Poznámka k plánování experimentů

M.Hušková, MFF UK

Příspěvek se týká plánu experimentů, jejichž cílem je získat co nejpřesnější odhad parametrů elipsy, koule nebo elipsoidu. Použijeme přitom výsledky pro plánování regresních experimentů vyložených např. v knize A.Pázmána (1980). Při volbě kriteria optimality (tj. kriteria pro "co nejpřesnější odhad")se vychází z tzv. Fisherovy informační matice (definice viz např. Anděl (1978)). Zde se soustředíme na dva typy kriterií optimality (které mají v našem problému přirozenou interpretaci):

1) D-optimalita - optimální plán maximalizuje determinant Fisherovy informační matice (odpovídá minimalizaci zobecněného rozptylu v lineárním modelu).
2) (částečná)A-optimalita - optimální plán minimalizuje součet rozptylů odhadů parametrů, které nás zajímají.

Napsání příspěvku bylo motivováno problematikou řešenou v rámci VHČ pro Racionalizační závod ČKD Praha.

Elipsa

Uvažujme experiment popsaný následovně:

$$\begin{aligned} Y_{i1} &= a_1 + r_1 \cos(\varphi_i + \alpha) + e_{i1}, \\ &\qquad\qquad\qquad\qquad i = 1,\dots,n, \\ Y_{i2} &= a_2 + r_2 \sin(\varphi_i + \alpha) + e_{i2}, \end{aligned} \tag{1}$$

kde (Y_{i1},Y_{i2}), $i = 1,\dots,n$, jsou nezávislá pozorování na elipse se středem (a_1,a_2), délkami poloos r_1,r_2 a úhlem otočení poloos α, $\varphi_1,\dots,\varphi_n$, $0 \le \varphi_i \le 2\pi$, $i = 1,\dots,n$, jsou úhly popisující plán experimentu, e_{ij} jsou chyby pozorování, přičemž e_{ij} má normální rozdělení s parametry $(0, \sigma^2 v_j)$, $i=1,\dots,n$; $j=1,2$, e_{i1}, e_{i2} jsou pro každé i nezávislé náhodné veličiny. Neznámými parametry jsou a_1,a_2,r_1,r_2,α.

Plán experimentu je v tomto případě popsán úhly $\varphi_1,\dots,\varphi_n$ (n dáno). Při volbě kriteria optimality vycházíme z tzv. Fisherovy informační matice, která má v našem případě tvar:

$$M_1 = \begin{pmatrix} m(a_1,a_1), & m(a_1,a_2), & m(a_1,r_1), & m(a_1,r_2), & m(a_1,\alpha) \\ m(a_1,a_2), & m(a_2,a_2), & m(a_2,r_1), & m(a_2,r_2), & m(a_2,\alpha) \\ m(a_1,r_1), & m(a_2,r_1), & m(r_1,r_1), & m(r_1,r_2), & m(r_1,\alpha) \\ m(a_1,r_2), & m(a_2,r_2), & m(r_1,r_2), & m(r_2,r_2), & m(r_2,\alpha) \\ m(a_1,\alpha), & m(a_2,\alpha), & m(r_2,\alpha), & m(r_2,\alpha), & m(\alpha,\alpha) \end{pmatrix} \tag{2}$$

kde

$$m(a_1,a_1) = nv_1^{-1} \qquad m(a_2,a_2) = nv_2^{-1},$$
$$m(r_1,r_1) = v_1^{-1}\sum_i \cos^2(\varphi_i+\alpha), \qquad m(r_2,r_2) = v_2^{-1}\sum \sin^2(\varphi_i+\alpha),$$
$$m(a_1,r_1) = v_1^{-1}\sum \cos(\varphi_i+\alpha), \qquad m(a_2,r_2) = v_2^{-1}\sum \sin(\varphi_i+\alpha),$$
$$m(a_1,\alpha) = r_1v_1^{-1}\sum_i \sin(\varphi_i+\alpha), \quad m(a_2,\alpha) = r_2v_2^{-1}\sum_i \cos(\varphi_i+\alpha)$$

$m(r_1, \alpha) = -r_1 v_1^{-1} \sum \sin(\varphi_i + \alpha) \cos(\varphi_i + \alpha)$,

$m(r_2, \alpha) = r_2 v_2^{-1} \sum \sin(\varphi_i + \alpha) \cos(\varphi_i + \alpha)$,

$m(\alpha, \alpha) = v_1^{-1} r_1^2 \sum \sin^2(\varphi_i + \alpha) + v_2^{-1} r_2^2 \sum \cos^2(\varphi_i + \alpha)$,

