Uwagi o A-optymalnych sprężynowych układach wagowych

Małgorzata Graczyk

Model

$\mathbf{y} \qquad n \times 1$

$$\mathrm{E}(\mathbf{y}) = \mathbf{X}\mathbf{w}, \qquad \mathrm{Cov}(\mathbf{y}) = \sigma^2 \mathbf{I}_n$$

gdzie

$\mathbf{w} \quad p \times 1$

σ^2

$\mathbf{X} = (x_{ij}) \quad x_{ij} = 0,\ 1,\ i = 1, 2, ..., n,\ j = 1, 2, ..., p$

Estymator

$$r(\mathbf{X}) = p$$

$$\hat{\mathbf{w}} = \left(\mathbf{X}^{'}\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^{'}\mathbf{y}$$

$$\mathrm{Var}\left(\hat{\mathbf{w}}\right) = \sigma^{2}\left(\mathbf{X}^{'}\mathbf{X}\right)^{-1}$$

Układ A-optymalny

$\mathbf{X} \in \Psi_{n \times p}(1,0)$

$$\min\left(\operatorname{tr}\left(\mathbf{X}'\mathbf{X}\right)^{-1}\right)$$

Gail, Kiefer (1980, 1982)

Pukelsheim (1993)

Neubauer i inni (1998)

Neubauer i inni (1998)

$\mathbf{X}_1 \in \Phi_{p\times(n-1)}(1,0)$

$$\mathbf{X}_1^{'}\mathbf{X}_1 = \frac{(p+1)(n-1)}{4p}\left(\mathbf{I}_p + \mathbf{1}_p\mathbf{1}_p^{'}\right), \quad \text{gdy } p \text{ jest nieparzyste,}$$

$$\mathbf{X}_1^{'}\mathbf{X}_1 = \frac{(n-1)p}{4(p-1)}\mathbf{I}_p + \frac{(n-1)(p-2)}{4(p-1)}\mathbf{1}_p\mathbf{1}_p^{'}, \quad \text{gdy } p \text{ jest parzyste.}$$

$p = 5,\ \ n-1 = 10 \Rightarrow \quad \Phi_{5\times 10}(1,0)$ układ A-optymalny istnieje

$p = 5,\ \ n-1 = 11 \Rightarrow \quad \Phi_{5\times 11}(1,0)$ układ A-optymalny spełniający powyższy warunek nie istnieje

Macierz układu

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{x}' \end{bmatrix}$$

$\mathbf{X} \in \Psi_{p\times n}(1,0)$

$\mathbf{X}_1 \in \Phi_{p\times(n-1)}(1,0)$ macierz układu, która spełnia warunki podane przez Neubauera (1998)

$\mathbf{x}$ $p \times 1$ wektor o elementach 1 lub 0

Układ optymalny dla p nieparzystego

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{x}^{'} \end{bmatrix} \in \Psi_{p \times n}(1,0)$$

$$\mathrm{tr}(\mathbf{X}^{'}\mathbf{X})^{-1} = \frac{4p^3}{(n-1)(p+1)^2} - \frac{16p^2}{(n-1)(p+1)^2} \cdot \frac{(p+1)^2 k - (p+2)k^2}{(n-1)(p+1)^2 + 2p(p+1)k - 4pk^2}$$

$$\mathrm{tr}(\mathbf{X}^{'}\mathbf{X})^{-1} = \frac{4p^3}{(n-1)(p+1)^2} - \frac{16p^2}{(n-1)(p+1)^2} \cdot \varphi(k)$$

$$\underbrace{\varphi(1),\ \ \varphi(2),\ \dots,\ \varphi(p-1),\ \ \varphi(p)}_{p \text{ wartości}}$$

$$\varphi(m) - \varphi(m-1)$$

Układ optymalny dla p nieparzystego

$\varphi(m) - \varphi(m-1) = \frac{\chi(m)}{\theta(m)\cdot\delta(m)}$,

gdzie

$$\chi(m) = -4p(p+1)m^2 + 2(p+1)(2p - (p+1)(p+2)(n-1))m + \\ (n-1)(p+1)^2((p+1)^2 + p + 2),$$

$$\theta(m) = (n-1)(p+1)^2 + 4p(p+1)(m-1) - 4p(m-1)^2 = \\ 4p(m-1)(p+2-m) + (n-1)(p+1)^2 > 0$$

$$\delta(m) = (n-1)(p+1)^2 + 4p(p+1)m - 4pm^2 = \\ 4pm(p-m) + 4pm + (n-1)(p+1)^2 > 0$$

dla każdego p, n oraz $m = 1, 2, ..., p$

Układ optymalny dla p nieparzystego

$$\chi(m) = -4p(p+1)m^2 + 4p(p+1)m - 2(p+1)^2(p+2)(n-1)m + (n-1)(p+1)^2((p+1)^2+p+2) = 0$$

$$\Delta = 4(p+1)^2(p+2)^2(n-1)^2 + 16p^2 + 16p(p+1)^3(n-1)$$

$$m_1 = \frac{4p-2(p+1)(p+2)(n-1)) + \sqrt{4(p+1)^2(p+2)^2(n-1)^2+16p^2+16p(p+1)^3(n-1)}}{8p(p+1)} > 0$$

$$m_2 = \frac{4p-2(p+1)(p+2)(n-1)) - \sqrt{4(p+1)^2(p+2)^2(n-1)^2+16p^2+16p(p+1)^3(n-1)}}{8p(p+1)} < 0$$

