

Łukasz Kuźmiński

**ZASTOSOWANIE ALGORYTMU POPRAWKI
(*ADJUSTMENT ALGORITHM*) DO KONSTRUKCJI PLANÓW
D-OPTYMALNYCH PRZY OGRANICZENIACH
KOSZTOWYCH**

1. Wstęp

W literaturze dosyć obszernie zostały opisane procedury służące do wyznaczania planów optymalnych według klasycznych kryteriów optymalności. Procedury te nie uwzględniają jednak ograniczonych nakładów kosztowych przeznaczonych na realizację eksperymentu oraz całkowitego kosztu realizacji eksperymentu według określonego planu będącego sumą kosztów przeprowadzenia poszczególnych doświadczeń.

W pracy tej zostanie przedstawiony algorytm poprawki oraz jego wykorzystanie do konstrukcji realnych planów *D*-kosztowo-optymalnych o *n* doświadczeniach, inaczej mówiąc, procedura pozwalająca uzyskać plany optymalne według kryterium *D*-optymalności z uwzględnieniem ograniczenia nakładów kosztowych na realizację eksperymentu. Wyznaczone plany będą wykorzystane do estymacji parametrów funkcji regresji danej równaniem

$$Y(\mathbf{x}) = h(\mathbf{x}, \theta) + \varepsilon(\mathbf{x}), \quad (1)$$

gdzie funkcja $h(\mathbf{x}, \theta)$ nazywana jest powierzchnią odpowiedzi i przybiera postać

$$h(\mathbf{x}, \theta) = \theta_1 f_1(\mathbf{x}) + \theta_2 f_2(\mathbf{x}) + \dots + \theta_r f_r(\mathbf{x}), \quad (2)$$

gdzie $f_1(\mathbf{x})$, $f_2(\mathbf{x})$, ..., $f_r(\mathbf{x})$ oznaczają znane rzeczywiste, ciągłe i liniowo niezależne na zbiorze $D \subset R^m$ funkcje *m* zmiennych $X_1, X_2, \dots, X_m$.

Wyznaczone plany minimalizujące kryterium *D*-optymalności, zgodnie z opisanym w dalszej części pracy algorytmem, spełniać będą następujący warunek kosztowy

$$\sum_{i=1}^n K(\mathbf{x}_i) \leq k_0, \quad (3)$$

gdzie: k_0 – maksymalny nakład kosztowy przeznaczony na realizację eksperymentu,

$K(\mathbf{x}_i)$ – koszt przeprowadzenia i -tej obserwacji.

W tej pracy rozpatrywany jest przypadek z teorii kosztowo-optimalnego planowania eksperymentów, w którym całkowity koszt realizacji eksperymentu zależy od liczby obserwacji i od rozmieszczenia poszczególnych obserwacji w obszarze eksperymentowania. Innymi słowy, koszty przeprowadzenia obserwacji w różnych punktach obszaru eksperymentowania nie są takie same.

Plany realne o n doświadczeniach oznaczane będą przez $\mathbf{P}_n = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$, gdzie $\mathbf{x}_i = (x_1, x_2, \dots, x_m)$ (por. [4, s. 53]). Stąd całkowity koszt realizacji eksperymentu według planu $\mathbf{P}_n$ wynosić będzie $K(\mathbf{P}_n) = \sum_{i=1}^n K(\mathbf{x}_i)$.

2. Kryterium D -optymalności i D -efektywności

Ponieważ prezentowany w tej pracy algorytm poprawki wykorzystany zostanie do wyznaczenia planów kosztowo-optimalnych na podstawie kryterium D -optymalności, konieczne jest przedstawienie definicji kryterium D -optymalności oraz D -efektywności.

