E-optymalność sprężynowych układów wagowych przy równych wariancjach oraz korelacjach błędów

Ewelina Rychlińska

Wydział Matematyki i Informatyki
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

XXXV Konferencja Statystyka Matematyczna
Wisła 7-11 grudnia 2009

Model sprężynowego układu wagowego

Rozważmy eksperyment, w którym wykonuje się b operacji pomiarowych v obiektów w celu wyznaczenia ich nieznanych miar.

Model liniowy: $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{w} + \mathbf{e}$

$\mathbf{y}$ $b \times 1$ zaobserwowany wektor losowy
$\mathbf{X} = (x_{ij}) \in \mathcal{M}_{b,v}(0,1) \quad rank(\mathbf{X}) = v$

$$x_{ij} = \begin{cases} 1, & j\text{-ty obiekt występuje w } i\text{-tym pomiarze} \\ 0, & \text{w przeciwnym przypadku} \end{cases}$$

$\mathbf{w}$ $v \times 1$ wektor nieznanych miar obiektów
$\mathbf{e}$ $b \times 1$ wektor błędów losowych,
$E(\mathbf{e}) = \mathbf{0}_b,\ Var(\mathbf{e}) = \sigma^2\mathbf{G},\ \mathbf{G} \in \mathcal{M}_{b,b}^{>}$ jest znana

Układ równań normalnych dla estymacji wektora parametrów $\mathbf{w}$

$$\mathbf{X}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{X}\mathbf{w} = \mathbf{X}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{y}$$

posiada jednoznaczne rozwiązanie postaci

$$\hat{\mathbf{w}} = \left(\mathbf{X}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{y}, \text{ gdzie } Var(\hat{\mathbf{w}}) = \sigma^2\left(\mathbf{X}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{X}\right)^{-1}$$

Definicja

Macierz $\mathbf{X}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{X}$ *nazywana jest* ***macierzą informacji*** *układu* $\mathbf{X}$ *dla estymacji wektora parametrów* $\mathbf{w}$.

E-optymalny sprężynowy układ wagowy

Kryterium E-optymalności opiera się na minimalizacji funkcji macierzy informacji układu **X** mającej postać

$$\Phi\left(\mathbf{X}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{X}\right) = \lambda_{max}\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{X}\right)^{-1}\right],$$

gdzie λ_{max} oznacza maksymalną wartość własną.

Definicja

Układ $\mathbf{X} \in \mathcal{M}_{b,v}(0,1)$*, dla którego maksymalna wartość własna macierzy kowariancji wektora estymatorów parametrów jest minimalna w klasie rozważanych układów przy danej macierzy* **G***, nazywamy* ***układem E-optymalnym****.*

Postać macierzy kowariancyjnej

Dla $Var(\mathbf{e}) = \sigma^2\mathbf{G}$ zakładamy strukturę kompletnie symetryczną,

$$\mathbf{G} = (1-g)\,\mathbf{I}_b + g\,\mathbf{J}_b, \quad g \in \left(-\frac{1}{b-1}, 1\right)$$

Wtedy macierz informacji ma postać:

$$\mathbf{X}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{X} = \frac{1}{1-g}\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X} - \frac{g}{1+(b-1)\,g}\mathbf{X}^T\mathbf{J}_b\mathbf{X}\right)$$

Przypadki:

- $g = 0 \Rightarrow \mathbf{G} = \mathbf{I}_b$ wyniki Jacroux, Notz (1983)
- ujemny współczynnik korelacji $g \in \left(-\frac{1}{b-1}, 0\right)$??
- dodatni współczynnik korelacji $g \in (0, 1)$??

Własności funkcji Φ

Definicja (Jacroux, Notz 1983)

Niech $\Phi\colon \mathcal{M}^{>}_{v,v} \to \mathbb{R}$ *oraz* $\mathbf{M} \in \mathcal{M}^{>}_{v,v}$ *posiada wartości własne* $\lambda_1 \leqslant \ldots \leqslant \lambda_v$. *Niech* $\Phi(\mathbf{M}) = \varphi(\lambda_1, \ldots, \lambda_v)$, *gdzie* φ *jest:*

- *funkcją wypukłą*
- *funkcją malejącą ze względu na każdą zmienną przy ustalonych pozostałych*
- *posiada własność:*
  Jeśli $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathcal{M}^{>}_{v,v}$ *mają wartości własne odpowiednio* $a_1 \leqslant a_2$, $b_1 \leqslant b_2$, *oraz* $a_1 \leqslant b_1$, $b_2 \leqslant a_2$,
  $tr(\mathbf{A}) = (v-1)a_1 + a_2 = (v-1)b_1 + b_2 = tr(\mathbf{B})$,
  to $\varphi(b_1, \ldots, b_1, b_2) \leqslant \varphi(a_1, \ldots, a_1, a_2)$.