$m(a_1, a_2) = m(a_1, r_2) = m(a_2, r_1) = m(N_1, N_2) = 0$

Přímý výpočet vede k tomu, že D-optimální plán musí splňovat následující podmínky:

(3) $$\sum_i \cos(\varphi_i + \alpha) = 0, \quad \sum_i \sin(\varphi_i + \alpha) = 0, \quad \sum_i \sin(2(\varphi_i + \alpha)) = 0$$

(4) $$\sum \sin^2(\varphi_i + \alpha) = n\, w_0,$$

kde w_0 je $\in \langle 0,1 \rangle$ a je řešením rovnice

(5) $$3\, w^2(r_2^2 v_2^{-1} - r_1^2 v_1^{-1}) + 2w(r_1^2 v_1^{-1} - 2r_2^2 v_2^{-1}) + r_2^2 v_2^{-1} = 0.$$

Plán není těmito rovnicemi určen jednoznačně.

Speciální případy:

a) Je-li $v_1^{-1} r_1^2 = v_2^{-1} r_2^2$, pak D-optimální plán musí splňovat (3) a

(6) $$\sum_i \sin^2(\varphi_i + \alpha) = n/2.$$

Tyto vztahy splňuje plán (n dělitelné 4):

(7) $$\varphi_{4i+1} \text{ libovolné}, \quad \varphi_{4i+2} = \varphi_{4i+1} + \pi/2, \quad \varphi_{4i+3} = \varphi_{4i+1} + \pi, \quad \varphi_{4(i+1)} = \varphi_{4i+1} + 3/2\,\pi \qquad i = 0,\dots,n/4-1.$$

b) je-li $v_2^{-1} r_2^2/(v_1^{-1} r_1^2) \doteq 0$, pak D-optimální plán splňuje (3) a

(8) $$\sum \sin^2(\varphi_i + \alpha) \doteq 2/3n.$$

Tyto vztahy splňuje např. (n dělitelné 6)

(9) $$\varphi_{6i+1} + \alpha \doteq \frac{\pi}{2}, \quad \varphi_{6i+2} + \alpha \doteq \frac{3}{2}\pi, \quad \varphi_{6i+3} \text{ libovolné},$$

$$\varphi_{6i+4} \doteq \varphi_{6i+3} + \frac{\pi}{2}, \quad \varphi_{6i+5} \doteq \varphi_{6i+3} + \pi, \quad \varphi_{6i+6} \doteq \varphi_{6i+3} + \frac{3}{2}\pi,$$

$i = 0,\dots,n/6-1$. Zhruba řečeno ve srovnání s plánem (7), děláme více pozorování ve směru osy souřadnic odpovídající 2.složce. Pokud se týče plánů, které jsou částečně A-optimální (tj. plány které minimalizují var $\hat{r}_1$ + var $\hat{r}_2$, kde $\hat{r}_i$, $i=1,2$, jsou odhady r_i metodou nejmenších čtverců), musí splňovat podmínky (3) a

(10) $$\sum_i \cos^2(\varphi_i + \alpha) = n \frac{\sqrt{v_1}}{\sqrt{v_1} + \sqrt{v_2}} .$$

Speciální případy

c) je-li $v_1 = v_2$, pak částečně A-optimální plán musí splňovat (3) a (6), což je splněno např. (7)

d) je-li $v_1/v_2 \doteq 0$, pak podmínka (10) vede k

(11) $$\sum_i \cos^2(\varphi_i + \alpha) \doteq 0$$

což je splněno např. (n dělitelné 2)

(12) $$\varphi_{2i+1} + \alpha \doteq \frac{\pi}{2}, \qquad \varphi_{2i+2} + \alpha \doteq 3\pi/2, \qquad i = 0,\dots,n/2-1$$

(tj. pozorování děláme ve směru osy elipsy odpovídající r_2, neboli ve směru, kde dostáváme méně přesná pozorování).

Poznámka: Je nutno poznamenat, že optimální plány (3,4), (3,10) nejsou obecně uvedenými podmínkami určeny jednoznačně. Vzhledem k tomu, že model (1) je obecně nelineární, závisí některé uvedené plány na neznámých parametrech . V tomto případě je vhodné provést nejprve serii n pokusů, kde $\varphi_1,\dots,\varphi_n$ jsou zvoleny libovolně, na jejich základě odhadnout neznámé parametry (tj. $\varphi_1,\dots,\varphi_{n_1}$ musí být zvoleny tak, abychom tak mohli učinit). Teprve pak zvolit body $\varphi_{n_1+1},\dots,\varphi_{n_1+n_2}$ dle některého optimálního plánu a v nich provést pozorování.

