Introdução à Otimização de Experimentos

Profa. Heloisa Maria de Oliveira

Universidade Federal de Santa Catarina
Campus Curitibanos

Algorítmo de Otimização

Define-se

- o número de fatores e seus respectivos níveis
- a quantidade de unidades experimentais
- o modelo utilizado
- o critério de otimização

Em seguida, constrói-se **todos os delineamentos possíveis** e calcula o valor do critério.

- inviável construir todos os delineamentos para encontrar
- experimento 3^5 com 24 observações, tem-se

$$(3^5)^{24} = 1,810^{57} \text{ delineamentos distintos}$$

- O algoritmo de troca surgiu com Fedorov (1972)
- Esse algoritmo troca os pontos e depois verifica se encontrou o delineamento ótimo
- versões modificadas do algoritmo de troca:
  - **algoritmo de troca por ponto (Point-Exchange)** de Cook e Nachtshem (1989)
  - **algoritmo de troca por coordenada (Coordinate-Exchange)** de Meyer e Nachtshem (1995)

Algorítmo Point-Exchange

1. Defina
   - K de fatores com seus respectivos níveis
   - n de unidades amostrais
   - número de tentativas Θ
   - critério de otimização
   - modelo

1. Construa uma matriz $\mathbf{D}$ com todos os pontos candidatos d_i;
2. Construa um delineamento inicial (não singular) aleatório $\mathbf{X}_1$;
3. Calcula $|\mathbf{X_1'X_1}|$, $(\mathbf{X_1'X_1})^{-1}$ e o valor do critério de otimização escolhido;
4. Enquanto número de tentativas $\theta \leq \Theta$
    1. troca um ponto da matriz $\mathbf{X_1}$ por uma linha do delineamento $\mathbf{D}$
    2. Calcula o $|\mathbf{X_2'X_2}|$, $(\mathbf{X_2'X_2})^{-1}$ e o valor do critério
        - Se o valor do novo critério de $\mathbf{X_2}$ é melhor do que o obtido em $\mathbf{X_1}$.

$$\mathbf{X_1} \leftarrow \mathbf{X_2}$$

        - Caso contrário, mantêm o delineamento anterior, ou seja, $\mathbf{X_1}$.
5. Apresenta o delineamento $\mathbf{X_1}$ encontrado.

Algorítmo Coordenate-Exchange

1. Defina
   - K de fatores com seus respectivos níveis
   - n de unidades amostrais
   - número de tentativas Θ para a busca
   - critério de otimização
   - modelo

1. Construa um delineamento inicial (não singular) aleatório $\mathbf{X}_c$;
2. Calcula $|\mathbf{X_c'X_c}|$, $(\mathbf{X_c'X_c})^{-1}$ e o valor do critério de otimização escolhido;
3. Enquanto número de tentativas $\theta \leq \Theta$
   1. troca uma coordenada da matriz $\mathbf{X_d}$,ou seja, fixa uma linha de $\mathbf{X}_c$ e muda a coordenada, originando $\mathbf{X_1}$ e $\mathbf{X_2}$;
   2. Calcula o $|\mathbf{X_j'X_j}|$, $(\mathbf{X_j'X_j})^{-1}$ para $j = \{1, 2\}$ e o valor do critério
      - Se o valor do novo critério de $\mathbf{X_1}$ é melhor do que o obtido em $\mathbf{X_c}$.
        $$\mathbf{X_c} \leftarrow \mathbf{X_1}$$
      - Se o valor do novo critério de $\mathbf{X_2}$ é melhor do que o obtido em $\mathbf{X_c}$.
        $$\mathbf{X_c} \leftarrow \mathbf{X_2}$$
      - Caso contrário, mantêm o delineamento anterior, ou seja, $\mathbf{X_c}$.
4. Apresenta o delineamento $\mathbf{X_c}$ encontrado.

Praticando o algoritmo Coordenate-Exchange

Encontre um delineamento ótimo considerando:

- Experimento Fatorial 3^2;
- modelo de efeitos principais;
- 4 unidades experimentais;
- D-otimalidade.