Definicja 1

Plan $\mathbf{P}_{n,D} \in \mathbf{P}_0$ jest D -optymalnym planem eksperymentu w klasie

$$\mathbf{P}_0 = \bigcup_{n=n_{\min}}^{n=n_{\max}} \mathbf{P}_n, \text{ jeśli}$$

$$\frac{1}{n^r} \det \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{P}_{n,D}) = \inf_{\mathbf{P}_n \in \mathbf{P}_0} \frac{1}{n^r} \det \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{P}_n), \quad (4)$$

gdzie: r – liczba parametrów równania (2), $\mathbf{M}(\mathbf{P}_n) = \frac{1}{n} \mathbf{F}_n^T \mathbf{F}_n$ nosi nazwę macierzy

informacyjnej planu $\mathbf{P}_n$, a $\mathbf{F}_n = \left[\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(1)}), \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(2)}), \dots, \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(n)}) \right]^T$. Z definicji 1 wynika, że plan D -optymalny minimalizuje wyznacznik $\det \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{P}_n)$, co jest jednoznaczne z maksymalizacją wyznacznika $\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_n)$.

W prezentowanym algorytmie jako miara jakości otrzymywanych planów z kolejnych iteracji wykorzystana zostanie D -efektywność. W tej pracy zastosowana będzie D -efektywność definiowana w następujący sposób.

Definicja 2

Niech $\mathbf{P}_{n,D}$ oznacza plan D -optymalny składający się z n doświadczeń w klasie $\mathbf{P}_0$, oraz niech $\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{n,D}) \neq 0$. Wielkość

$$e_D(\mathbf{P}_n) = \left[\frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_n)}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{n,D})} \right]^{\frac{1}{r}} \quad (5)$$

nazywa się D -efektywnością planu $\mathbf{P}_n$ w klasie $\mathbf{P}_0$ (por. [2]).

3. Metoda wyznaczania planów realnych na podstawie planów formalnych

W klasycznej teorii planowania eksperymentów wiadomo, że plan formalny określa odsetek obserwacji, jaki ma być realizowany w poszczególnych punktach obszaru eksperymentowania. Niech $\xi^* = \begin{Bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \dots & \mathbf{x}_s \\ p_1 & p_2 & \dots & p_s \end{Bmatrix}$ oznaczać będzie pewien ψ -optymalny plan formalny, gdzie s – oznacza liczbę różnych punktów planu, a p_i – odsetek obserwacji przeprowadzonych w punkcie i ($i = 1, 2, \dots, s$) (por. [4, s. 56]). Jeżeli zostanie określona liczba doświadczeń n , które mają być zrealizowane, może się zdarzyć, że dla co najmniej jednej spośród s wartości $p_1, p_2, \dots, p_s$ iloczyn np_i nie będzie liczbą całkowitą. W takim przypadku oznacza to, że nie ma możliwości zrealizowania realnego ψ -optymalnego planu o liczbie doświadczeń n . Taki problem można rozwiązać przez wyznaczenie przybliżonego planu realnego według określonego sposobu, co spowoduje, że przybliżony plan $\tilde{\mathbf{P}}_n^*$ nie wiele będzie się różnił efektywnością od planu ψ -optymalnego.

Na wstępie procedury wyznaczania planu realnego $\tilde{\mathbf{P}}_n^*$ na podstawie formalnego planu ψ -optymalnego wyznaczamy zbiór $\tilde{\mathbf{P}}_n$ planów realnych

$$\tilde{\mathbf{P}}_n = \left\{ \tilde{\mathbf{P}}_n = \left\{ \left(\mathbf{x}_1, \frac{n_1}{n} \right), \left(\mathbf{x}_2, \frac{n_2}{n} \right), \dots, \left(\mathbf{x}_s, \frac{n_s}{n} \right) \right\} : n_i \geq [np_i], n_i \in \{0, 1, \dots, n\}, \sum_{i=1}^s n_i = n \right\}, \quad (6)$$

gdzie symbol $[np_i]$ oznacza część całkowitą liczby np_i . Zbiór $\tilde{\mathbf{P}}_n$ jest podzbiorem

zbioru $\mathbf{P}_n = \bigcup_{n_{\min}}^{n_{\max}} \mathbf{P}_n$, natomiast plan $\tilde{\mathbf{P}}_n$ realizuje n_i doświadczeń w punkcie $\mathbf{x}_i$ ($i = 1, 2, \dots, s$), gdzie $n_1 + n_2 + \dots + n_s = n$ (por. [1]).