W tym przypadku: $\Phi(\mathbf{M}) = \lambda_{max}(\mathbf{M}^{-1})$

Lemat

Niech Π *będzie zbiorem wszystkich macierzy permutacji* $v \times v$ *oraz niech* $\mathbf{M} \in \mathcal{M}_{v,v}$. *Wówczas*

$$\bar{\mathbf{M}} = \frac{1}{v!} \sum_{\mathbf{P} \in \Pi} \mathbf{P}^T \mathbf{M} \mathbf{P} = \underbrace{\left(\frac{tr\left(\mathbf{M}\right)}{v} - \frac{Q\left(\mathbf{M}\right)}{v\left(v-1\right)} \right)}_{\alpha} \mathbf{I}_v + \underbrace{\frac{Q\left(\mathbf{M}\right)}{v\left(v-1\right)}}_{\beta} \mathbf{J}_v$$

1. $\bar{\mathbf{M}}$ *ma wartości własne:*
   - α $\quad (v-1)$*-krotną*
   - $\alpha + \beta v$ $\quad$ *jednokrotną*
2. $tr\left(\bar{\mathbf{M}}\right) = tr\left(\mathbf{M}\right)$, $tr =$ *ślad macierzy*
3. $Q\left(\bar{\mathbf{M}}\right) = Q\left(\mathbf{M}\right)$, $Q =$ *suma elementów pozadiagonalnych*

Idea wyznaczania dolnego ograniczenia λ_{max}

W ustalonej klasie macierzy $\mathcal{M}_{b,v}(0,1)$ przy danej korelacji g:

Jaka jest optymalna liczba jedynek N w $\mathbf{X}_d$,
aby $\lambda_{max}\left[\left(\mathbf{X}_d^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{X}_d\right)^{-1}\right]$ była minimalna?

- Dla każdej macierzy $\mathbf{X}_d$ o tej samej liczbie jedynek N tworzymy macierz $\mathbf{M}_d = \mathbf{X}_d^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{X}_d$ oraz $\bar{\mathbf{M}}_d = \alpha_d\mathbf{I}_v + \beta_d\mathbf{J}_v$.
- Z wypukłości Φ otrzymujemy: $\Phi\left(\bar{\mathbf{M}}_d\right) \leqslant \Phi\left(\mathbf{M}_d\right)$
- Szukamy $\bar{\mathbf{M}}_{d*}$ wśród $\bar{\mathbf{M}}_d$ powstałych z $\mathbf{X}_d$ o tej samej liczbie jedynek N, dla której $\Phi\left(\bar{\mathbf{M}}_{d*}\right) \leqslant \Phi\left(\bar{\mathbf{M}}_d\right)$.

Lemat

Niech $\mathbf{X}_{d*} \in \mathcal{M}_{b,v}(0,1)$ *będzie macierzą o* $N = bm + p$ *jedynkach* $(0 \leqslant m \leqslant v-1, 0 \leqslant p \leqslant b-1)$ *następującej postaci*

$$\mathbf{X}_{d*} = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & 1 & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

Niech $\mathbf{X}_d \in \mathcal{M}_{b,v}(0,1)$ *będzie dowolną macierzą o* N *jedynkach, dla której* $\sum_{j=1}^{v} r_j^2 = b^2 m + p^2$*. Wówczas* $\Phi\left(\bar{\mathbf{M}}_{d*}\right) \leqslant \Phi\left(\bar{\mathbf{M}}_d\right)$.

