εκπαίδευση μεταπροτύπων. Όπως προαναφέρθηκε, το λογισμικό υποστηρίζει δύο είδη μεταπροτύπων, τα πρότυπα παλινδρόμησης και τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα ακτινικής βάσης. Γενικά, το πλήθος των διανυσμάτων μεταβλητών, που χρησιμοποιούνται για την εκπαίδευση, καθορίζει την ακρίβεια του μεταπροτύπου αλλά αυξάνει το υπολογιστικό κόστος υπολογισμού του.

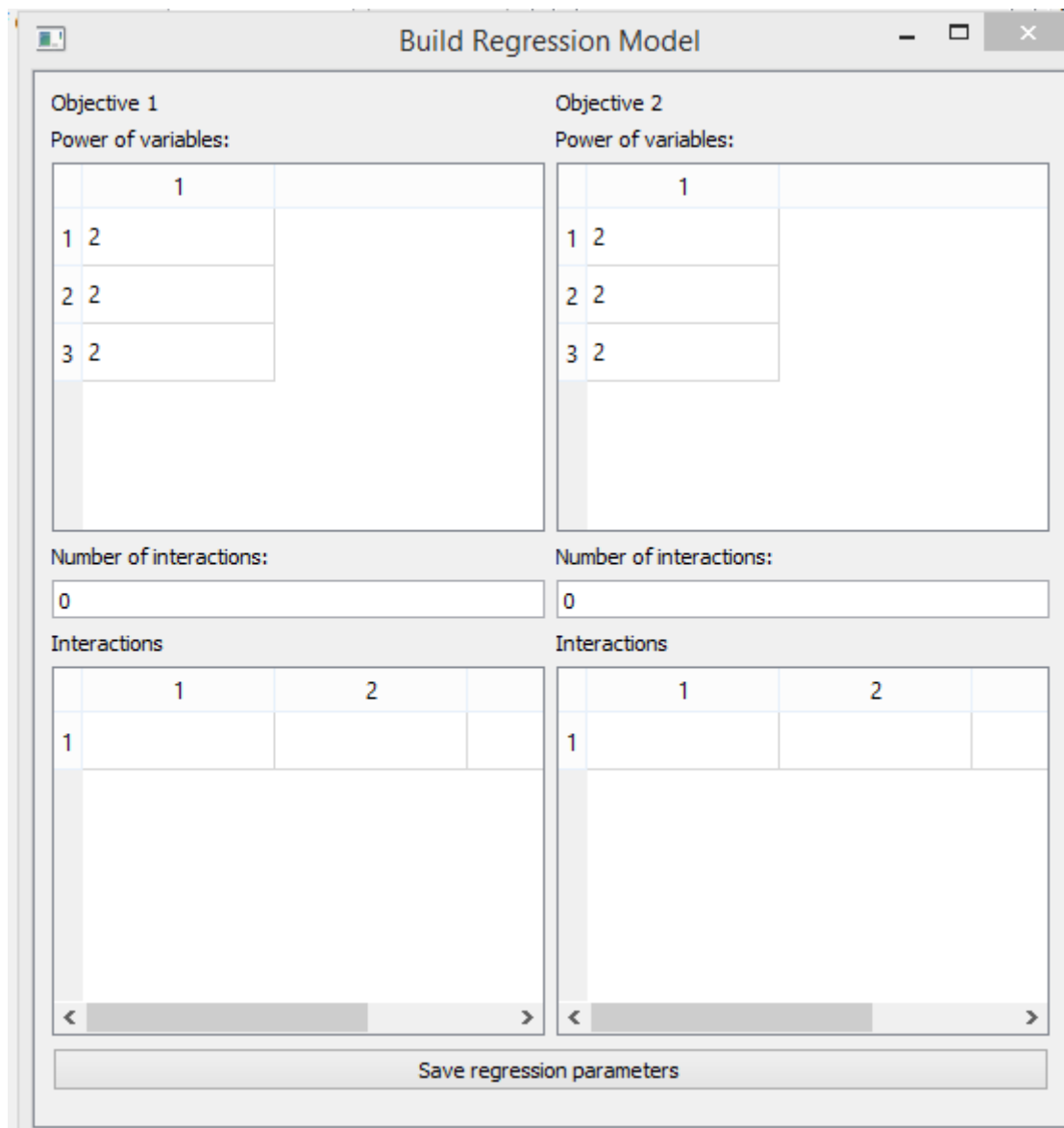
Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα Ακτινικής Βάσης

Αυτού του είδους μεταπρότυπα, δεν απαιτούν καμία ρύθμιση από τον χρήστη [22] [32], καθώς έχει προγραμματιστεί να χρησιμοποιούνται αυτόματες ρυθμίσεις. Απλά επιλέγεται και εκπαιδεύεται από τον ήδη υπάρχοντα σχεδιασμό. Η διαδικασία είναι χρονοβόρα, καθώς απαιτείται η επίλυση ενός μεγάλου συστήματος εξισώσεων, και ο χρόνος εκτέλεσής της εξαρτάται από το μέγεθος της βάσης δεδομένων που θα επεξεργαστεί. Δεν υπάρχει ακόμα επιλογή για χειροκίνητη επιλογή της ακτίνας ή άλλων παραμέτρων. Επειδή δεν έχει προστεθεί η λειτουργία εκπαίδευσης τεχνητών νευρωνικών δικτύων για τους περιορισμούς, η χρήση αυτού του είδους μεταπροτύπου οδηγεί στην ανάγκη επιβολής ποινών για κάθε περιορισμό στις συναρτήσεις στόχους. Το μεταπρότυπο υποστηρίζει όλες τις συναρτήσεις-στόχους του προβλήματος, χωρίς κάποια παραπάνω ρύθμιση.

Πρότυπα Παλινδρόμησης

Το λογισμικό DoE έχει εστιάσει περισσότερο στα πρότυπα παλινδρόμησης και παρέχει διάφορες ρυθμίσεις και παραμέτρους για την ορθή τους χρήση. Εξαρχής, πρέπει να ορισθεί το πολυώνυμο που θα χρησιμοποιήσει το μοντέλο. Αυτό το πολυώνυμο μπορεί να ορισθεί καθολικά για τις συναρτήσεις στόχους ή ξεχωριστά για καθεμία από αυτές. Ο χρήστης καθορίζει τη δύναμη μέχρι την οποία θα υπολογίζεται η κάθε μεταβλητή καθώς και την αλληλεπίδραση μεταξύ τους. Αυτό γίνεται σε ένα νέο παράθυρο (βλ. Σχήμα 4.6).

Εκεί, το λογισμικό περιμένει από τον χρήστη να εισάγει τις μέγιστες δυνάμεις κάθε μεταβλητής, τον αριθμό των αλληλεπιδράσεων καθώς και τις αλληλεπιδράσεις. Στις αλληλεπιδράσεις ο κάθε αριθμός δηλώνει σε ποια δύναμη θα υψωθεί η αντίστοιχη μεταβλητή. Για παράδειγμα, έστω ότι ένα πρόβλημα με τέσσερις μεταβλητές και επιθυμείται να ληφθεί υπόψη η αλληλεπίδραση λ.χ. $x_1^3 x_3^2$. Αυτή πρέπει να εισαχθεί σε μια γραμμή του αντίστοιχου πίνακα, γράφοντας 3 0 2 0. Αφού καθορισθεί πλήρως το πολυώνυμο για όλες τις συναρτήσεις στόχων, αποθηκεύεται για χρήση από υποπρόγραμμα που υπολογίζει το πρότυπο παλινδρόμησης. Η ίδια διαδικασία ακολουθείται και για τους περιορισμούς, αν δεν έχει επιλεγεί η χρήση όρων ποινής για κάθε διάνυσμα μεταβλητών, που υπερβαίνει τους περιορισμούς. Σε περίπτωση που ο



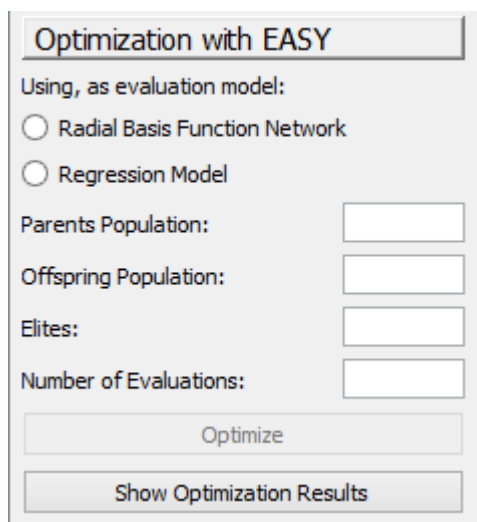
Σχήμα 4.6: Ρύθμιση τύπου-βαθμού πολυωνύμων για τα πρότυπα παλινδρόμησης.

χρήστης δεν γνωρίζει τι πολυώνυμο πρέπει να χρησιμοποιηθεί, υπάρχει και επιλογή να επιλεγεί αυτόματα ένα δευτεροβάθμιο πολυώνυμο. Το λογισμικό, τότε, δημιουργεί πολυώνυμο δεύτερης τάξης για όλες τις συναρτήσεις στόχων και (αν επιθυμείται) περιορισμούς. Η επιλογή αυτή γίνεται γιατί το πολυώνυμο δευτέρου βαθμού είναι, ίσως, το πιο συνηθισμένο και απλό πρότυπο. Στο κεφάλαιο 2.3.4 που αναφέρεται στα πρότυπα παλινδρόμησης, αναγράφεται ο μαθηματικός τύπος του προτύπου. Εδώ πρέπει να σημειωθεί ότι το πρότυπο, που κατασκευάζεται αυτόματα, περιέχει αλληλεπιδράσεις δύο μεταβλητών και όχι περισσότερων χάριν απλότητας και ευκολίας. Η εκπαίδευση εκτελείται ξεχωριστά για τις συναρτήσεις στόχους και τους περιορισμούς. Η διαδικασία εκπαίδευσης είναι ανάλογη των διανυσμάτων εκπαίδευσης καθώς

και του μεγέθους/πολυπλοκότητας του πολυωνύμου. Τα διανύσματα εκπαίδευσης είναι οι ομάδες των διανυσμάτων μεταβλητών, συναρτήσεων στόχων και περιορισμών που δημιουργήθηκαν από τον σχεδιασμό και τις αξιολογήσεις των προηγούμενων βημάτων.

Βελτιστοποίηση με τη βοήθεια του λογισμικού EASY

Κατά την ανάπτυξη του λογισμικού DoE δεν δημιουργήθηκε υποπρόγραμμα για την πραγματοποίηση βελτιστοποίησης. Για τη βελτιστοποίηση απαιτείται η κλήση του λογισμικού EASY. Το λογισμικό απαιτεί τη ρύθμιση παραμέτρων που είναι ζωτικής σημασίας για τον EA (βλ. Σχήμα 4.7).



The image shows a software dialog box titled "Optimization with EASY". It contains the following elements:

- A header bar with the title "Optimization with EASY".
- A section labeled "Using, as evaluation model:" with two radio button options: "Radial Basis Function Network" and "Regression Model".
- Four input fields with labels: "Parents Population:", "Offspring Population:", "Elites:", and "Number of Evaluations:".
- Two buttons at the bottom: "Optimize" and "Show Optimization Results".

Σχήμα 4.7: Ρύθμιση παραμέτρων για την κλήση του λογισμικού EASY.

Αρχικά, ανάλογα με το ποιο μεταπρότυπο έχει εκπαιδευτεί, δημιουργείται το αντίστοιχο πρόγραμμα που θα κάνει την αξιολόγηση με τα μεταπρότυπα που έχουν εκπαιδευτεί. Αυτό είναι και το λογισμικό αξιολόγησης που θα συνδεθεί με τον EASY. Η τελική έκβαση των αποτελεσμάτων εξαρτάται από το πόσο ακριβές είναι το μεταπρότυπο σε σχέση με το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης.

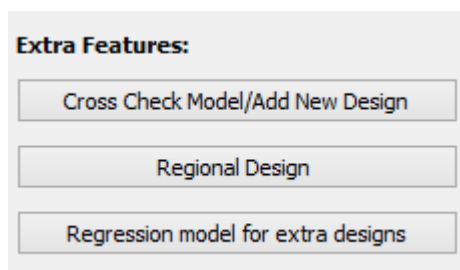
Ο αριθμός των μέγιστων αξιολογήσεων καθορίζει τη σύγκλιση της διαδικασίας βελτιστοποίησης. Γενικά, επειδή ο χρόνος υπολογισμού του αντίστοιχου μεταπρότυπου είναι μηδαμινός σε σχέση με την εκτέλεση ενός υπολογιστικού πειράματος με το ακριβές λογισμικό αξιολόγησης, ο αριθμός των αξιολογήσεων μπορεί να είναι μεγάλος και η διαδικασία της βελτιστοποίησης τελειώνει σε πολύ μικρό χρονικό διάστημα.

Πρέπει να καθοριστούν και οι βασικοί πληθυσμοί απόγονοι, γονείς και επίλεκτοι τους οποίους θα χειριστεί ο EASY. Οι παράμετροι που μπορούν να ρυθμιστούν είναι πολύ περισσότερες αλλά για την απλότητα στη χρήση και ευκολία, καθορίζονται μόνο οι απαραίτητες. Ένας έμπειρος χρήστης μπορεί να ρυθμίσει ελεύθερα τις υπόλοιπες παραμέτρους ανεξάρτητα από το λογισμικό DoE. Μετά το πέρας της διαδικασίας βελτιστοποίησης, ο χρήστης ενημερώνεται με κατάλληλο μήνυμα και μπορεί να δει

τα αποτελέσματα σε αντίστοιχο νέο παράθυρο. Το παράθυρο παρουσιάζει τις βέλτιστες λύσεις στις οποίες καταλήγει το λογισμικό EASY καθώς και τις αντίστοιχες λύσεις που προκύπτουν από την αξιολόγησή τους με το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης. Οι πραγματικές τιμές των αντικειμενικών συναρτήσεων των διανυσμάτων μεταβλητών που επιλέχθηκαν ως βέλτιστα, υπολογίζονται με επαναξιολόγησή τους με το λογισμικό αξιολόγησης.

Επιπρόσθετες Επιλογές

Μετά το πέρας τις διαδικασίας προτυποποίησης και βελτιστοποίησης του προβλήματος, ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να παρέμβει στον σχεδιασμό των πειραμάτων προσθέτοντας διανύσματα τιμών των μεταβλητών ή μειώνοντας την περιοχή εύρεσης της λύσης (βλ. Σχήμα 4.8).



Σχήμα 4.8: Επιπρόσθετες επιλογές.

Η προσθήκη επιπλέον διανυσμάτων μεταβλητών μπορεί να κατευθύνει τη λύση του προβλήματος σε μια περιοχή και να βελτιώσει την απόκριση των μεταπροτύπων. Κατά τη διαδικασία αυτή, παρουσιάζονται δύο διανύσματα για κάθε διάνυσμα μεταβλητών που θα προστεθεί, ένα διάνυσμα συναρτήσεων στόχων που παράχθηκε από το ακριβές λογισμικό αξιολόγησης και ένα διάνυσμα συναρτήσεων στόχων που παράχθηκε από το λογισμικό αξιολόγησης με μεταπρότυπα. Έτσι ελέγχεται το σφάλμα του μεταπρότυπου σε σχέση με τις πραγματικές αξιολογήσεις. Μετά την προσθήκη των διανυσμάτων μεταβλητών και των διανυσμάτων των συναρτήσεων στόχων στον πίνακα του αρχικού σχεδιασμού, το μεταπρότυπο εκπαιδεύεται ξανά και η διαδικασία της βελτιστοποίησης επαναλαμβάνεται με τα νέα μεταπρότυπα.

Ο περιορισμός των τιμών των συναρτήσεων στόχων οδηγεί στην κατευθυνόμενη εύρεση λύσεων, δηλαδή περιορίζονται οι λύσεις σε ένα μικρότερο πεδίο όπου και τα μεταπρότυπα πιθανά να έχουν καλύτερη ακρίβεια. Με την τεχνική αυτή, τα μεταπρότυπα εκπαιδεύονται μόνο με όσα διανύσματα μεταβλητών δίνουν αποκρίσεις στο πεδίο ενδιαφέροντος.

Σημειώνεται ότι, μετά από οποιαδήποτε αλλαγή στα διανύσματα μεταβλητών που περιέχει ο σχεδιασμός, πρέπει να πραγματοποιηθεί ξανά η εκπαίδευση των μεταπρότυπων καθώς και η διαδικασία της βελτιστοποίησης.

Στην περίπτωση που έχουν πραγματοποιηθεί οι απαραίτητες αξιολογήσεις για τα αντίστοιχα διανύσματα μεταβλητών, εισάγονται εύκολα στο λογισμικό DoE, το οποίο,

στη συνέχεια, αναλαμβάνει την προτυποποίηση και την εύρεση της βέλτιστης λύσης. Διευκολύνονται, έτσι, προβλήματα των οποίων οι αποκρίσεις έχουν βρεθεί είτε χωρίς πρόγραμμα σε ηλεκτρονικό υπολογιστή, δηλαδή από πειράματα-μετρήσεις, είτε είχαν βρεθεί σε προηγούμενες εκτελέσεις του πειράματος.

Κεφάλαιο 5

Επίλυση Προβλημάτων Βελτιστοποίησης

Τα προβλήματα που επιλύθηκαν είναι δύο τύπων, μαθηματικά και πραγματικά προβλήματα αεροδυναμικής. Τα μαθηματικά προβλήματα πραγματοποιήθηκαν για την επιβεβαίωση της μεθόδου, δηλαδή για να αποφασιστεί αν όλη η διαδικασία καθώς και τα προγράμματα που χρησιμοποιούνται υλοποιούνται με σωστό τρόπο και δίνουν αποδεκτά αποτελέσματα. Συγκεκριμένα, στα προβλήματα που έχουν πολυωνυμικές συναρτήσεις-στόχους, η μέθοδος δεν παρέχει αναγκαστικά καλύτερα αποτελέσματα ή ταχύτερα, απλά επιβεβαιώνεται η λειτουργία της μεθόδου. Στα προβλήματα που έχουν εκθετικές, ημιτονοειδείς ή λογαριθμικές συναρτήσεις-στόχους χρησιμεύουν για τον έλεγχο της διαδικασίας και του λογισμικού σε πιο περίπλοκες μαθηματικές συναρτήσεις. Όλα αυτά καταλήγουν, στην επίλυση πραγματικών προβλημάτων ρευστοδυναμικής στα οποία θα γίνει εμφανής η χρησιμότητα της μεθόδου και τα καλύτερα και γρηγορότερα αποτελέσματα που προσφέρει σε σχέση με τις μεθόδους χωρίς μεταπρότυπα. Σημειώνεται ότι, με τον όρο **πραγματική αξιολόγηση** νοείται η αξιολόγηση που πραγματοποιείται με το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης, ενώ με την **προσεγγιστική αξιολόγηση** νοείται η αξιολόγηση που πραγματοποιείται με τα μεταπρότυπα.

5.1 Πολυωνυμικά Προβλήματα Ελαχιστοποίησης

Τα προβλήματα αυτού του τύπου έχουν αντικειμενικές συναρτήσεις που είναι πολυώνυμα και πραγματοποιούνται για τον έλεγχο της σωστής λειτουργίας του λογισμικού DoE καθώς και των μεθόδων που αυτό υλοποιεί. Η επίλυση τους με ΕΑ χωρίς μεταπρότυπα είναι γρήγορη και η υποβολή της με μεταπρότυπα δεν προσφέρει κάτι παραπάνω. Όμως, οι δοκιμές γίνονται για την πιστοποίηση της εγκυρότητας των μεταπρότυπων.

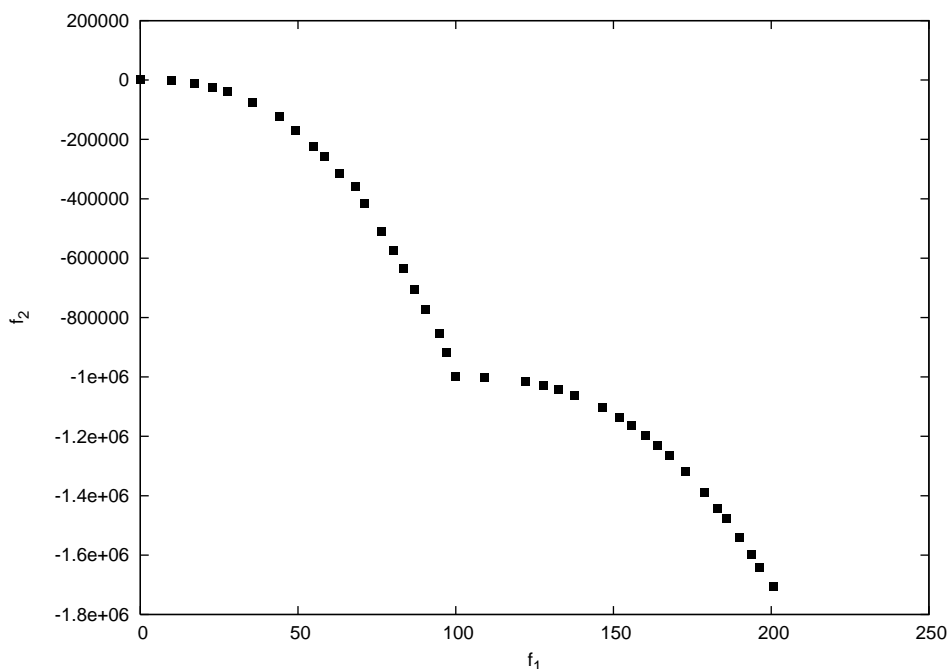
5.1.1 Πολυωνυμικό Πρόβλημα Δύο Στόχων

Αυτό το πρόβλημα έχει δυο αντικειμενικές συναρτήσεις προς ελαχιστοποίηση και τρεις μεταβλητές σχεδιασμού. Οι μεταβλητές x_1, x_2, x_3 περιορίζονται από το κάτω (-10) και το άνω όριο (10). Το πρόβλημα δεν έχει καμία φυσική σημασία και για αυτό θα μπορούσαν να είχαν επιλεγεί περισσότερες μεταβλητές σχεδιασμού με διαφορετικά όρια και διαφορετικές συναρτήσεις στόχων. Οι συναρτήσεις στόχων δίνονται από τις σχέσεις:

$$f_1(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \quad (5.1)$$

$$f_2(x_1, x_2, x_3) = 10x_3^5 - 7x_1^5 + 3x_2^6 - 5x_1^3 + 2x_3^2 + x_1x_2x_3 \quad (5.2)$$

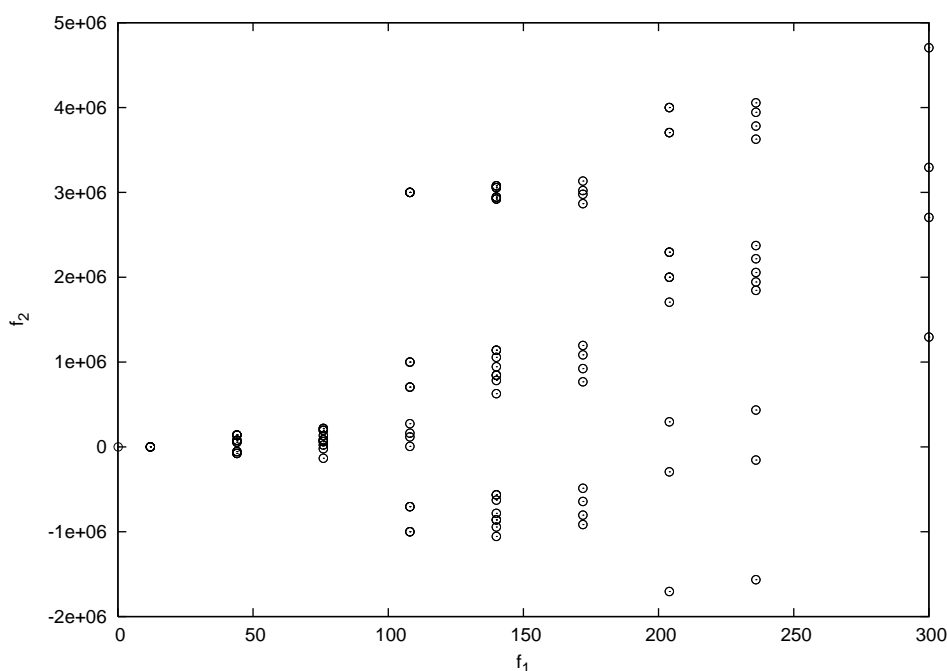
Αρχικά, πραγματοποιήθηκε βελτιστοποίηση του προβλήματος με το λογισμικό *EASY*, η οποία είχε ως αποτέλεσμα ένα μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων. Αυτό χρησιμοποιείται για την μετέπειτα σύγκρισή του με τη μέθοδο του σχεδιασμού πειραμάτων. Χρησιμοποιείται ένας (25,45) ΕΑ με μέγιστο αριθμό αξιολογήσεων τις 1450, που υπολογίζει το μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων του σχήματος 5.1.