Jako przybliżenie ψ -optymalnego planu realnego wybierany jest plan $\tilde{\mathbf{P}}_n$, dla którego

$$\psi(\tilde{\mathbf{P}}_n) = \inf_{\tilde{\mathbf{P}}_n \in \tilde{\mathbf{P}}_n} \psi(\tilde{\mathbf{P}}_n) \quad (7)$$

Może się zdarzyć również sytuacja, w której każda z wartości np_i dla $i = 1, 2, \dots, s$ będzie liczbą całkowitą dla ustalonej liczby obserwacji n . Wtedy plan realny $\mathbf{P}_n^*$ utworzony na podstawie ψ -optymalnego planu formalnego ξ^* będzie realnym planem ψ -optymalnym.

4. Algorytm poprawki do budowy realnego planu D-kosztowo-optymalnego

Algorytm poprawiania (por. [2]) rozpoczyna się od wyboru dowolnego planu realnego $\mathbf{P}_n = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$ spełniającego warunek kosztowy (3).

Etap 1

Dla każdego punktu $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im})$, $i = 1, 2, \dots, n$, planu P_n wybranego na wstępie obliczana jest miara zmiany wartości wyznacznika macierzy informacyjnej planu $\mathbf{M}(\mathbf{P}_n)$ spowodowana zmianą wartości współrzędnej x_{ij} ($j = 1, 2, \dots, m$) punktu $\mathbf{x}_i$ ($i = 1, 2, \dots, n$) na wartość x'_{ij} gdzie $x'_{ij} = x_{ij} + s_j$, lub $x''_{ij} = x_{ij} - s_j$, gdzie s_j jest założoną z góry długością skoku wokół punktu x_{ij} . W ten sposób punkt $\mathbf{x}_i$ zostaje zastąpiony przez punkt $\mathbf{x}'_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x'_{ij}, \dots, x_{im})$ lub punkt $\mathbf{x}''_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x''_{ij}, \dots, x_{im})$. Miara ta oznaczona przez r_{ij} ($i = 1, 2, \dots, n$; $j = 1, 2, \dots, 2m$) i obliczana będzie ze wzoru

$$r_{ij} = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_n^{(l)} \text{ lub } \mathbf{x}'_j \text{ lub } \mathbf{x}''_j)}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_n)}, \quad (8)$$

w którym $\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_n)$ oznaczać będzie wyznacznik macierzy planu przed zamianą punktów, a $\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_n^{(l)} \text{ lub } \mathbf{x}'_j \text{ lub } \mathbf{x}''_j)$, ($l = 1, 2, \dots, 2mn$) wyznacznik macierzy planu uzyskanego po zamianie odpowiednich punktów. Z przedstawionego powyżej sposobu postępowania wynika, że dla planu obejmującego n doświadczeń oraz m zmiennych objaśniających w każdym doświadczeniu należy w 1 etapie algorytmu obliczyć $2nm$ wartości miar r_{ij} . Oczywiście miary r_{ij} obliczane są tylko dla takich planów $\mathbf{P}_n^{(l)} \text{ lub } \mathbf{x}'_j \text{ lub } \mathbf{x}''_j$ ($l = 1, 2, \dots, 2mn$), które spełniają warunek kosztowy (3).

Z tego wynika, że liczba $2nm$ koniecznych do obliczenia wartości miar r_{ij} pomniejszona będzie o liczbę planów $P_{n, x_j}^{(l)}$ lub x_j'' , których całkowity koszt realizacji przekracza założoną z góry wartość nakładu kosztowego k_0 przeznaczonego na realizację eksperymentu.

Etap 2

Spośród obliczonych wartości miary r_{ij} wybierana jest największa, oznaczana przez

$$r^* = \max_{i, j} r_{ij}. \quad (9)$$

Jeżeli $r^* > 1$, to dokonuje się zamiany punktu $\mathbf{x}_i = (x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_m)$ na punkt $\mathbf{x}_{ij}' = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ij}', \dots, x_{im})$ lub $\mathbf{x}_{ij}'' = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ij}'', \dots, x_{im})$ i procedura jest rozpoczynana od początku – od etapu 1. W przypadku przeciwnym przechodzimy do etapu 3.