Constroí-se aleatoriamente o delineamento inicial

$$\mathbf{X_c} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & x_{13} & \cdots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & x_{23} & \cdots & x_{2k} \\ 1 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & x_{n3} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X_c} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Calculamos:

- $\mathbf{X_c'X_c} = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}$

- $|\mathbf{X_c'X_c}|$ é 16

Possíveis trocas dos elementos, $x_{11} = -1$ por 0 e 1.

- $\mathbf{X_1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ $\quad |\mathbf{X_1'X_1}|$ é 8

- $\mathbf{X_2} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ $\quad |\mathbf{X_2'X_2}|$ é 8

$$|\mathbf{X_c'X_c}| \geq |\mathbf{X_j'X_j}| \text{ para } j = \{1, 2\} \rightarrow \text{não a troca}$$

Possíveis trocas dos elementos, $x_{12} = 0$ por -1 e 1.

- $\mathbf{X_3} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ $\qquad |\mathbf{X_3'X_3}|$ é 8

- $\mathbf{X_4} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ $\qquad |\mathbf{X_4'X_4}|$ é 40

$|\mathbf{X_c'X_c}| \leq |\mathbf{X_j'X_j}|$ para $j = \{3, 4\} \rightarrow$ troca $\mathbf{X_c}$ por $\mathbf{X_4}$

Possíveis trocas dos elementos, $x_{22} = -1$ por 0 e 1.

- $\mathbf{X_5} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ $\quad |\mathbf{X_5'X_5}|$ é 30

- $\mathbf{X_6} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ $\quad |\mathbf{X_6'X_6}|$ é 24

$$|\mathbf{X_c'X_c}| \geq |\mathbf{X_j'X_j}| \text{ para } j = \{5, 6\} \rightarrow \text{não troca } \mathbf{X_c}$$

Possíveis trocas dos elementos, $x_{23} = -1$ por 0 e 1.

- $\mathbf{X_7} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ $\qquad |\mathbf{X_7'X_7}|$ é 16

- $\mathbf{X_8} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ $\qquad |\mathbf{X_8'X_8}|$ é 8

$$|\mathbf{X_c'X_c}| \geq |\mathbf{X_j'X_j}| \text{ para } j = \{7, 8\} \rightarrow \text{não troca } \mathbf{X_c}$$

Possíveis trocas dos elementos, $x_{31} = 1$ por 0 e -1.

- $\mathbf{X_9} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ $|\mathbf{X_9'X_9}|$ é 24

- $\mathbf{X_{10}} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ $|\mathbf{X_{10}'X_{10}}|$ é 24

$|\mathbf{X_c'X_c}| \geq |\mathbf{X_j'X_j}|$ para $j = \{9, 10\} \rightarrow$ não troca $\mathbf{X_c}$

Possíveis trocas dos elementos, $x_{32} = 0$ por 1 e -1.

- $\mathbf{X_{11}} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ $|\mathbf{X'_{11}X_{11}}|$ é 32

- $\mathbf{X_{12}} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ $|\mathbf{X'_{12}X_{12}}|$ é 64

$|\mathbf{X'_cX_c}| \geq |\mathbf{X'_jX_j}|$ para $j = \{11, 12\} \rightarrow$ troca $\mathbf{X_c}$ por X_{12}

Possíveis trocas dos elementos, $x_{41} = 1$ por 0 e -1.

- $\mathbf{X_{13}} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ $\quad |\mathbf{X}'_{13}\mathbf{X}_{13}|$ é 40

- $\mathbf{X_{14}} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$ $\quad |\mathbf{X}'_{14}\mathbf{X}_{14}|$ é 32

$|\mathbf{X}'_{\mathbf{c}}\mathbf{X}_{\mathbf{c}}| \geq |\mathbf{X}'_{\mathbf{j}}\mathbf{X}_{\mathbf{j}}|$ para $j = \{13, 14\} \rightarrow$ troca $\mathbf{X_c}$ por $\mathbf{X_{12}}$

Última troca dos elementos, $x_{42} = 1$ por 0 e -1.

