

Universidad de Castilla-La Mancha



Departamento de Matemáticas

**DISEÑO ÓPTIMO DE EXPERIMENTOS  
PARA MODELOS DE MEZCLAS APLICADOS  
EN LA INGENIERÍA Y LAS CIENCIAS  
EXPERIMENTALES**

**MEMORIA PARA OPTAR EL GRADO DE DOCTOR**

AUTORA

**Irene García Camacha Gutiérrez**

DIRECTOR

**Dr. Raúl Martín Martín**

*Toledo, 2017*







# Resumen

El presente trabajo tiene como objetivo determinar estrategias de construcción de diseños óptimos en problemas de experimentos con mezclas, en los que las variables controlables por el experimentador son proporciones. Para este propósito se han desarrollado herramientas teóricas y numéricas para resolver diferentes situaciones reales en las que surgen este tipo de problemas.

En general, los capítulos tienen la siguiente estructura: comienzan con una introducción, donde se presentan los objetivos y las principales contribuciones, el desarrollo de los mismos está dividido en varias secciones atendiendo a los diferentes subtemas, y contienen un último apartado dedicado a las conclusiones.

A continuación exponemos de manera resumida los principales objetivos y contribuciones de la memoria.

El **capítulo 1** introduce la finalidad del diseño óptimo de experimentos y presenta las motivaciones por las que surge. Se establecen formalmente las bases sobre las que se construye esta teoría y se exponen conceptos, notaciones y resultados fundamentales sobre los que se apoya. Se definen los principales criterios de optimización, con especial énfasis sobre los criterios de  $D$ - e  $I$ -optimización, que serán los de mayor interés para el desarrollo de esta memoria. La segunda parte de este capítulo introduce una importante herramienta en la teoría de diseño óptimo, la derivada direccional de una función criterio. Se proporciona también el teorema fundamental del diseño óptimo de experimentos, el teorema general de equivalencia,

además de otros resultados fundamentales. El capítulo concluye con la extensión de esta teoría para modelos no lineales.

El **capítulo 2** comienza justificando la necesidad de desarrollar métodos numéricos para el cálculo de soluciones aproximadas. A continuación se realiza una revisión bibliográfica de las técnicas algorítmicas más utilizadas en la literatura: el algoritmo Wynn-Fedorov y el algoritmo multiplicativo. El primero de los resultados desarrollados en este trabajo es un nuevo algoritmo para el cálculo de diseños óptimos aproximados: el *Algoritmo Combinado*. Aunque puede aplicarse para cualquier función criterio, la convergencia ha sido probada para  $D$ -optimización. La eficacia del nuevo algoritmo se muestra a lo largo de diferentes ejemplos.

El **capítulo 3** se dedica al estudio de los experimentos con mezclas. El capítulo comienza definiendo este tipo de problemas y la región de diseño donde tienen sentido, *el simplex*. A continuación se describen los diseños de mezclas estándar que han recibido mayor atención en la literatura, así como los modelos más utilizados para explicar este tipo de comportamientos. En particular, se hace especial hincapié sobre los polinomios canónicos de Scheffé. La última sección es una revisión de los trabajos más destacados sobre diseños óptimos para modelos de mezclas.

El **capítulo 4** comienza justificando la necesidad de desarrollar técnicas generales para resolver problemas de diseño óptimo en experimentos con mezclas. En este trabajo se proponen dos algoritmos para la construcción de diseños  $D$ -óptimos exactos en este tipo de problemas. El primero de ellos consiste en extender el algoritmo multiplicativo para una clase de diseños restringidos, *los diseños de permutación*. Este nuevo algoritmo permite resolver problemas de mezclas considerando modelos no lineales, aunque no permite abordar problemas de mezclas con restricciones. Como alternativa *heurística* se propone otro método, basado en algoritmos genéticos, capaz de obtener soluciones en problemas restringidos que también puede utilizarse para modelos no lineales. El desarrollo de técnicas de construcción de los diseños óptimos para esta clase de modelos no han sido estudiados en la literatura en este contexto. Varios

ejemplos que surgen en la industria farmacéutica, química y petroquímica ilustran los resultados obtenidos por las nuevas metodologías.

El **capítulo 5** contiene diferentes estrategias para la construcción de diseños  $D$ - e  $I$ -óptimos robustos exactos y continuos para modelos de mezclas. El desarrollo de estas estrategias viene motivado por el ejemplo que aparece en Hernández et al. [JH08] en el que se busca la composición óptima de un sucedáneo que simule al diésel en el autoencendido bajo condiciones de motor HCCI. El uso de la metodología desarrollada en este capítulo permite abordar la falta de especificidad del modelo que presenta este problema. En primer lugar se analizó el problema de mezclas binarias y se obtuvieron resultados teóricos que permitieron obtener la expresión analítica de los diseños  $D$ -óptimos. Para más de dos ingredientes, se proporciona un algoritmo general basado en algoritmos genéticos, ya que no es posible tratar el problema de manera analítica. Por otro lado, se propone una nueva familia de diseños restringidos, *los diseños intercambiables*, que presentan buenas propiedades como generadores de los diseños óptimos robustos.

El **capítulo 6** es una síntesis de los resultados y aportaciones obtenidas a lo largo de la realización de este trabajo. En la última parte se presenta una discusión sobre las líneas de investigación futuras.



# Índice general

VIII

<b>1. Diseño de Experimentos</b>	<b>1</b>
1.1. Introducción . . . . .	1
1.2. Teoría de diseño para modelos lineales . . . . .	5
1.3. Diseños y Matriz de Información . . . . .	8
1.4. Criterios de optimización . . . . .	12
1.4.1. Funciones criterio . . . . .	13
1.5. Condiciones de optimización . . . . .	19
1.5.1. Teorema de Equivalencia . . . . .	19
1.5.2. Derivada direccional . . . . .	20
1.6. Modelos no lineales . . . . .	28
<b>2. Algoritmos</b>	<b>31</b>
2.1. Introducción . . . . .	32
2.2. Algoritmo de Wynn-Fedorov . . . . .	37
2.3. Algoritmo Multiplicativo . . . . .	47
2.4. Algoritmo Combinado . . . . .	62
2.4.1. Algoritmo . . . . .	66

2.4.2.	Convergencia para $D$ -optimización . . . . .	68
2.4.3.	Algoritmo para $D$ -optimización . . . . .	69
2.4.4.	Ejemplos Numéricos para $D$ -optimización . . . . .	71
2.4.5.	Conclusiones . . . . .	83
<b>3.</b>	<b>Experimentos con Mezclas</b>	<b>85</b>
3.1.	Introducción . . . . .	85
3.2.	Diseños de Mezclas . . . . .	87
3.2.1.	Diseños Simplex Lattice (DSL) . . . . .	87
3.2.2.	Diseños Simplex Centroid (DSC) . . . . .	88
3.2.3.	Diseños Axiales . . . . .	88
3.3.	Modelos de Mezclas . . . . .	90
3.3.1.	Polinomios Canónicos de Scheffé . . . . .	91
3.3.2.	Modelos de mezclas de Cox . . . . .	95
3.3.3.	Modelos de mezclas con funciones homogéneas . . . . .	97
3.3.4.	Modelos de mezclas con términos inversos . . . . .	98
3.3.5.	Modelos <i>log-contrast</i> . . . . .	99
3.3.6.	Polinomios de Kronecker . . . . .	100
3.3.7.	Modelos de mezclas con variables-proceso . . . . .	101
3.3.8.	Modelos en los que interviene la cantidad de mezcla . . . . .	101
3.3.9.	Directrices para la elección de un modelo . . . . .	102
3.4.	Diseños óptimos para modelos de mezclas . . . . .	103