Σχήμα 5.1: Πολυωνυμικό Πρόβλημα Δύο Στόχων. Μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων δύο στόχων, όπως υπολογίστηκε από τον *EASY*.

Στη συνέχεια, πραγματοποιείται η εύρεση των βέλτιστων λύσεων του προβλήματος με τη βοήθεια προτύπων παλινδρόμησης και τη μέθοδο σχεδιασμού πειραμάτων. Τα βήματα που υλοποιούνται είναι τα εξής:

1. **Δημιουργία Πίνακα Σχεδιασμού Πειράματος:** Χρησιμοποιήθηκε ο πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός για την κατασκευή του πίνακα του σχεδιασμού. Οι τρεις μεταβλητές χωρίστηκαν σε έξι επίπεδα τιμών καθεμιά. Η διακριτοποίηση αυτή πραγματοποιήθηκε ώστε να επιτευχθεί η καλύτερη ακρίβεια των προτύπων παλινδρόμησης με το μικρότερο δυνατό βαθμό του πολυωνύμου που θα χρησιμοποιηθεί. Ο πίνακας του σχεδιασμού αποτελείται από 216 διανύσματα τιμών των μεταβλητών και δημιουργήθηκε με τον τρόπο που αναλύθηκε στο κεφάλαιο 3.1.
2. **Αξιολόγηση των Διανυσμάτων Μεταβλητών του Σχεδιασμού:** Για κάθε διάνυσμα μεταβλητών που περιέχεται στον πίνακα του σχεδιασμού εκτελείται το λογισμικό αξιολόγησης. Επομένως, πραγματοποιούνται 216 αξιολογήσεις. Τελικά, δημιουργείται ο πίνακας των αποκρίσεων διάστασης (216×2) . Το σχήμα 5.2 δείχνει τον πίνακα των αποκρίσεων, ώστε να εκτιμηθεί το εύρος των αποκρίσεων.



Σχήμα 5.2: Πολυωνυμικό Πρόβλημα Δύο Στόχων. Αποκρίσεις του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού.

3. **Κατασκευή των Προτύπων Παλινδρόμησης:** Επιλέγονται δύο πρότυπα παλινδρόμησης, ένα για κάθε συνάρτηση-στόχο. Για την πρώτη συνάρτηση-στόχο, επιλέγεται ένα πολυώνυμο δευτέρου βαθμού για το πρότυπο παλινδρόμησης καθώς είναι γνωστή η συνάρτηση του αντίστοιχου στόχου και το πρότυπο προσαρμόζεται ώστε να την προσεγγίσει όσο το δυνατόν καλύτερα. Το πρότυπο,

συνεπώς, είναι:

$$\hat{y}_{k1} = \beta_{001} + \sum_{j=1}^2 \sum_{i=1}^3 \beta_{ij1} x_{ijk}^j \quad (5.3)$$

όπου ο δείκτης i δείχνει το αριθμό της μεταβλητής. Για αυτό και το άθροισμα είναι μέχρι τρία (3). Ο δείκτης j δείχνει τη δύναμη στην οποία υψώνεται η κάθε μεταβλητή και επειδή έχουμε πολυώνυμο δευτέρου βαθμού το αντίστοιχο άθροισμα είναι μέχρι το δύο (2), ο δείκτης k δείχνει την εκτέλεση του πειράματος και ο δείκτης 1 δείχνει ότι πρόκειται για την πρώτη συνάρτηση-στόχο. Για τη δεύτερη συνάρτηση-στόχο, επιλέγεται ένα πολυώνυμο έκτου βαθμού με μια αλληλεπίδραση για το πρότυπο παλινδρόμησης (βλ. Εξ.5.4). Αυτό γίνεται επειδή είναι γνωστό ότι η συνάρτηση-στόχος του πραγματικού προβλήματος έχει μεταβλητές που φθάνουν μέχρι έκτου βαθμού.

$$\hat{y}_{k2} = \beta_{002} + \sum_{j=1}^6 \sum_{i=1}^3 \beta_{ij2} x_{ijk}^j + \beta_{192} x_1 x_2 x_3 \quad (5.4)$$

όπου ο δείκτης 2 δείχνει ότι είναι για τη δεύτερη συνάρτηση στόχου. Ο παράγοντας $\beta_{192} x_1 x_2 x_3$ αφορά την αλληλεπίδραση που υπάρχει στην πραγματική αντικειμενική συνάρτηση και ο συντελεστής έχει δείκτη (192) τον αμέσως επόμενο αριθμό από τους άλλους συντελεστές. Για την εύρεση των συντελεστών β_{ijl} (όπου l είναι ο δείκτης του στόχου) και για τα δύο πρότυπα παλινδρόμησης χρησιμοποιείται η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων που αναλύθηκε στην ενότητα 2.3.4. Για τη γρηγορότερη γραφή των εξισώσεων των προτύπων παλινδρόμησης, ορίζεται η εξής γενική σχέση:

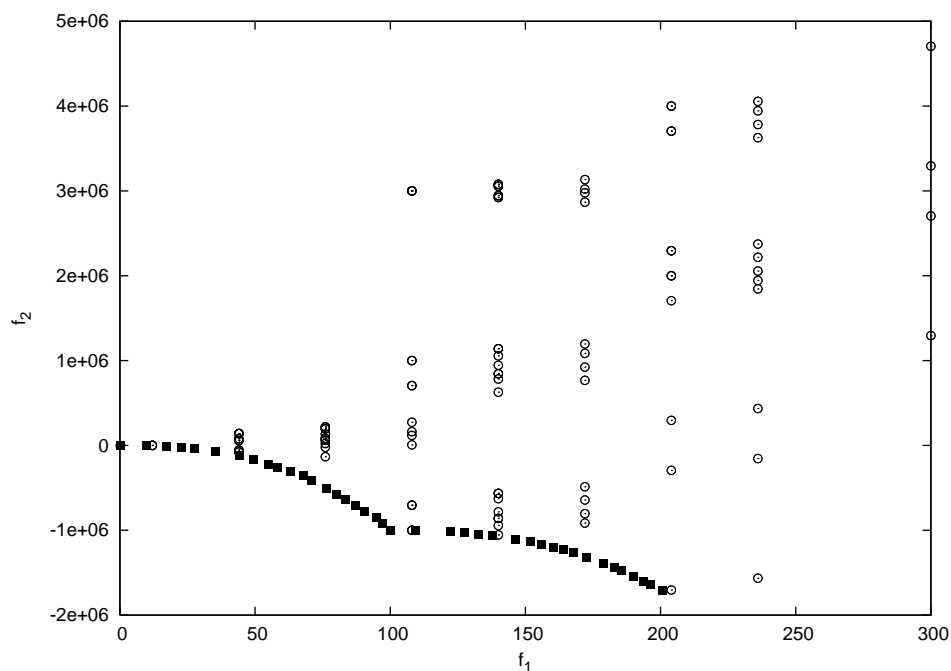
$$\hat{y}_{kO} = \beta_{00O} + \sum_{j=1}^P \sum_{i=1}^3 \beta_{ijO} x_{ijk}^j + \beta_{19O} x_1 x_2 x_3 \quad (5.5)$$

όπου ο δείκτης (O) θα συμβολίζει την συνάρτηση στόχο και ο δείκτης (P) θα συμβολίζει τη μέγιστη δύναμη που θα φθάνει το πολυώνυμο. Δηλαδή, το παραπάνω πρότυπο παλινδρόμησης (5.4) θα συμβολίζοταν ως 5.5 με $P = 6$ και $O = 2$.

Εδώ φαίνεται και η ανάγκη κατασκευής πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού με έξι τουλάχιστον επίπεδα σε κάθε μεταβλητή, που πραγματοποιήθηκε στο πρώτο βήμα. Στην περίπτωση που ο σχεδιασμός περιείχε λιγότερα (από τα 216) στοιχεία, η μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων δεν θα μπορούσε να υπολογίσει τους $6 \times 3 + 2 = 20$ συντελεστές που απαιτούνται για το δεύτερο πρότυπο παλινδρόμησης με ικανοποιητική ακρίβεια. Ο υπολογισμός των συντελεστών των προτύπων παλινδρόμησης καταλήγει στους ίδιους συντελεστές που έχουν οι συναρτήσεις-στόχοι (αναμενόμενο) και, επομένως, τα μεταπρότυπα και οι συναρτήσεις-στόχοι συμπίπτουν, δηλαδή δεν υπάρχει σφάλμα ανάμεσα στην πρόβλεψη και την πραγματική τιμή. Για το λόγο αυτό, δεν είναι αναγκαία

η χρήση ΕΑ για την εύρεση των βέλτιστων λύσεων, καθώς το μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων του σχήματος 5.1 θα είναι ίδιο με αυτό που προκύπτει από έναν ΕΑ με τα παραπάνω πρότυπα παλινδρόμησης. Η διαδικασία του συγκεκριμένου προβλήματος ολοκληρώνεται εδώ, όπου και έχει επιβεβαιωθεί ότι το λογισμικό λειτουργεί για πολυωνυμικά προβλήματα δύο στόχων. Παρουσιάζονται και τα υπόλοιπα βήματα για την πληρότητα της διαδικασίας.

4. **Χρήση ΕΑ με μεταπρότυπα ως το αποκλειστικό λογισμικό αξιολόγησης:** Στο συγκεκριμένο πρόβλημα, δεν γίνεται αυτό το βήμα, όπως εξηγήθηκε παραπάνω. Παρόλα αυτά, αναφέρεται για λόγους πληρότητας των βημάτων. Σε αυτό το βήμα, τα πρότυπα παλινδρόμησης που έχουν δημιουργηθεί χρησιμοποιούνται ως το λογισμικό αξιολόγησης για τον ΕΑ. Ολοκληρώνοντας τον ΕΑ, οι βέλτιστες λύσεις που προκύπτουν από τη σύγκλιση της διαδικασίας επαναξιολογούνται με το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης.
5. **Επανάληψη διαδικασίας:** Με το τέλος του ΕΑ που στηρίχτηκε αποκλειστικά σε προ-εκπαιδευμένα μεταπρότυπα, πραγματοποιείται μια επαναληπτική διαδικασία, αν η ποιότητα της πρόβλεψης δεν πληρεί τα απαραίτητα κριτήρια. Οι πραγματικές αποκρίσεις που βρίσκονται από το παραπάνω βήμα εισάγονται στον πίνακα του σχεδιασμού του πειράματος και επαναλαμβάνονται τα βήματα 3 με 5. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα, δεν χρειάστηκε να γίνει επανάληψη.



Σχήμα 5.3: Πολυωνυμικό Πρόβλημα Δύο Στόχων. Μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων δύο στόχων μαζί με τις αξιολογήσεις του σχεδιασμού πειραμάτων.

Η παραπάνω διαδικασία κατέληξε στην επιβεβαίωση της λειτουργίας των μεθόδων και του λογισμικού και της σωστής λειτουργίας των επιμέρους προγραμμάτων που

υλοποιούν τη διαδικασία. Οι συνολικές αξιολογήσεις, που θα είχαν πραγματοποιηθεί με το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης αν είχε εκτελεστεί η βελτιστοποίηση με ΕΑ, παρουσιάζονται στο σχήμα 5.3. Σε αυτό το πρόβλημα, η εύρεση βέλτιστων λύσεων με μεταπρότυπα δεν επιτυγχάνεται γρηγορότερα από την απλή εύρεση χωρίς μεταπρότυπα, καθώς είναι ίδια τα μεταπρότυπα και οι συναρτήσεις-στόχοι.

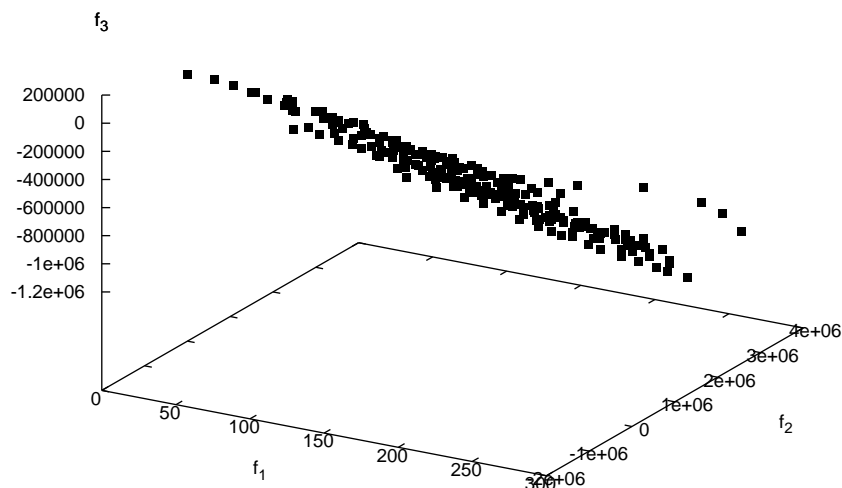
5.1.2 Πολυωνυμικό Πρόβλημα Τριών Στόχων

Το προηγούμενο πρόβλημα επεκτείνεται προσθέτοντας έναν ακόμα στόχο, με σκοπό να δημιουργηθεί ένα τριδιάστατο μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων. Επομένως οι δύο πρώτες συναρτήσεις στόχων δίνονται από τις εξισώσεις 5.1,5.2 και η τρίτη από την εξίσωση:

$$f_3 = x_1x_2x_3 + 10x_2 - 10x_2^5 + 5x_1^2 - 5x_1^4 + 15x_3^3 - 15x_3 \quad (5.6)$$

Ακολουθείται η ίδια διαδικασία και με το πρόβλημα δύο στόχων.

Αρχικά, πραγματοποιείται βελτιστοποίηση του προβλήματος με το λογισμικό *EASY* για να συγκριθούν τα αποτελέσματα με τη μέθοδο του σχεδιασμού πειραμάτων. Χρησιμοποιείται ένας (35,55) ΕΑ, με μέγιστο αριθμό αξιολογήσεων τις 1100, που υπολογίζει το μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων του σχήματος 5.4.



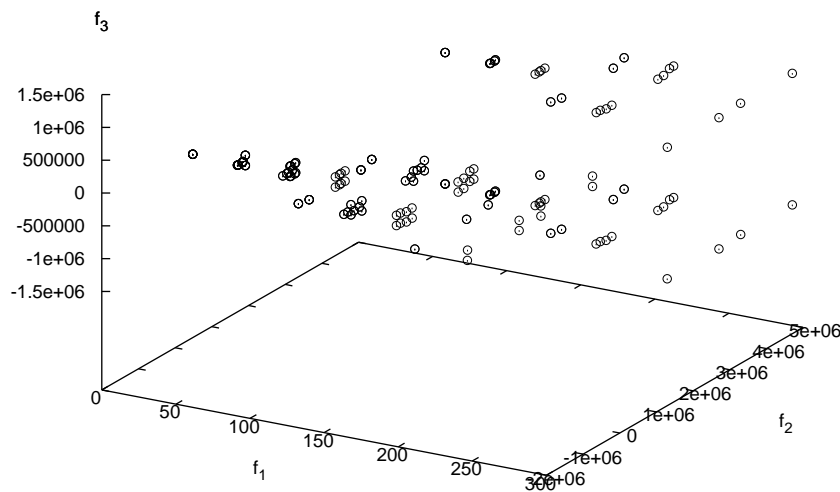
Σχήμα 5.4: Πολυωνυμικό Πρόβλημα Τριών Στόχων. Μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων τριών στόχων.

Οι συνολικές αξιολογήσεις που απαιτούνται είναι στο ίδιο επίπεδο με το προηγού-

μενο πρόβλημα, επειδή οι συναρτήσεις στόχων είναι πολυώνυμα και η εύρεση των βέλτιστων λύσεων πραγματοποιείται γρήγορα σε σχέση με προβλήματα με διαφορετικές συναρτήσεις στόχων. Ο αριθμός των γονέων και των απογόνων αυξήθηκε για να δημιουργηθεί ένα καλύτερο μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων, δηλαδή πιο πυκνό.

Στη συνέχεια, πραγματοποιήθηκε η εύρεση των βέλτιστων λύσεων του προβλήματος με τη βοήθεια προτύπων παλινδρόμησης και τη μέθοδο σχεδιασμού πειραμάτων. Τα βήματα, που πραγματοποιούνται, αναλύθηκαν παραπάνω και εδώ αναφέρονται επιγραμματικά:

1. **Δημιουργία Πίνακα Σχεδιασμού Πειράματος:** Χρησιμοποιούνται έξι επίπεδα σε κάθε μεταβλητή και ένας πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός που παράγουν 216 διαφορετικά διανύσματα τιμών των μεταβλητών.
2. **Αξιολόγηση των Διανυσμάτων Μεταβλητών του Σχεδιασμού:** Πραγματοποιούνται 216 αξιολογήσεις που γεμίζουν έναν πίνακα διάστασης (216×3) . Το σχήμα 5.5 δείχνει τον πίνακα των αποκρίσεων, σε καρτεσιανούς άξονες ώστε να εκτιμηθεί το εύρος των αποκρίσεων.



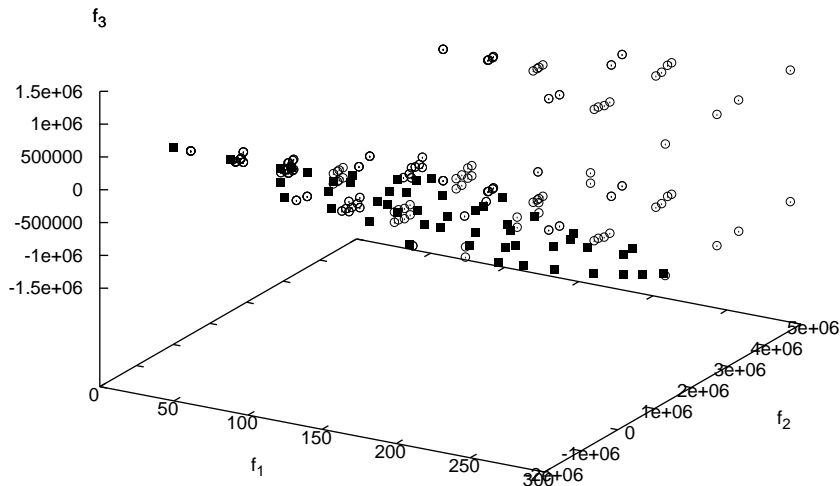
Σχήμα 5.5: Πολυωνυμικό πρόβλημα τριών στόχων. Αποκρίσεις του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού.

3. **Κατασκευή των Προτύπων Παλινδρόμησης:** Τα πρότυπα παλινδρόμησης για τις δύο πρώτες συναρτήσεις-στόχων παρουσιάζονται στις εξισώσεις 5.3 και 5.4 και είναι ίδια με το προηγούμενο πρόβλημα. Για την τρίτη συνάρτηση-στόχο, επιλέγεται ένα πολυώνυμο έκτου βαθμού για το πρότυπο παλινδρόμησης.

σης καθώς αυτό καλύπτει τον μεγαλύτερο βαθμό που παρουσιάζεται στην αντίστοιχη συνάρτηση-στόχο 5.6. Το πρότυπο, συνεπώς, είναι:

$$\hat{y}_{k3} = \beta_{003} + \sum_{j=1}^6 \sum_{i=1}^3 \beta_{ij3} x_{ijk}^j + \beta_{193} x_1 x_2 x_3 \quad (5.7)$$

όπου ο δείκτης 3 δείχνει ότι το πρότυπο αντιστοιχεί στην τρίτη συνάρτηση-στόχο. Ο υπολογισμός των συντελεστών του τελευταίου πρότυπου παλινδρόμησης καταλήγει στους ίδιους συντελεστές που έχει η συνάρτηση στόχος 5.6 και, επομένως, το μεταπρότυπο και η συνάρτηση στόχος συμπίπτουν, δηλαδή δεν υπάρχει σφάλμα ανάμεσα στην πρόβλεψη και την πραγματική τιμή. Για το λόγο αυτό, δεν είναι αναγκαία η χρήση ΕΑ για την εύρεση των βέλτιστων λύσεων, καθώς το μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων του σχήματος 5.4 θα είναι το μέτωπο που θα προέκυπτε αν πραγματοποιηθεί η διαδικασία του ΕΑ με τα μεταπρότυπα που δημιουργήθηκαν. Η διαδικασία του συγκεκριμένου προβλήματος ολοκληρώνεται εδώ, όπου και έχει επιβεβαιωθεί ότι το λογισμικό λειτουργεί για πολυωνυμικά προβλήματα τριών στόχων. Στο σχήμα 5.6, παρουσιάζονται όλες οι αξιολογήσεις που πραγματοποιήθηκαν για τον σχεδιασμό του πειράματος σε συνδυασμό με τις βέλτιστες λύσεις.