Etap 3

Wielkość s_j dotychczasowych zmian współrzędnych zmniejszana jest dwukrotnie o długość skoku dla każdej współrzędnej punktu

$$s_j' = \frac{s_j}{2} \quad (j = 1, 2, \dots, m) \quad (10)$$

i jeżeli $s_j' \geq SM$ dla przynajmniej jednej współrzędnej x_j ($j = 1, 2, \dots, m$), gdzie SM oznacza minimalną dopuszczalną długością skoku ustaloną z góry, to procedura rozpoczyna się od etapu pierwszego. W przeciwnym razie procedura jest zatrzymywana.

Algorytm poprawki ma dwie wersje, które różnią się od siebie długością skoku s_j oraz minimalną długością skoku SM . Dla pierwszego rodzaju oznaczanego symbolem AA1 (*Adjustment Algorithm 1*) $SM = s_1, \dots, s_m = 0,1$, natomiast dla drugiego rodzaju o symbolu AA2 (*Adjustment Algorithm 2*) $SM = 0,02$ oraz $s_1, \dots, s_m = 0,08$. Podane wartości długości skoków dla obu rodzajów algorytmów są podane dla przypadku, w którym wartości wszystkich zmiennych $x_1, x_2, \dots, x_m$ są obserwowane na przedziale $[-1, 1]$. W sytuacji gdy obszar eksperymentowania się zmienia, to wartości s_j oraz SM zmieniają się proporcjonalnie.

5. Numeryczny przykład zastosowania algorytmu poprawki (*Adjustment Algorithm*) do budowy realnego planu *D*-kosztowo-optymalnego

W przykładzie numerycznym zostanie przedstawione wykorzystanie algorytmu poprawki do budowy realnego *D*-kosztowo-optymalnego planu $\mathbf{P}_n^*$ dla równania regresji postaci

$$Y(x; \theta) = \theta_1 + \theta_2 x + \varepsilon(x). \quad (11)$$

Przyjmuje się, że obszarem eksperymentowania jest $D_1 = [-1, 1]$. Całkowity koszt eksperymentu opisany jest równaniem $K(\mathbf{P}_n) = \sum_{i=1}^n K(x_i)$, przy czym funkcja kosztów dla tego przykładu ma postać $K(x_i) = x_i + 2$. Całkowity nakład kosztowy przeznaczony na realizację eksperymentu ustalony zostaje na poziomie $k_0 = 7$. Zadanie polegać będzie w tym przypadku na wyznaczeniu realnego *D*-kosztowo-optymalnego planu składającego się z 4 doświadczeń $\mathbf{P}_4^*$ dla estymacji parametrów równania regresji danego wzorem (11). Omawiany plan zostanie zbudowany za pomocą algorytmu poprawki AA1, dla którego $SM = s_1, \dots, s_m = 0,1$.

Etap 1

Na początku wybierany jest dowolny plan realny składający się z 4 doświadczeń i spełniający warunek kosztowy (3) postaci

$$\mathbf{P}_4 = \{-1, -0,5, 0, 0,3\}, \quad (12)$$

dla którego $K(\mathbf{P}_4) = 6,8 \leq k_0$. Do obliczania *D*-efektywności ze wzoru (5) dla planów uzyskiwanych w kolejnych iteracjach algorytmu poprawki wykorzystywany będzie *D*-optymalny realny plan dla estymacji parametrów równania (11) składający się z $n = 4$ doświadczeń

$$\mathbf{P}_{4,D} = \{-1, -1, 1, 1\}, \quad (13)$$

dla którego $\det \mathbf{P}_{4,D} = 1$. Plan (13) został uzyskany przy użyciu metody opisanej w pkt 3 tej pracy, na podstawie *D*-optymalnego, formalnego planu ξ_D dla estymacji parametrów równania regresji (11) postaci

$$\xi_D = \begin{Bmatrix} -1 & 1 \\ 0,5 & 0,5 \end{Bmatrix},$$

przy założeniu, że obszar eksperymentowania $D_1 = [-1, 1]$ (por. [4, s. 144]).