---

<b>4. Algoritmos mezclas</b>	<b>107</b>
4.1. Introducción . . . . .	108
4.2. Diseños de Permutación . . . . .	110
4.3. AM para DPEM . . . . .	112
4.3.1. Derivadas direccionales . . . . .	112
4.4. Algoritmo Genético . . . . .	118
4.5. Ejemplos Numéricos . . . . .	123
4.5.1. Formulación de tabletas de <i>tramadol</i> . . . . .	124
4.5.2. Leyes de mixtura para la viscosidad de fluidos	126
4.5.3. Control del tamaño de nanopartículas . . . . .	129
4.5.4. Formulación de microemulsiones . . . . .	130
4.5.5. Conclusiones . . . . .	133
<b>5. Diseño Robusto</b>	<b>137</b>
5.1. Introducción . . . . .	138
5.2. Teoría de diseño robusto . . . . .	142
5.3. Mezclas binarias . . . . .	147
5.3.1. Estrategias Puras . . . . .	156
5.3.2. Estrategia General de Construcción . . . . .	161
5.4. Mezclas de tres ingredientes . . . . .	168
5.4.1. Algoritmo Genético . . . . .	171
5.4.2. Diseños Restringidos . . . . .	176
5.4.3. Resultados . . . . .	182
5.4.4. Aproximación del problema continuo . . . . .	186
5.5. Un ejemplo real . . . . .	204
5.6. Conclusiones . . . . .	212

<b>6. Conclusiones e investigación futura</b>	<b>217</b>
6.1. Conclusiones . . . . .	217
6.2. Líneas de investigación futuras . . . . .	223
<b>Bibliografía</b>	<b>227</b>

# Capítulo 1

## Diseño de Experimentos

### 1.1. Introducción

En toda actividad en la que se aplica el método científico para probar una hipótesis o aportar novedades en alguno de los campos del conocimiento, la experimentación juega un papel fundamental. Y es que ésta, basada en la medida y en lo empírico, resulta ser imprescindible para el estudio de cualquier fenómeno observable. La experimentación consistirá, por tanto, en examinar (someter a una prueba) un comportamiento o sistema real con objeto de recoger datos acerca de los factores que influyen en él y sobre la propia característica de interés. El fin último será procesar estos datos para convertirlos en información valiosa que, tras ser analizada de forma exhaustiva, nos aportará conclusiones sobre nuestro estudio. Sin embargo, se ha de prestar especial atención a la manera de recoger estos datos ya que su posterior análisis estadístico será informativo sólo si los datos por ellos mismos lo son. Son muchas las disciplinas en las que planificar y diseñar una prueba se convierte en una etapa crucial para el desarrollo del estudio. La puesta a punto de la recogida de datos cobra especial relevancia para la obtención de conclusiones válidas y rigurosas. Es por ello que en la actualidad existe gran interés por el diseño de experimentos.

A priori aumentar el tamaño de la muestra puede parecer una posible solución a este problema. Sin embargo, en la práctica ésta resulta ser poco viable debido a limitaciones experimentales de índole económica, temporal o simplemente por la ausencia de casos. Por esta razón, el Diseño Óptimo de Experimentos (DOE) resulta especialmente interesante ya que su finalidad es conseguir la máxima información posible para cubrir nuestras expectativas futuras a un mínimo coste.

Además, como señalábamos en el párrafo anterior, el diseño óptimo de experimentos nos ofrece la ventaja de cubrir los objetivos del experimento respondiendo a un determinado criterio fruto de la intencionalidad del estudio.

A continuación se describen las fases para resolver un problema de diseño óptimo de experimentos:

- Modelización del Experimento:

Esta etapa no es otra que la de definición del problema: todo fenómeno de la naturaleza objeto de estudio necesita de una ley capaz de explicar la característica de interés en función de variables observables llamadas explicativas.

En primer lugar, será necesario definir un conjunto donde tomar las observaciones. Dicho conjunto se conoce como *espacio del diseño* y se denota por  $\chi$ . En la práctica  $\chi$  va a ser un subconjunto compacto de un espacio euclídeo, con frecuencia un intervalo de la recta real o producto de ellos. De aquí en adelante asumiremos que dicho conjunto es compacto.

Posteriormente ha de definirse la relación funcional entre el resultado observado y los factores que influyen en él. Formalmente puede escribirse como sigue:

$$y(x) = \eta(x, \theta) + \varepsilon(x),$$

siendo  $y$  una variable aleatoria, denominada variable respuesta, que depende de una o varias variables  $x$  a las que llamaremos variables explicativas, regresoras o variables controlables.

Éstas, pueden ser elegidas libremente por el experimentador. La función  $\eta$  recibe el nombre de superficie de respuesta y es una función parcialmente conocida, es decir, está dentro de un conjunto paramétrico de funciones  $\eta(x, \theta)$ , donde los parámetros  $\theta^t = (\theta_1, \dots, \theta_m) \in \mathbb{R}^m$  son desconocidos y su especificación determina totalmente a  $\eta$ . Por último, el modelo presenta un error aleatorio  $\varepsilon$  que engloba tanto los errores de la realización de las pruebas como la especificación del modelo.

Para caracterizar la varianza de  $y(x)$  y la dependencia entre dos observaciones  $y(x)$ ,  $y(z)$ , consideraremos la siguiente función de covarianza:

$$\begin{aligned}\gamma(x, \theta) &= E\{[y(x) - \eta(x, \theta)][y(z) - \eta(z, \theta)]\} = E[\varepsilon(x)\varepsilon(z)] \\ &= Cov[y(x), y(z)].\end{aligned}$$

- Elección del criterio de optimización y cálculo del diseño óptimo:

Antes de comenzar a aplicar la teoría de diseño óptimo, conviene fijar ideas sobre cuál es el objetivo del estudio y traducirlo en términos matemáticos. En otras palabras, elegir la función que maximice la información en el sentido de los intereses reales del estudio. Este criterio de optimalidad ha de verificar una serie de propiedades deseables para poder aplicar las herramientas teóricas que se expondrán más adelante.

Los mejores diseños serán aquellos que minimicen de algún modo la varianza (y también la covarianza cuando ésta sea considerada) de los estimadores de los parámetros. De este modo, el objetivo fundamental consistirá en encontrar los valores donde las observaciones deben ser tomadas y en qué proporciones para obtener la mejor estimación de los parámetros desconocidos.

En la práctica, el cálculo de dichos diseños no resulta una tarea fácil y, en la mayoría de las ocasiones, la obtención de un procedimiento analítico teórico para su resolución resulta inabordable dado el alto nivel de complejidad de este tipo de problemas. Debido a ello, surgen procedimientos para el cálculo numérico de soluciones aproximadas en paralelo al desarrollo de las nuevas tecnologías. En el siguiente capítulo se presentarán los procedimientos más utilizados en la literatura así como el desarrollo de un nuevo algoritmo para el cálculo de diseños óptimos.

- Análisis del diseño obtenido:

Una vez calculado el diseño, la cuestión será estudiar si éste es el óptimo o bien, si hemos utilizado un procedimiento numérico, si la solución aproximada es lo suficientemente buena. Para este propósito utilizaremos el resultado más importante de la teoría de diseño óptimo de experimentos, *el teorema fundamental del diseño de experimentos*. Sin embargo, existen problemas que no reúnen las condiciones para aplicar este resultado y otros en los que, a pesar de poder aplicarse, no es posible comprobarlo. En estos casos, a partir de ciertos resultados derivados de éste teorema es posible establecer un límite inferior de la bondad del diseño llamado *cota de la eficiencia*. En este sentido, puede establecerse la bondad de diseño en función de la distancia a este valor de referencia. Una vez comprobado nuestro diseño, el último cometido será ajustarlo al experimento real para llevarlo a cabo en la práctica.

Teniendo en cuenta el esquema del proceso descrito, este primer capítulo se dedica a realizar una revisión de los conceptos y las herramientas teóricas más importantes para el cálculo de diseños óptimos. El siguiente capítulo estará dedicado al estudio de las técnicas algorítmicas más populares para su cálculo aproximado y se proporcionará un nuevo método, *el algoritmo combinado*. El resto de capítulos se centrarán en un tipo de experimentos, con características especiales: los problemas de mixturas. En el capítulo 3 se

establecerán los fundamentos de los experimentos con mezclas, en el capítulo 4 se proponen dos algoritmos para el cálculo de diseños óptimos para modelos de mezclas y en el capítulo 5 se proporcionan resultados teóricos y técnicas numéricas para la construcción de diseños de mezclas óptimo robustos cuando el modelo no está completamente especificado.