Σχήμα 5.6: Πολυωνυμικό Πρόβλημα Τριών Στόχων. Μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων δύο στόχων μαζί με τις αξιολογήσεις του σχεδιασμού πειραμάτων.

Η παραπάνω διαδικασία κατέληξε στην επιβεβαίωση της λειτουργίας των μεθόδων και του λογισμικού και της σωστής λειτουργίας των επιμέρους προγραμμάτων που υλοποιούν τη διαδικασία και σε περίπτωση τριών στόχων. Τονίζεται, πάλι, ότι η

χρήση μεταπροτύπου σε αυτό το πρόβλημα δεν έχει κάποια επιτάχυνση στην εύρεση των βέλτιστων λύσεων. Η διαδικασία που πραγματοποιήθηκε δεν διαφοροποιείται από το προηγούμενο πρόβλημα, απλά προστίθεται ένα ακόμα μεταπρότυπο για τον παραπάνω στόχο.

5.2 Μη-Πολυωνυμικά Μαθηματικά Προβλήματα Ελαχιστοποίησης

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται μαθηματικά προβλήματα, των οποίων οι συναρτήσεις στόχων τους δεν είναι πολυωνυμικές εκφράσεις, αλλά περιέχουν εκθετικά, λογάριθμους και τριγωνομετρικούς αριθμούς. Αυτά τα προβλήματα φανερώνουν τόσο τη σωστή λειτουργία του λογισμικού DoE και της μεθόδου σχεδιασμού πειραμάτων, όσο και τα πλεονεκτήματα που παρέχουν τα μεταπρότυπα.

5.2.1 Μη-Πολυωνυμικό Μαθηματικό Πρόβλημα Δύο Στόχων

Το πρόβλημα αυτό στοχεύει στην εύρεση των βέλτιστων τιμών των δύο συναρτήσεων στόχων της. Οι ανεξάρτητες μεταβλητές σχεδιασμού είναι τρεις με κάτω όριο το 0.1 και πάνω όριο το 10. Τα όρια αυτά περιορίζονται από τον φυσικό λογάριθμο που περιέχεται σε μια από τις συναρτήσεις στόχους. Οι συναρτήσεις στόχων δίνονται από τις σχέσεις:

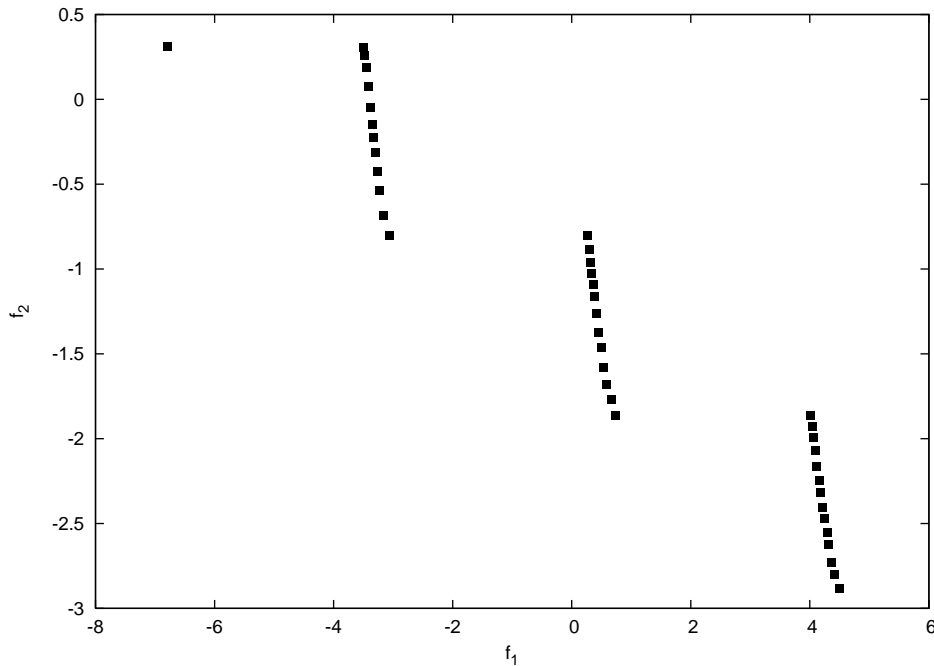
$$f_1(x_1, x_2, x_3) = \ln(x_1) + \ln(x_2) + \ln(x_3) \quad (5.8)$$

$$f_2(x_1, x_2, x_3) = \sin(x_1) + \sin(x_2) + \sin(x_3) \quad (5.9)$$

Χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό EASY για την υλοποίηση ενός (25,50) ΕΑ με μέγιστο αριθμό επιτρεπόμενων αξιολογήσεων τις 2500. Το μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων (βλ. Σχήμα 5.7), που προέκυψε από τη διαδικασία, συγκρίνεται με το μέτωπο, που προέκυψε από τη διαδικασία του σχεδιασμού πειράματος. Η διαδικασία αυτή περιλαμβάνει το σχεδιασμό του πειράματος, την αξιολόγηση των απαραίτητων διανυσμάτων τιμών των μεταβλητών, τη δημιουργία μεταπροτύπων και τελικά την εύρεση μετώπου με τον EASY που χρησιμοποιεί ως μοναδικό λογισμικό αξιολόγησης τα μεταπρότυπα.

Για τη διαδικασία του σχεδιασμού πειραμάτων υλοποιούνται τα ακόλουθα βήματα:

1. **Δημιουργία Πίνακα Σχεδιασμού Πειράματος:** Για την καλύτερη ακρίβεια των μεταπροτύπων, που θα δημιουργηθούν, οι μεταβλητές σχεδιασμού χωρίζονται σε 8 επίπεδα η καθεμία. Δημιουργείται, έτσι, ένας πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός με 512 εκτελέσεις πειραμάτων. Δηλαδή, ο πίνακας του

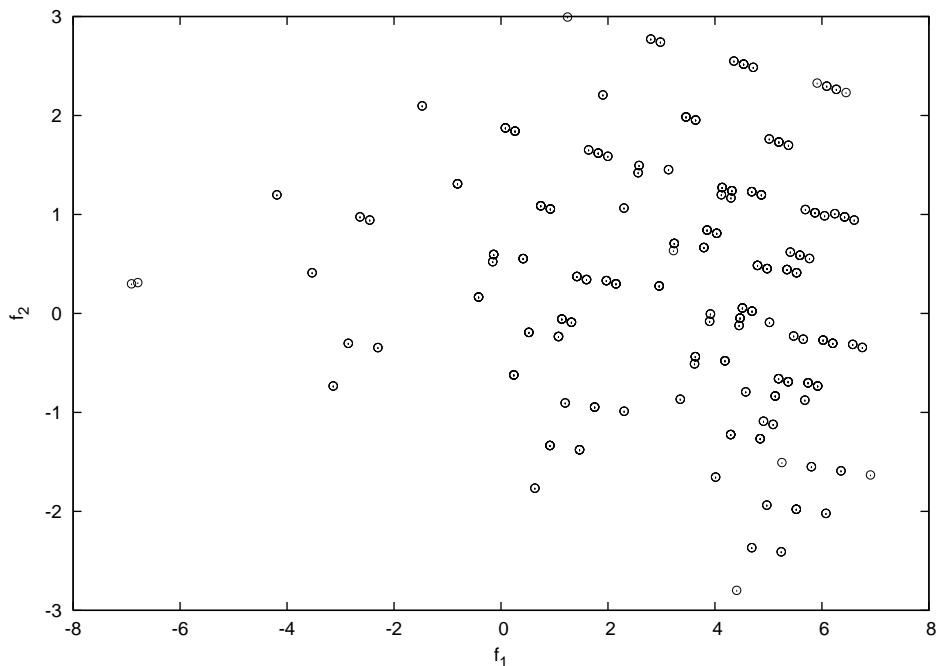


Σχήμα 5.7: Μη-πολυωνυμικό μαθηματικό πρόβλημα δυο στόχων. Μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων δύο στόχων.

σχεδιασμού πειράματος έχει διάσταση (512×3) και εμπεριέχει όλα τα διανύσματα τιμών των μεταβλητών για τις εκτελέσεις του πειράματος.

2. **Αξιολόγηση των Διανυσμάτων Μεταβλητών του Σχεδιασμού:** Για κάθε διάνυσμα μεταβλητών που περιέχεται στον πίνακα του σχεδιασμού εκτελείται το λογισμικό αξιολόγησης, δηλαδή πραγματοποιούνται 512 εκτελέσεις, που κατασκευάζουν τον πίνακα των αποκρίσεων διάστασης (512×2) . Το σχήμα 5.8 δείχνει τον πίνακα των αποκρίσεων.
3. **Κατασκευή των Προτύπων Παλινδρόμησης:** Επιλέγονται δύο πρότυπα παλινδρόμησης, ένα για κάθε συνάρτηση-στόχο. Οι συναρτήσεις-στόχοι του συγκεκριμένου προβλήματος είναι πολύ εύκολο να αναλυθούν σε πολυωνυμικές συναρτήσεις με τη βοήθεια των σειρών Taylor. Επομένως, τα πρότυπα παλινδρόμησης, που λειτουργούν με πολυώνυμα, πρέπει να παρέχουν καλή προσέγγιση των συναρτήσεων στόχων και μάλιστα η προσέγγιση βελτιώνεται όσο αυξάνεται ο μέγιστος βαθμός του πολυωνύμου. Για την πρώτη συνάρτηση στόχο, επιλέγεται ένα πολυώνυμο $18^{\text{ου}}$ βαθμού για το πρότυπο παλινδρόμησης. Το πρώτο πρότυπο, συνεπώς, είναι αυτό της σχέσης 5.5 με $P = 18$ και $O = 1$. Και για το δεύτερο πρότυπο παλινδρόμησης χρησιμοποιείται η σχέση 5.5 με $P = 18$ και $O = 2$, πάλι για να υπάρχει μεγάλη ακρίβεια στην προσέγγιση.

Ο μεγάλος βαθμός δυνάμεων των προτύπων, που κατασκευάστηκαν, φανερώνει την ανάγκη χωρισμού των μεταβλητών σε 8 επίπεδα. Απαιτούνται πολλά

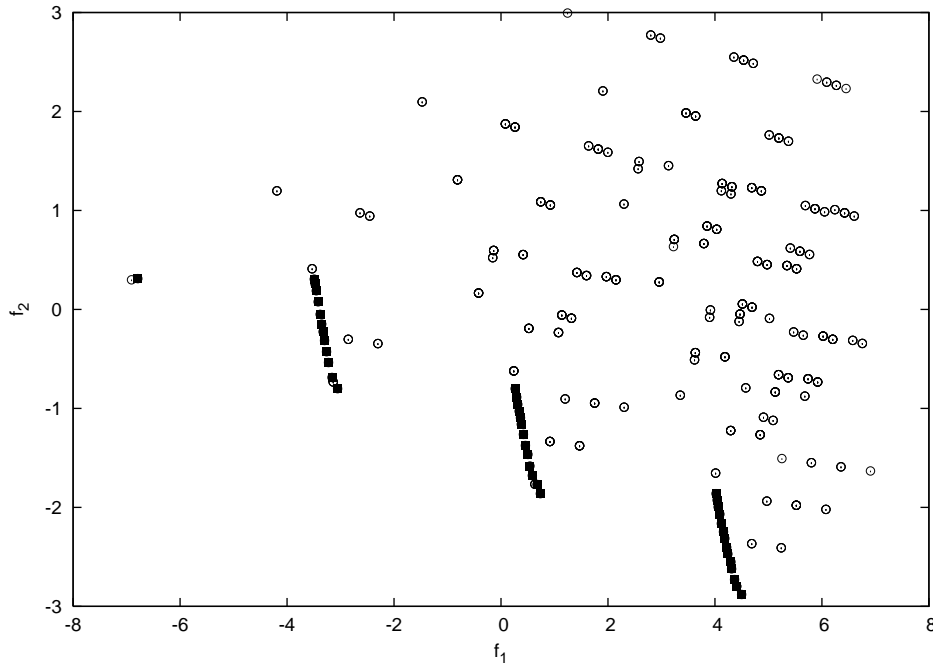


Σχήμα 5.8: Μη-πολυωνυμικό μαθηματικό πρόβλημα δυο στόχων. Αποκρίσεις του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού.

δεδομένα ώστε να δημιουργηθούν πρότυπα με μεγάλη ακρίβεια. Στα πρότυπα αυτά, πρέπει να υπολογιστούν 55 συντελεστές β . Υπολογίζονται οι συντελεστές β και για τα δύο μεταπρότυπα με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων.

4. **Χρήση ΕΑ με μεταπρότυπα ως το αποκλειστικό λογισμικό αξιολόγησης:**
 Σε αυτό το βήμα, τα πρότυπα παλινδρόμησης που έχουν δημιουργηθεί χρησιμοποιούνται ως το λογισμικό αξιολόγησης σε έναν ΕΑ. Η σύγκλιση της διαδικασίας είναι γρήγορη, για αυτό και δεν υπάρχει ενδιαφέρον για το ποιος είναι ο μέγιστος αριθμός αξιολογήσεων που πραγματοποιήθηκαν ή ποιο είναι το πλήθος των γονέων και των απογόνων του ΕΑ. Οι βέλτιστες λύσεις, που προκύπτουν, επαναξιολογούνται με το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης. Αυτές οι λύσεις συγκρίνονται και με τις υπόλοιπες του αρχικού σχεδιασμού πειραμάτων και παράγεται το μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων. Το μέτωπο αυτό βρίσκεται πολύ κοντά με το μέτωπο που προέκυψε με το λογισμικό EASY (βλ. Σχήμα 5.9). Οι προσεγγίσεις των μεταπρωτύπων έχουν μικρή απόκλιση σε σχέση με τις πραγματικές τιμές των συναρτήσεων στόχων. Η διαδικασία τερματίζεται εδώ καθώς έχουν βρεθεί οι βέλτιστες λύσεις του προβλήματος. Δεν απαιτείται επανάληψη της διαδικασίας.

Η διαδικασία με τα μεταπρότυπα βρήκαν τις βέλτιστες λύσεις με 512 αξιολογήσεις με το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης, ενώ ο απλός (μ,λ) ΕΑ συνέκλινε με 2500 αξιολογήσεις. Φαίνεται αισθητά η επιτάχυνση στη διαδικασία εύρεσης των βέλτιστων λύσεων και η βοήθεια που προσφέρουν τα μεταπρότυπα σε τέτοιου είδους προβλήματα.



Σχήμα 5.9: Μη-πολυωνυμικό μαθηματικό πρόβλημα δυο στόχων. Αποκρίσεις του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού.

τα. Σημειώνεται ότι δεν τρέχει ΕΑ με μεταπρότυπο συνδεδεμένο με την εξέλιξη, καθώς εδώ δεν επιθυμείται μια τέτοια σύγκριση. Παρόλα αυτά, η υποβοήθηση του ΕΑ με μεταπρότυπα συνδεδεμένα με την εξέλιξη θα παρείχε αντίστοιχα αποτελέσματα με τα μεταπρότυπα που χρησιμοποιήθηκαν, με επιτάχυνση της διαδικασίας και λιγότερες πραγματικές αξιολογήσεις. Δεν είναι γνωστό ποιο μεταπρότυπο εντοπίζει γρηγορότερα τις βέλτιστες λύσεις, αλλά αυτό θα φανεί σε επόμενα προβλήματα.

5.2.2 Μη-Πολυωνυμικό Μαθηματικό Πρόβλημα Τριών Στόχων

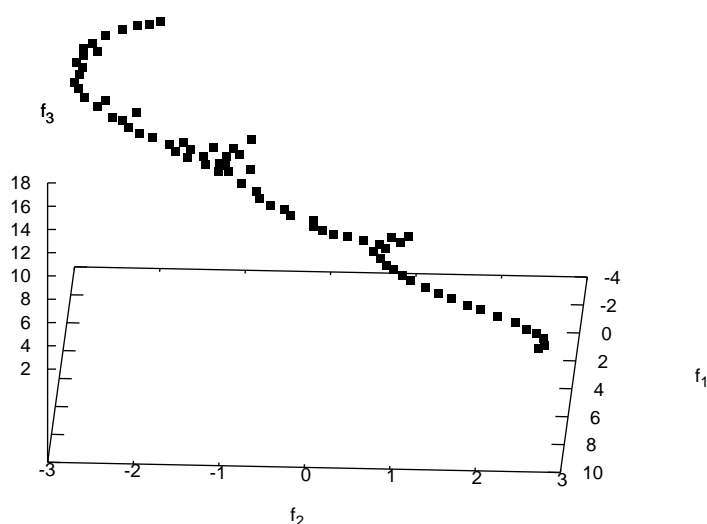
Το πρόβλημα αυτό στοχεύει στην εύρεση των βέλτιστων τιμών των τριών συναρτήσεων-στόχων της. Οι ανεξάρτητες μεταβλητές σχεδιασμού είναι τρεις με κάτω όριο το 0.1 και πάνω όριο το 3, τα οποία διαμορφώνονται από τις συναρτήσεις στόχους. Στο πρόβλημα αυτό, οι συναρτήσεις στόχων γίνονται πιο περίπλοκες, σε σχέση με τα προηγούμενα προβλήματα, και είναι:

$$f_1(x_1, x_2, x_3) = 3 + 2 \cos(x_1^2) + 2 \cos(x_2^2) + 2 \cos(x_3^2) \quad (5.10)$$

$$f_2(x_1, x_2, x_3) = \sin(e^{x_1}) + \sin(e^{x_2}) + \sin(e^{x_3}) \quad (5.11)$$

$$f_3(x_1, x_2, x_3) = e^{x_1} + e^{x_2} + e^{x_3} \quad (5.12)$$

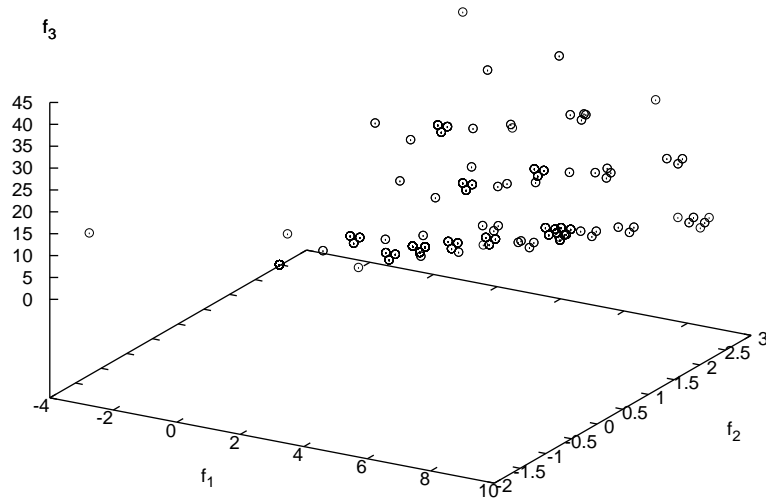
Χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό EASY για την υλοποίηση ενός (30,60) ΕΑ με μέγιστο αριθμό επιτρεπόμενων αξιολογήσεων τις 5000. Το μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων από τον ΕΑ παρουσιάζεται στο σχήμα 5.10.



Σχήμα 5.10: Μη-πολυωνυμικό μαθηματικό πρόβλημα τριών στόχων. Μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων τριών στόχων, που δημιουργήθηκε από το λογισμικό EASY.

Για την διαδικασία του σχεδιασμού πειραμάτων υλοποιούνται τα ίδια βήματα, που έγιναν και στα άλλα προβλήματα :

1. **Δημιουργία Πίνακα Σχεδιασμού Πειράματος:** Οι μεταβλητές σχεδιασμού χωρίζονται σε 10 επίπεδα η καθεμία, επειδή οι συναρτήσεις στόχων είναι περίπλοκες και χρειάζεται αρκετά δεδομένα για να επιτευχθεί ικανοποιητική ακρίβεια των προσεγγίσεων. Δημιουργείται, έτσι, ένας πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός με 1000 εκτελέσεις πειραμάτων, που απαρτίζουν τον πίνακα του σχεδιασμού.
2. **Αξιολόγηση των Διανυσμάτων Μεταβλητών του Σχεδιασμού:** Χρειάστηκαν να υλοποιηθούν 1000 πραγματικές αξιολογήσεις προκειμένου να γεμίσει ο πίνακας των αποκρίσεων, που φαίνεται στο σχήμα 5.11.
3. **Κατασκευή των Προτύπων Παλινδρόμησης:** Οι τρεις συναρτήσεις-στόχοι απαιτούν τρία διαφορετικά πρότυπα παλινδρόμησης. Όπως και στο μη-πολυωνυμικό μαθηματικό πρόβλημα δυο στόχων, έτσι και εδώ οι συναρτήσεις-στόχοι μπορούν να αναλυθούν σε πολυώνυμα με τη βοήθεια σειρών Taylor. Επειδή, όμως, οι συναρτήσεις-στόχοι είναι διαφορετικές από απλά πολυώνυμα, πάντοτε θα υπάρχει ένα μικρό σφάλμα μεταξύ της προσέγγισης και της πραγματικής τιμής. Χρειάζεται κατασκευή προτύπων με μεγάλες δυνάμεις, έτσι

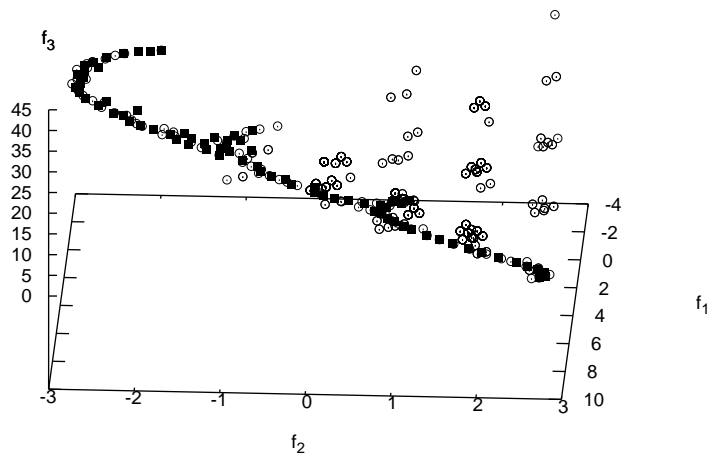


Σχήμα 5.11: Μη-πολυωνυμικό μαθηματικό πρόβλημα τριών στόχων. Αποκρίσεις του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού.