Wykorzystując wzór (5), dla planu początkowego $\mathbf{P}_4$ wybranego w pierwszym etapie prezentowanego algorytmu otrzymujemy

$$e_D(\mathbf{P}_4) = \sqrt{\frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4)}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4,D})}} = \sqrt{\frac{0,245}{1}} = 0,495,$$

widać zatem, że plan początkowy ma niską efektywność. Przechodzimy do pierwszego kroku procedury. W pierwszym kroku, zgodnie z opisem algorytmu poprawki z pkt 4 tej pracy, obliczamy wartości r_{ij} dla wszystkich nowych punktów powstałych z punktów planu wstępnego, dodając i odejmując wartość długości skoku $s_j = 0,1$ ($i = 1, 2, 3, 4$). Są to następujące punkty

$$\begin{aligned} x'_{11} &= -0,9, & x''_{11} &= -1,1, \\ x'_{21} &= -0,4, & x''_{21} &= -0,6, \\ x'_{31} &= 0,1, & x''_{31} &= -0,1, \\ x'_{41} &= 0,4, & x''_{41} &= 0,2, \end{aligned} \tag{14}$$

przy czym punkt $x''_{11} = -1,1$ nie będzie brany pod uwagę, ponieważ wykracza poza obszar eksperymentowania.

Plany po dokonaniu zamiany odpowiednich punktów oraz wartości wyznaczników macierzy informacyjnych dla tych planów wraz z wartościami r_{ij} i całkowitym kosztem realizacji eksperymentu według tych planów są następujące:

$$\mathbf{P}_{4, x'_{11}}^{(1)} = \{-0,9, -0,5, 0, 0,3\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{11}}^{(1)}) = 0,211,$$

$$r_{11'} = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{11}}^{(1)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 0,861, \quad K(\mathbf{P}_{4, x'_{11}}^{(1)}) = 6,9 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x'_{21}}^{(2)} = \{-1, -0,4, 0, 0,3\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{21}}^{(2)}) = 0,236,$$

$$r_{21'} = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{21}}^{(2)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 0,963, \quad K(\mathbf{P}_{4, x'_{21}}^{(2)}) = 7 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x''_{21}}^{(3)} = \{-1, -0,6, 0, 0,3\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x''_{21}}^{(3)}) = 0,256,$$

$$r_{21''} = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x''_{21}}^{(3)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 1,045, \quad K(\mathbf{P}_{4, x''_{21}}^{(3)}) = 6,8 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x'_{31}}^{(4)} = \{-1, -0,5, 0,1, 0,3\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{31}}^{(4)}) = 0,261,$$

$$r_{31}' = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{31}}^{(4)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 1,065, \quad K(\mathbf{P}_{4, x'_{31}}^{(4)}) = 6,9 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x''_{31}}^{(5)} = \{-1, -0,5, -0,1, 0,3\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x''_{31}}^{(5)}) = 0,231,$$

$$r_{31}'' = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x''_{31}}^{(5)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 0,943, \quad K(\mathbf{P}_{4, x''_{31}}^{(5)}) = 6,7 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x'_{41}}^{(6)} = \{-1, -0,5, 0, 0,4\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{41}}^{(6)}) = 0,277,$$

$$r_{41}' = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{41}}^{(6)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 1,13, \quad K(\mathbf{P}_{4, x'_{41}}^{(6)}) = 6,9 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x''_{41}}^{(7)} = \{-1, -0,5, 0, 0,2\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x''_{41}}^{(7)}) = 0,235,$$

$$r_{41}'' = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x''_{41}}^{(7)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 0,959, \quad K(\mathbf{P}_{4, x''_{41}}^{(7)}) = 6,7 \leq k_0.$$

Na końcu pierwszego etapu procedury wybrany zostaje plan $\mathbf{P}_{4, x'_{41}}^{(6)} = \{-1, -0,5, 0, 0,4\}$, dla którego wartość miary $r_{41}' = r^*$ oraz $K(\mathbf{P}_{4, x'_{41}}^{(6)}) = 6,9 \leq k_0$. Efektywność wyznaczonego planu obliczona na podstawie wzoru (5) wynosi $e_D = (\mathbf{P}_{4, x'_{41}}^{(6)}) = 0,526$.

