

# Optimálne návrhy experimentov odolné voči trendu

Samuel Rosa

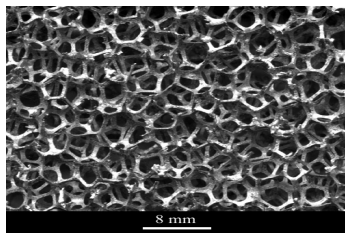
vedúci dipl. práce: Radoslav Harman

Fakulta matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského, Bratislava

20. 1. 2014

- Úvod
- Model
- Navrhovanie experimentov
- Optimalita
- Výsledky
- Dôsledky, použitie

- Experiment - merania za rôznych podmienok
- Návrhy experimentov - aké merania zvoliť, aby bol výsledok čo 'najlepší'
- Cieľom je minimalizovať chybu výsledku, resp. maximalizovať informáciu získanú z experimentu
- Časový trend ako rušivý prvok - skúmaný už v Cox (1952)
- Atkinson, Donev (1996) - voľba návrhov odolných voči trendu pomocou kritérií optimality
- V tejto práci - teória približných návrhov (pozri napr. Pukelsheim (2006))



Obr.: Penový hliník.

- Výskumníci sa snažia vyvinúť súčiastku z penového hliníku odolnejšiu voči tlaku
- 1. Pôvodná súčiastka, 2. Pridaný horčík, 3. Pridaný kremík
- Testovacie zariadenie (mechanický tlak na súčiastku); postupne 150 súčiastok
- Výsledok merania: miera deformácie
- Časový trend - opotrebovanie, zahrievanie zariadenia
- (O koľko) sú nové súčiastky odolnejšie?

$$Y_i = \tau_{t(i)} + \theta_1 h_1(u(i)) + \dots + \theta_d h_d(u(i)) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, N \quad (1)$$

- $Y_i$  - výsledok merania
- $u(i) \in \{1, \dots, n\}$  - čas, v ktorom sa vykoná  $i$ -te meranie
- $t(i) \in \{1, \dots, v\}$  - ošetrenie zvolené pre  $i$ -te meranie
- $\tau_{t(i)}$  - vplyv ošetrenia  $t(i)$
- $\theta_1, \dots, \theta_d$  - rušivé parametre časového trendu
- $h_1, \dots, h_d: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  - regresné funkcie časového trendu
- $\varepsilon_i$  - náhodná chyba,  $E(\varepsilon_i) = 0$ ,  $\text{Var}(\varepsilon_i) = \sigma^2$ , chyby sú nekorelované
- prvé ošetrenie - kontrolné; **cieľ experimentu** - odhadnúť kontrasty  $\tau_2 - \tau_1, \dots, \tau_v - \tau_1$

- *Približný návrh* (approximate design) je zobrazenie  $\xi$  z  $\{1, \dots, v\} \times \{1, \dots, n\}$  do  $[0, 1]$ , také, že  $\sum_{t,u} \xi(t, u) = 1$ .
- $\xi(t, u)$ : relatívne množstvo meraní, ktoré treba vykonať za daných podmienok

# Návrhy experimentov

- *Približný návrh* (approximate design) je zobrazenie  $\xi$  z  $\{1, \dots, v\} \times \{1, \dots, n\}$  do  $[0, 1]$ , také, že  $\sum_{t,u} \xi(t, u) = 1$ .
- $\xi(t, u)$ : relatívne množstvo meraní, ktoré treba vykonať za daných podmienok
- Ak  $n \sum_t \xi(t, u) = 1$  pre všetky  $u$  a  $n\xi(t, u) \in \{0, 1\}$  pre všetky  $u$  a  $t$ , tak  $\xi$  udáva *presný návrh* (exact design): v každom čase  $u$  volíme práve jedno ošetrenie  $t$ .
- Príklad približného návrh, ktorý udáva presný:

$t \backslash u$	1	2	3	4	5
1	1/5	0	0	0	0
2	0	0	0	1/5	0
3	0	1/5	1/5	0	1/5

- $\beta = (\tau_1, \dots, \tau_v, \theta_1, \dots, \theta_d)^T$  - parametre modelu
- Model (1) vyjadríme ako  $Y_i = \mathbf{f}^T(t(i), u(i))\beta + \varepsilon_i$
- $\mathbf{f}(t, u) = (\mathbf{e}_t^T, h_1(u), \dots, h_d(u))^T$ ;  $\mathbf{e}_t$  je  $t$ -ty štandardný jednotkový vektor dĺžky  $v$
- $\mathbf{A}^T\beta = (\tau_2 - \tau_1, \dots, \tau_v - \tau_1)^T$  - systém parametrov, ktorý chceme odhadnúť