## 1.2. Teoría de diseño para modelos lineales

Comenzaremos estudiando el modelo más sencillo, el modelo lineal con observaciones incorreladas. Cuando hablamos de modelo lineal, nos estaremos refiriendo a que el modelo es lineal en los parámetros desconocidos  $\theta$ ,

$$y(x) = \eta(x, \theta) + \varepsilon(x) = \theta^t f(x) + \varepsilon(x), \quad (1.1)$$

siendo  $\varepsilon(x)$  el error aleatorio donde:

$$E[\varepsilon(x)] = 0 \quad \text{y} \quad \text{Var}[\varepsilon(x)] = \sigma^2(x).$$

De este modo, podemos escribir:

$$E[y(x)] = \theta^t f(x) = \sum_{j=1}^m f_j(x) \theta_j \quad \text{y} \quad \text{Var}[y(x)] = \sigma^2(x).$$

La función  $\eta(x, \theta)$  es lineal en  $f^t(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))$ , es una función vectorial conocida y continua.  $\theta^t = (\theta_1, \dots, \theta_m)$ , es un vector de parámetros desconocidos que pertenece a un conjunto  $\Theta$ . Por tanto, el modelo de regresión lineal con observaciones incorreladas, viene determinado por una terna,  $(\chi, \Theta, \sigma^2)$ , donde  $\chi$  es un espacio métrico compacto,  $\Theta$  es un espacio paramétrico y  $\sigma^2$  la varianza.

Por otro lado, si la varianza de la respuesta es constante, el modelo se llamará *homocedástico*. De lo contrario, diremos que el modelo es

*heterocedástico*. Podemos también suponer que ésta depende de las variables observables a través de una función conocida  $\lambda(x)$ , que ha de ser acotada, continua, real-valuada, positiva y definida en  $\chi$ . Se denominará *función de eficiencia* y reflejará la estructura de heterocedasticidad del modelo. En este caso, escribimos la varianza de la respuesta:

$$\text{Var}[y(x)] = \sigma^2(x) = \frac{\sigma^2}{\lambda(x)}.$$

Al ser  $\lambda(x)$  conocida, podemos reducir el correspondiente modelo de regresión mediante las transformaciones:

$$y\sqrt{\lambda(x)} \longrightarrow y \quad , \quad f(x)\sqrt{\lambda(x)} \longrightarrow f(x)$$

a un modelo homocedástico donde  $\text{Var}[y(x)] = \sigma^2$ . Véase Rodríguez Torreblanca y Ortiz Rodríguez, [Rod99].

Dado que se trata de una transformación sencilla, en la teoría del diseño óptimo de experimentos podemos suponer  $\lambda(x) = 1$  sin perder generalidad. De aquí en adelante los modelos se considerarán homocedásticos.

Supongamos que el número de observaciones que podemos realizar es  $N$ . Usando notación vectorial:

$$Y_N = (y(x_1), \dots, y(x_N))^t \text{ es el vector de observaciones}$$

con

$$X_N = (x_{ij}), \quad x_{ij} = f_j(x_i), \quad i = 1, \dots, N, \quad j = 1, \dots, m$$

es decir,

$$X_N = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & \dots & f_m(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ f_1(x_N) & \dots & f_m(x_N) \end{pmatrix}.$$

Utilizando esta notación podemos escribir matricialmente el modelo (1.1) como

$$E[Y_N] = X_N\theta,$$

y la hipótesis de incorrelación entre las observaciones:

$$\Sigma_N = Cov(Y | \theta, \sigma^2, X) = \sigma^2 I_N$$

siendo  $I_N$  la matriz identidad de orden  $N$ .

Los parámetros del modelo,  $\theta$ , pueden estimarse mediante mínimos cuadrados, de lo que resulta

$$\hat{\theta} = (X_N^t X_N)^{-1} X_N^t Y_N.$$

Este estimador coincide con el mejor estimador lineal centrado (*Best Linear Unbiased Estimator*, BLUE) y está definido para minimizar la suma generalizada de los cuadrados de los errores. El estimador de mínimos cuadrados es ampliamente usado debido a que su estructura es independiente de la matriz de covarianzas  $\Sigma_N$ . La matriz de covarianzas del estimador  $\hat{\theta}$  es

$$Cov(\hat{\theta}) = (X_N^t X_N)^{-1} X_N^t \Sigma_N X_N ((X_N^t X_N)^{-1})^t = \sigma^2 (X_N^t X_N)^{-1}.$$

Para estimar el valor de la respuesta en un punto no observado  $x$  utilizaremos

$$\hat{y}_x = f^t(x) \hat{\theta}$$

Teniendo en cuenta la definición anterior y la de los parámetros estimados, podemos escribir la varianza de la respuesta estimada como

$$Var(\hat{y}_x) = \sigma^2 f^t(x) (X^t X)^{-1} f(x).$$

Obsérvese que se pretende elegir el diseño que proporcione la mejor estimación, en algún sentido, de los parámetros estimados por mínimos cuadrados, o bien, que dé una buena estimación de  $y_x$ . Por lo tanto, las fórmulas anteriores serán fundamentales para medir la bondad de los diseños calculados.

### 1.3. Diseños exactos y aproximados. Matriz de Información

Existen diferentes tipos de diseño sobre los que se desarrolla toda una teoría adaptada a su tipología.

**Definición 1.1.** *Se denomina diseño discreto o exacto de  $N$  observaciones a una sucesión de  $N$  puntos de  $\mathcal{X}$ ,  $\{x_1, \dots, x_N\}$ , donde podría haber repeticiones.*

Considerando diseños exactos, el problema de diseño consistirá en elegir  $N$  observaciones que minimicen un funcional apropiado de  $Cov(\hat{\theta})$ . Por cuestión de conveniencia, en lugar de considerar la matriz anterior, se considera la llamada *matriz de información*, que para diseños exactos se define

$$M(\xi_N) = \frac{1}{N} X_N^t X_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) f^t(x_i).$$

Dadas  $N$  observaciones, debemos decidir cuántas  $N_i$  debemos tomar en  $x_i$ , con  $\sum_{i=1}^k N_i = N$ , de modo que la matriz  $X^t X$  sea tan “grande” como sea posible en algún sentido. Obsérvese que si  $X_N^t X_N$  es no degenerada, el problema de minimizar cierta función de  $Cov(\hat{\theta})$  es equivalente, salvo constante, a maximizar la matriz de información.

La matriz de información será la suma de  $N$  matrices de rango 1. Cada una de ellas representa la información proveniente de una observación simple.

Dado que los  $N_i$  deben ser enteros, esto es un problema de programación lineal entera que, en general, es de difícil resolución. Parece conveniente hacer, en cierto modo, continuo el problema. La matriz  $X^t X$  puede escribirse del siguiente modo

$$X^t X = \sum_{i=1}^k N_i f(x_i) f^t(x_i).$$

La definición anterior, sugiere la idea de asociar al diseño una medida de probabilidad discreta, definida por  $\xi_N(x_i) = \frac{N_i}{N}$ ,  $x_i \in \chi$ . Este planteamiento nos lleva a definir una nueva clase de diseño:

**Definición 1.2.** *Cualquier medida de probabilidad,  $\xi$ , sobre  $\chi$  con soporte en un conjunto finito, es un diseño aproximado o asintótico.*

Es decir, si el diseño  $\xi$  pone peso  $\xi(x_i)$  en  $x_i$ ,  $i = 1, \dots, k$  y el número total de observaciones que se realizan es  $N$ , entonces, se tomarán aproximadamente  $N \cdot \xi(x_i)$  observaciones en  $x_i$ ,  $i = 1, \dots, k$ . Elijiendo un  $N$  suficientemente grande, es posible aproximar un diseño de estas características a uno exacto.