ώστε η προσεγγιστική αξιολόγηση να μην απέχει πολύ από την πραγματική αξιολόγηση. Για την πρώτη συνάρτηση-στόχο, επιλέγεται ένα πολυώνυμο 18^{ου} βαθμού για το πρότυπο παλινδρόμησης, δηλαδή η εξίσωση 5.5 με $P = 18$ και $O = 1$. Το ίδιο γίνεται και με τη δεύτερη συνάρτηση-στόχο, που θα εκφράζεται από την εξίσωση 5.5 με $P = 18$ και $O = 2$. Για την τρίτη συνάρτηση-στόχο χρησιμοποιήθηκε πρότυπο 38^{ου} βαθμού, δηλαδή η εξίσωση θα είναι η 5.5 με $P = 38$ και $O = 3$. Η μέγιστη δύναμη του πολυωνύμου αυξήθηκε, γιατί παρατηρήθηκε ότι δεν επιτυγχάνεται ικανοποιητική ακρίβεια με πολυώνυμα μικρότερου βαθμού. Επειδή χρειάζονται να βρεθούν 85 συντελεστών β για το τρίτο πρότυπο και 55 συντελεστών β για το καθένα από τα άλλα δύο πρότυπα, η διακριτοποίηση των μεταβλητών έγινε σε 10 επίπεδα. Η εύρεση των συντελεστών γίνεται με τη βοήθεια της μεθόδου ελαχίστων τετραγώνων.

4. Χρήση ΕΑ με μεταπρότυπα ως το αποκλειστικό λογισμικό αξιολόγησης:

Για να βρεθούν οι βέλτιστες λύσεις, πρέπει να υλοποιηθεί ένας ΕΑ με λογισμικό αξιολόγησης τα μεταπρότυπα. Η εκτέλεση του ΕΑ δεν υπολογίζεται στο υπολογιστικό κόστος της διαδικασίας, καθώς κάθε εκτέλεση των μεταπρωτύπων απαιτεί μηδαμινό χρόνο σε σχέση με την εκτέλεση του πραγματικού προτύπου παλινδρόμησης. Τα διανύσματα των τιμών των μεταβλητών, που αντιστοιχούν στις βέλτιστες λύσεις, αξιολογούνται ξανά με το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης. Οπότε, η διαδικασία καταλήγει στην παραγωγή ενός μετώπου μη-κυριαρχούμενων λύσεων. Το μέτωπο αυτό (βλ. Σχήμα 5.12) βρίσκεται πολύ κοντά στο μέτωπο που παράχθηκε με το λογισμικό EASY. Οι προσεγγίσεις



Σχήμα 5.12: Μη-πολυωνυμικό μαθηματικό πρόβλημα τριών στόχων. Αποκρίσεις του πλήρους παραγοντικού σχεδιασμού.

των μεταπροτύπων έχουν μικρή απόκλιση σε σχέση με τις πραγματικές τιμές των συναρτήσεων στόχων. Η διαδικασία τερματίζεται εδώ καθώς έχουν βρεθεί οι βέλτιστες λύσεις του προβλήματος και δεν απαιτείται κάποια βελτίωση των αποτελεσμάτων.

Φαίνεται η βοήθεια των μεταπροτύπων στη διαδικασία της βελτιστοποίησης, καθώς εντοπίζεται το ίδιο μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων με το 1/5 των πραγματικών αξιολογήσεων που χρειάστηκε η διαδικασία βελτιστοποίησης χωρίς μεταπρότυπα.

5.3 Ρευστοδυναμικά Προβλήματα Βελτιστοποίησης

Τα προβλήματα αυτά αποτελούν πραγματικά ρευστοδυναμικά προβλήματα, τα οποία καλείται να βελτιστοποιήσει ένας μηχανικός. Σε αυτά τα προβλήματα, εμφανίζονται τα πλεονεκτήματα της διαδικασίας του σχεδιασμού πειραμάτων. Τα αποτελέσματα της διαδικασίας σχεδιασμού πειραμάτων συγκρίνονται και με αυτά ενός (μ,λ) ΕΑ, αλλά και με αυτά ενός ΕΑ υποβοηθούμενου από μεταπρότυπα συνδεδεμένα με την εξέλιξη (online). Έτσι, ο αναγνώστης είναι σε θέση να αναγνωρίσει τις διαφορές ανάμεσα στις μεθόδους καθώς και τα πλεονεκτήματα που η καθεμιά παρέχει.

5.3.1 Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Αεροτομής Τεσσάρων Στοιχείων

Το πρόβλημα βελτιστοποίησης αεροτομής τεσσάρων στοιχείων μελετά τη ροή αέρα γύρω από υπεραντωτική διάταξη. Στο σύστημα περιλαμβάνονται τέσσερις αεροτομές, η μπροστινή (Slat), η κύρια/κεντρική (Main), η πρώτη πίσω (Flap1) και η δεύτερη πίσω (Flap2). Η κατασκευή αυτή έχει ως στόχο την αύξηση του συντελεστή άνωσης (C_l). Στο πρόβλημα μεγιστοποίησης που αναλύεται, στόχος είναι η μεγιστοποίηση του συντελεστή άνωσης. Για διευκόλυνση της διαδικασίας και χωρίς να επηρεαστεί καθόλου το τελικό αποτέλεσμα, θεωρείται ότι πρέπει να ελαχιστοποιηθεί η αρνητική τιμή του συντελεστή άνωσης. Για τον υπολογισμό της συνάρτησης-στόχου χρησιμοποιείται λογισμικό αξιολόγησης που προγραμματίστηκε στο ΜΠΥΡ&Β για την επίλυση ροών. Τα γεωμετρικά σχήματα των αεροτομών θεωρούνται σταθερά και διδιάστατα. Αλλάζοντας τη θέση και τη στροφή των πτέρυγων αλλάζει και ο συντελεστής άνωσης. Στην περίπτωση που αναλύεται εδώ, η κύρια αεροτομή δεν αλλάζει θέση ή στροφή, αλλά παραμένει στη θέση της. Στόχος αυτού του προβλήματος βελτιστοποίησης είναι η εύρεση των συνδυασμών των θέσεων και των στροφών των αεροτομών ώστε να επιτευχθεί μεγιστοποίηση του συντελεστή άνωσης. Επειδή το πρόβλημα είναι διδιάστατο, οι ανεξάρτητες μεταβλητές είναι 9, δυο μετακινήσεις (μια κατά τον άξονα x και μια κατά τον y) και μια στροφή για κάθε αεροτομή που κινείται. Στο πίνακα 5.1 φαίνονται τα άνω και κάτω όρια των μεταβλητών σχεδιασμού.

Variable	Min	Max
x_1	-0.15	0.15
y_1	-0.05	0.05
θ_1	-0.05	0.05
x_2	-0.15	0.15
y_2	-0.05	0.05
θ_2	-0.05	0.05
x_3	-0.15	0.15
y_3	-0.05	0.05
θ_3	-0.05	0.05

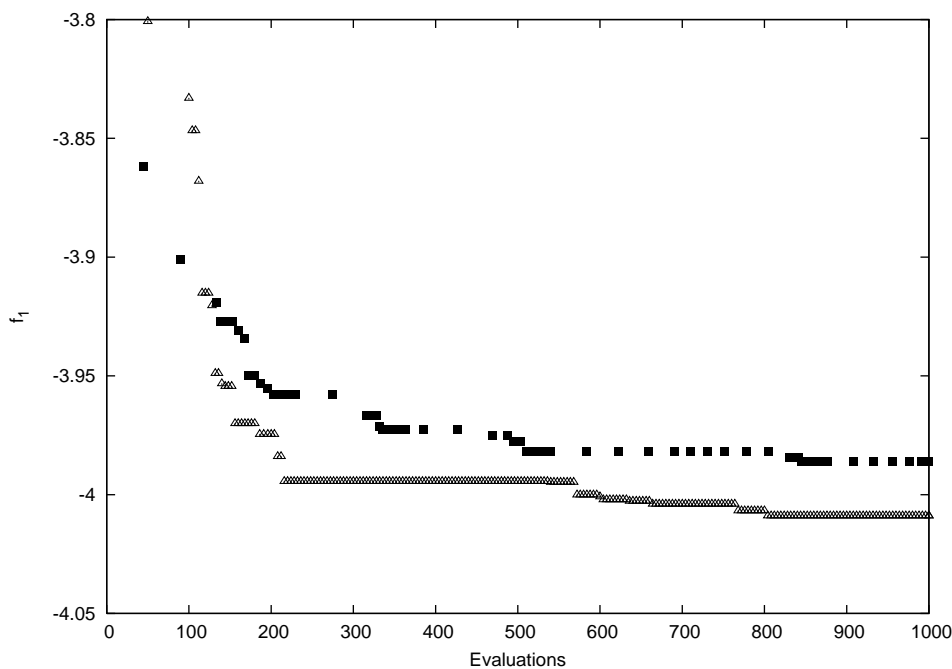
Πίνακας 5.1: Όρια μεταβλητών σχεδιασμού.

Αρχικά, έχει ορισθεί μια αρχική θέση για κάθε αεροτομή. Οι ανεξάρτητες μεταβλητές σχεδιασμού δηλώνουν το πόσο και πως θα κουνηθεί το κάθε αεροτομή. Αφού έχουν αλλάξει οι θέσεις των αεροτομών, δημιουργείται ένα διδιάστατο πλέγμα γύρω από αυτά. Το πλέγμα δεν έχει συγκεκριμένους κόμβους ή στοιχεία, αλλά αλλάζουν ανάλογα με τις αποστάσεις των αεροτομών. Οι κόμβοι κυμαίνονται από 39000 έως και 71000 με μέση τιμή τους 55000 κόμβους. Τα στοιχεία του πλέγματος είναι μόνο τρίγωνα και κυμαίνονται από 77000 έως 142000 με μέση τιμή τα 100000 τρίγωνα. Το λογισμικό αξιολόγησης είναι κώδικας ατρίβους συμπιεστής ροής (εξισώσεις Euler), τρέχει σε κάρτες γραφικών (GPUs) με μικτή ακρίβεια. Ο κώδικας αυτός αναπτύχθηκε στο ΜΠΥΡ&Β [33] [34]. Για την επίλυση, στο επ' άπειρο όριο του χωρίου ροής, ο αριθμός Mach είναι ίσος με 0.2 και η γωνία πρόσπτωσης με 10° .

Στο τέλος της διαδικασίας, υπολογίζεται ο συντελεστής άνωσης, δηλαδή η τιμή της συνάρτησης-στόχου για το διάνυσμα τιμών των μεταβλητών που ορίσθηκε.

Πραγματοποιείται εύρεση της βέλτιστης λύσης με το λογισμικό EASY, που υλοποιεί έναν (25,45) EA με μέγιστο αριθμό αξιολογήσεων τις 1000. Η διαδικασία συγκλίνει σε λύση με συντελεστή άνωσης 3.98585. Παρατηρείται ότι το αποτέλεσμα του EASY είναι με αρνητικό πρόσημο, καθώς εκτελείται διαδικασία ελαχιστοποίησης και για αυτό ο συντελεστής άνωσης υπολογίζεται με αρνητική τιμή.

Στο σημείο αυτό, εκτελείται και ένας EA υποβοηθούμενος με τοπικά συνδεδεμένα με την εξέλιξη μεταπρότυπα (online MAEA) [35]. Το λογισμικό EASY έχει τη δυνατότητα να τον υλοποιήσει και έτσι χρησιμοποιούνται τα νευρωνικά δίκτυα ακτινικής βάσης για την υποβοήθηση του EA. Τα μεταπρότυπα ενεργοποιούνται μετά τη δημιουργία μιας βάσης δεδομένων 100 στοιχείων από τα οποία χρησιμοποιούνται 15 μέχρι 30 στοιχεία για την εκπαίδευση των μεταπρωτύπων. Επιπλέον, σε κάθε γενιά που προκύπτει με τα μεταπρότυπα αξιολογούνται ξανά με το ακριβές λογισμικό αξιολόγησης από 4 μέχρι 8 άτομα των πληθυσμών γονέων και απογόνων. Ο EA υποβοηθούμενος με μεταπρότυπα συγκλίνει στη λύση με τιμή 4.00888 για τον συντελεστή άνωσης, με κόστος 600 πραγματικών αξιολογήσεων. Η σύγκριση των συγκλίσεων των δυο παραπάνω EA φαίνεται στο σχήμα 5.13. Ο άξονας f_1 δείχνει την αντικειμενική συνάρτηση, ενώ ο άξονας Evaluations τις πραγματικές αξιολογήσεις που πραγματοποιήθηκαν. Είναι φανερό ότι η βοήθεια των μεταπρωτύπων επιταχύνει τη διαδικασία



Σχήμα 5.13: Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Αεροτομής Τεσσάρων Στοιχείων. Σύγκλιση (μ.λ) EA (■) και EA υποβοηθούμενου με συνδεδεμένα με την εξέλιξη μεταπρότυπα (online MAEA) (△).

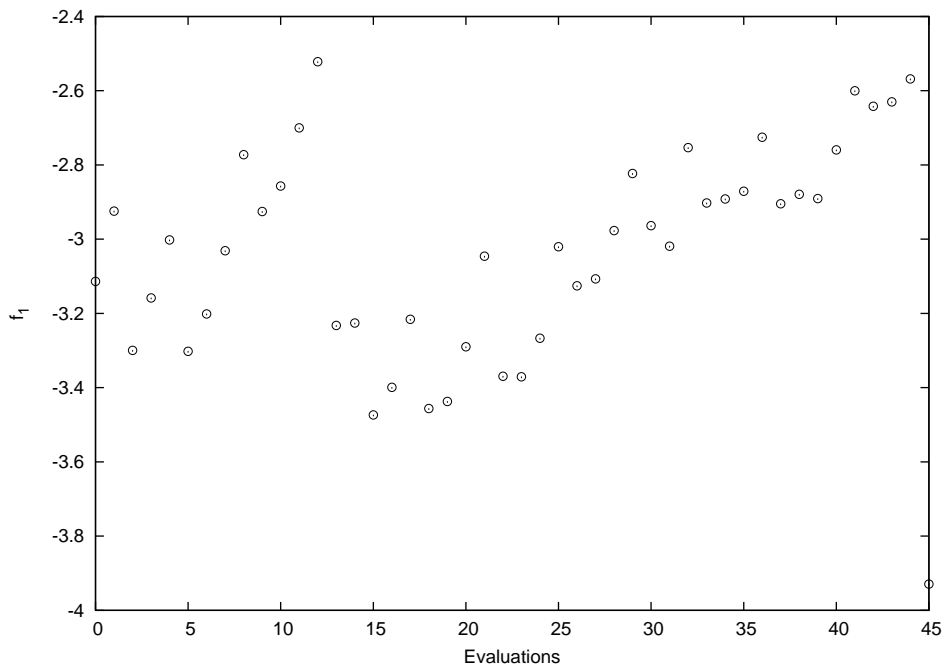
και την κάνει να συγκλίνει σε ακόμα καλύτερη λύση.

Στη συνέχεια, υπολογίζεται η βέλτιστη λύση από έναν ΕΑ, που χρησιμοποιεί αποσυνδεδεμένα από την εξέλιξη του ΕΑ εκπαιδευμένα μεταπρότυπα, όπου η αρχική εκπαίδευση γίνεται για σημεία που επιλέγει η διαδικασία σχεδιασμού πειραμάτων. Η διαδικασία είναι ίδια με αυτή που υλοποιήθηκε στα μαθηματικά προβλήματα βελτιστοποίησης. Αναλύεται στα ακόλουθα βήματα:

- 1. Δημιουργία Πίνακα Σχεδιασμού Πειράματος:** Το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης απαιτεί αρκετό υπολογιστικό χρόνο. Επομένως, επιθυμείται να εκτελεστεί όσο το δυνατόν λιγότερες φορές. Για τον λόγο αυτό, δεν πραγματοποιείται πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός, αλλά επιλέγεται ένας τυχαιοποιημένος σχεδιασμός βασισμένος σε κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό. Σε αυτό, όπως αναλύθηκε και στην αντίστοιχη ενότητα 3.3, ο χρήστης καθορίζει τον ακριβή αριθμό των πραγματικών αξιολογήσεων, που επιθυμεί να πραγματοποιήσει. Το αντίστοιχο πρόγραμμα αναλαμβάνει να κατασκευάσει το κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό, του οποίου το σύνολο των αξιολογήσεων που απαιτεί διαφέρει όσο το δυνατόν λιγότερο από το σύνολο των αξιολογήσεων, που επιθυμεί ο χρήστης. Στη συνέχεια, επιλέγει από αυτές με τυχαίο τρόπο το ποιες θα πραγματοποιηθούν. Στην συγκεκριμένη περίπτωση, επιλέγονται να γίνουν 45 πραγματικές αξιολογήσεις, επομένως ο πίνακας του σχεδιασμού έχει διάσταση (45×9) . Οι 9 μεταβλητές σχεδιασμού χωρίζονται σε 4 επίπεδα η καθεμιά.
- 2. Αξιολόγηση των Διανυσμάτων Μεταβλητών του Σχεδιασμού:** Εκτελούνται οι αναγκαίες πραγματικές αξιολογήσεις με τα διανύσματα τιμών των μεταβλητών που περιέχονται στο πίνακα σχεδιασμού. Συμπληρώνεται ο πίνακας των αποκρίσεων και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο σχήμα 5.14.
- 3. Κατασκευή των Προτύπων Παλινδρόμησης:** Επειδή δεν είναι γνωστό το πως μπορεί να αναλυθεί η συνάρτηση στόχος σε πολυώνυμο, ερευνήθηκε το πολυώνυμο έτσι ώστε να παρέχει το μικρότερο δυνατό σφάλμα ανάμεσα στις πραγματικές και τις προσεγγιστικές αξιολογήσεις. Η σχέση που χρησιμοποιείται για το πρότυπο παλινδρόμησης είναι:

$$\hat{y} = \beta_0 + \sum_{i=1}^9 \beta_i x_i + \sum_{i=2}^4 \beta_{i+9} x_i^2 + \sum_{i=6}^8 \beta_{i+12} x_i^2 + \beta_{16} \prod_{i=1}^9 x_i \quad (5.13)$$

Οι δείκτες των συντελεστών β τοποθετούνται με αύξουσα σειρά, αλλά δεν υπάρχει πρόβλημα να τοποθετηθούν με οποιοδήποτε άλλο τρόπο. Δεν υπάρχει δείκτης, που να υποδηλώνει σε ποια συνάρτηση-στόχου αντιστοιχεί το πρότυπο, επειδή υπάρχει μόνο μια συνάρτηση-στόχου. Το πρότυπο αυτό δίνει τη δυνατότητα υπολογισμού των συντελεστών του με μικρή βάση δεδομένων (δηλαδή, μικρό πίνακα σχεδιασμού) σε σχέση με τα μαθηματικά προβλήματα βελτιστοποίησης. Το υποπρόγραμμα υλοποίησης της μεθόδου ελαχίστων τετραγώνων υπολογίζει τους συντελεστές β .



Σχήμα 5.14: Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Αεροτομής Τεσσάρων Στοιχείων. Αποκρίσεις του σχεδιασμού.

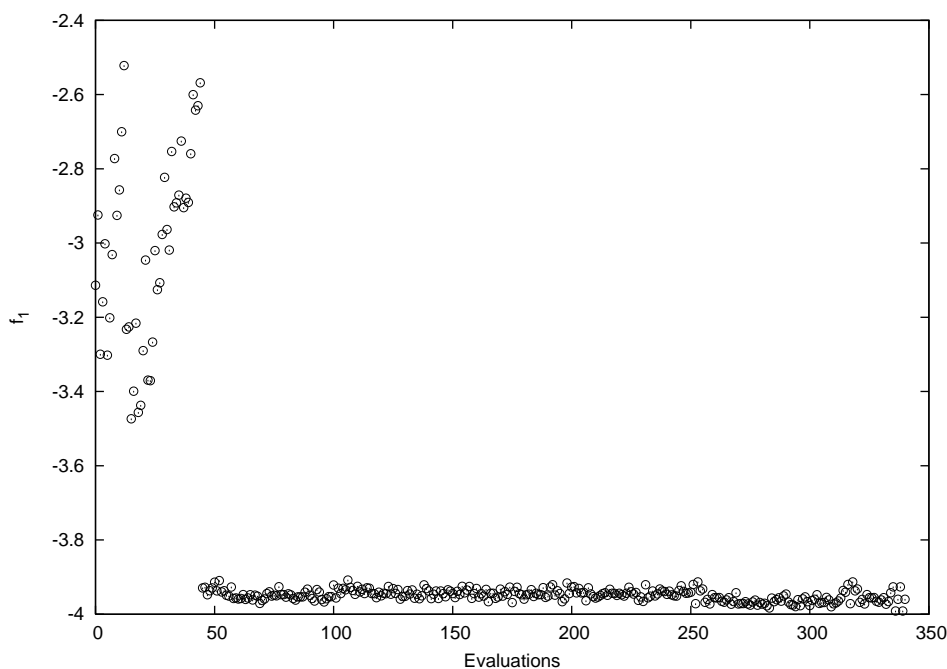
4. Χρήση ΕΑ με μεταπρότυπα ως το αποκλειστικό λογισμικό αξιολόγησης :

Το λογισμικό EASY χρησιμοποιώντας ως λογισμικό αξιολόγησης το εκπαιδευμένο μεταπρότυπο του προηγούμενου βήματος υλοποιεί έναν ΕΑ για την εύρεση της βέλτιστης λύσης. Σε αυτήν την περίπτωση, ο ΕΑ εκτελείται πολύ γρήγορα και για αυτό δεν λαμβάνεται υπόψη το υπολογιστικό του κόστος. Η βέλτιστη λύση επαναξιολογείται και με το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης.