Układ optymalny dla p nieparzystego

$$\varphi(m) - \varphi(m-1) = \frac{\chi(m)}{\theta(m) \cdot \delta(m)}$$

$$\varphi(m) - \varphi(m-1) > 0, \quad \text{gdy} \quad m = 1,\ 2,\ ...,\ \lfloor m_1 \rfloor \quad \text{ciąg} \nearrow$$

$$\varphi(m) - \varphi(m-1) < 0, \quad \text{gdy} \quad m = \lfloor m_1 \rfloor + 1,\ ...,\ p \quad \text{ciąg} \searrow$$

$$m_1 = \frac{4p - 2(p+1)(p+2)(n-1)) + \sqrt{4(p+1)^2(p+2)^2(n-1)^2 + 16p^2 + 16p(p+1)^3(n-1)}}{8p}$$

$$\frac{p-1}{2} < m_1$$

$$\operatorname{tr}\left(\frac{p-1}{2}\right) - \operatorname{tr}\left(\frac{p+1}{2}\right) < 0$$

Układ optymalny dla p nieparzystego

Twierdzenie

W nieosobliwym sprężynowym układzie wagowym $\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{x}' \end{bmatrix}$

$$\operatorname{tr}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \geqslant \frac{4p^3}{(n-1)(p+1)^2} - \frac{4p^2}{(n-1)(p+1)^2} \cdot \frac{2(p+1)^2(p-1)-(p+2)(p-1)^2}{(n-1)(p+1)^2+2p(p-1)}.$$

Układ optymalny dla p nieparzystego

$\Psi_{p\times n}(1,0)$

$\mathbf{X}^*$ hipotetyczna macierz, która spełnia warunek Neubauera
$\mathrm{tr}\left(\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*\right) = \frac{n(p+1)}{2}$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{x}' \end{bmatrix}$$

$\mathrm{tr}\left(\mathbf{X}'\mathbf{X}\right) = \frac{(n-1)(p+1)}{2} + \frac{p-1}{2}$

$\mathrm{tr}\left(\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*\right) - \mathrm{tr}\left(\mathbf{X}'\mathbf{X}\right) = 1$

Układ optymalny dla p nieparzystego - przykład 1

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{x}^{'} \end{bmatrix} \in \Psi_{(4t+1)\times(2(4t+1)+1)}(1,0)$$

$\mathbf{X}_1 \in \Phi_{(4t+1)\times(2(4t+1))}(1,0), \quad \mathbf{X}_1 = \mathbf{N}^{'}, \quad$ gdzie

$\mathbf{N}$ jest macierzą incydencji układu zrównoważony o blokach niekompletnych z parametrami $v = 4t+1,\ b = 2(4t+1),\ r = 2(2t+1),\ k = 2t+1,\ \lambda = 2t+1,\ t = 1,2,...$

Układ optymalny dla p nieparzystego - przykład 2

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{x}^{'} \end{bmatrix} \in \Psi_{(4t-1)\times(4t)}(1,0)$$

$\mathbf{X}_1 \in \Phi_{(4t-1)\times(4t-1)}(1,0), \quad \mathbf{X}_1 = \mathbf{N}^{'}, \quad$ gdzie

$\mathbf{N}$ jest macierzą incydencji układu zrównoważony o blokach niekompletnych z parametrami $v = 4t-1,\ b = 4t-1,\ r = 2t,\ k = 2t,\ \lambda = 2t,\ t = 1, 2, ...$

Układ optymalny dla p parzystego

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{x}' \end{bmatrix} \in \Psi_{p\times n}(1,0)$$

$$\mathrm{tr}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = \frac{4(p^2-2p+2)}{p(n-1)} - \frac{16}{p(n-1)} \cdot \frac{(p-1)^2k-(p-2)k^2}{p^2(n-1)+4p(p-1)k-4(p-2)k^2}$$

$$\mathrm{tr}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = \frac{4(p^2-2p+2)}{p(n-1)} - \frac{16}{p(n-1)} \cdot \gamma(k)$$

$$\underbrace{\gamma(1),\ \ \gamma(2),\ \dots,\ \gamma(p-1),\ \ \gamma(p)}_{p\ \text{ wartości}}$$

$$\gamma(m) - \gamma(m-1)$$

Układ optymalny dla p parzystego

$\gamma(m) - \gamma(m-1) = \frac{\omega(m)}{\xi(m)\cdot\zeta(m)}$,

gdzie

$$\omega(m) = -4(p-1)(p-2)m^2 + \big(4(p-1)(p-2) - 2p^2(p-2)(n-1)\big)\, m + p^2(p-2)(n-1) + p^2(p-1)^2(n-1),$$