El diseño concentrado en los puntos  $x_1, \dots, x_k$ , con pesos respectivos  $\omega_1, \dots, \omega_k$  ( $0 \leq \omega_i \leq 1$  para  $i = 1, \dots, k$ ;  $\sum_{i=1}^k \omega_i = 1$ ) se denotará por

$$\xi = \left\{ \begin{array}{ccc} x_1 & \dots & x_k \\ \omega_1 & \dots & \omega_k \end{array} \right\},$$

siendo  $\xi(x_i) = \omega_i$ . Por tanto, la *matriz de información para diseños aproximados* se define como

$$M(\xi) = \sum_{x \in \chi} \sigma^{-2} f(x) f^t(x) \xi(x).$$

La noción de diseño aproximado puede generalizarse definiendo una nueva clase de diseño:

**Definición 1.3.** *Cualquier medida de probabilidad,  $\xi$ , sobre  $\chi$  cuyo soporte no sea necesariamente un conjunto finito, es un diseño continuo (Atkinson [Atk92]).*

La extensión de la definición de *matriz de información para diseños continuos* es como sigue

$$M(\xi) = \int_{\chi} \sigma^{-2} f(x) f^t(x) \xi(dx).$$

Haciendo uso del Teorema de Caratheodory (ver Observación 1.2) veremos que cualquier diseño óptimo continuo lo podemos “reemplazar” por una distribución de probabilidad discreta. Por este motivo, podemos suponer que el soporte del diseño óptimo es discreto.

Los diseños aproximados o los continuos no tienen interpretación directa en términos de experimentos, deben entenderse como mecanismos para aproximar un diseño exacto ya que éstos poseen propiedades deseables para poder aplicar las herramientas teóricas que pueden emplearse en la búsqueda del óptimo.

**Definición 1.4.** *Llamaremos soporte de un diseño  $\xi$  al conjunto de puntos en los que el diseño pone pesos distinto de cero:*

$$S_\xi = \{x \in \chi : \xi(x) > 0\}.$$

**Observación 1.1.** *Asumiendo normalidad en las observaciones, la matriz de información coincide con la matriz de información de Fisher:*

$$M(\xi) = -E_\xi \left[ \frac{\partial^2 \log l(y, \gamma, \sigma^2)}{\partial \gamma_i \partial \gamma_j} \right] = E_\xi \left[ \frac{\partial \log l(y, \gamma, \sigma^2)}{\partial \gamma_i} \frac{\partial \log l(y, \gamma, \sigma^2)}{\partial \gamma_j} \right].$$

*Esta definición se podrá aplicar a modelos no lineales, con el inconveniente de que la matriz dependerá de los parámetros que se quieran estimar.*

El conjunto de todos los diseños se denotará por  $\Xi$ , mientras que el conjunto de todas las matrices de información será

$$\mathcal{M} = \{M(\xi) : \xi \in \Xi\}.$$

**Teorema 1.1. (Propiedades de la Matriz de Información)**

*Para cualquier diseño  $\xi \in \Xi$  se verifica:*

1.  $M(\xi)$  es simétrica y semidefinida positiva.

2.  $M(\xi)$  es singular si el soporte de  $\xi$  contiene menos puntos que el número de parámetros,  $m$ .
3. El conjunto de todas las matrices de información  $\mathcal{M}$  es convexo.
4. Si  $f(x)$  y  $\lambda(x)$  son continuas en  $\chi$ , y  $\chi$  es compacto entonces  $\mathcal{M}$  es compacto.

**Teorema 1.2. (Teorema de Caratheodory.)** Cada elemento  $M$  de la envolvente convexa  $\mathcal{M}$  de cualquier subconjunto  $S$  de un espacio  $l$  dimensional lo podemos expresar como combinación lineal convexa de  $l + 1$  elementos de  $S$ :

$$M = \sum_{i=1}^{l+1} \alpha_i s_i, \quad \sum_{i=1}^{l+1} \alpha_i = 1, \quad \alpha_i \geq 0, \quad s_i \in S.$$

Si  $M$  es un punto de la frontera de  $\mathcal{M}$  entonces  $\alpha_{l+1} = 0$ .

Las propiedades de las matrices de información anteriormente mencionadas hacen que el teorema anterior sea aplicable al conjunto de estas matrices, obteniéndose uno de los resultados más importantes de la teoría de diseño óptimo de experimentos:

**Corolario 1.0.** Para cualquier diseño, su matriz de información siempre se puede representar por:

$$M(\xi) = \sum_{i=1}^k \lambda(x_i) f(x_i) f^t(x_i) \omega_i$$

donde  $k \leq \frac{m(m+1)}{2} + 1$ ,  $0 \leq \omega_i \leq 1$  y  $\sum_{i=1}^k \omega_i = 1$ .

**Observación 1.2.** Anteriormente referíamos que la matriz de información era la suma de submatrices correspondientes a diseños unipuntuales. El corolario previo nos da, por tanto, una cota superior del número de puntos de diseño. Luego para cualquier diseño,  $\tilde{\xi}$ , cuyo número de puntos en su soporte supere a  $\frac{m(m+1)}{2} + 1$  siempre se puede encontrar otro diseño  $\xi$  con un número de puntos en su

soporte menor o igual que  $\frac{m(m+1)}{2} + 1$  y tal que  $M(\xi) = M(\tilde{\xi})$ . De este modo, cualquier diseño óptimo continuo puede ser reemplazado por al menos una distribución de probabilidad discreta con soporte finito.

De aquí en adelante, tanto notación como resultados estarán enfocados para el caso de diseños aproximados.

## 1.4. Criterios de optimización

La finalidad del diseño óptimo de experimentos será encontrar el mejor de los diseños que permita una estimación óptima de los parámetros del modelo o de la respuesta predicha. Sin embargo, necesitamos decidir en qué sentido buscamos tal optimalidad en relación a los intereses del estudio. Se trata, por tanto, de elegir el diseño que minimice cierta función de  $Cov(\hat{\theta}) \propto M^{-1}(\xi_N)$ .

**Definición 1.5.** *Un criterio de optimalidad es una función  $\Psi$  del conjunto  $\mathcal{M}$  en la recta real:*

$$\Psi : \mathcal{M} \longrightarrow \mathbb{R}$$

que expresa la cantidad de información proporcionada por  $M(\xi)$

**Definición 1.6.** *Diremos que  $\xi^* \in \Xi$  es un diseño  $\Psi$ -óptimo si verifica:*

$$\Psi[M(\xi^*)] = \min_{\xi \in \Xi} \Psi[M^{-1}(\xi)]$$

**Notación 1.1.** *En ocasiones escribiremos  $\Psi(\xi)$  en lugar de  $\Psi[M(\xi)]$  por simplicidad. Para evitar un conflicto de notación, vamos a definir dos funciones  $\Psi[M(\xi)] \stackrel{Not}{\equiv} \Phi(\xi)$ , ambas referidas a la función criterio. El uso de una u otra función dependerá del argumento requerido por cuestiones notacionales, pero su significado es invariante.*

### 1.4.1. Funciones criterio

**Definición 1.7.** Diremos que una función:

$$\Psi : \mathcal{M} \longrightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$$

acotada inferiormente es una **función criterio** si se cumple que:

$$M(\xi) \geq M(\eta) \Rightarrow \Psi[M(\xi)] \leq \Psi[M(\eta)].$$

La relación entre las matrices se refiere al orden de Loewner, es decir,  $A \geq B \Leftrightarrow B - A$  es semidefinida positiva.

**Notación 1.2.** Llamaremos  $\mathcal{M}^+ = \{M \in \mathcal{M} : \det M > 0\}$ .  $\mathcal{L}(\mathcal{M})$  es el subespacio vectorial de las matrices simétricas de orden  $m$  generado por el conjunto  $\mathcal{M}$ . Si  $\Psi$  es una función criterio definimos los conjuntos:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_\Psi &= \{M \in \mathcal{M} : \Psi(M) < \infty\} \\ \Xi^* &= \{\xi \in \Xi : \xi \text{ es } \Psi\text{-óptimo}\} \end{aligned}$$

#### Propiedades

Entre las propiedades deseables a verificar por las funciones criterio cabe destacar:

1. Convexidad de la función criterio  $\Psi$ . Para cualesquiera  $M_1, M_2 \in \mathcal{M}$  esto es

$$\Psi[\gamma M_1 + (1 - \gamma)M_2] \leq \gamma \Psi[M_1] + (1 - \gamma)\Psi[M_2], \quad 0 \leq \gamma \leq 1.$$

Esta propiedad es necesaria para que el criterio sea sensible a los métodos de optimización convexos y para que sea aplicable el Teorema de Equivalencia que estudiaremos más adelante.