Etap 2

Na początku kolejnego etapu algorytmu, w ten sam sposób jak we wcześniejszym etapie, wyznaczony jest nowy zbiór punktów do wymiany:

$$\begin{aligned} x'_{11} &= -0,9, & x''_{11} &= -1,1, \\ x'_{21} &= -0,4, & x''_{21} &= -0,6, \\ x'_{31} &= 0,1, & x''_{31} &= -0,1, \\ x'_{41} &= 0,3, & x''_{41} &= 0,5. \end{aligned} \tag{15}$$

Punkt $x''_{11} = -1,1$, z tego samego powodu co wcześniej, zostaje wyeliminowany ze zbioru. W tym etapie planem początkowym jest plan wyznaczony na końcu poprzedniego etapu $\mathbf{P}_4^{(0)} = \{-1, -0,5, 0, 0,4\}$. Plany po zamianie odpowiednich punktów na punkty ze zbioru (17) wraz z wyznacznikami macierzy informacyjnych dla tych planów oraz wartościami r_{ij} i całkowitym kosztem realizacji eksperymentów według tych planów przybierają następującą postać:

$$\mathbf{P}_{4, x'_{11}}^{(1)} = \{-0,9, -0,5, 0, 0,4\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{11}}^{(1)}) = 0,242,$$

$$r_{11'} = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{11}}^{(1)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 0,83, \quad K(\mathbf{P}_{4, x'_{11}}^{(1)}) = 7 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x'_{21}}^{(2)} = \{-1, -0,4, 0, 0,4\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{21}}^{(2)}) = 0,267,$$

$$r_{21'} = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{21}}^{(2)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 0,914, \quad K(\mathbf{P}_{4, x'_{21}}^{(2)}) = 7 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x''_{21}}^{(3)} = \{-1, -0,6, 0, 0,4\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x''_{21}}^{(3)}) = 0,242,$$

$$r_{21''} = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x''_{21}}^{(3)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 0,83, \quad K(\mathbf{P}_{4, x''_{21}}^{(3)}) = 6,8 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x'_{31}}^{(4)} = \{-1, -0,5, 0,1, 0,4\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{31}}^{(4)}) = 0,292,$$

$$r_{31'} = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{31}}^{(4)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 1, \quad K(\mathbf{P}_{4, x'_{31}}^{(4)}) = 7 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x''_{31}}^{(5)} = \{-1, -0,5, -0,1, 0,4\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x''_{31}}^{(5)}) = 0,265,$$

$$r_{31''} = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x''_{31}}^{(5)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 0,907, \quad K(\mathbf{P}_{4, x''_{31}}^{(5)}) = 6,8 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x'_{41}}^{(6)} = \{-1, -0,5, 0, 0,5\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{41}}^{(6)}) = 0,312,$$

$$r_{41'} = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x'_{41}}^{(6)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 1,068, \quad K(\mathbf{P}_{4, x'_{41}}^{(6)}) = 7 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x''_{41}}^{(7)} = \{-1, -0,5, 0, 0,3\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x''_{41}}^{(7)}) = 0,265,$$

$$r_{41''} = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x''_{41}}^{(7)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 0,907, \quad K(\mathbf{P}_{4, x''_{41}}^{(7)}) = 6,8 \leq k_0.$$

Kierując się ogólnymi kryteriami prezentowanej procedury, tak samo jak we wcześniejszym etapie, w tym etapie wybierzemy plan $\mathbf{P}_{4, x'_{41}}^{(6)} = \{-1, -0,5, 0, 0,5\}$, dla którego $r_{41'} = r^*$ oraz $K(\mathbf{P}_{4, x'_{41}}^{(6)}) = 7 \leq k_0$. Efektywność wyznaczonego planu wynosi $e_D(\mathbf{P}_{4, x'_{41}}^{(6)}) = 0,56$.