$$\xi(m) = p^2(n-1) + 4p(p-1)(m-1) - 4(p-2)(m-1)^2 > 0$$

$$\zeta(m) = p^2(n-1) + 4p(p-1)m - 4(p-2)m^2 > 0$$

dla każdego p, n oraz $m = 1,\ 2, ..., p$

Układ optymalny dla p parzystego

$$\omega(m) = -4(p-1)(p-2)m^2 + \left(4(p-1)(p-2) - 2p^2(p-2)(n-1)\right)m + p^2(p-2)(n-1) + p^2(p-1)^2(n-1) = 0$$

$$\Delta = 16(p-1)^2(p-2)^2 + 4p^4(p-2)^2(n-1)^2 + 16p^2(p-1)^3(p-2)(n-1)$$

$$m_1 = \frac{4(p-1)(p-2)-2p^2(p-2)(n-1)+\sqrt{16(p-1)^2(p-2)^2+4p^4(p-2)^2(n-1)^2+16p^2(p-1)^3(p-2)(n-1)}}{8(p-1)(p-2)}$$

$$m_1 > 0$$

$$m_2 = \frac{4(p-1)(p-2)-2p^2(p-2)(n-1)-\sqrt{16(p-1)^2(p-2)^2+4p^4(p-2)^2(n-1)^2+16p^2(p-1)^3(p-2)(n-1)}}{8(p-1)(p-2)}$$

$$m_2 < 0$$

Układ optymalny dla p parzystego

$$\gamma(m) - \gamma(m-1) = \frac{\omega(m)}{\xi(m)\cdot\zeta(m)}$$

$$\gamma(m) - \gamma(m-1) > 0, \quad \text{gdy} \quad m = 1,\ 2,\ ...,\ \lfloor m_1 \rfloor \quad \text{ciąg} \nearrow$$

$$\gamma(m) - \gamma(m-1) < 0, \quad \text{gdy} \quad m = \lfloor m_1 \rfloor + 1,\ ...,\ p \quad \text{ciąg} \searrow$$

$$m_1 = \frac{4(p-1)(p-2) - 2p^2(p-2)(n-1) + \sqrt{16(p-1)^2(p-2)^2 + 4p^4(p-2)^2(n-1)^2 + 16p^2(p-1)^3(p-2)(n-1)}}{8(p-1)(p-2)}$$

$$\frac{p}{2} < m_1$$

$$\mathrm{tr}\left(\tfrac{p}{2}\right) - \mathrm{tr}\left(\tfrac{p+2}{2}\right) < 0$$

Układ optymalny dla p parzystego

Twierdzenie

W nieosobliwym sprężynowym układzie wagowym $\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{x}^{'} \end{bmatrix}$

$\operatorname{tr}(\mathbf{X}^{'}\mathbf{X})^{-1} \geqslant \frac{4(p^2-2p+2)(p(n+1)-p+1)}{p^2(n-1)(n+p-1)}$.

Układ optymalny dla p parzystego

$\Psi_{p\times n}(1,0)$

$\mathbf{X}^*$ hipotetyczna macierz, która spełnia warunek Neubauera

$\mathrm{tr}\left(\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*\right) = \frac{np}{2}$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{x}' \end{bmatrix}$$

$\mathrm{tr}\left(\mathbf{X}'\mathbf{X}\right) = \frac{np}{2}$

$\mathrm{tr}\left(\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*\right) - \mathrm{tr}\left(\mathbf{X}'\mathbf{X}\right) = 0$

Układ optymalny dla p parzystego - przykład

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{x}^{'} \end{bmatrix} \in \Psi_{(2t)\times(2(2t-1)+1)}(1,0)$$

$\mathbf{X}_1 \in \Phi_{(2t)\times(2(2t-1))}(1,0), \quad \mathbf{X}_1 = \mathbf{N}^{'}, \quad$ gdzie

$\mathbf{N}$ jest macierzą incydencji układu zrównoważony o blokach niekompletnych z parametrami $v = 2t,\ b = 2(2t-1),\ r = 2t-1,\ k = t,\ \lambda = t-1,\ t = 2,3,...$

Literatura

Banerjee K.S. (1975) Weighing Designs for Chemistry, Medicine, Economics, Operations Research, Statistics. Marcel Dekker Inc., New York.

Gail Z., Kiefer J. (1980) D-optimum weighing designs, Ann. Statistics 8, 1293-1306.

Neubauer M.G., Watkins W., Zeitlin J. (1998) Notes on D-optimal designs, Linear Algebra ans its Applications, 280, 109-127.

Raghavarao D. (1971) Constructions and Combinatorial Problems in Design of Experiments, John Wiley Inc. New York.

Raghavarao D., Padgett L.V. (2005) Block designs. Analysis, Combinatorics and Applications, Series of Applied Mathematics 17, Word Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.