5. Επανάληψη διαδικασίας :

Η λύση του ΕΑ δεν δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα την πρώτη φορά. Για αυτό το λόγο χρειάζεται να πραγματοποιηθεί επαναληπτική διαδικασία από το βήμα 3 μέχρι και το 5. Σε κάθε επανάληψη, προστίθενται οι βέλτιστες λύσεις του 4^{ου} βήματος στον αρχικό πίνακα του σχεδιασμού και μετά εκτελούνται τα βήματα 3 έως και 5. Έτσι, εμπλουτίζεται ο πίνακας και το πρότυπο μπορεί να πετύχει καλύτερη ακρίβεια και κατ' επέκταση καλύτερη βέλτιστη λύση. Για να υπάρχουν περισσότερες νέες λύσεις κάθε φορά, στο βήμα 4 λαμβάνονται παραπάνω από μια βέλτιστες λύσεις. Προφανώς, όλες αυτές δεν είναι βέλτιστες αλλά βοηθούν την εκπαίδευση του μεταπρότυπου. Επιπλέον, αντί απλά να συμπληρωθεί ο πίνακας με τις νέες αξιολογήσεις, μπορεί να περιοριστεί σε ένα πεδίο αποκρίσεων. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα, όταν ο πίνακας ξεπερνά τα 100 στοιχεία, επιλέχθηκαν τα 80 καλύτερα διανύσματα τιμών των μεταβλητών (αυτά με τις μικρότερες αποκρίσεις) για την εκπαίδευση του μεταπρότυπου. Με αυτήν την τεχνική αυξάνεται η ακρίβεια του προτύπου παλινδρόμησης γύρω από την περιοχή της βέλτιστης τιμής. Κριτήριο διακοπής της επανάληψης είναι η εύρεση της βέλτιστης λύσης

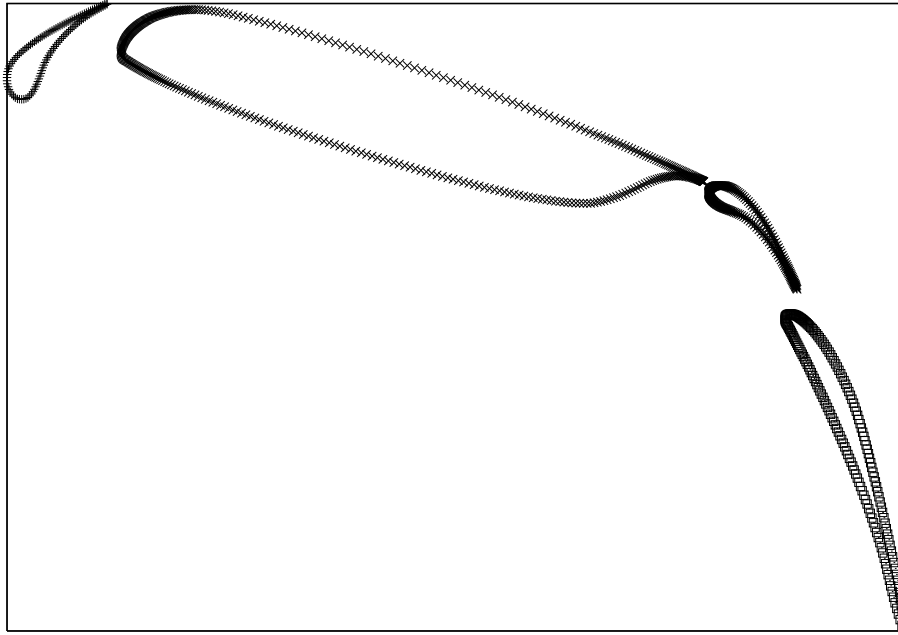
ή το όριο των πραγματικών αξιολογήσεων που μπορούν να πραγματοποιηθούν. Πραγματοποιούνται 10 επαναλήψεις, για το πρόβλημα αυτό. Κάθε επανάληψη προσθέτει 30 νέα διανύσματα τιμών των μεταβλητών στον πίνακα του σχεδιασμού. Η σύγκλιση της διαδικασίας παρουσιάζεται στο σχήμα 5.15.



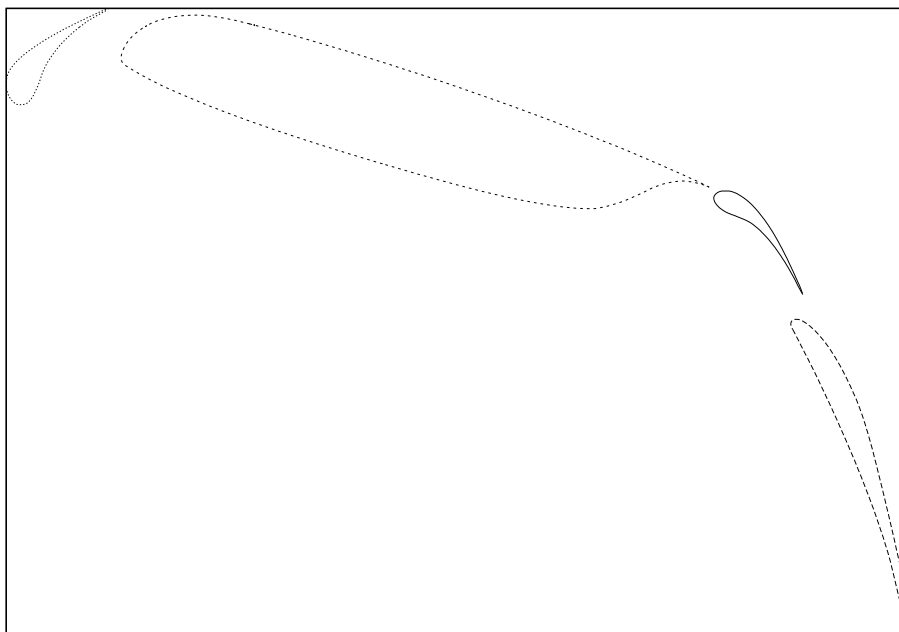
Σχήμα 5.15: Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Αεροτομής Τεσσάρων Στοιχείων. Σύγκλιση διαδικασίας σχεδιασμού πειραμάτων.

Με το πέρας της άνω διαδικασίας, έχουν υπολογιστεί 345 διανύσματα τιμών των μεταβλητών με το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης. Η βέλτιστη λύση που βρέθηκε από όλα αυτά υπολόγισε τον συντελεστή άνωσης ίσο με 3.99151. Το σχήμα 5.16 δείχνει την διάταξη των τεσσάρων αεροτομών, η οποία δίνει ως αποτέλεσμα τη βέλτιστη λύση που υπολογίζεται στα παραπάνω βήματα. Από την άλλη, στο σχήμα 5.17 φαίνεται η διάταξη των τεσσάρων πτερυγίων που πετυχαίνουν την βέλτιστη λύση για τον ΕΑ υποβοηθούμενο με συνδεδεμένα με την εξέλιξη μεταπρότυπα (online ΜΑΕΑ).

Παρατηρείται ότι οι διαφορές ανάμεσα στις δύο διατάξεις είναι μικρές, όπως είναι και μεταξύ των συντελεστών άνωσης που παράγουν. Επομένως, η χρήση των δυο διαφορετικών μεταπρότυπων δίνει μικρές διαφορές στα αποτελέσματα καθώς και στην επιτάχυνση στην σύγκλιση της διαδικασίας. Παρόλα αυτά, και τα δυο είδη μεταπρότυπων προσφέρουν βελτίωση και επιτάχυνση στη σύγκλιση της διαδικασίας του ΕΑ.



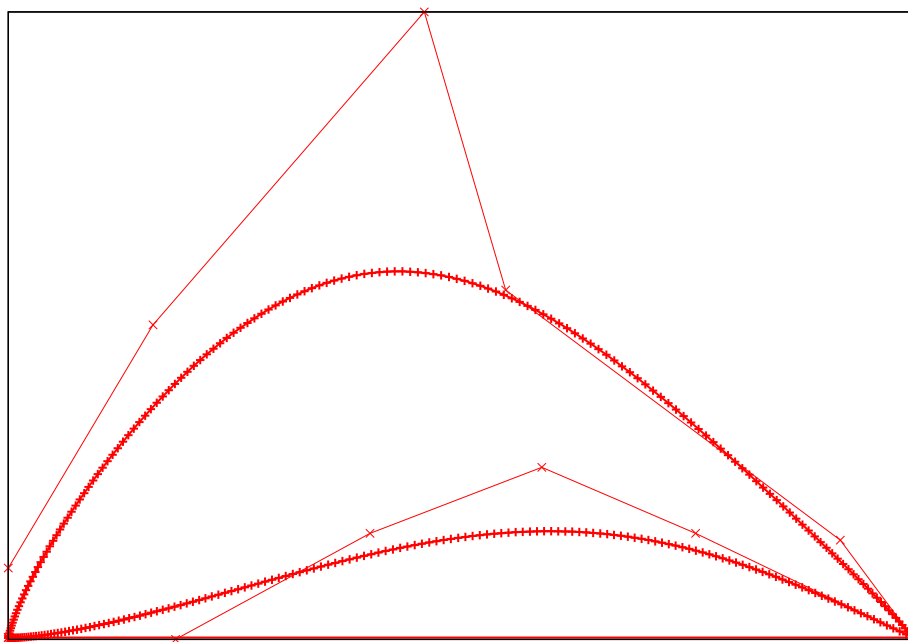
Σχήμα 5.16: Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Αεροτομής Τεσσάρων Στοιχείων. Διάταξη αεροτομών για την βέλτιστη λύση του σχεδιασμού πειραμάτων.



Σχήμα 5.17: Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Αεροτομής Τεσσάρων Στοιχείων. Διάταξη αεροτομών για τη βέλτιστη λύση του ΕΑ υποβοηθούμενου από μεταπρότυπα (online ΜΑΕΑ).

5.3.2 Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Σχεδιασμού Διδιάστατης Πτερύγωσης Συμπίεστη

Το πρόβλημα αποτελείται από δυο στόχους για το σχεδιασμό μιας 2Δ πτερύγωσης συμπίεστη. Οι στόχοι είναι ελαχιστοποίηση των απωλειών πίεσης και μεγιστοποίηση της στροφής της ροής. Το πτερύγιο του συμπίεστη έχει σχεδιαστεί να λειτουργεί σε $M_1 = 0.618$, $\alpha_1 = 47^\circ$ και $Re = 8.41 \times 10^5$. Το λογισμικό αξιολόγησης πραγματοποιεί επιλύση ροής με την βοήθεια ολοκληρωματικών μεθόδων οριακού στρώματος, όπως περιγράφεται στην δημοσίευση ([36]). Το πτερύγιο του συμπίεστη παραμετροποιήθηκε με την χρήση 7 σημείων Bezier, ξεχωριστά για την πλευρά πίεσης και την πλευρά υποπίεσης. Από τα σημεία αυτά αλλάζουν μόνο οι θέσεις στον y άξονα των σημείων Bezier, δίνοντας στο πρόβλημα 10 μεταβλητές σχεδιασμού, αφού το πρώτο και το τελευταίο σημείο έχουν σταθερές όλες τις συντεταγμένες. Δηλαδή, μεταβάλλοντας τα σημεία Bezier δημιουργείται διαφορετικό σχήμα στην αεροτομή του πτερυγίου του συμπίεστη και δίνει διαφορετικές τιμές για τη διαφορά πίεσης και τη στροφή της ροής.



Σχήμα 5.18: Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Σχεδιασμού Διδιάστατης Πτερύγωσης Συμπίεστη. Αεροτομή πτέρυγας συμπίεστη με τα αντίστοιχα σημεία Bezier που την παράγουν.

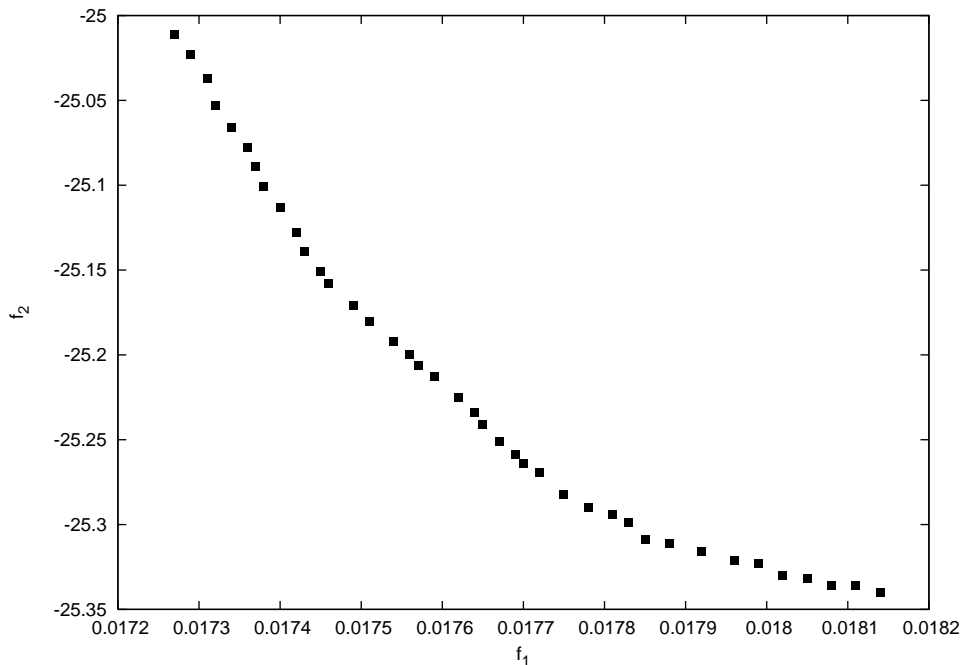
Πρέπει, αλλάζοντας τιμές στις συντεταγμένες y να βρεθεί το μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων για το πρόβλημα. Στο πίνακα 5.2 φαίνονται τα άνω και κάτω όρια των μεταβλητών σχεδιασμού.

Στην αρχή, πραγματοποιείται η εύρεση του μετώπου μη-κυριαρχούμενων λύσεων με

Variable	Min	Max
y_1	-0.028	-0.0005
y_2	-0.0090	-0.0005
y_3	0.02	0.03
y_4	0.049	0.05
y_5	0.03	0.035
y_6	0.02	0.0250058
y_7	0.09	0.0941
y_8	0.18	0.19
y_9	0.1	0.11
y_{10}	0.028	0.034

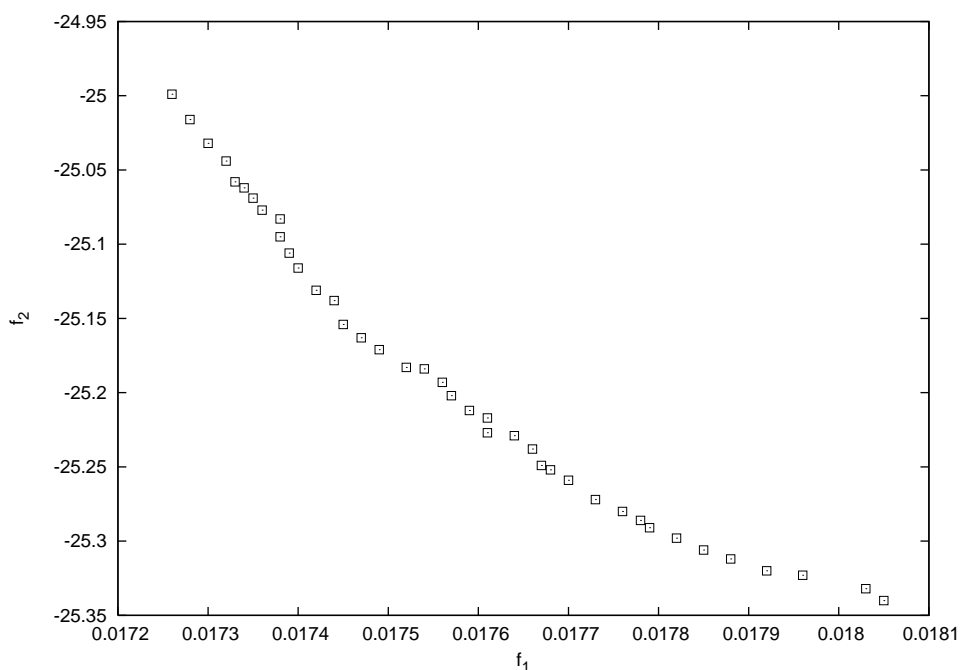
Πίνακας 5.2: Όρια μεταβλητών σχεδιασμού.

το λογισμικό EASY, που υλοποίησε έναν (35,70) ΕΑ με μέγιστο αριθμό αξιολογήσεων τις 4900. Η γωνία στροφής της ορμής λαμβάνει αρνητικό πρόσημο, έτσι ώστε από πρόβλημα μεγιστοποίησης να γίνει πρόβλημα ελαχιστοποίησης, όπως έγινε και παραπάνω. Στο πέρας της διαδικασίας έχει βρεθεί το μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων του σχήματος 5.19. Σημειώνεται ότι στο σχήμα αυτό, καθώς και σε όλα τα άλλα που παρουσιάζονται στη συνέχεια, ο στόχος f_1 αντιστοιχεί στις απώλειες πίεσης, ενώ ο στόχος f_2 στην στροφή της ροής.



Σχήμα 5.19: Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Σχεδιασμού Διδιάστατης Πτερόγωσης Συμπίεστη. Μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων που προκύπτει με EASY, όπου f_1 είναι οι απώλειες πίεσης και f_2 η στροφή της ροής.

Στο σημείο αυτό, είναι χρήσιμο να εκτελεστεί και ένας ΕΑ υποβοηθούμενος με μεταπρότυπα συνδεδεμένα με την εξέλιξη (online MAEA). Το λογισμικό EASY έχει τη δυνατότητα να τον υλοποιήσει και έτσι χρησιμοποιούνται τα νευρωνικά δίκτυα ακτινικής βάσης (RBF) για την υποβοήθηση του ΕΑ. Τα μεταπρότυπα ενεργοποιούνται μετά τη δημιουργία μιας βάσης δεδομένων 70 στοιχείων από τα οποία χρησιμοποιούνται 15 μέχρι 30 στοιχεία για την εκπαίδευση κάθε μεταπρότυπου. Το ακριβές λογισμικό αξιολόγησης χρησιμοποιείται για να αξιολογήσει επακριβώς από 4 μέχρι 8 άτομα των πληθυσμών γονέων και απογόνων. Μετά από 1000 πραγματικές αξιολογήσεις, το μέτωπο, που παράγεται, φαίνεται στο σχήμα 5.20.

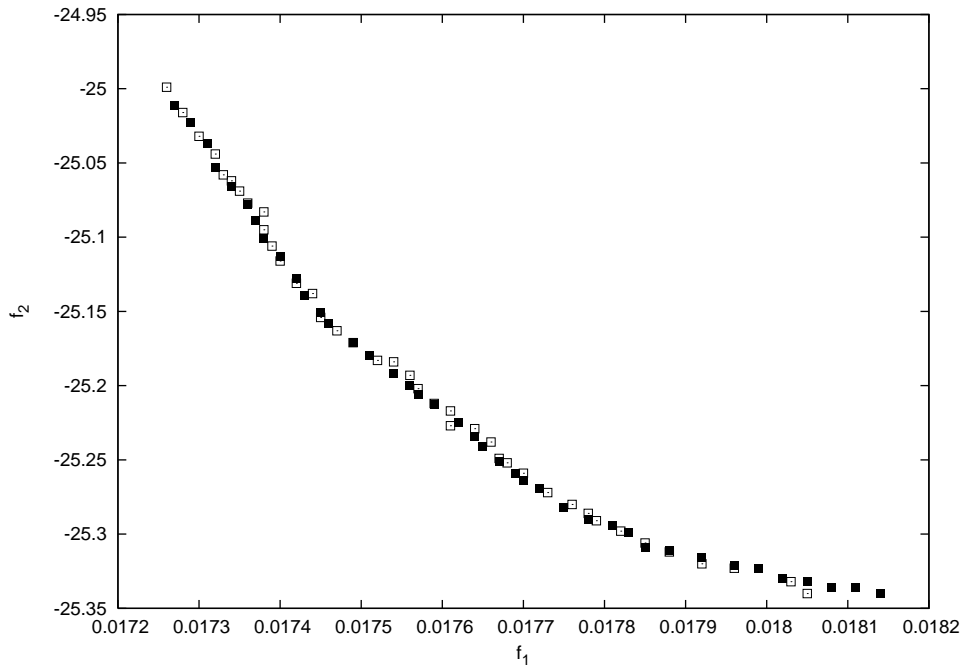


Σχήμα 5.20: Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Σχεδιασμού Διδιάστατης Πτερύγωσης Συμπίεστη. Μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων που παράχθηκε με ΕΑ υποβοηθούμενο με συνδεδεμένα με την εξέλιξη μεταπρότυπα (online MAEA).

Είναι φανερό ότι η βοήθεια των συνδεδεμένων με τον ΕΑ μεταπρότυπων επιταχύνει τη διαδικασία, καθώς έχουν διαφορά 2900 αξιολογήσεις. Το σχήμα 5.21 δείχνει και τα δύο μέτωπα μαζί για καλύτερη σύγκριση.