Koule

Uvažujme experiment popsaný následovně:

(13) $$\begin{aligned} Y_{i1} &= a_1 + r\cos\varphi_i \sin\theta_i + e_{i1}, \\ Y_{i2} &= a_2 + r\sin\varphi_i \sin\theta_i + e_{i2}, \qquad i = 1,\dots,n , \\ Y_{i3} &= a_3 + r\cos\theta_i + e_{i3} , \end{aligned}$$

kde (Y_{i1},Y_{i2},Y_{i3}), $i = 1,\dots,n$, jsou nezávislá pozorování na kouli se středem (a_1,a_2,a_3) a poloměru r, (θ_i, φ_i), $i = 1,\dots,n$, jsou úhly popisující plán experimentu, $\varphi_i \in \langle 0, 2\pi\rangle$, $\theta_i \in \langle 0,\pi\rangle$, $i = 1,\dots,n$, e_{ij} jsou chyby pozorování, přičemž e_{i1}, e_{i2}, e_{i3} jsou nezávislé pro všechna i. e_{ij} má normální rozdělení s parametry $(0, \sigma^2 v_j)$, $j = 1,2,3$, $i = 1,\dots,n$. Neznámými parametry jsou a_1,a_2,a_3,r,σ^2.

Podobně jako v předchozím odstavci nás zajímají plány experimentu (popsané body (θ_i, φ_i). $i= 1,\dots,n$), které jsou buď D-optimální nebo minimalizující rozptyl odhadu poloměru r. Fisherova informační matice má tvar

(14) $$M_2 = \begin{pmatrix} m(a_1,a_1), & m(a_1,a_2), & m(a_1,a_3), & m(a_1,r) \\ m(a_1,a_2), & m(a_2,a_2), & m(a_2,a_3), & m(a_2,r) \\ m(a_1,a_3), & m(a_2,a_3), & m(a_3,a_3), & m(a_3,r) \\ m(a_1,r), & m(a_2,r), & m(a_3,r), & m(r,r) \end{pmatrix}$$

kde

$$m(a_j,a_j) = n\, v_j^{-1}, \qquad m(a_j,a_s) = 0 \qquad j \neq s, \quad j,s = 1,2,3?$$

$$m(a_1,r) = v_1^{-1} \sum_i \cos\varphi_i \sin\theta_i ,$$

$$m(a_2,r) = v_2^{-1} \sum_i \sin\varphi_i \sin\theta_i ,$$

$$m(a_3,r) = v_3^{-1} \sum_i \cos\theta_i$$

$$m(r,r) = v_1^{-1}\sum_i \cos^2\varphi_i \sin^2\theta_i + v_2^{-1}\sum_i \sin^2\varphi_i \sin^2\theta_i + v_3^{-1}\sum_i \cos^2\theta_i$$

Je-li $v_3 < \min(v_2,v_1)$, pak D-optimální i A-optimální plány musí splňovat

(15) $$\sum_i \cos\varphi_i \sin\theta_i = 0, \quad \sum_i \sin\varphi_i \sin\theta_i = 0, \quad \sum_i \cos\theta_i = 0,$$

$$\sum_i \cos^2\theta_i = n ,$$

což je splněno např. (n sudé).

(16) $\theta_{2i+1} = 0, \quad \theta_{2i+2} = \pi \qquad i = 0,\dots,n/2-1.$

(zhruba řečeno pozorování děláme ve "směru" nejmenšího rozptylu).

Je-li $v_1 = v_2 = v_3$, pak D-optimální i A-optimální plány musí splňovat (15), což je splněno např. (16). V tomto případě optimální plány nezávisí na otočení souřadných os takže plán (16) popisuje nekonečně mnoho plánů.

Elipsoid

Uvažujme experiment popsaný následovně.

(17) $$\begin{aligned} Y_{i1} &= a_1 + r_1 \cos\varphi_i \sin\theta_i + e_{i1}, \\ Y_{i2} &= a_2 + r_2 \sin\varphi_i \sin\theta_i + e_{i1} \qquad i = 1,2,\dots,n , \\ Y_{i3} &= a_3 + r_3 \cos\theta_i + e_{i3} \end{aligned}$$

kde (Y_{i1},Y_{i2},Y_{i3}), $i = 1,\dots,n$, jsou nezávislá pozorování na elipsoidu se středem (a_1,a_2,a_3), délkami poloos r_1,r_2,r_3, přičemž osy elipsoidu splývají s osami souřadnými. Dále (θ_i, φ_i) a e_{ij}, $i=1,\dots,n$, $j=1,2,3$, mají týž význam jako v předchozím odstavci.