Etap 3

W tym etapie procedury planem początkowym jest $\mathbf{P}_4^{(0)} = \{-1, -0,5, 0, 0,5\}$. Postępując analogicznie jak we wcześniejszych etapach, wyznaczamy zbiór punktów przeznaczonych do wymiany

$$\begin{aligned} x'_{11} &= -0,9, & x''_{11} &= -1,1, \\ x'_{21} &= -0,4, & x''_{21} &= -0,6, \\ x'_{31} &= 0,1, & x''_{31} &= -0,1, \\ x'_{41} &= 0,4, & x''_{41} &= 0,6 \end{aligned} \tag{16}$$

oraz na jego podstawie tworzony jest zbiór planów wraz z wartościami wyznaczników macierzy informacyjnych, wartościami r_{ij} oraz całkowitymi kosztami realizacji eksperymentów według tych planów.

$$\mathbf{P}_{4, x'_{11}}^{(1)} = \{-0,9, -0,5, 0, 0,5\}, \quad K(\mathbf{P}_{4, x'_{11}}^{(1)}) = 7,1 > k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x'_{21}}^{(2)} = \{-1, -0,4, 0, 0,5\}, \quad K(\mathbf{P}_{4, x'_{21}}^{(2)}) = 7,1 > k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x''_{21}}^{(3)} = \{-1, -0,6, 0, 0,5\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x''_{21}}^{(3)}) = 0,327;$$

$$r_{21}' = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x_{21}}^{(3)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 1,048, \quad K(\mathbf{P}_{4, x_{21}}^{(3)}) = 6,9 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x_{31}}^{(4)} = \{-1, -0,5, 0,1, 0,5\}, \quad K(\mathbf{P}_{4, x_{31}}^{(4)}) = 7,1 > k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x_{31}}^{(5)} = \{-1, -0,5, -0,1, 0,5\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x_{31}}^{(5)}) = 0,302;$$

$$r_{31}'' = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x_{31}}^{(5)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 0,968, \quad K(\mathbf{P}_{4, x_{31}}^{(5)}) = 6,9 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x_{41}}^{(6)} = \{-1, -0,5, 0, 0,4\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x_{41}}^{(6)}) = 0,277;$$

$$r_{41}' = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x_{41}}^{(6)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 0,877, \quad K(\mathbf{P}_{4, x_{41}}^{(6)}) = 6,9 \leq k_0;$$

$$\mathbf{P}_{4, x_{41}}^{(7)} = \{-1, -0,5, 0, 0,6\}, \quad K(\mathbf{P}_{4, x_{41}}^{(7)}) = 7,1 > k_0.$$

Półowa planów ze względu na całkowity koszt ich realizacji w ogóle nie została wzięta pod uwagę. Spośród pozostałych wybrany zostaje plan $\mathbf{P}_{4, x_{21}}^{(3)} = \{-1, -0,6, 0, 0,5\}$, dla którego w tym etapie $r_{21}'' = r^*$ oraz $K(\mathbf{P}_{4, x_{21}}^{(3)}) = 6,9 \leq k_0$. Efektywność wyróżnionego planu wynosi $e_D(\mathbf{P}_{4, x_{21}}^{(3)}) = 0,57$. Widać, że plany uzyskiwane w kolejnych etapach procedury mają coraz wyższą efektywność.

Etap 4

Planem początkowym jest teraz plan $\mathbf{P}_4^{(0)} = \{-1, -0,6, 0, 0,5\}$, a zbiór punktów do wymiany przybiera postać

$$\begin{aligned} x_{11}' &= -0,9, & x_{11}'' &= -1,1, \\ x_{21}' &= -0,5, & x_{21}'' &= -0,7, \\ x_{31}' &= 0,1, & x_{31}'' &= -0,1, \\ x_{41}' &= 0,4, & x_{41}'' &= 0,6. \end{aligned} \tag{17}$$

Poniżej, w celu przyspieszenia prezentacji tego algorytmu, prezentowane są tylko te plany zbudowane na podstawie zbioru punktów (19), dla których wartość $r_{ij} > 1$:

$$\mathbf{P}_{4, x_{21}''}^{(3)} = \{-1, -0,7, 0, 0,5\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x_{21}''}^{(3)}) = 0,345,$$

$$r_{21}'' = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x_{21}''}^{(3)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 1,055, \quad K(\mathbf{P}_{4, x_{21}''}^{(3)}) = 6,8 \leq k_0,$$

$$\mathbf{P}_{4, x_{41}'}^{(6)} = \{-1, -0,6, 0, 0,6\}, \quad \det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x_{41}'}^{(6)}) = 0,367,$$

$$r_{41}' = \frac{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_{4, x_{41}'}^{(6)})}{\det \mathbf{M}(\mathbf{P}_4^{(0)})} = 1,124, \quad K(\mathbf{P}_{4, x_{41}'}^{(6)}) = 7 \leq k_0.$$