r_j = liczba jedynek w j-tej kolumnie $\mathbf{X}_d$

Wnioski

1. $\Phi\left(\bar{\mathbf{M}}_{d*}\right) \leqslant \Phi\left(\mathbf{X}_d^T \mathbf{G}^{-1} \mathbf{X}_d\right) = \lambda_{max}\left[\left(\mathbf{X}_d^T \mathbf{G}^{-1} \mathbf{X}_d\right)^{-1}\right]$
2. Szukamy minimum funkcji

$$\Phi\left(\bar{\mathbf{M}}_{d*}\right) = \lambda_{max}\left(\bar{\mathbf{M}}_{d*}^{-1}\right) = \frac{(1-g)\left[1+(b-1)g\right]v(v-1)}{f(m,p)},$$

$$f(m,p) = \left[bm(v-m) + p(v-2m-1)\right](1-g) + p(b-p)(v-1)g,$$

gdzie macierz $\bar{\mathbf{M}}_{d*}$ powstała z $\mathbf{X}_{d*}$ o $N = bm + p$ jedynkach.

Lemat

Jeśli $g \in \left(-\frac{1}{b-1}, 0\right)$, *to* $\Phi\left(\bar{\mathbf{M}}_{d*}\right)$ *osiąga minimum dla następujących wartości* m *oraz* p*:*

- v *nieparzyste, to* $m = \frac{v-1}{2}$, $p = 0$ *lub* $m = \frac{v+1}{2}$, $p = 0$
- v *parzyste, to* $m = \frac{v}{2}$, $p = 0$

Lemat

Jeśli $g \in (0, 1)$, *to* $\Phi\left(\bar{\mathbf{M}}_{d*}\right)$ *osiąga minimum dla następujących wartości* m *oraz* p*:*

- v, b *nieparzyste, to* $m = \frac{v-1}{2}$, $p = \frac{b-1}{2}$ *lub* $m = \frac{v-1}{2}$, $p = \frac{b+1}{2}$
- v *nieparzyste,* b *parzyste, to* $m = \frac{v-1}{2}$, $p = \frac{b}{2}$
- v *parzyste, to* $m = \frac{v}{2}$, $p =$ *najbliższa całkowita liczba nieujemna dla* $\frac{b}{2} + \frac{1}{2(v-1)}\left(1 - \frac{1}{g}\right)$

Dolne ograniczenie λ_{max}

Twierdzenie

Dla $\mathbf{X} \in \mathcal{M}_{b,v}(0,1)$, $\mathbf{G} = (1-g)\mathbf{I}_b + g\mathbf{J}_b$, $g \in \left(-\frac{1}{b-1}, 0\right)$, *jeśli*

- v *nieparzyste, to*

$$\lambda_{max}\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{X}\right)^{-1}\right] \geqslant \frac{[1+(b-1)g]4v}{b(v+1)}$$

- v *parzyste, to*

$$\lambda_{max}\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{X}\right)^{-1}\right] \geqslant \frac{[1+(b-1)g]4(v-1)}{bv}$$

Dolne ograniczenie λ_{max}

Twierdzenie

Dla $\mathbf{X} \in \mathcal{M}_{b,v}(0,1)$, $\mathbf{G} = (1-g)\mathbf{I}_b + g\mathbf{J}_b$, $g \in (0,1)$, *jeśli*

- *v oraz b nieparzyste, to*

$$\lambda_{max}\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{X}\right)^{-1}\right] \geqslant \frac{(1-g)[1+(b-1)g]4v}{b(v+1)(1-g)+(b^2-1)g}$$

- *v nieparzyste, b parzyste, to*

$$\lambda_{max}\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{X}\right)^{-1}\right] \geqslant \frac{(1-g)[1+(b-1)g]4v}{b(v+1)(1-g)+b^2g}$$

- *v parzyste, to*

$$\lambda_{max}\left[\left(\mathbf{X}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{X}\right)^{-1}\right] \geqslant \frac{(1-g)[1+(b-1)g]v(v-1)}{\left(\frac{bv^2}{4}-p\right)(1-g)+p(b-p)(v-1)g},$$

$p =$ *najbliższa całkowita liczba nieujemna dla* $\frac{b}{2} + \frac{1}{2(v-1)}\left(1-\frac{1}{g}\right)$

Literatura

- Banerjee K.S. (1975), *"Weighing Designs for Chemistry, Medicine, Economics, Operations Research, Statistics"*, Marcel Dekker Inc., New York
- Jacroux M., Notz W. (1983), *"On the optimality of spring balance weighing designs"*, The Annals of Statistics, vol.11, no.3, p.970-978
- Raghavarao D. (1971), *"Constructions and Combinatorial Problems in Design of Experiments"*, John Wiley, New York