**Observación 1.3.** Una condición suficiente para la convexidad de la función es que,

$$\left. \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \Psi[\gamma M_1 + (1 - \gamma)M_2] \right|_{\gamma=0} \geq 0$$

cuando la derivada exista.

## 2. Positivamente homogénea

$$\Psi[\delta M(\xi)] = \frac{1}{\delta} \Psi[M(\xi)], \quad \delta \geq 0$$

Esta propiedad nos permitirá trabajar con  $M^{-1}(\xi)$  en lugar de  $\frac{\sigma^2}{N} M^{-1}(\xi)$  que es la verdadera matriz de covarianzas de los estimadores de los parámetros del modelo. También permitirá dar una medida apropiada de la eficiencia de un diseño respecto de un criterio, concepto que se usará más adelante para comparar diseños.

Se exponen a continuación las definiciones y propiedades de los criterios más utilizados en la práctica. Supongamos que estamos interesados en todos los parámetros del modelo. Consideremos también que la matriz de información es no singular y definida positiva. Existe una clasificación de los diferentes criterios en dos grupos atendiendo a su finalidad: criterios basados en alcanzar la mejor estimación de los parámetros o criterios basados en obtener la mejor predicción de la respuesta.

**Criterios basados en los parámetros*****D*–optimización (Criterio del determinante)**

El criterio de *D*-optimización viene definido por la función criterio:

$$\Psi_D[M(\xi)] = \log[\det M(\xi)^{-1}] = -\log[\det M(\xi)], \quad \xi \in \Xi.$$

También suele considerarse este criterio modificado

$$\Psi_D[M(\xi)] = [\det M(\xi)]^{-\frac{1}{m}} \quad \xi \in \Xi.$$

De este modo se consigue la homogeneidad de esta función criterio, que permite el uso adecuado de la eficiencia del diseño como se verá más adelante. El uso del logaritmo permite dar una prueba más sencilla de la convexidad y simplifica el cálculo del gradiente.

*Algunas propiedades de  $\Psi_D$  son:*

- El valor de  $\Psi_D$  es finito si y sólo si  $M(\xi)$  es no singular.
- $\Psi_D$  es continua en  $\mathcal{M}$ .
- $\Psi_D$  es convexa en  $\mathcal{M}$  y estrictamente convexa en  $\mathcal{M}^+$ .
- En las matrices en que  $\Psi_D$  es finita, también es diferenciable, y su gradiente es:

$$\nabla[-\log[\det M(\xi)]] = -M^{-1}(\xi).$$

Además

$$\frac{\partial \Psi_D}{\partial \omega_i} = -f^t(x_i)M^{-1}(\xi)f(x_i).$$

Existe una interpretación estadística de gran utilidad del diseño  $D$ -óptimo. Asumiendo normalidad en los errores del modelo lineal (1.1), la región de confianza del vector de parámetros desconocidos  $\theta$  describe un elipsoide de la forma:

$$(\theta - \hat{\theta})M(\xi)(\theta - \hat{\theta}) \leq \lambda,$$

siendo  $\hat{\theta}$  el estimador mínimo cuadrático de  $\theta$ . Como el volumen del elipsoide es proporcional a  $[\det M^{-1}(\xi)]^{1/2}$ , este criterio consiste en minimizar el volumen del elipsoide de confianza de los parámetros del modelo.

#### **A-optimización (Criterio de la media de las varianzas)**

El criterio de A-optimización viene definido por la función criterio:

$$\Psi_A[M(\xi)] = \text{Tr } M^{-1}(\xi), \quad \xi \in \Xi.$$

Como  $\text{Cov}(\hat{\theta}) \propto M^{-1}(\xi)$ , entonces

$$\sum_{j=1}^m \text{Cov}(\hat{\theta}_j) \propto \text{Tr } M^{-1}(\xi),$$

de modo que este criterio minimiza el promedio de las varianzas de los estimadores de los parámetros, pero no tiene en cuenta las covarianzas entre ellos. Este criterio fue considerado por Elfving [Elf52] y Chernoff [Che53b].

*Algunas propiedades de  $\Psi_A$  son:*

- El valor de  $\Psi_A$  es finito si y sólo si  $M(\xi)$  es no singular.
- $\Psi_A$  es continua en  $\mathcal{M}$ .
- $\Psi_A$  es convexa en  $\mathcal{M}$  y estrictamente convexa en  $\mathcal{M}^+$ .
- En las matrices en que  $\Psi_A$  es finita, también es diferenciable, y su gradiente es:

$$\nabla[\text{Tr } M^{-1}(\xi)] = -M^{-2}.$$

Si  $\Psi_A$  es diferenciable

$$\frac{\partial \Psi_A}{\partial \omega_i} = -f^t(x_i)M^{-2}(\xi)f(x_i).$$

### ***E*–optimización (Criterio del autovalor más pequeño)**

El criterio de *E*-optimización viene definido por la función criterio:

$$\Psi_E[M(\xi)] = \frac{1}{\lambda_\xi} \quad \xi \in \Xi,$$

siendo  $\lambda_\xi$  el mínimo autovalor de  $M(\xi)$ .

*Algunas propiedades de  $\Psi_E$  son:*

- El valor de  $\Psi_E$  es finito si y sólo si  $M(\xi)$  es no singular.
- $\Psi_E$  es continua en  $\mathcal{M}$ .
- $\Psi_E$  es convexa en  $\mathcal{M}$  y estrictamente convexa en  $\mathcal{M}^+$ .

Considerando de nuevo el elipsoide de confianza de  $\theta$ , como las raíces de los autovalores son proporcionales a los ejes de dicho elipsoide, el criterio  $E$ -óptimo minimizará el mayor de sus ejes.

**Observación 1.4.** Podemos considerar los criterios anteriores como casos especiales de un criterio general llamado  $\Psi_p$ -optimización que se define como:

$$\Psi_p[M(\xi)] = \left[ \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left( \frac{1}{\lambda_i} \right)^p \right]^{\frac{1}{p}}, \quad 0 \leq p < \infty$$

Así, para  $p \rightarrow 0$ , tenemos el  $D$ -óptimo, para  $p \rightarrow 1$  el  $A$ -óptimo y para  $p \rightarrow \infty$  el  $E$ -óptimo, siempre que  $\lim_{p \rightarrow \infty} \Psi_p(\xi)$  este definido.

### Criterios basados en la respuesta

Considerando el modelo lineal (1.1), asumiendo varianza constante y utilizando que  $\text{Var}(LZ) = L\text{Var}(Z)L^t$ , es posible escribir mediante cálculos sencillos la varianza de la respuesta predicha en  $x$ ,  $\widehat{\eta}(x, \theta) = \widehat{\theta}f(x)$ , como

$$\text{Var}(\widehat{y}(x)) \propto d(x, \xi) = f^t(x)M^{-1}(\xi)f(x).$$

La función  $d(x, \xi)$  se conoce como *función de dispersión*. Basándonos en esto, podemos definir criterios de optimización de modo que los diseños minimicen, en algún sentido, la varianza de la respuesta predicha.

### $G$ -optimización

Este criterio consiste en minimizar el mayor de los valores de la varianza en el espacio de diseño  $\chi$ . Se define como:

$$\Psi_G[M(\xi)] = \sup_{x \in \chi} d(x, \xi).$$

Kiefer y Wolfowitz [Kie59] prueban la equivalencia entre este criterio y el criterio de  $D$ -optimización. Este resultado corresponde

al conocido *teorema general de equivalencia*, que revisaremos en la siguiente sección.

Algunas propiedades de este criterio son:

- $\Psi_G$  es continua en  $\mathcal{M}$ .
- $\Psi_G$  es convexa en  $\mathcal{M}$  y estrictamente convexa en  $\mathcal{M}_+$ .

### ***I*–optimización**

Trata de minimizar el valor esperado de la varianza de la respuesta predicha sobre  $\chi$ , de modo que viene definido por:

$$\Psi_I[M(\xi)] = \text{Tr}[AM^{-1}(\xi)] ,$$

siendo  $A = \sum_{x \in \chi} f(x)f^t(x)$ .

Este criterio también es conocido como *V*-optimización ó *IV*- optimización.