Στην συνέχεια, θα υπολογιστεί το αντίστοιχο μέτωπο με την βοήθεια της διαδικασίας του σχεδιασμού πειραμάτων. Η διαδικασία είναι ίδια με αυτή που υλοποιήθηκε στα μαθηματικά προβλήματα βελτιστοποίησης. Αναλύεται στα ακόλουθα βήματα:

1. **Δημιουργία Πίνακα Σχεδιασμού Πειράματος:** Ο σχεδιασμός, που επιλέγεται, είναι ένας τυχαιοποιημένος σχεδιασμός βασισμένος σε κλασματικό παραγοντικό σχεδιασμό, που αναλύθηκε στην ενότητα 3.3. Αυτός επιλέγεται για να υπάρχει καθορισμένος αριθμός αξιολογήσεων. Ο αριθμός των πραγματικών αξιολογήσεων επιλέγεται να είναι 216, επειδή τόσες αξιολογήσεις μπορούν



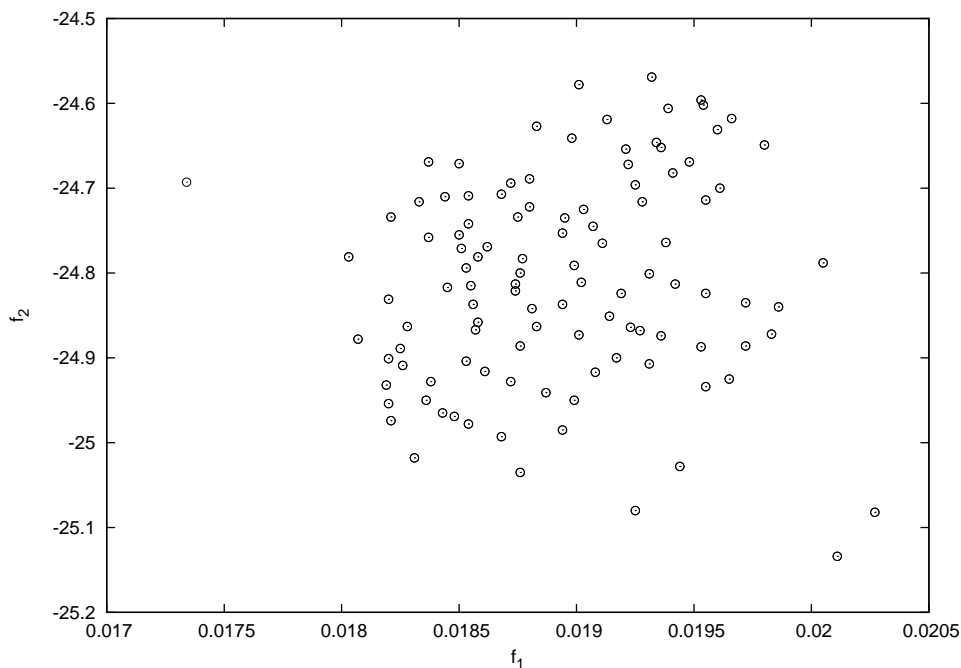
Σχήμα 5.21: Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Σχεδιασμού Διδιάστατης Πτερύγωσης Συμπίεστη. Μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων με συνδεδεμένα με την εξέλιξη μεταπρότυπα (□) και χωρίς μεταπρότυπα (■).

να παρέχουν την κατάλληλη εκπαίδευση για τα πρότυπα παλινδρόμησης. Ο σχεδιασμός αυτός δημιουργεί έναν πίνακα διάστασης (216×10) .

2. **Αξιολόγηση των Διανυσμάτων Μεταβλητών του Σχεδιασμού:** Εκτελούνται οι αναγκαίες πραγματικές αξιολογήσεις με τα διανύσματα τιμών των μεταβλητών που περιέχονται στο πίνακα σχεδιασμού. Συμπληρώνεται ο πίνακας των αποκρίσεων και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο σχήμα 5.22.
3. **Κατασκευή των Προτύπων Παλινδρόμησης:** Το συγκεκριμένο πρόβλημα αποτελείται από πολύπλοκες συναρτήσεις-στόχους. Για αυτό το λόγο θα είναι αδύνατο να προσεγγιστεί με ένα πολυώνυμο μικρού βαθμού. Αφού επιλέχθηκε σχεδιασμός πειραμάτων με 216 στοιχεία, υπάρχει η δυνατότητα δημιουργίας προτύπων μεγάλου βαθμού. Έτσι, και για τις δύο συναρτήσεις-στόχους, επιλέχθηκε το εξής πρότυπο παλινδρόμησης.

$$\hat{y}_O = \beta_{0O} + \sum_{j=1}^{10} \sum_{i=1}^{10} \beta_{ijO} x_i^j + \beta_{11O} \prod_{i=1}^{10} x_i \quad (5.14)$$

Οι δείκτες των συντελεστών β τοποθετούνται ανά μεταβλητή και ανά δύναμη. Ο τρόπος τοποθέτησης των δεικτών δεν επηρεάζουν σε τίποτα τη διαδικασία. Ο δείκτης O παίρνει τιμές 1 και 2 αναλόγως σε ποια συνάρτηση στόχου αντιστοιχεί. Το υποπρόγραμμα υλοποίησης της μεθόδου ελαχίστων τετραγώνων

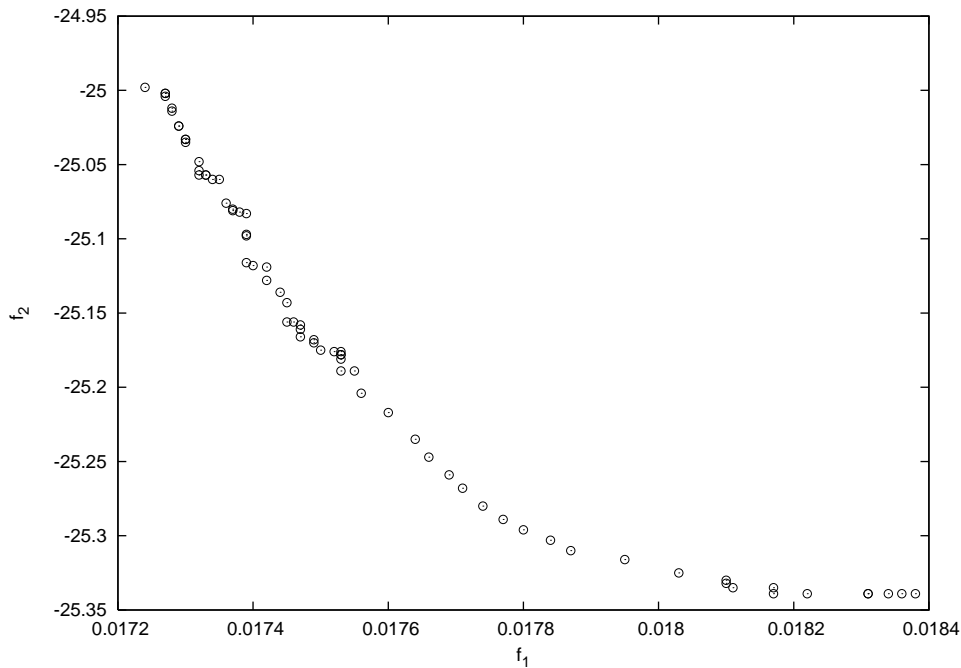


Σχήμα 5.22: Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Σχεδιασμού Διδιάστατης Πτερύγωσης Συμπίεστη. Αποκρίσεις του σχεδιασμού πειραμάτων.

υπολογίζει τους συντελεστές β για τα δυο διαφορετικά πρότυπα. Προφανώς, οι συντελεστές είναι διαφορετικοί για κάθε πρότυπο.

4. **Χρήση ΕΑ με μεταπρότυπα ως το αποκλειστικό λογισμικό αξιολόγησης:** Το λογισμικό EASY χρησιμοποιώντας ως λογισμικό αξιολόγησης το εκπαιδευμένο μεταπρότυπο του προηγούμενου βήματος υλοποιεί έναν ΕΑ για την εύρεση των βέλτιστων λύσεων. Ο ΕΑ σε αυτή την περίπτωση εκτελείται πολύ γρήγορα και για αυτό δεν λαμβάνεται υπόψη το υπολογιστικό του κόστος. Παράγονται 40 βέλτιστες λύσεις, οι οποίες επαναξιολογούνται με το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης.
5. **Επανάληψη διαδικασίας:** Οι λύσεις του βήματος 4 επιδέχονται και άλλη βελτίωση. Επαναλαμβάνονται, λοιπόν, τα βήματα 3 έως και 5, μέχρι να δημιουργηθεί ένα ικανοποιητικό μέτωπο. Σε κάθε επανάληψη, προστίθενται οι βέλτιστες λύσεις του 4^{ου} βήματος στον αρχικό πίνακα του σχεδιασμού και μετά εκτελούνται τα βήματα 3 έως και 5. Οι βέλτιστες λύσεις που παράγονται είναι 40 για να αυξηθεί γρήγορα η βάση δεδομένων για την εκπαίδευση των μεταπροτύπων, αλλά και για να παρέχει στο τέλος ένα πυκνό μέτωπο. Το πεδίο των αποκρίσεων δεν χρειάζεται να περιοριστεί, όπως έγινε στο προηγούμενο πρόβλημα, γιατί όλες οι τιμές μπορεί να παρέχουν χρήσιμη πληροφορία για την εύρεση βέλτιστων λύσεων. Οι επαναλήψεις διακόπτονται όταν το μέτωπο που βρέθηκε είναι ικανοποιητικό και δεν δείχνει να δέχεται βελτίωση ή όταν η διαδικασία έχει πραγματοποιήσει το μέγιστο αριθμό πραγματικών αξιολογήσε-

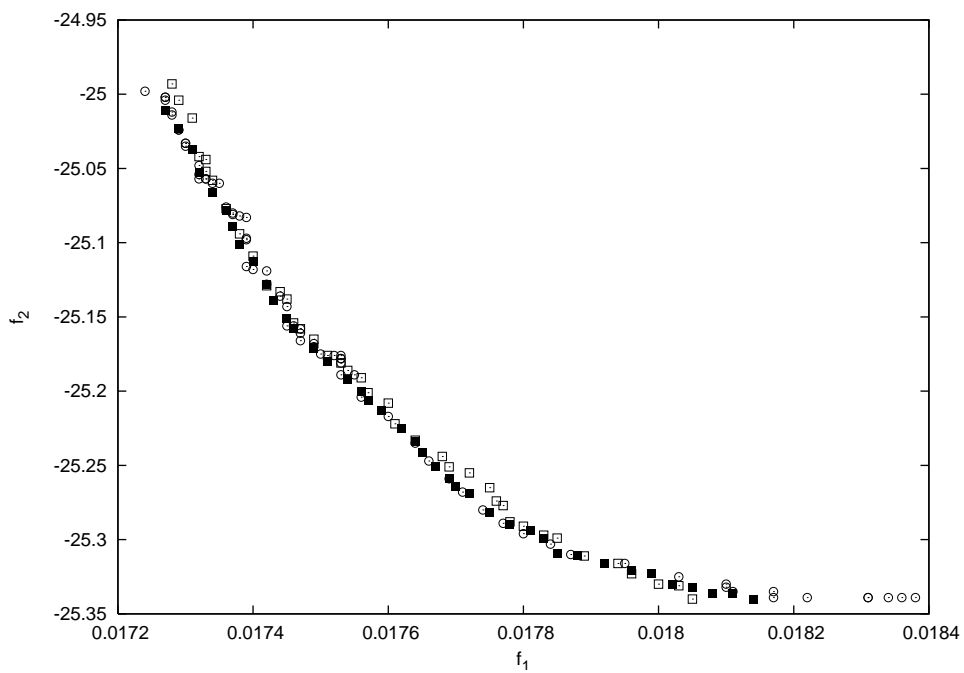
ων. Δέκα επαναλήψεις ήταν αρκετές για να βρεθεί το ακόλουθο μέτωπο 5.23:



Σχήμα 5.23: Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Σχεδιασμού Διδιάστατης Πτερυγώσης Συμπίεστη. Σύγκλιση διαδικασίας ΕΑ που βασίζεται σε μεταπρότυπα και σε σχεδιασμό πειραμάτων.

Πρέπει να σημειωθεί ότι τα στοιχεία του μετώπου δεν βρέθηκαν όλα στην τελευταία επανάληψη, αλλά επιλέχθηκαν από όλες πραγματικές αξιολογήσεις, που πραγματοποιήθηκαν. Συνολικά πραγματοποιήθηκαν 616 πραγματικές αξιολογήσεις, πολύ λιγότερες από ότι πραγματοποιήθηκαν με τον (μ,λ) ΕΑ. Στο σχήμα 5.24 συγκρίνονται τα μέτωπα που παράχθηκαν με τους τρεις διαφορετικούς τρόπους.

Το μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων είναι παρόμοιο και στις τρεις περιπτώσεις. Εντυπωσιακό είναι το πόσο γρήγορα επιτυγχάνεται με τη βοήθεια μεταπροτύπων. Με τη διαδικασία του σχεδιασμού πειραμάτων επιτυγχάνεται το μέτωπο με 4284 λιγότερες πραγματικές αξιολογήσεις, το οποίο αποτελεί μεγάλη βελτίωση στο υπολογιστικό κόστος της διαδικασίας.



Σχήμα 5.24: Ρευστοδυναμικό Πρόβλημα Σχεδιασμού Διδιάστατης Περύγωσης Συμ-
πιεστή. Μέτωπα λύσεων, με (μ,λ) EA (■), με online MAEA (□) και με την διαδικασία
σχεδιασμού πειραμάτων (○).

Κεφάλαιο 6

Ανακεφαλαίωση, συμπεράσματα και προτάσεις για περαιτέρω μελέτη

Η παρούσα διπλωματική εργασία ανέλυσε τρία θέματα. Πρώτο και πιο βασικό περιγράφηκαν οι ΕΑ. Είναι χρήσιμοι για οποιοδήποτε μέρος της διπλωματική εργασίας, καθώς πάνω σε αυτούς βασίστηκαν και όλες οι άλλοι μέθοδοι. Αναλύθηκαν οι βασικές αρχές τους, ο τρόπος λειτουργίας τους και τα βήματα που ακολουθούν για την εύρεση της βέλτιστης ή των βέλτιστων λύσεων. Προφανώς, οι ΕΑ έχουν και μειονεκτήματα και πλεονεκτήματα, όπως όλες οι μέθοδοι βελτιστοποίησης. Ένα βασικό μειονέκτημά τους είναι το υπολογιστικό κόστος που απαιτείται για την εύρεση των βέλτιστων λύσεων, που απορρέει από το (πολλές φορές) χρονοβόρο λογισμικό αξιολόγησης. Για τη μείωση του υπολογιστικού κόστους τους, μελετήθηκαν οι τεχνικές των μεταπρότυπων.

Τα μεταπρότυπα αποτελούν το δεύτερο σημαντικό θέμα της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Αυτά προσομοιάζουν με απλές μαθηματικές συναρτήσεις το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης, που χρησιμοποιείται από έναν (μ,λ) ΕΑ. Αυτό αποσκοπεί στο να χρησιμοποιείται το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης λιγότερες φορές, ώστε να μειωθεί το υπολογιστικό κόστος. Τα μεταπρότυπα εκπαιδεύονται με δεδομένα που παρέχονται από τις εκτελέσεις του πραγματικού λογισμικού αξιολόγησης δείγματος. Η αξιοπιστία τους επηρεάζεται τόσο από τον αριθμό όσο και από το πόσο αντιπροσωπευτικά είναι αυτά τα δείγματα. Υπάρχουν δύο κατηγορίες μεταπρότυπων, τα συνδεδεμένα και τα αποσυνδεδεμένα από την εξέλιξη του ΕΑ μεταπρότυπα. Εδώ, μελετήθηκαν εκτενώς τα αποσυνδεδεμένα από την εξέλιξη και, συγκεκριμένα τα πρότυπα παλινδρόμησης πολυωνυμικής βάσης. Αυτά αποτελούνται από πολυωνυμικές συναρτήσεις, δηλαδή οι μεταβλητές σχεδιασμού συνδέονται με τα αποτελέσματα του προβλήματος με πολυωνυμικές σχέσεις. Έχουν το πλεονέκτημα ότι μπορούν να εκπαιδευτούν πολύ γρήγορα σε σχέση με άλλου είδους μεταπρότυπα. Γενικότερα, τα μεταπρότυπα εκπαιδεύονται με τη βοήθεια μιας βάσης δεδομένων, που έχει δημιουργηθεί από εκτελέσεις του πραγματικού λογισμικού αξιολόγησης. Τα εκπαιδευμένα μεταπρότυπα συμμετέχουν ως λογισμικό αξιολόγησης σε ένα (μ,λ) ΕΑ.

Πρέπει να σημειωθεί ότι επειδή τα μεταπρότυπα εκτελούνται σε μηδαμινό χρόνο, ο ΕΑ αυτός δεν αυξάνει αισθητά το υπολογιστικό κόστος. Τα βέλτιστα αποτελέσματα επαναξιολογούνται από το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης και, αν τα μεταπρότυπα έχουν ικανοποιητική ακρίβεια, οι βέλτιστες λύσεις θα είναι και αυτές που αναζητώνται. Έτσι, πραγματοποιείται η διαδικασία της βελτιστοποίησης με τη βοήθεια μεταπρότυπων αποσυνδεδεμένων από την εξέλιξη. Έχει αποδειχθεί ότι η χρήση μεταπρότυπων μειώνει τον αριθμό των πραγματικών αξιολογήσεων στο 1/3 περίπου αυτών που θα χρειάζονταν αν δεν χρησιμοποιούνταν μεταπρότυπα.

Η αρχική εκπαίδευση των μεταπρότυπων αποτελεί ένα σημαντικό σημείο, που καθορίζει την αποτελεσματικότητά τους. Για αυτόν τον λόγο, δεν πρέπει να γίνεται τυχαία επιλογή των εκτελέσεων του πραγματικού λογισμικού αξιολόγησης. Αντιθέτως, η επιλογή των διανυσμάτων τιμών των μεταβλητών σχεδιασμού που θα εκτελεστούν από το πραγματικό λογισμικό αξιολόγησης γίνεται με τη βοήθεια του σχεδιασμού πειραμάτων. Οι σχεδιασμοί πειραμάτων αποτελεί το τρίτο, σε σειρά, θέμα της παρούσας διπλωματικής εργασίας, αλλά είναι το πιο σημαντικό. Ο σχεδιασμός πειραμάτων κατασκευάζει έναν πίνακα στο οποίο περιέχονται όλα τα διανύσματα τιμών των μεταβλητών με τα οποία θα γίνουν οι εκτελέσεις. Ο εν λόγω πίνακας συμπληρώνεται διαφορετικά, ανάλογα με το είδος του σχεδιασμού. Στο αντίστοιχο κεφάλαιο, αναλύθηκαν τα βασικότερα είδη σχεδιασμού πειραμάτων, καθώς και οι διαφορές τους. Στη διπλωματική εργασία, αναλύθηκαν οι εξής σχεδιασμοί:

1. Πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός.
2. Κλασματικός παραγοντικός σχεδιασμός.
3. Τυχαιοποιημένος σχεδιασμός.
4. Σχεδιασμός κεντρικής σύνθεσης.

Από τον σχεδιασμό πειραμάτων, μπορούν να εξαχθούν σημαντικές στατιστικές και άλλες πληροφορίες για το πρόβλημα που αναλύεται.

Όλες οι παραπάνω μεθοδολογίες εφαρμόστηκαν σε μαθηματικά και ρευστοδυναμικά προβλήματα. Τα πρώτα υπέδειξαν τη σωστή λειτουργία των μεθόδων. Στα προβλήματα ρευστοδυναμικής, συγκρίθηκαν τα αποτελέσματα της διαδικασίας του ΕΑ, που υποβοηθήθηκε με σχεδιασμό των πειραμάτων και μεταπρότυπα, τόσο με απλό (μ,λ) ΕΑ, όσο και με ΕΑ υποβοηθούμενο από συνδεδεμένα στην εξέλιξη του ΕΑ μεταπρότυπα (ΜΑΕΑ). Η σύγκριση αυτή υπέδειξε τη γρηγορότερη και σε καλύτερες βέλτιστες τιμές σύγκλιση της διαδικασίας βελτιστοποίησης σε περίπτωση που χρησιμοποιούνται μεταπρότυπα. Οι διαφορές στην γρήγορη επίτευξη της λύσης και στην εύρεση των βέλτιστων λύσεων μεταξύ των δύο κατηγοριών μεταπρότυπων είναι μικρές και διαφέρουν ανάλογα με το πρόβλημα.

Εκτός από τις διαδικασίες και τις μεθόδους που αναπτύχθηκαν, δημιουργήθηκε και ένα πρόγραμμα με γραφικό περιβάλλον που υλοποιεί ότι αναλύθηκε. Το πρόγραμμα αυτό αποσκοπεί στην ευκολότερη διαχείριση της διαδικασίας του σχεδιασμού πειραμάτων και της βελτιστοποίησης με ΕΑ. Επιπλέον, παρέχει επιπρόσθετες ρυθμίσεις

που μπορεί να βοηθήσουν τον χρήστη να βγάλει σε πέρας την διαδικασία βελτιστοποίησης που πραγματοποιεί. Το γραφικό περιβάλλον παρέχει μια πιο εύχρηστη πλατφόρμα πάνω στην οποία μπορεί να δουλέψει ο χρήστης.

6.1 Βελτιώσεις

Όλα αυτά που ερευνήθηκαν παρέχουν μια καλή βάση για την εδραίωση μιας διαφορετικής διαδικασίας χειρισμού των ΕΑ. Περαιτέρω έμφαση μπορεί να δοθεί και σε άλλους τύπους σχεδιασμών. Άλλοι τύποι μπορεί να παρέχουν πιο αποδοτικά αποτελέσματα ανάλογα με το πρόβλημα που επιλύεται. Κάποιοι σχεδιασμοί μπορούν να παρέχουν ενδιαφέρουσες ιδιότητες. Κάποιοι, για παράδειγμα, με τον συνδυασμό τους, μπορούν να διαρθρώσουν ένα ισχυρότερο και καλύτερης ακρίβειας σχεδιασμό. Μπορούν να μελετηθούν και άλλοι τύποι μεταπρότυπων. Συγκεκριμένα, στα πρότυπα παλινδρόμησης πρέπει να προστεθούν και άλλες συναρτήσεις που δεν είναι πολυωνυμικές. Με αυτόν τον τρόπο, το πρότυπο θα προσεγγίζει καλύτερα περιοδικά φαινόμενα ή εκθετικά φαινόμενα. Γενικότερα, όσο πολυπλοκότερο γίνεται το πρότυπο παλινδρόμησης τόσο καλύτερα θα προσεγγίζει τα διάφορα προβλήματα. Πέραν των προτύπων παλινδρόμησης, καλό θα ήταν να ενταχθούν και άλλα μεταπρότυπα, όπως τα νευρωνικά δίκτυα. Επιπλέον, πρέπει να προστεθούν και άλλα μεταπρότυπα για την προσομοίωση των περιορισμών.

Όλες οι παραπάνω μέθοδοι πρέπει να προστεθούν και στο λογισμικό DoE. Εκτός από αυτά, το λογισμικό υστερεί ως προς τις ρυθμίσεις που απαιτεί το λογισμικό EASY. Επιθυμητή, λοιπόν, είναι η προσθήκη και άλλων παραμέτρων για τη σωστή ρύθμιση του ΕΑ, που πραγματοποιείται με τα μεταπρότυπα. Χρήσιμη θα ήταν και η προσθήκη διαγραμμάτων, που θα δείχνουν τις αποκρίσεις των συναρτήσεων-στόχων, τη σύγκλιση της διαδικασίας καθώς και τις κύριες επιρροές και αλληλεπιδράσεις των μεταβλητών. Μπορεί να μελετηθεί καλύτερα η στατιστική ανάλυση των πειραμάτων, ώστε να προστεθεί στο λογισμικό και να παρέχει έναν ακόμα τομέα πληροφοριών που να βοηθούν τον χειριστή. Τέλος, το λογισμικό DoE πρέπει να εκτελείται με ή χωρίς γραφικό περιβάλλον και να εκτελεί τις διεργασίες του σε παράλληλες υπολογιστικές μονάδες, ώστε να επιταχυνθεί η εύρεση των αποτελεσμάτων.