- $\mathbf{X_{15}} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$ $|\mathbf{X}'_{15}\mathbf{X_{15}}|$ é 40

- $\mathbf{X_{16}} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$ $|\mathbf{X}'_{16}\mathbf{X_{16}}|$ é 32

$$|\mathbf{X}'_{\mathbf{c}}\mathbf{X_c}| \geq |\mathbf{X}'_{\mathbf{j}}\mathbf{X_j}| \text{ para } j = \{15, 16\} \rightarrow \text{troca } \mathbf{X_c} \text{ por } X_{12}$$

Resultando

- $$\mathbf{X_c} = \mathbf{X_{12}} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

- $|\mathbf{X_c'X_c}|$ é 64

Delineamentos Ótimos para Fatoriais em blocos incompletos

- Algoritmo interchange
- Etapas
    1. Defina o Experimento Fatorial, o número e tamanho de cada bloco, modelo e quantas tentativas serão realizadas para encontrar o delineamento.

Otimização para Experimentos Fatoriais em Blocos Casualizados

Modelo matricial

$$
\begin{aligned}
\mathbf{y} &= \mathbf{Z}\gamma + \mathbf{X}\beta + \epsilon \\
&= \mathbb{D}\delta + \epsilon
\end{aligned}
$$

onde

- $\mathbf{y}$ é o vetor $(n \times 1)$ das respostas de interesse
- $\mathbb{D} = \left[\mathbf{Z} || \mathbf{X}\right]$
- $\mathbf{X}$ é a matriz $\left(n \times p\right)$ com os níveis dos k fatores
- $\mathbf{Z}$ é a matriz indicadora $(n \times b)$ dos efeitos fixos de blocos

Assume-se $\mathbf{E}(\epsilon) = \mathbf{0}_n$ e $\text{Cov}(\epsilon) = \sigma_\epsilon^2 \mathbf{I}_n$

1. Construa um delineamento inicial $\mathbb{D}$ e encontra sua resperctiva matriz de delineamento $\mathbb{D}$ Considerando $\mathbb{D} = \left[\mathbf{Z}||\mathbf{X}\right]$ Pelo modelo temos

$$\mathbb{D}'\mathbb{D} = \begin{bmatrix} \mathbf{Z}'\mathbf{Z} & \mathbf{Z}'\mathbf{X} \\ \mathbf{X}'\mathbf{Z} & \mathbf{X}'\mathbf{X} \end{bmatrix}$$

e com inversa

$$(\mathbb{D}'\mathbb{D})^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{11} & \mathbf{C}_{12} \\ \mathbf{C}_{21} & \mathbf{C}_{22} \end{bmatrix}$$

1. Calcula o critério usando a matriz $\mathbf{C}_{22}$ e $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ do delineamento $\mathbb{D}$.
2. Enquanto o número de tentativas θ menor ou igual Θ
   1. Se $\mathbb{D}_\mathbf{i}$ é melhor do que o delineamento anterior $\mathbb{D}$, troca das coordenadas
   $$\mathbb{D} \rightarrow \mathbb{D}_\mathbf{i}$$
   2. Se $\mathbb{D}_\mathbf{i}$ não é melhor do que o delineamento anterior $\mathbb{D}$, mantêm-se $\mathbb{D}$.
3. Apresenta o delineamento $\mathbb{D}$ encontrado.

Eficiência dos Delineamentos

- Avalia a performance de dois delineamentos $\xi_{\mathbf{1}}$ e $\xi_{\mathbf{2}}$ dada por

$$\mathsf{E}(\xi_{\mathbf{1}}, \xi_{\mathbf{2}}) = \frac{\text{menor valor do criterio de otimização}(\xi_{\mathbf{1}}, \xi_2)}{\text{maior valor do criterio de otimização}(\xi_{\mathbf{1}}, \xi_{\mathbf{2}})}.$$

- eficiência maior que 1 indica que o delineamento denominador é melhor do que numerador