- $\beta = (\tau_1, \dots, \tau_v, \theta_1, \dots, \theta_d)^T$  - parametre modelu
- Model (1) vyjadríme ako  $Y_i = \mathbf{f}^T(t(i), u(i))\beta + \varepsilon_i$
- $\mathbf{f}(t, u) = (\mathbf{e}_t^T, h_1(u), \dots, h_d(u))^T$ ;  $\mathbf{e}_t$  je  $t$ -ty štandardný jednotkový vektor dĺžky  $v$
- $\mathbf{A}^T\beta = (\tau_2 - \tau_1, \dots, \tau_v - \tau_1)^T$  - systém parametrov, ktorý chceme odhadnúť
- *Informačná matica* pre systém  $\mathbf{A}^T\beta$ :

$$\mathbf{N}_{\mathbf{A}}(\xi) = (\mathbf{A}^T [\sum_{t,u} \xi(t, u) \mathbf{f}(t, u) \mathbf{f}^T(t, u)]^{-1} \mathbf{A})^{-1},$$

keď je  $\mathbf{A}^T\beta$  odhadnuteľný.

- pre náš systém parametrov je  $\mathbf{N}_{\mathbf{A}}(\xi)$   $v - 1 \times v - 1$  matica

# Optimalita

- $\phi$ -optimálny  $\xi^*$ : maximalizuje  $\max_{\xi} \phi(\mathbf{N}_{\mathbf{A}}(\xi))$
- $\phi_p$ -optimalita:  $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{v-1}$  sú vlastné hodnoty  $\mathbf{N}_{\mathbf{A}}(\xi)$ , potom

$$\phi_p(\mathbf{N}_{\mathbf{A}}(\xi)) = \begin{cases} \left( \frac{1}{v-1} \sum_{j=1}^{v-1} \lambda_j^p \right)^{1/p}, & p \in (-\infty, 0) \\ \left( \prod_{j=1}^{v-1} \lambda_j \right)^{1/(v-1)}, & p = 0 \\ \lambda_1, & p = -\infty \end{cases}$$

- $\phi$ -optimálny  $\xi^*$ : maximalizuje  $\max_{\xi} \phi(\mathbf{N}_{\mathbf{A}}(\xi))$
- $\phi_p$ -optimalita:  $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{v-1}$  sú vlastné hodnoty  $\mathbf{N}_{\mathbf{A}}(\xi)$ , potom

$$\phi_p(\mathbf{N}_{\mathbf{A}}(\xi)) = \begin{cases} \left( \frac{1}{v-1} \sum_{j=1}^{v-1} \lambda_j^p \right)^{1/p}, & p \in (-\infty, 0) \\ \left( \prod_{j=1}^{v-1} \lambda_j \right)^{1/(v-1)}, & p = 0 \\ \lambda_1, & p = -\infty \end{cases}$$

- D-optimalita:  $p = 0$ , maximalizuje determinant informačnej matice, minimalizuje objem elipsoidu spoľahlivosti
- A-optimalita:  $p = -1$ , maximalizuje harmonický priemer vlastných hodnôt informačnej matice
- E-optimalita:  $p = -\infty$ , maximalizuje najmenšiu vlastnú hodnotu informačnej matice.

**Veta 1**

Nech  $p \in [-\infty, 0]$ . Ak  $p > -\infty$ , nech  $\gamma$  je riešenie rovnice

$$(v - 2)\gamma^{1-p} + 2\gamma - 1 = 0 \quad (2)$$

na intervale  $(0, 1)$ . Ak  $p = -\infty$ , položme  $\gamma = 1/2$ . Nech  $\xi^*$  je ľubovoľný približný návrh spĺňajúci

$$\xi^*(1, u) = \gamma \sum_t \xi^*(t, u) \text{ a } \xi^*(2, u) = \dots = \xi^*(v, u)$$

pre  $u = 1, \dots, n$ .

Potom  $\xi^*$  je  $\phi_p$ -optimálny návrh pre odhad  $\tau_2 - \tau_1, \dots, \tau_v - \tau_1$ .

**Veta 1**

Nech  $p \in [-\infty, 0]$ . Ak  $p > -\infty$ , nech  $\gamma$  je riešenie rovnice

$$(v - 2)\gamma^{1-p} + 2\gamma - 1 = 0 \quad (2)$$

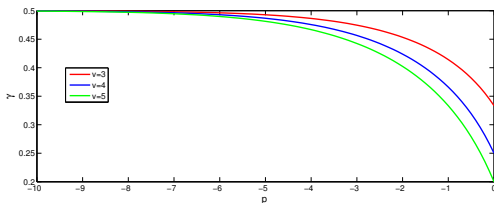
na intervale  $(0, 1)$ . Ak  $p = -\infty$ , položme  $\gamma = 1/2$ . Nech  $\xi^*$  je ľubovoľný približný návrh spĺňajúci

$$\xi^*(1, u) = \gamma \sum_t \xi^*(t, u) \text{ a } \xi^*(2, u) = \dots = \xi^*(v, u)$$

pre  $u = 1, \dots, n$ .

Potom  $\xi^*$  je  $\phi_p$ -optimálny návrh pre odhad  $\tau_2 - \tau_1, \dots, \tau_v - \tau_1$ .