Παράρτημα Α΄

Στατιστική Ανάλυση του Παραγοντικού Σχεδιασμού

Η στατιστική ανάλυση [4] [37] πραγματοποιείται για να διερευνηθεί η απόκλιση των αποκρίσεων του πειράματος από την μέση τιμή και οι παράγοντες που επηρεάζουν τόσο την απόκλιση όσο και τις αποκρίσεις. Μετά το πέρας της στατιστικής ανάλυσης, ο ερευνητής θα μπορέσει να αποφανθεί αν οι αποκλίσεις είναι αποδεκτές ή όχι. Η διαδικασία αυτή πραγματοποιείται σε στοχαστικά πειράματα όπου επαναλήψεις στην εκτέλεση ενός πειράματος είναι απαραίτητες. Ο παρακάτω πίνακας παρουσιάζει όλες τις εκτελέσεις του πειράματος που πραγματοποιούνται. Τμήμα του πίνακα αποτελείται από τις επαναλήψεις που πραγματοποιούνται με σταθερά επίπεδα των δύο μεταβλητών.

		<i>Factor B</i>						
		1	2	...	<i>b</i>			
<i>Factor A</i>	1	y_{111}	y_{112}	y_{121}	y_{122}	...	y_{1b1}	y_{1b2}
	...	y_{11n}	...	y_{12n}	...	y_{1bn}		
	2	y_{111}	y_{112}	y_{121}	y_{122}	...	y_{1b1}	y_{1b2}
	...	y_{11n}	...	y_{12n}	...	y_{1bn}		
...								
<i>a</i>	y_{111}	y_{112}	y_{121}	y_{122}	...	y_{1b1}	y_{1b2}	
0 ...	y_{11n}	...	y_{12n}	...	y_{1bn}			

Για την στατιστική ανάλυση, θα χρησιμοποιηθεί ένα παράδειγμα με δύο μεταβλητές σχεδιασμού και η μεταβλητή A θα έχει a επίπεδα ενώ η B b επίπεδα. Η κάθε εκτέλεση του πειράματος επαναλαμβάνεται n φορές. Άρα συνολικά θα διατίθενται abn αποκρίσεις. Το y_{ijk} συνιστά την απόκριση μιας αντικειμενικής συνάρτησης, όταν η μεταβλητή A βρίσκεται στο i επίπεδο, η B στο j επίπεδο και όλα αυτά στην k ουσιαστική επανάληψη.

Το πρότυπο επιρροής μπορεί να περιγράψει τις αποκρίσεις του σχεδιασμού:

$$y_{ijk} = \mu + \tau_i + \beta_j + (\tau\beta)_{ij} + \epsilon_{ijk} \begin{cases} i = 1, 2, \dots, a \\ j = 1, 2, \dots, b \\ k = 1, 2, \dots, n \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

όπου μ είναι ο συνολικός μέσος των επιρροών, τ_i είναι η επίδραση του i επιπέδου της μεταβλητής A, β_j είναι η επίδραση του j επιπέδου της μεταβλητής B, $(\tau\beta)_{ijk}$ είναι η αλληλεπίδραση μεταξύ των μεταβλητών A και B στα αντίστοιχα επίπεδα και ϵ_{ijk} τα τυχαία λάθη. Συνήθως, θεωρείται ότι οι επιδράσεις ορίζονται ως αποκλίσεις από το συνολικό μέσο μ , άρα ισχύουν οι τύποι:

$$\sum_{i=1}^a \tau_i = 0 \quad \sum_{j=1}^b \beta_j = 0 \quad \sum_{i=1}^a \tau_i \beta_j = 0 \quad \sum_{i=1}^a \tau_i \beta_j = 0 \quad (\text{A.2})$$

Η απόκριση μπορεί να μοντελοποιηθεί με πρότυπα παλινδρόμησης που έχουν καλύτερη συμπεριφορά, όταν οι μεταβλητές είναι ποσοτικές.

Πρέπει να ελεγχθούν οι υπόθεση:

$$H_0 : \tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_a = 0 \quad (\text{A.3})$$

$$H_1 : \text{at least one } \tau_i \neq 0 \quad (\text{A.4})$$

$$H_0 : \beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_b = 0 \quad (\text{A.5})$$

$$H_1 : \text{at least one } \beta_i \neq 0 \quad (\text{A.6})$$

$$H_0 : (\tau\beta)_{ij} = 0 \quad (\text{A.7})$$

$$H_1 : \text{at least one } (\tau\beta)_{ij} \neq 0 \quad (\text{A.8})$$

Για το έλεγχο, ορίζονται τα ακόλουθα μεγέθη:

$$y_{i..} = \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^n y_{ijk} \quad i = 1, 2, \dots, a \quad (\text{A'.9})$$

$$y_{.j.} = \sum_{i=1}^a \sum_{k=1}^n y_{ijk} \quad j = 1, 2, \dots, b \quad (\text{A'.10})$$

$$y_{..k} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b y_{ijk} \quad \begin{cases} i = 1, 2, \dots, a \\ j = 1, 2, \dots, b \end{cases} \quad (\text{A'.11})$$

$$y_{...} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^n y_{ijk} \quad (\text{A'.12})$$

Η συνολική διακύμανση αποτελείται από τέσσερις ποσότητες, την διακύμανση της μεταβλητής A (SS_A), της μεταβλητής B (SS_B), της διακύμανσης της αλληλεπίδρασης των μεταβλητών A και B (SS_{AB}) και του σφάλματος (SS_{error}). Η κύρια επιρροή της μεταβλητής A έχει $a - 1$ βαθμούς ελευθερίας και της μεταβλητής B $b - 1$ βαθμούς ελευθερίας. Η αλληλεπίδραση των δύο μεταβλητών έχει $ab - 1 - (a - 1) - (b - 1) = (a - 1)(b - 1)$ βαθμούς ελευθερίας. Επειδή υπάρχουν και n επαναλήψεις κάθε εκτέλεση, οι βαθμοί ελευθερίας του σφάλματος είναι $ab(n - 1)$.

Η προβλεπόμενη τιμή του μέσου τετραγώνων μπορεί να αποδειχθεί :

$$E(MS_A) = \sigma^2 + \frac{bn \sum_{i=1}^a \tau_i^2}{a - 1} \quad (\text{A'.13})$$

$$E(MS_B) = \sigma^2 + \frac{bn \sum_{j=1}^b \beta_j^2}{b - 1} \quad (\text{A'.14})$$

$$E(MS_{AB}) = \sigma^2 + \frac{n \sum_{j=1}^b \beta_j^2}{(a - 1)(b - 1)} \quad (\text{A'.15})$$

$$E(MS_{error}) = \sigma^2 \quad (\text{A'.16})$$

Για να ελεγχθεί η κενή υπόθεση (null hypothesis) A'.3, συγκρίνονται τα MS_A, MS_B, MS_E με το σ^2 . Αν είναι ίσα τότε η σχέση A'.3 ισχύει. Σε αντίθετη περίπτωση, ελέγχεται η σημαντικότητα κάθε επιρροής και αλληλεπίδρασης με τον λόγο του αντίστοιχου μέσου τετραγώνου δια του μέσου τετραγώνου του σφάλματος. Ο έλεγχος

αυτός ονομάζεται F test [38]. Επομένως, χρησιμοποιούνται οι στατιστικοί όροι:

$$F_0 = \frac{MS_A}{MS_{error}} \quad (A.17)$$

$$F_0 = \frac{MS_B}{MS_{error}} \quad (A.18)$$

$$F_0 = \frac{MS_{AB}}{MS_{error}} \quad (A.19)$$

Όσο μεγαλύτερος είναι ο λόγος τόσο σημαντικότερη είναι η επιρροή. Όλη η διαδικασία συνοψίζεται στην εύρεση των μεγεθών του παρακάτω πίνακα:

<i>Source of Variation</i>	<i>Sum of Squares</i>	<i>Degrees of Freedom</i>	<i>Mean Square</i>	F_0
<i>Atreatments</i>	SS_A	$a - 1$	$\frac{SS_A}{a-1}$	$\frac{MS_A}{MS_{error}}$
<i>Btreatments</i>	SS_B	$b - 1$	$\frac{SS_B}{b-1}$	$\frac{MS_B}{MS_{error}}$
<i>InteractionAB</i>	SS_{AB}	$(a - 1)(b - 1)$	$\frac{SS_{AB}}{(a-1)(b-1)}$	$\frac{MS_{AB}}{MS_{error}}$
<i>Error</i>	SS_{error}	$ab(n - 1)$	$\frac{SS_{error}}{ab(n-1)}$	
<i>Total</i>	SS_{total}	$abn - 1$		

Για τον υπολογισμό τους, οι παρακάτω τύποι είναι χρήσιμοι:

$$SS_{total} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^n y_{ijk}^2 - \frac{y_{...}^2}{abn} \quad (A.20)$$

$$SS_A = \frac{1}{bn} \sum_{i=1}^a y_{i..}^2 - \frac{y_{...}^2}{abn} \quad (A.21)$$

$$SS_B = \frac{1}{an} \sum_{j=1}^b y_{.j.}^2 - \frac{y_{...}^2}{abn} \quad (A.22)$$

$$SS_{AB} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b y_{.ij}^2 - \frac{y_{...}^2}{abn} - SS_A - SS_B \quad (A.23)$$

$$SS_{error} = SS_{total} - SS_A - SS_B - SS_{AB} \quad (A.24)$$

Παράρτημα Β'

Ανάλυση Γραμμικού Προτύπου Παλινδρόμησης

Πολλές φορές χρησιμοποιείται γραμμικό πολυωνυμικό πρότυπο για την προσέγγιση των αποτελεσμάτων μιας σειράς επιλεγμένων πειραμάτων [3]. Η σχέση ανάμεσα στην προβλεπόμενη απόκριση του πειράματος και τις μεταβλητές σχεδιασμού έχει τη μορφή:

$$\hat{y}_k = \beta_0 + \beta_1 x_{k1} + \beta_2 x_{k2} + \dots + \beta_N x_{kN} \quad (\text{B'.1})$$

όπου \hat{y}_k είναι η προσέγγιση της συνάρτησης στόχου, x_{ki} οι N μεταβλητές σχεδιασμού και β_i οι $N+1$ συντελεστές του προτύπου παλινδρόμησης. Ο δείκτης k παίρνει τιμές από 1 μέχρι τον αριθμό K των πειραμάτων που έχουν πραγματοποιηθεί. Το y_k δηλώνει την πραγματική απόκριση της συνάρτησης στόχου. Η διαφορά μεταξύ της πραγματικής και της προβλεπόμενης απόκρισης είναι το σφάλμα ϵ_k .

Αρχικά, για την ανάλυση του προτύπου παλινδρόμησης, δημιουργείται ο πίνακας \mathbf{X} που αποτελείται από όλα τα x_{ik} . Οι στήλες αντιπροσωπεύουν τις μεταβλητές σχεδιασμού ενώ οι γραμμές είναι τα διανύσματα τιμών των μεταβλητών για κάθε εκτέλεση του πειράματος. Για την εύρεση των συντελεστών β_i χρησιμοποιείται η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων (least squares). Το σύστημα εξισώσεων 2.10 επιλύεται για την εύρεση των συντελεστών β_i . Το σύστημα 2.10 μπορεί να γραφτεί με κανονικοποιημένη μορφή η οποία παρέχει πλεονέκτημα που θα δούμε κατά τη διαδικασία της ανάλυσης. Σε αυτή, τα $(ij) = \sum_{k=1}^K x_{ik}x_{jk}$ αποτελούν τα στοιχεία του πίνακα $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ και είναι το άθροισμα των στηλών i, j του πίνακα \mathbf{X} και τα $(iy) = \sum_{k=1}^K x_{ik}y_k$ αποτελούν τα στοιχεία του πίνακα $\mathbf{X}^T\mathbf{y}$ και είναι το άθροισμα της i στήλης του \mathbf{X} με τον πίνακα \mathbf{Y} . Ο πίνακας δείχνει τη γενική μορφή ενός κανονικοποιημένου συστήματος

εξισώσεων.

$$\begin{array}{c|cccc|c} & \mathbf{X} & & & & \mathbf{Y} \\ \hline & (00) & (01) & \dots & (0K) & (0y) \\ & (10) & (11) & \dots & (1K) & (1y) \\ & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ & (K0) & (K1) & \dots & (KK) & (Ky) \end{array}$$

Αν ο πίνακας \mathbf{X} είναι ορθογωνικός, είναι ιδιαίτερος εύκολο να λύσουμε το σύστημα εξισώσεων. Τα στοιχεία (ij) για τα οποία ισχύει $i \neq j$ θα μηδενιστούν και θα μείνει μόνο η διαγώνιος του πίνακα $X^T X$ και άρα το σύστημα μεταπίπτει στις εξισώσεις:

$$(ii)\beta_i = (iy) \rightarrow \beta_i = \frac{(iy)}{(ii)} \quad (\text{B'.2})$$

Για την κατανόηση της σημαντικότητας της παραπάνω ανάλυσης παρουσιάζεται το παράδειγμα ενός πειράματος με τρεις μεταβλητές που θα έχουν δυο επίπεδα καθένα. Σε ένα τέτοιο πρόβλημα, το γραμμικό πρότυπο παλινδρόμησης παίρνει τη μορφή:

$$\hat{y}_k = \beta_0 + \beta_1 x_{k1} + \beta_2 x_{k2} + \beta_3 x_{k3} \quad (\text{B'.3})$$

Αν έχει υλοποιηθεί ένας πλήρης παραγοντικός σχεδιασμός, θα έχουν πραγματοποιηθεί 8 πειράματα ($K = 8$). Για την αναπαράσταση του πίνακα \mathbf{X} το πρώτο επίπεδο (χαμηλό) σημειώνεται με το -1 και το δεύτερο (υψηλό) με το 1. Ο πίνακας έχει την ακόλουθη μορφή:

Run	x_0	x_1	x_2	x_3	y
1	1	-1	-1	-1	y_1
2	1	1	-1	-1	y_2
3	1	-1	1	-1	y_3
4	1	1	1	-1	y_4
5	1	-1	-1	1	y_5
6	1	1	-1	1	y_6
7	1	-1	1	1	y_7
8	1	-1	1	1	y_8

Δημιουργείται ο πίνακας $X^T X$ και ο $X^T Y$

$$\begin{array}{c} X^T X \\ \left[\begin{array}{cccc} 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 8 \end{array} \right] \end{array} \quad \begin{array}{c} X^T Y \\ \left[\begin{array}{c} \sum_{k=1}^K y_k \\ \sum_{k=1}^K x_{2k} y_k \\ \sum_{k=1}^K x_{3k} y_k \\ \sum_{k=1}^K x_{4k} y_k \end{array} \right] \end{array}$$

Παρατηρείται ότι υπάρχει μία αντιστοιχία του πίνακα $X^T Y$ με τις κύριες επιδράσεις.

$$\sum_{k=1}^K y_k = Grand\ Total$$

$$1/4 \sum_{k=1}^K x_{2k} y_2 = Main\ Effect\ A$$

$$1/4 \sum_{k=1}^K x_{3k} y_3 = Main\ Effect\ B$$

$$1/4 \sum_{k=1}^K x_{4k} y_4 = Main\ Effect\ C$$

Επομένως, με την εύρεση των συντελεστών β_i , υπολογίζονται και οι κύριες επιδράσεις.

Αν το πρότυπο παλινδρόμησης Β'.3 επεκτείνονταν και προσθέτονταν οι αλληλεπιδράσεις $x_1 x_2$, $x_2 x_3$, $x_1 x_3$, $x_1 x_2 x_3$, τότε θα υπήρχαν οι επιπρόσθετοι συντελεστές β_{12} , β_{23} , β_{13} , β_{123} αντίστοιχα και θα ίσχυαν οι ακόλουθες σχέσεις:

$$\beta_{12} = 0.5AB$$

$$\beta_{23} = 0.5BC$$

$$\beta_{13} = 0.5AC$$

$$\beta_{123} = 0.5ABC$$

Έτσι υπολογίζονται και οι αλληλεπιδράσεις των μεταβλητών χωρίς να χρειαστούν δύσκολες επιπλέον πράξεις.

Ανεξάρτητα από τα παραπάνω, είναι αναγκαίο να βρεθεί το τετράγωνο των αποκλίσεων μεταξύ του προτύπου παλινδρόμησης και το πραγματικό πρότυπο.

$$SS_E = \sum_{k=1}^K (y_k - \hat{y}_k)^2 \quad (B'.4)$$

$$SS_E = \sum_{k=1}^K \epsilon_k^2$$

Ο τύπος του σφάλματος 2.5 που εμφανίστηκε στην ανάπτυξη της μεθόδου ελαχίστων τετραγώνων μπορεί να γραφτεί υπό μορφή πινάκων:

$$\vec{\epsilon} = Y - \hat{Y} = Y - X\vec{\beta} \quad (\text{B'.5})$$

όπου $\vec{\epsilon}$ είναι το διάνυσμα των σφαλμάτων. Η εξίσωση B'.4 μπορεί να αναλυθεί με τη βοήθεια πινάκων ως εξής:

$$\begin{aligned} SS_E &= (Y - X\vec{\beta})^T(Y - X\vec{\beta}) \\ &= Y^TY - \vec{\beta}^T X^TY - \vec{\beta} + \vec{\beta}^T X^T X\vec{\beta} \\ &= Y^TY - 2\vec{\beta}^T X^TY + \vec{\beta}^T X^T X\vec{\beta} \end{aligned}$$

Επειδή από τη θεωρία των ελαχίστων τετραγώνων είναι γνωστή η σχέση $X^T X\vec{\beta} = X^TY$, η τελευταία εξίσωση γίνεται:

$$SS_E = Y^TY - \vec{\beta}^T X^TY \quad (\text{B'.6})$$

Η σχέση B'.6 αποτελεί μια σχέση εύκολου υπολογισμού του τετραγώνου της απόκλισης του σφάλματος, το οποίο παρέχει πληροφορίες για την ακρίβεια του προτύπου παλινδρόμησης που χρησιμοποιήθηκε.

Παράρτημα Γ΄

Βασικά Χαρακτηριστικά της Γλώσσας Qt

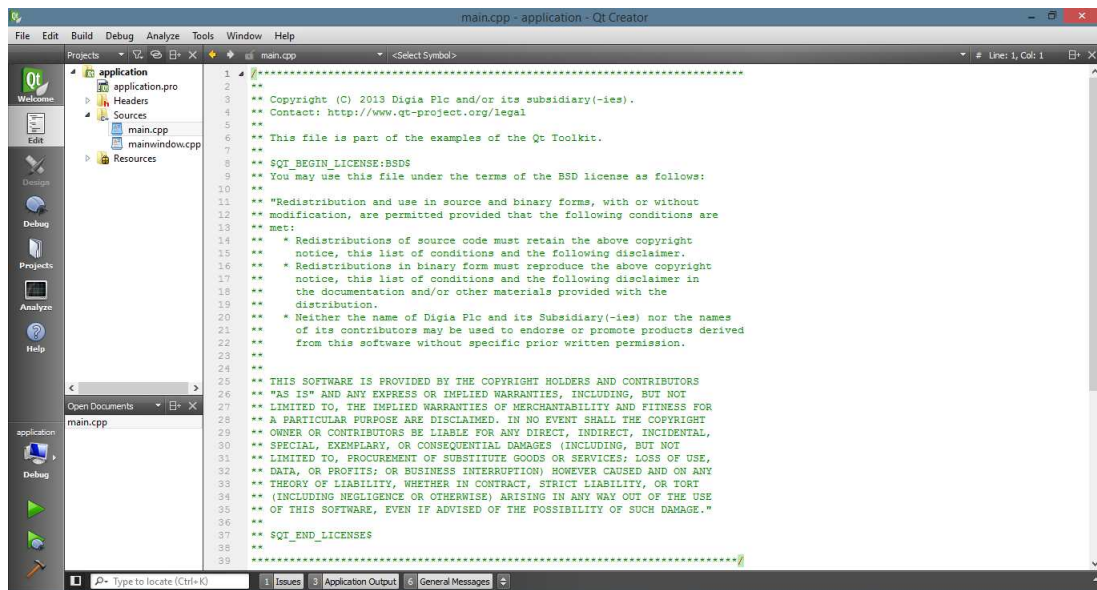
Το γραφικό περιβάλλον του λογισμικού DoE αναπτύχθηκε με τη γλώσσα προγραμματισμού Qt C++ [39]. Η Qt C++ είναι επέκταση της κλασικής C++ η οποία χρησιμοποιήθηκε για τους υπόλοιπους κώδικες που δημιουργήθηκαν στην παρούσα διπλωματική εργασία. Εμπεριέχει βιβλιοθήκες ειδικές για την παραγωγή γραφικών, ενώ οι βασικές λειτουργίες και λογική παραμένει παρόμοια με την C++. Ιδιαίτερο χαρακτηριστικό της Qt C++ είναι η εύκολη προσαρμογή του προγράμματος σε όλα τα λειτουργικά συστήματα (cross-platform), ακόμα και σε λειτουργικά συστήματα για φορητές συσκευές smartphone, tablet. Η γλώσσα περιέχει βιβλιοθήκες και για τον χειρισμό διαφόρων λειτουργιών νέων συσκευών, όπως bluetooth, wifi, και άρα αποτελεί ιδανικό εργαλείο για προγραμματισμό προγραμμάτων για τέτοιου είδους συσκευές. Για να εκτελεστεί ένα τέτοιο λογισμικό σε διαφορετικό λειτουργικό σύστημα το μόνο που χρειάζεται είναι η προσαρμογή των βιβλιοθηκών του. Η γλώσσα Qt C++ παρέχει έτοιμες βιβλιοθήκες που περιλαμβάνουν γραφικά στοιχεία. Για παράδειγμα, η βιβλιοθήκη Qt Gui παρέχει αντικείμενα που εξαρτώνται από τη βιβλιοθήκη OpenGL. Τα αντικείμενα αυτά είναι έτοιμα για χρήση και δεν χρειάζονται προγραμματισμό, αλλά μπορούν να προσαρμοστούν στις απαιτήσεις του καθενός. Μπορούν να κατασκευαστούν και νέα αντικείμενα αλλά τα ήδη έτοιμα θα μπορέσουν να διευκολύνουν τη διαδικασία. Γενικότερα, προγράμματα που απαιτούν κατασκευή ή απλών παραθύρων δημιουργούνται εύκολα με τα ενσωματωμένα αντικείμενα, ενώ πιο πολύπλοκα γραφικά απαιτούν περισσότερο προγραμματισμό από τον χρήστη. Το γεγονός ότι η γλώσσα αυτή αποτελεί προέκταση της γλώσσας C++, της δίνει τα πλεονεκτήματα και τις ευελιξίες που έχει η C++. Σε σχέση με τις άλλες γλώσσες προγραμματισμού για γραφικά, όπως Java, .NET, η Qt παράγει προγράμματα που εκτελούνται ταχύτερα από τις άλλες. Σε γενικές γραμμές, έχει καλύτερη συντήρηση των βιβλιοθηκών της και αναπτύσσεται (προσθέτονται και άλλες λειτουργίες) ταχύτερα, επειδή χρησιμοποιείται και υποστηρίζεται από μεγάλες εταιρίες.