Spśród przedstawionych dwóch planów wybrany zostaje plan $\mathbf{P}_{4, x_{41}'}^{(6)} = \{-1, -0,6, 0, 0,6\}$, ponieważ $r_{41}' = r^*$ oraz $K(\mathbf{P}_{4, x_{41}'}^{(6)}) = 7 \leq k_0$. Efektywność wyróżnionego planu wynosi $e_D(\mathbf{P}_{4, x_{41}'}^{(6)}) = 0,606$.

Realizując kolejne etapy algorytmu (5-12) w analogiczny sposób jak wcześniejsze w etapie XII dochodzimy do wyniku końcowego, którym jest plan $\mathbf{P}_4^* = \{-1, -1, 0, 1\}$ o efektywności $e_D(\mathbf{P}_4^*) = 0,829$.

Na etapie 12 zatrzymujemy procedurę ponieważ jedynym planem w 13 etapie algorytmu, dla którego $r_{ij} > 1$, jest plan $\mathbf{P}_{4, x_{31}''}^{(4)} = \{-1, -1, 0, 1, 1\}$, dla którego $K(\mathbf{P}_{4, x_{31}''}^{(4)}) = 7,1 > k_0 = 7$.

6. Zakończenie

W pracy przedstawiony został zmodyfikowany algorytm poprawki do wyznaczania realnych planów według określonych kryteriów μ -optymalności przy ograniczonych nakładach kosztowych przeznaczonych na realizację eksperymentu. Prezentowany przykład liczbowy w pkt 5 pracy pokazuje, jak przy użyciu opisanego algorytmu wyznacza się D -kosztowo-optymalny, realny plan eksperymentu dla estymacji parametrów równania regresji z jedną zmienną objaśniającą danej wzorem (11) przy założonych z góry ograniczonych nakładach kosztowych na realizację eksperymentu. Mimo ograniczeń kosztowych algorytm poprawki doprowadza

do ostatecznego planu o efektywności równej 0,829. Przedstawiony przykład pokazuje również, że nawet dla realnego planu składającego się z $n = 4$ doświadczeń i równania regresji z jedną zmienną objaśniającą algorytm poprawki wymaga wielu żmudnych obliczeń. Wniosek z tego taki, że korzystanie z tego algorytmu w znacznym stopniu ułatwia oprogramowanie komputerowe. Obliczenia wymagane w kolejnych krokach procedury stają się coraz bardziej uciążliwe w miarę wzrostu liczby doświadczeń n w eksperymencie oraz liczby zmiennych objaśniających.

Literatura

- [1] Biskup D., *Baysowskie planowanie eksperymentów w zagadnieniu regresji*, AE, Wrocław 2003 (praca doktorska – niepublikowana).
- [2] Donev A.N., Atkinson A.C., *An Adjustment Algorithm for the Construction of Exact D-Optimum Experimental Designs*, „Technometrics”, november 1988, vol. 30, no 4.
- [3] Jung W., *Kostenoptimale Versuchsplanung im Regressionsmodell*, „Biometrical Journal” 1974 nr 16, s. 31-47.
- [4] Wawrzynek J., *Statystyczne planowanie eksperymentów w zagadnieniach regresji w warunkach małej próby*, AE, Wrocław 1994.

THE IMPLEMENTATION OF ADJUSTMENT ALGORITHM TO CREATE THE D -COST-OPTIMAL. REAL DESIGN AT LIMITED COST

Summary

The paper describes the modified adjustment algorithm for seeking the real designs according to the definite criterion ψ -optimality at limited costs intended for realization of the experiment.

An example of running the described algorithm is shown in the paper. In presented example, the exercise consists in assigning the D -cost-optimal, real design of experiment for estimating parameters of the regression function equation with one explanatory variable.