- $\gamma$  - pomer počtu meraní s kontrolným ošetrením ku celkovému počtu meraní
- dostávame nekonečne veľa  $\phi_p$ -optimálnych návrhov  $\xi^*$  pre ľubovoľné  $p \in [-\infty, 0]$
- $\xi^*$  nezávisí na stupni  $d$  časového trendu, na voľbe  $h_1, \dots, h_d$ , ani na voľbe  $u(1), \dots, u(N)$



Obr.: Závislosť  $\gamma$  na  $p$

- s klesajúcim  $p$  (od 0 postupne k  $-\infty$ ) čoraz väčšia váha pre kontrolné ošetrenie
- D-opt. ( $p = 0$ ):  $\gamma = 1/v$  - merania rovnomerne rozdelené medzi ošetrenia
- A-opt. ( $p = -1$ ):  $\gamma = \frac{\sqrt{v-1}-1}{v-2}$  - medzi D-opt. a E-opt.
- E-opt. ( $p = -\infty$ ):  $\gamma = 1/2$  - až polovica meraní je s prvým (kontrolným) ošetrením

- Optimálna kritériálna hodnota  $\phi_p(\xi^*)$  pre  $p \in (-\infty, 0)$ :

$$\phi_p(\xi^*) = \frac{1 - \gamma_p}{v - 1} \left( 1 - \frac{1 - \gamma_p^p}{v - 1} \right)^{1/p},$$

kde  $\gamma_p$  je riešením rovnice (2).

- D-opt.:  $\phi_0(\xi^*) = v^{-v/(v-1)}$
- A-opt.:  $\phi_{-1}(\xi^*) = \left( \frac{\sqrt{v-1}-1}{v-2} \right)^2$
- E-opt.:  $\phi_{-\infty}(\xi^*) = (4(v-1))^{-1}$
- Nezávisia na voľbe regresorov časového trendu  $h_1, \dots, h_d$ .
- Kritériálne hodnoty presných návrhov nemôžu presiahnuť tieto optimálne hodnoty.

- *efektívnosť návrhu*:  $\text{eff}_\phi(\xi) = \frac{\phi(\xi)}{\phi(\xi^*)}$
- rýchle vypočítanie efektívnosti presných návrhov
- možnosť prijať dostatočne kvaliný presný návrh
- Tabuľka efektívností presných návrhov pre model s kubickým časovým trendom, kde  $N = n = 18$ :

$\xi$	$\text{eff}_D(\xi)$	$\text{eff}_A(\xi)$	$\text{eff}_E(\xi)$
231131232232131132	0.9992	0.9703	0.8875
123311221133112231	0.9613	0.9955	0.9870
213111223123111312	0.8951	0.9508	0.9876



- *efektívnosť návrhu*:  $\text{eff}_\phi(\xi) = \frac{\phi(\xi)}{\phi(\xi^*)}$
- rýchle vypočítanie efektívnosti presných návrhov
- možnosť prijať dostatočne kvaliný presný návrh
- Tabuľka efektívností presných návrhov pre model s kubickým časovým trendom, kde  $N = n = 18$ :

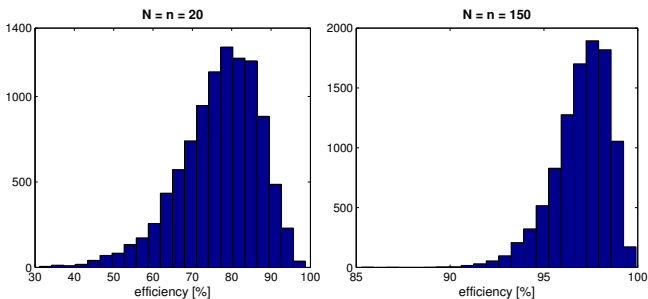
$\xi$	$\text{eff}_D(\xi)$	$\text{eff}_A(\xi)$	$\text{eff}_E(\xi)$
231131232232131132	0.9992	0.9703	0.8875
123311221133112231	0.9613	0.9955	0.9870
213111223123111312	0.8951	0.9508	0.9876

- Druhý návrh má vysokú efektívnosť pri všetkých troch kritériách, je **ROBUSTný** voči voľbe kritérií.

Pomocou Vety 1: rýchle generovanie presných návrhov, ktoré dávajú prvému ošetreniu váhu (približne)  $\gamma_p$  a ostatným rovnomerne rozloženú váhu.

- majú tendenciu mať vysokú efektívnosť
- náhodnosť je výhodná: model nemusí platiť presne

Histogramy efektívností pre model s kubickým trendom:



## Literatúra

- [1] Atkinson, A.C., Donev, A.N. (1996): *Experimental design optimally balanced for trend*, Technometrics 38(4), pp. 333-341
- [2] Cox, D.R. (1951): *Some systematic experimental designs*, Biometrika 38(3/4), pp. 312-323
- [3] Pukelsheim F. (2006): *Optimal Design of Experiments*, SIAM

Ďakujem za pozornosť.