Σε προγραμματιστικό επίπεδο, τα γραφικά στοιχεία ανταλλάσσουν πληροφορίες μεταξύ τους με συνδέσμους. Οι σύνδεσμοι ενώνουν γραφικά στοιχεία, όπως κουμπιά και γραμμές εισαγωγής, μεταξύ τους και είναι υπεύθυνοι για την ανταλλαγή δεδομένων μεταξύ των δύο στοιχείων. Για παράδειγμα, αν πατηθεί ένα κουμπί, ένας

σύνδεσμος θα λάβει το σήμα και θα πραγματοποιήσει μια εργασία που έχει συνδεθεί με το κουμπί, όπως την εκτέλεση ενός υποπρογράμματος και παρουσίαση των αποτελεσμάτων της. Οι σύνδεσμοι αποτελούν βασικό στοιχείο της γλώσσας και ο σωστός χειρισμός τους οργανώνει το γενικότερο πρόγραμμα. Κάθε γραφικό στοιχείο που περιέχεται στις έτοιμες βιβλιοθήκες, περιέχει ξεχωριστές εντολές για τη μεταχείρισή του. Για παράδειγμα, οι πίνακες που κατασκευάζονται χειρίζονται με εντολές που γεμίζουν τα στοιχεία τους, αλλάζουν το μέγεθός τους, εμφανίζουν διαφορετικές λειτουργίες για τον χρήστη του τελικού προγράμματος και επεξεργάζονται τα δεδομένα τους. Οι κώδικες που εμπεριέχουν γραφικά στοιχεία τα μεταχειρίζονται ως ξεχωριστές κλάσεις, γεγονός που διευκολύνει την ενσωμάτωσή τους με κώδικα χωρίς γραφικά στοιχεία. Επειδή η γλώσσα Qt είναι λογισμικό ανοιχτού κώδικα (Open Source), ο προγραμματιστής μπορεί να παρέμβει στις έτοιμες κλάσεις και να τις προσαρμόσει στις ανάγκες του. Για να εξασφαλιστεί η εύκολη μεταφορά του τελικού προγράμματος σε άλλα λειτουργικά συστήματα, υπάρχουν μεταβλητές που αναγνωρίζουν το λειτουργικό σύστημα που χρησιμοποιείται και πραγματοποιούν τις αντίστοιχες λειτουργίες. Όπως γίνεται και με την γλώσσα C++, οι εντολές φλοιού είναι ενσωματωμένες ως εντολές της γλώσσας βελτιώνοντας την εκτέλεση του προγράμματος σε διάφορα λειτουργικά συστήματα. Παρατηρείται, άρα, ότι ο προγραμματισμός με Qt απαιτεί τη γνώση της γλώσσας C++ και την εκμάθηση των επιπλέον κλάσεων που εμπεριέχονται χωρίς όμως να υιοθετηθεί μια ιδιαίτερα διαφορετική προγραμματιστική νοοτροπία.

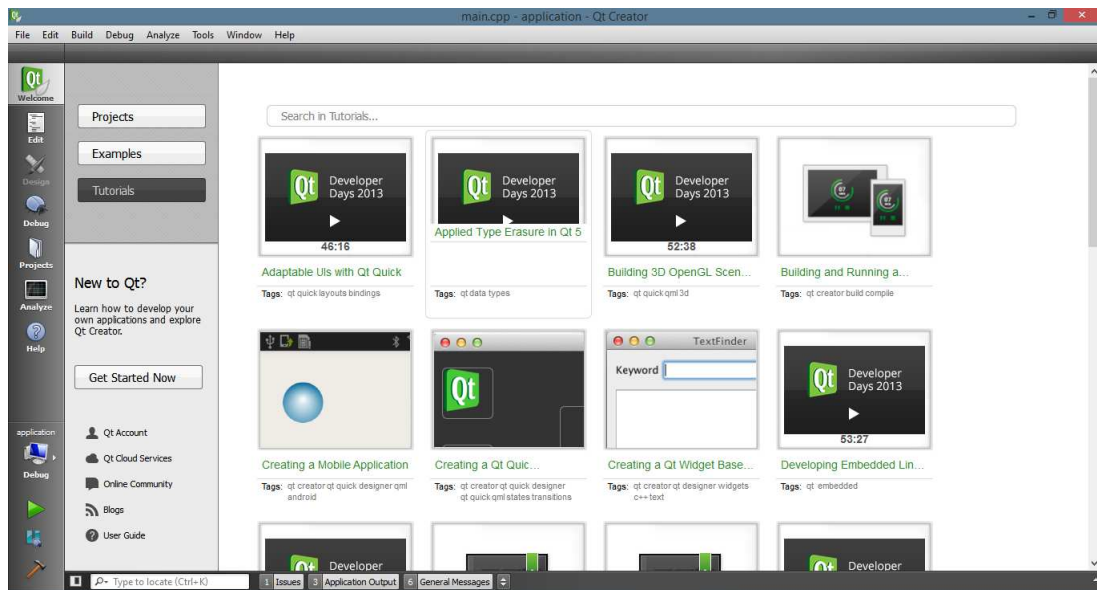
Μεγάλο προνόμιο είναι το λογισμικό κατασκευής προγραμμάτων Qt Creator Γ.1, που παρέχεται μαζί με τις βιβλιοθήκες της γλώσσας. Το λογισμικό αυτό παρέχει στον προγραμματιστή ένα γραφικό περιβάλλον για την κατασκευή των προγραμμάτων. Διευκολύνεται, έτσι, η κατασκευή γραφικού περιβάλλοντος, καθώς παρέχονται βιβλιοθήκες που περιέχουν βασικούς κώδικες για τη δημιουργία γραφικών στοιχείων και ο χρήστης δεν χρειάζεται να τους κατασκευάσει εξ αρχής. Η διάρθρωσή του Qt Creator διευκολύνει τον χειρισμό των κλάσεων, των γραφικών στοιχείων και την ενσωμάτωσή τους σε ένα μεγαλύτερο πρόγραμμα project. Τα αρχεία που χρειάζονται για την ολοκλήρωση ενός προγράμματος, εμφανίζονται στο πλάι του παραθύρου παρέχοντας μια καλύτερη οργάνωση στην όλη διαδικασία σύνταξης του κώδικα.

Το εργαλείο άμεσης διόρθωσης και συμπλήρωσης του λογισμικού Qt Creator διευκολύνει την γρήγορη γραφή και αποσφαλμάτωση (debugging) των κωδίκων. Το εργαλείο αυτό τονίζει/ δίνει έμφαση (highlight) τα συντακτικά λάθη σε ένα πρόγραμμα, βοηθά με το να παρέχει συνεχόμενα πληροφορίες για τις εντολές, τη σύνταξή τους, τα ορίσματά τους και τα αποτελέσματά τους και συμπληρώνει εντολές και μεταβλητές που έχουν ήδη χρησιμοποιηθεί και ορισθεί. Δημιουργεί αυτόματα ένα αρχείο που χρησιμοποιείται για τη μεταγλώττιση (compile) των κωδίκων, ώστε ο χρήστης να μην αναζητά πως θα γίνει η σωστή μεταγλώττιση. Κατά την εκτέλεση του προγράμματος που δημιουργείται, το λογισμικό παρέχει μηνύματα που αναδεικνύουν σφάλματα, προβλήματα και άλλες εξόδους του προγράμματος, όπως μηνύματα του προγράμματος. Σε περίπτωση σφάλματος κατά την εκτέλεση, το λογισμικό Qt Creator εστιάζει στην γραμμή του κώδικα που παρουσίασε το σφάλμα κάνοντας την διόρθωσή του



Σχήμα Γ.1: Γραφικό περιβάλλον σύνταξη κειμένου σε Qt Creator

εύκολη. Εκτός από όλα τα παραπάνω που βοηθούν έναν προγραμματιστή, παρέχει πληροφορίες και για την εκμάθηση της χρήσης της γλώσσας Qt C++.

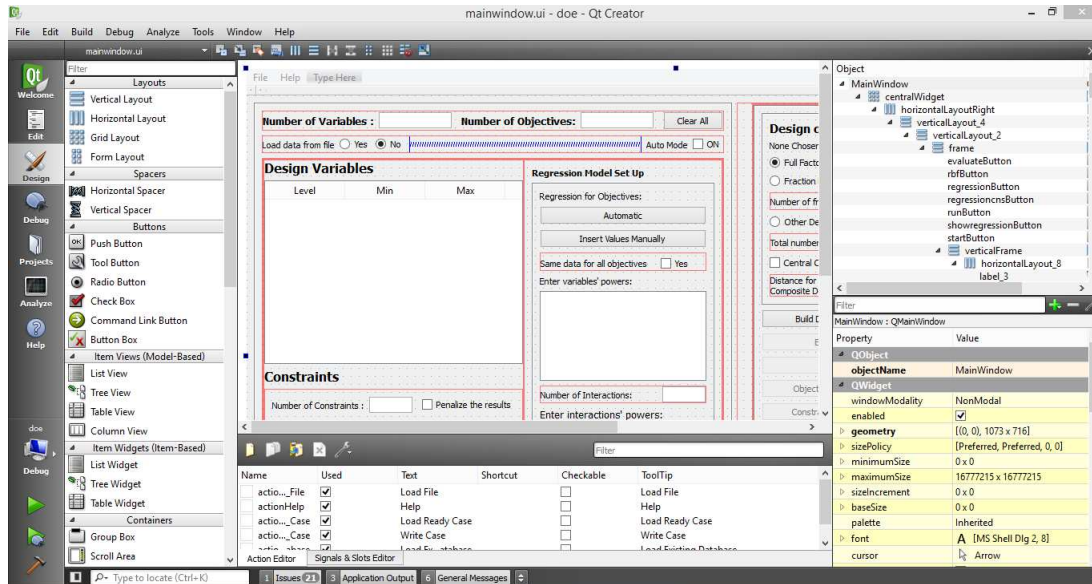


Σχήμα Γ.2: Αρχική οθόνη εκμάθησης στο Qt Creator

Παρέχει οδηγούς για εκμάθηση, ευρετήριο για τις εντολές και έτοιμα παραδείγματα που δείχνουν την λειτουργία της γλώσσας (βλ. Σχήμα Γ.2).

Ένα ακόμα λογισμικό που διευκολύνει τον προγραμματισμό είναι το Qt Designer. Σε αυτό το λογισμικό, ο προγραμματιστής έχει τη δυνατότητα να δημιουργήσει στατικά τα παράθυρα και τα γραφικά αντικείμενα που θα χρησιμοποιηθούν στο πρόγραμμά

του. Με τον όρο 'στατικά' εννοείται ότι δεν μπορεί να αλλάξει η μορφή του γραφικού στοιχείου μέσα από άλλα υποπρογράμματα, αλλά τα υποπρογράμματα μπορούν να επεξεργαστούν τα επιμέρους στοιχεία των γραφικών και να λάβουν αποτελέσματα.



Σχήμα Γ.3: Γραφικό περιβάλλον του λογισμικούQt Designer

Τα γραφικά στοιχεία μπορούν να υλοποιηθούν και με δυναμικό τρόπο μέσα από τα υποπρογράμματα που καλούνται από το κεντρικό πρόγραμμα. Με αυτό τον τρόπο ο προγραμματιστής έχει την δυνατότητα δημιουργίας γραφικών στοιχείων ανάλογα με άλλους παράγοντες. Γενικά, η δυναμική κατασκευή γραφικών στοιχείων δίνει καλύτερο χειρισμό των γραφικών, αλλά απαιτεί περισσότερο κόπο από την μεριά του προγραμματιστή. Αντίθετα, η στατική κατασκευή γραφικών στοιχείων είναι πιο εύκολη στην κατασκευή, αλλά η υλοποίηση περίπλοκων και μεταβαλλόμενων κατά την εκτέλεση του προγράμματος γραφικών αποτελεί δύσκολο έως ακατόρθωτο εγχείρημα. Το λογισμικό Qt Designer παρέχει άμεση οπτικοποίηση των γραφικών στοιχείων. Ο χρήστης μπορεί να προσθέσει στο κεντρικό παράθυρο αντικείμενα όπως πίνακες, ετικέτες, γραμμές επεξεργασίας κ.τ.λ. απλά επιλέγοντάς τα από τη λίστα των ενσωματωμένων αντικειμένων και τοποθετώντας τα στο παράθυρο που επιθυμεί. Η οργάνωση των παραθύρων γίνεται άμεσα και γρήγορα, χωρίς τη χρήση κώδικα, γεγονός που διαφοροποιεί αυτήν τη γλώσσα προγραμματισμού από τις άλλες.

Φυσικά, τα παραπάνω λογισμικά δεν είναι απαραίτητο να χρησιμοποιηθούν για την σύνταξη ενός προγράμματος σε γλώσσα Qt C++. Η όλη διαδικασία της σύνταξης μπορεί να πραγματοποιηθεί, όπως και σε οποιαδήποτε άλλη γλώσσα, μέσω συντάκτη κειμένου και εντολής συστήματος.

Βιβλιογραφία

- [1] Asouti, V.G., Kampolis, I.C., and Giannakoglou, K.C.: *A grid-enabled asynchronous metamodel-assisted evolutionary algorithm for aerodynamic optimization*. Genetic Programming and Evolvable Machines (SI:Parallel and Distributed Evolutionary Algorithms, Part One), 10(3):373–389, 2009.
- [2] Kontoleonos, E.A, Asouti, V.G., and Giannakoglou, K.C.: *An asynchronous metamodel-assisted memetic algorithm for cfd-based shape optimization*. Engineering Optimization, 44(2):157–173, 2012.
- [3] Cochran, W. G. and M.Cox, Gertrude: *Experimental Design*. 2nd edition, 1957.
- [4] Montgomery, D. C.: *Design and Analysis of Experiments*. 5th edition, 2008.
- [5] K.Dejong: *Analysis of the behaviour of a class of genetic adaptive systems*. PhD thesis, University of Michigan, Ann Arbor, 1975.
- [6] Κ.Χ.Γιαννάκογλου: *Μέθοδοι Βελτιστοποίησης στην Αεροδυναμική*. Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, 2005.
- [7] Schoenauer, Z.Michalewicz: *Evolutionary algorithms for constrained parameter optimization problems*. Evolutionary Computation Mechanics, 1996.
- [8] Goldberg, D.E.: *Genetic algorithms in search, optimization and machine learning*. Addison - Wesley, 1989.
- [9] Darwin, C.: *On the origin of species. or the presentation of favoured races in the struggle for life*. John Murrat Albemarle Street, London, October 1 1859.
- [10] Kampolis, I.C., Zymaris, A.S., Asouti, V.G., and Giannakoglou, K.C.: *Multi-level optimization strategies based on metamodel-assisted evolutionary algorithms, for computationally expensive problems*. In *2007 Congress on Evolutionary Computation - CEC '07*, Singapore, September 25-28 2007.
- [11] Giannakoglou, K.C., Giotis, A.P., and Karakasis, M.K.: *Low-cost genetic optimization based on inexact pre-evaluations and the sensitivity analysis of design parameters*. Inverse Problems in Engineering, 9(4):389–412, 2001.

- [12] Giannakoglou, K.C., Giotis A.P. and Karakasis, M.K.: *Low-cost genetic optimization based on inexact pre-evaluations and the sensitivity analysis of design parameters*. Inverse Problems in Engineering, 2001.
- [13] Giannakoglou, K.C., Kampolis, I.C., and Georgopoulou, C.A.: *Metamodel-assisted evolutionary algorithms (MAEAs)*. In *Introduction to Optimization and Multidisciplinary Design in Aeronautics and Turbomachinery*, Lecture Series. von Karman Institute, Rhode-St-Genése, Belgium, June 2008.
- [14] Giannakoglou, K.C., Asouti, V.G., and Kampolis, I.C.: *Hierarchical, metamodel-assisted evolutionary algorithms*. In *Introduction to Optimization and Multidisciplinary Design in Aeronautics and Turbomachinery*, Lecture Series. von Karman Institute, Rhode-St-Genése, Belgium, June 2010.
- [15] Karakasis, M.K. and Giannakoglou, K.C.: *On the use of metamodel-assisted, multi-objective evolutionary algorithms*. Engineering Optimization, 38(8):941–957, 2006.
- [16] Karakasis, M.K. and Giannakoglou, K.C.: *Metamodel-assisted multi-objective evolutionary optimization*. In *EUROGEN 2005, Evolutionary and Deterministic Methods for Design, Optimization and Control with Applications to Industrial and Societal Problems*, Munich, Germany, September 12-14 2005.
- [17] Giannakoglou, K.C. and Karakasis, M.K.: *Hierarchical and distributed metamodel-assisted evolutionary algorithms*. In *Introduction to Optimization and Multidisciplinary Design - Applications to Aeronautics and Turbomachinery*, Lecture Series. von Karman Institute, Rhode-St-Genése, Belgium, March 2006.
- [18] Kenney, J. F. and Keeping, E. S.: *Linear Regression and Correlation*, Ch. 15 in *Mathematics of Statistics*, Pt. 1. 3rd edition, 1962.
- [19] Kampolis, I.C., Papadimitriou, D.I., and Giannakoglou, K.C.: *Evolutionary optimization using a new radial basis function network and the adjoint formulation*. Inverse Problems in Science and Engineering, 14(4):397–410, 2006.
- [20] Pan Wang, Zhenzhou Lu, Zhangchun Tang: *An application of the kriging method in global sensitivity analysis with parameter uncertainty*. Applied Mathematical Modelling, 2013.
- [21] Giannakoglou, K.C.: *Neural network assisted evolutionary algorithms for aeronautics and turbomachinery*. In *Numerical Optimization Methods & Tools for Multi-criteria, Multi-Disciplinary Design with applications to Aeronautics and Turbomachinery*, Lecture Series. von Karman Institute, Rhode-St-Genése, Belgium, November 2004.
- [22] Giotis, A.P., Giannakoglou, K.C., and Périaux, J.: *A reduced-cost multi-objective optimization method based on the Pareto front technique, neural*

networks and PVM. In *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering - ECCOMAS 00*, Barcelona, Spain, September 2000.

- [23] Cox, D.R.: *Interaction*. *International Statistical Review*. 1984.
- [24] Κ.Χ.Γιαννάκογλου, Ι. Αναγνωστόπουλος, Γ.Μπεργελές: *Αριθμητική Ανάλυση για Μηχανικούς*.
- [25] Υψηλάντης, Πέτρος Παύλος Δ.: *Μεθοδολογία Αποκριτικών Επιφανειών Σχεδιασμοί Υποσυνόλου*. Διπλωματική Εργασία. 2012.
- [26] Wilk, M. B.: *The Randomization Analysis of a Generalized Randomized Block Design*. 1955.
- [27] S., Huda and Shingiti, Al: *Rotatable generalized central composite designs A minimax efficiencies for estimating slopes*, volume 3. 2004.
- [28] *Central composite designs*. <http://www.itl.nist.gov/div898/handbook/pri/section3/pri3361.htm>.
- [29] Dean, Edwin B.: *Taguchi approach to design optimization for quality and cost an overview*. 1991.
- [30] S.L.C. Ferreiraa, Corresponding author contact information, E mail the corresponding author R.E. Brunsb H.S. Ferreiraa G.D. Matosa J.M. Davida G.C. Brandãoa E.G.P. da Silva L.A. Portugala P.S. dos Reisc a A.S. Souzaa W.N.L. dos Santosc: *Box-Behnken design: An alternative for the optimization of analytical methods*, volume 597. 2007.
- [31] Fedorov, V.V.: *Theory of Optimal Experiments*. Academic Press, New York, 1972.
- [32] Giannakoglou, K.C. and Giotis, A.P.: *Acceleration of genetic algorithms using artificial neural networks - Application of the method*. In *Genetic Algorithms for Optimization in Aeronautics and Turbomachinery*, Lecture Series. von Karman Institute, Rhode-St-Genése, Belgium, May 2000.
- [33] Tsiakas, K.T., Trompoukis, X.S., Asouti, V.G., and Giannakoglou, K.C.: *Design-optimization of a compressor blading on a gpu cluster*. In *EUROGEN 2013, Evolutionary and Deterministic Methods for Design, Optimization and Control with Applications to Industrial and Societal Problems*, Las Palmas de Gran Canaria, Spain, October 7-9 2013.
- [34] Trompoukis, X.S., Asouti, V.G., Kampolis, I.C., and Giannakoglou, K.C.: *CUDA implementation of Vertex-Centered, Finite Volume CFD methods on Unstructured Grids with Flow Control Applications*, chapter 17. Morgan Kaufmann, 2011.

- [35] Karakasis, M.K. and Giannakoglou, K.C.: *On the use of metamodel-assisted, multi-objective evolutionary algorithms*. 2006.
- [36] Drela, M. and Giles, M.B.: *Viscous-inviscid analysis of transonic and low Reynolds number airfoils*. AIAA Journal, 25(10):1347–1355, 1987.
- [37] R.Myers, D.C. Montgomery: *Response Surface Methodology Process and Product Optimization Using Designed Experiments*. 2nd edition, 2002.
- [38] Blanchette, Jasmin and Summerfield, Mark: *Power Function of the F-Test Under Non-Normal Situations*, volume 66. 1971.
- [39] Tiku, M. L.: *C++ GUI Programming with Qt 4*. 2nd edition, 2002.