En ocasiones, los experimentadores no están interesados en todos los parámetros sino sólo en algunos de ellos o combinaciones lineales de éstos. Para ello se define una matriz  $A$  de tamaño  $s \times m$  y rango  $s \leq m$ , donde  $s$  es el número de combinaciones lineales de los parámetros  $\theta_1, \dots, \theta_m$  en las que estamos interesados, es decir,  $A\theta$ . A partir de ella y utilizando las definiciones anteriores surgen los criterios de  $D_A$ –optimización,  $L_A$ –optimización y  $c$ –optimización entre muchos otros. Para más información sobre este tipo de criterios consultar [Mar06].

En la literatura existen multitud de criterios atendiendo a los diferentes objetivos de cada estudio. Los que hemos dado son una recopilación de los más populares y los que serán de mayor utilidad para el desarrollo de esta memoria.

## 1.5. Condiciones de optimización

En esta sección determinamos condiciones bajo las cuales un diseño  $\xi$  será óptimo. Una herramienta importante para este propósito será la derivada direccional. A continuación se enuncia el teorema de equivalencia.

### 1.5.1. Teorema de Equivalencia

Kiefer y Wolfowitz [Kie59] demostraron la equivalencia entre los criterios  $D$ - y  $G$ -óptimos cuando el modelo es homocedástico. Por tanto, se establece que, utilizando ambos criterios llegamos al mismo diseño óptimo.

**Teorema 1.3. (Teorema de Equivalencia.)** *Las siguientes afirmaciones son equivalentes:*

1.  $\xi^*$  maximiza  $\det M(\xi)$  entre todos los diseños en  $\chi$  ( $D$ -optimización)

$$\max_{\xi \in \Xi} \det M(\xi) = \det M(\xi^*).$$

2. El diseño  $\xi^*$  minimiza  $\sup_{x \in \chi} d(x, \xi)$  entre todos los diseños aproximados en  $\chi$  ( $G$ -optimización)

$$\min_{\xi \in \Xi} \sup_{x \in \chi} d(x, \xi) = \sup_{x \in \chi} d(x, \xi^*).$$

Además, la expresión anterior es igual a  $m$  (número de parámetros del modelo)

$$\sup_{x \in \chi} d(x, \xi^*) = m.$$

Demostración. Puede encontrarse en Kiefer y Wolfowitz [Kie59] y en Fedorov [Fed72a].

**Observación 1.5.** *El teorema establece la equivalencia entre  $D$ -optimización, que se utiliza para estimar de manera óptima los parámetros del modelo, y  $G$ -optimización, donde el interés se centra en predecir óptimamente la respuesta. Esta equivalencia se da para diseños continuos pero para diseños exactos puede que no se verifique.*

*Este teorema juega un papel fundamental en la construcción de diseños óptimos y en la realización de algoritmos para su construcción, puesto que pueden intercambiarse las propiedades de los diseños  $D$ - y  $G$ -óptimos.*

*El teorema proporciona una herramienta de gran utilidad para la verificación de la  $D$ -optimización ( $G$ -optimización) de un diseño. Siguiendo el punto 2 de este teorema, basta con ver que se cumple la condición  $\sup_{x \in \mathcal{X}} d(x, \xi^*) = m$ .*

*Del teorema se deduce también que en los puntos del soporte de un diseño  $D$ - ( $G$ -óptimo) la función de dispersión  $d(x, \xi^*)$  alcanza su máximo valor, es decir,  $m$ . La utilidad de esta observación está en que, en lugar de comprobar que  $d(x, \xi) \leq m \forall x \in \mathcal{X}$ , para saber si el diseño  $\xi$  es  $D$ -óptimo ( $G$ -óptimo), se podría empezar comprobando si  $d(x_i, \xi) = m$  en los puntos  $x_i$  del soporte de  $\xi$ . Puesto que la condición establecida es necesaria pero no suficiente, solamente serviría, en principio, para asegurar que el diseño no es  $D$ -óptimo si la condición no se verifica.*

### 1.5.2. Derivada direccional

Whittle [Whi73b] y Kiefer [Kie74] amplían el Teorema de equivalencia para funciones criterio más generales y a su vez, White [Whi73a] lo extiende para modelos no lineales. Se introducen una serie de conceptos para enunciar el Teorema de equivalencia dado por Whittle.

**Definición 1.8.** *Dada una función criterio  $\Psi : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$  convexa, definimos la derivada direccional de  $\Psi$  en  $M_1 = M(\xi)$  en la dirección de  $M_2 = M(\eta)$  como:*

$$\begin{aligned} F_{\Psi}[M(\xi), M(\eta)] &= \partial\Psi[M_1, M_2] = \\ &= \lim_{\beta \rightarrow 0^+} \frac{\Psi[(1 - \beta)M_1 + \beta M_2] - \Psi(M_1)}{\beta}. \end{aligned}$$

Es importante subrayar que la derivada direccional puede existir incluso si  $\Psi$  no es diferenciable. (Whittle [Whi73b]).

Whittle [Whi71] y Kiefer [Kie74] usan en su teoría de diseño una definición alternativa a la derivada direccional, **la derivada de Gâteaux**.

**Definición 1.9.** *Dada una función criterio  $\Psi : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$  convexa, definimos la derivada de Gâteaux de  $\Psi$  en  $M_1 = M(\xi)$  en la dirección de  $M_2 = M(\eta)$  como:*

$$G_{\Psi}[M(\xi), M(\eta)] = \lim_{\beta \rightarrow 0^+} \frac{\Psi[M_1 + \beta M_2] - \Psi[M_1]}{\beta}.$$

Podemos ver fácilmente la relación entre ambas definiciones:

$$F_{\Psi}[M(\xi), M(\eta)] = G_{\Psi}[M(\xi), M(\eta) - M(\xi)],$$

y

$$G_{\Psi}[M(\xi), M(\eta)] = F_{\Psi}[M(\xi), M(\xi) + M(\eta)].$$

La diferenciabilidad de  $\Psi$  implica que  $G_{\Psi}$  sea lineal en su segundo argumento [Roc72].

**Lema 1.1. (Propiedades de la derivada direccional.)**

*Sea  $\Psi$  convexa, entonces se verifica:*

1.  $F_{\Psi}[M, M] = 0, \quad \forall M \in \mathcal{M}^+$

$$2. F_{\Psi}[M_1, M_2] \leq \Psi[M_2] - \Psi[M_1], \quad \forall M_1 \in \mathcal{M}^+, M_2 \in \mathcal{M}$$

Demostración.

1. Es inmediata:

$$\begin{aligned} F_{\Psi}[M, M] &= \lim_{\beta \rightarrow 0^+} \frac{\Psi[(1 - \beta)M + \beta M] - \Psi[M]}{\beta} \\ &= \lim_{\beta \rightarrow 0^+} \frac{\Psi[M] - \Psi[M]}{\beta} = 0 \end{aligned}$$

2. Por ser  $\Psi$  convexa, se verifica que:

$$\begin{aligned} \frac{\Psi[(1 - \beta)M_1 + \beta M_2] - \Psi[M_1]}{\beta} &\leq \frac{(1 - \beta)\Psi[M_1] + \beta\Psi[M_2] - \Psi[M_1]}{\beta} \\ &= \Psi[M_2] - \Psi[M_1]. \end{aligned}$$

Tomando  $\lim_{\beta \rightarrow 0^+}$  en la desigualdad anterior, se tiene que

$$F_{\Psi}[M_1, M_2] \leq \Psi[M_2] - \Psi[M_1]$$

□

**Teorema 1.4.** *Sea  $\Psi$  una función convexa sobre  $\mathcal{M}$ . Se verifica que*

$$\xi^* \text{ es } \Psi\text{-óptimo si y sólo si } F_{\Psi}[M(\xi^*), M(\xi)] \geq 0 \quad \forall \xi \in \Xi$$

Demostración.

Si  $\Psi$  es mínimo en  $M(\xi^*)$ , entonces

$$\Psi[(1 - \beta)M(\xi^*) + \beta M(\xi)] - \Psi[M(\xi^*)] \geq 0$$

para todo  $\beta \in [0, 1]$  y todo  $\xi \in \Xi$ .