Fisherova informační matice má prvky:

$$m(a_j,a_j) = n\, v_j^{-1} \qquad m(a_j,a_s) = 0, \quad j \neq s; \quad j,s = 1,2,3,$$

$$m(r_j,r_j) = v_1^{-1}\sum_i \sin^2\theta_i \cos^2\varphi_i , \qquad m(a_1,r_1) = v_1^{-1}\sum \sin\theta_i . \cos\varphi_i ,$$

$$m(r_2,r_2) = v_2^{-1}\sum_i \sin^2\theta_i \sin^2\varphi_i , \qquad m(a_2,r_2) = v_2^{-1}\sum \sin\theta_i . \sin\varphi_i ,$$

$$m(r_3,r_3) = v_3^{-1}\sum_i \cos^2\theta_i , \qquad m(a_3,r_3) = v_3^{-1}\sum \cos\theta_i ,$$

$$m(a_i,r_j) = 0 \qquad i \neq j, \qquad i,j = 1,2,3,$$

D-optimální plán splňuje vztahy (15) a

$$(18) \qquad \sum_i \sin^2 \theta_i = \frac{2}{3} n \qquad\qquad \sum \sin^2 \theta_i \cos^2 \varphi_i = n/3,$$

což platí např. pro následující dva plány:

$$(\mathrm{I}) \quad \begin{cases} \theta_{4i+1} = \theta_{4i+2} = 0{,}3\,\pi & \theta_{4i+3} = \theta_{4i+1} = -\theta_{4i+1} + \pi \\ \varphi_{4i+1} = \varphi_{4i+3} \text{ libovolné} & \varphi_{4i+2} = \varphi_{4i+4} = \varphi_{4i+1} + \pi \\ i = 0,\dots,n/4-1 & (n \text{ dělitelné } 4), \end{cases}$$

$$(\mathrm{II}) \quad \begin{cases} \theta_{12i+j} = \pi/2, \quad \theta_{12i+4+j} = \beta, \quad \theta_{12i+8+j} = \beta + \pi/2, \quad j = 1,2,3,4, \\ \varphi_{12i+4s+1} = \alpha, \quad \varphi_{12i+4s+2} = \alpha + \pi/2, \quad \varphi_{12i+4s+3} = \alpha + \pi, \quad \varphi_{12i+4s+4} = \alpha + \frac{3}{2}\pi \\ s = 1,2,3, \qquad i = 0,1,\dots,n/12-1 \qquad (n \text{ dělitelné } 12), \\ \beta \in \langle 0, \pi/2 \rangle, \qquad \alpha \in \langle 0, \pi \rangle \quad \text{libovolné} \end{cases}$$

A-optimální plán splňuje vztahy (15) a

$$\sum \sin^2 \theta_i = n \frac{\sqrt{v_1} + \sqrt{v_2}}{\sqrt{v_1} + \sqrt{v_2} + \sqrt{v_3}}, \qquad \sum \sin^2 \theta_i \cos^2 \varphi_i = \frac{\sqrt{v_1}}{\sqrt{v_1} + \sqrt{v_2} + \sqrt{v_3}}$$

Těmto vztahům vyhovuje např. (n dělitelné 2)

$$\sin \theta_{2i+1} = \sin(\pi - \theta_{2i+2}) = \left(\frac{\sqrt{v_1} + \sqrt{v_2}}{\sqrt{v_1} + \sqrt{v_2} + \sqrt{v_3}}\right)^{1/2}$$

$$\cos \varphi_{2i+1} = \cos(\varphi_{2i+2} + \pi) = \left(\frac{\sqrt{v_1}}{\sqrt{v_1} + \sqrt{v_2}}\right)^{1/2}$$

$$i = 0,\dots,n/2-1.$$

Jestliže $v_1 = v_2$, pak A optimální plán splňuje vztahy (15) a (18).

Model (17) odpovídá situaci kdy hlavní osy elipsoidu se shodují s osami souřadnými. V obecném případě je nutné rozdělit n pokusů do dvou etap. Nejprve provedeme serii n_1 pokusů v libovolně zvolených bodech, výsledky použijeme k odhadu otočení hlavních os elipsoidu a teprve pak zvolíme zbývajících $n - n_1$ bodů dle některého optimálního plánu.

Literatura:

J.Anděl(1978): Matematická statistika. SNTL

A.Pázmán(1980): Základy optimalizácie experimentu, Veda.