Como  $(1 - \beta)M(\xi^*) + \beta M(\xi) = M[(1 - \beta)\xi^* + \beta\xi]$ , por definición de la derivada direccional tenemos

$$F_{\Psi}[M_1, M_2] = \lim_{\beta \rightarrow 0^+} \frac{\Psi[(1 - \beta)M_1 + \beta M_2] - \Psi[M_1]}{\beta}.$$

Sustituyendo  $M_1$  por  $M(\xi^*)$  y  $M_2$  por  $M(\xi)$ , como el numerador es positivo, se verifica que:

$$F_{\Psi}[M(\xi^*), M(\xi)] = \partial\Psi[M(\xi^*), M(\xi)] \geq 0 \quad \forall \xi \in \Xi,$$

y queda probada la condición necesaria.

Para ver la suficiencia, supongamos que  $F_{\Psi}[M(\xi^*), M(\xi)] \geq 0 \quad \forall \xi \in \Xi$ . Usando el Lema (1.1), obtenemos que  $\Psi[M(\xi)] - \Psi[M(\xi^*)] \geq 0$  para todo  $\xi \in \Xi$ , es decir,  $\xi^*$  es óptimo.

□

**Corolario 1.1.** *Bajo las hipótesis del teorema anterior*

$$\inf_{\xi \in \Xi} F_{\Psi}[M(\xi^*), M(\xi)] = 0.$$

Demostración.

Debido a que  $F_{\Psi}[M(\xi^*), M(\xi)] \geq 0$  para todo  $\xi \in \Xi$ , eligiendo  $\xi = \xi^*$  se concluye pues  $F_{\Psi}[M(\xi^*), M(\xi^*)] = 0$  (Lema 1.1).

□

**Teorema 1.5. (Teorema general de equivalencia.)** *Sea  $\Psi$  una función criterio convexa y  $\xi^*$  un diseño tal que:*

$$F_{\Psi}[M(\xi^*), M(\xi)] > -\infty, \quad \xi \in \Xi.$$

*Entonces son equivalentes:*

1.  $\xi^* \in \Xi$  minimiza  $\Psi$  sobre  $\Xi$ , es decir,  $\xi^*$  es  $\Psi$ -óptimo.
2.  $\xi^*$  maximiza el  $\inf_{\eta \in \Xi} F_\Psi[M(\xi), M(\eta)]$ .
3.  $\inf_{\eta \in \Xi} F_\Psi[M(\xi^*), M(\eta)] = 0$ .

Demostración. Puede encontrarse en Pázman [Paz86].

En ocasiones escribiremos  $\Phi(\xi)$  en lugar de  $\Psi[M(\xi)]$  y  $F_\Phi(\xi, \eta)$  en vez de  $F_\Psi[M(\xi), M(\eta)]$  cuando no exista riesgo de confusión.

Como se ha mencionado anteriormente, no es necesario que la función criterio sea diferenciable para que las derivadas direccionales estén bien definidas. Sin embargo, si  $\Phi$  verifica tal propiedad, las condiciones de optimización son significativamente más sencillas de probar.

**Definición 1.10.** La derivada direccional  $F_\Phi$  se dice lineal si se verifica que  $\forall \xi \in \Xi$  y  $\forall \eta \in \Xi$

$$F_\Phi(\xi, \eta) = \int_{\mathcal{X}} F_\Phi(\xi, \xi_x) \eta(dx),$$

donde  $\xi_x$  es el diseño unipuntual con peso 1 en  $x \in \mathcal{X}$ .

**Lema 1.2.** Sea  $\Psi$  convexa y sea  $M \in \mathcal{M}^+$ . Una condición necesaria y suficiente para que  $\Psi$  sea diferenciable en  $M$  es que la derivada direccional  $F_\Psi[M, \cdot]$  sea lineal.

Demostración. Una demostración de este lema puede encontrarse en Pázman [Paz86].

**Lema 1.3.** Si  $F_\Phi$  es lineal se verifica que

$$\inf_{\eta \in \Xi} F_\Phi(\xi, \eta) = \inf_{x \in \mathcal{X}} F_\Phi(\xi, \xi_x).$$

Demostración.

Como  $\{\xi_x : x \in \chi\} \subset \Xi$  entonces

$$\inf_{\eta \in \Xi} F_{\Phi}(\xi, \eta) \leq \inf_{x \in \chi} F_{\Phi}(\xi, \xi_x).$$

Por otro lado, debido a que  $\eta$  es una medida de probabilidad, se tiene que

$$\begin{aligned} \inf_{\eta \in \Xi} F_{\Phi}(\xi, \eta) &= \inf_{\eta \in \Xi} \int_{\chi} F_{\Phi}(\xi, \xi_x) \eta(dx) \geq \inf_{\eta \in \Xi} \int_{\chi} \inf_{x \in \chi} F_{\Phi}(\xi, \xi_x) \eta(dx) \\ &= \inf_{x \in \chi} F_{\Phi}(\xi, \xi_x). \end{aligned}$$

□

**Lema 1.4.** Si  $F_{\Phi}$  es lineal, entonces

$$S_{\xi^*} \subseteq \{x \in \chi : F_{\Phi}(\xi^*, \xi_x) = 0\}.$$

Demostración.

Como  $\xi^*$  es óptimo, la derivada direccional en  $\xi^*$  para cualquier dirección es no negativa, en particular,

$$F_{\Phi}(\xi^*, \xi_x) \geq 0 \quad \forall x \in \chi.$$

Por la linealidad de  $F_{\Phi}$  se tiene que

$$0 = F_{\Phi}(\xi^*, \xi^*) = \int_{\chi} F_{\Phi}(\xi^*, \xi_x) \xi^*(dx).$$

Por tanto, como  $\xi^*$  es una medida de probabilidad, la integral anterior es cero si

$$S_{\xi^*} \subseteq \{x \in \chi : F_{\Phi}(\xi^*, \xi_x) = 0\}.$$

□

**Observación 1.6.**

1. Si  $\Phi((1-\beta)\xi + \beta\eta)$  es diferenciable podemos escribir mediante la regla de L'Hôpital

$$F_{\Phi}(\xi, \eta) = \lim_{\beta \rightarrow 0^+} \frac{d}{d\beta} \Phi((1-\beta)\xi + \beta\eta).$$

2. Si existe el gradiente de  $\Psi$  entonces por su definición, podemos escribir:

$$\begin{aligned} F_{\Psi}[M_1, M_2] &= \text{Tr}[(\nabla \Psi[M_1])(M_2 - M_1)] \\ &= \langle \nabla \Psi[M_1], M_2 - M_1 \rangle. \end{aligned}$$

3. Si  $\Phi$  es diferenciable en  $\xi$ , llamando  $\omega$  al vector de pesos del diseño  $\xi$ ,  $\mu$  al vector de pesos de un diseño  $\eta$  y  $e_j = (0, \dots, 1, \dots, 0)$ , la derivada de Gâteaux es precisamente

$$G_{\Phi}(\omega, e_j) = \frac{\partial \Phi}{\partial \omega_j}.$$

Denotando por  $d_i = \frac{\partial \Phi}{\partial \omega_i}$ , por la relación entre la derivada direccional y la derivada de Gâteaux, tenemos que

$$\begin{aligned} F_{\Phi}(\xi, \eta) &= F_{\Phi}(\omega, \mu) = G_{\Phi}(\omega, \mu - \omega) = (\mu - \omega)^t \frac{\partial \Phi}{\partial \omega} \\ &= \sum_{i=1}^k (\mu_i - \omega_i) \frac{\partial \Phi}{\partial \omega_i}. \end{aligned}$$

Por tanto, si  $\mu = e_j$  se tiene que

$$F_{\Phi}(\omega, e_j) = d_j - \sum_{i=1}^k \omega_i d_i.$$

**Teorema 1.6.** Si  $\Psi$  es convexa en  $\mathcal{M}$  y diferenciable en  $M(\xi^*)$ , entonces

$$\xi^* \text{ es } \Psi - \text{óptimo si y sólo si } F_{\Psi}[M(\xi^*), f(x)f^t(x)] \geq 0$$

para todo  $x \in \chi$ .

Demostración.

La necesidad es inmediata haciendo uso del teorema 1.4.

Veamos ahora que se verifica la condición de suficiencia.

Dada una matriz  $M(\xi)$  sabemos que podemos expresarla de la forma:

$$M(\xi) = \sum_{i=1}^k \xi(x_i) f(x_i) f^t(x_i),$$

donde  $\sum \xi(x_i) = 1$  y  $\xi(x_i) > 0$ . Entonces, si  $\Psi$  es diferenciable en  $M(\xi^*)$  (Lema 1.1.):

$$F_{\Psi}[M(\xi^*), M(\xi)] = \sum_i \xi(x_i) F_{\Psi}[M(\xi^*), f(x_i) f^t(x_i)].$$

Así,  $F_{\Psi}[M(\xi^*), f(x) f^t(x)] \geq 0$  para todo  $x \in \chi$  y esto implica que  $F_{\Psi}[M(\xi^*), M(\xi)] \geq 0$  para todo  $\xi \in \Xi$ . Aplicando el Teorema anterior obtenemos el resultado.

□

**Teorema 1.7.** *Si  $\Psi$  es diferenciable en un entorno de  $M(\xi^*)$ , entonces son equivalentes:*

1.  $\xi^*$  es  $\Psi$ -óptimo
2.  $f^t(x) \nabla \Psi[M(\xi^*)] f(x) \geq \text{Tr}[M(\xi^*) \nabla \Psi[M(\xi^*)]]$ ,  $x \in \chi$
3.  $\inf_{x \in \chi} f^t(x) \nabla \Psi[M(\xi^*)] f(x) = \sum_{x \in \chi} f^t(x) \nabla \Psi[M(\xi^*)] f(x) \xi^*(x)$

Demostración. Puede encontrarse en Pázman [Paz86].

**Observación 1.7.** *De acuerdo con el segundo punto de la observación 1.6.*

$$F_{\Psi}[M(\xi^*), f(x)f^t(x)] = f^t(x)\nabla\Psi[M(\xi^*)]f(x) - \text{Tr}[M(\xi^*)\nabla\Psi[M(\xi^*)]].$$

El teorema anterior proporciona un par de condiciones para la búsqueda de los puntos de soporte del diseño óptimo

**Corolario 1.2.** *Bajo las condiciones del teorema anterior, un diseño  $\xi^*$  es  $\Psi$ -óptimo si y sólo si*

1.  $F_{\Psi}[M(\xi^*), f(x_j)f^t(x_j)] = 0$  si  $\xi^*(x_j) > 0$
2.  $F_{\Psi}[M(\xi^*), f(x_j)f^t(x_j)] \geq 0$  si  $\xi^*(x_j) = 0$ .

## 1.6. Modelos no lineales

Como indicábamos en la introducción del capítulo, la teoría de diseños óptimos se desarrolla inicialmente para modelos lineales. Sin embargo, en la práctica es frecuente encontrar experimentos donde la respuesta se explica a partir de modelos no lineales.

En estos casos, la matriz de información depende del valor de los parámetros  $\theta$  y, en consecuencia, los diseños óptimos también dependerán de estos valores. En este sentido, se dice que los diseños alcanzados son **localmente óptimos**. La estrategia a seguir será utilizar la fórmula de Taylor para transformar el modelo no lineal en uno lineal. Para ello, es necesario dar una estimación inicial de los parámetros,  $\theta^{(0)} = (\theta_1^{(0)}, \dots, \theta_m^{(0)})^t$  (véase [Che53b]). El modelo queda linealizado del siguiente modo:

$$\begin{aligned}
E[y(x)] = \eta(x, \theta) &= \eta(x, \theta^{(0)}) + \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta_i} \right)_{\theta^{(0)}} (\theta_i - \theta_i^{(0)}) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m \left( \frac{\partial^2 \eta(x, \theta)}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \right)_{\theta^{(s)}} (\theta_i - \theta_i^{(0)}) (\theta_j - \theta_j^{(0)}),
\end{aligned}$$

donde  $\theta_i^{(s)}$  está comprendido entre  $\theta_i^{(0)}$  y  $\theta_i$ ,  $i = 1, \dots, m$ . Escribiendo:

$$\tilde{f}_i(x) = \left( \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta_i} \right)_{\theta^{(0)}}, \quad i = 1, \dots, m,$$

linealizamos el modelo, y se calcula el diseño óptimo para el modelo linealizado.

Tras realizar la transformación es necesario evaluar el grado de no linealidad del modelo y el efecto de la aproximación lineal. Bates y Watts [Bat80b] proponen medidas relativas de la curvatura intrínseca de la superficie respuesta,  $\Gamma^\eta$ , y de la curvatura del efecto de los parámetros,  $\Gamma^\theta$ . La obtención de valores relativamente pequeños para los máximos de ambas medidas indican que la aproximación del plano tangente es razonable [Bat80a].

Para evitar la dependencia del valor de los parámetros en el diseño óptimo tenemos varias posibilidades:

1. Dar valores nominales a los parámetros en situaciones donde hay información disponible a priori o la dependencia de  $M$  sobre  $\theta$  es débil. Ésta resulta ser una aproximación viable y se adopta rutinariamente (ver p.e. [Li08])
2. Utilizar la teoría bayesiana que consiste en dar una distribución a priori a los parámetros desconocidos. Un diseño óptimo bayesiano es aquel que minimiza la esperanza de una función pérdida que depende de todas las cantidades desconocidas en el experimento, esto es, respuestas y parámetros del modelo.

3. Emplear diseños secuenciales, en los que en cada paso se estimarán los parámetros para el diseño que acaba de calcularse hasta que se establezca el proceso.

# Capítulo 2

## Algoritmos

*Los **objetivos** de este capítulo son: En primer lugar estudiar los fundamentos de los algoritmos estándar para el cálculo de los diseños óptimos y analizar sus deficiencias. En segundo lugar, proponer un algoritmo para calcular diseños óptimos con capacidad de resolución cuando los métodos existentes exceden los límites computacionales o sus tiempos de cálculo son elevados.*

*Las principales **contribuciones** son: En la sección 2.4 se presenta un nuevo algoritmo para el cálculo de diseños aproximados, el algoritmo combinado, que mejora la velocidad de convergencia de los algoritmos existentes. Éste se basa en ajustar convenientemente las estrategias seguidas por los métodos clásicos. En el apartado 2.4.2 se ha obtenido la demostración de la convergencia para el criterio de  $D$ -optimización y en el apartado 2.4.3 se proporciona el pseudocódigo del algoritmo para este criterio. Los exitosos resultados obtenidos a partir de esta nueva técnica para el criterio de  $D$ -optimización se ilustran en el apartado 2.4.4 a través de varios ejemplos.*

## 2.1. Introducción

La búsqueda de soluciones analíticas para el problema de construcción de diseños  $\Phi$ -óptimos resulta ser una tarea ardua y en la mayoría de los problemas reales no es posible calcular analíticamente tales diseños bajo un determinado criterio. Las herramientas analíticas que disponemos, concretamente los teoremas de equivalencia introducidos por Kiefer y Wolfowitz [Kie59] y sus extensiones, sólo pueden aplicarse en casos muy simples o bien se requiere suponer ciertas consideraciones difíciles de probar, por lo que resultan ser medios insuficientes.

Los principales problemas surgidos se deben a la intratabilidad analítica de los funcionales o a complicaciones en la región de diseño. Es por ello que se hace necesario el uso de métodos numéricos para la obtención de diseños aproximados.

Existen numerosas técnicas computacionales tradicionales ligadas a la teoría general de optimización: método de la búsqueda aleatoria, todas las variantes de los métodos de gradiente, métodos de descenso, etc. Sin embargo, éstos no resultan ser los mejores para encontrar diseños aproximados [Yu11] puesto que son muy lentos y la convergencia no está garantizada. Es por ello que se han desarrollado algoritmos especializados para resolver problemas de diseño óptimo de experimentos.

La introducción de estos algoritmos se deben a Wynn [Wyn70a] y [Wyn72] y Fedorov [Fed72a], y desde entonces, han sido ampliados para criterios de optimalidad más generales (Fedorov y Maljutov [Fed72b], Whittle [Whi73b], Gribik y Kortanek [Gri77] y Atwood [Atw73], [Atw76] y [Atw80]). Esto motivó el desarrollo de los teoremas generales de equivalencia [Kie74]. Otra corriente de algoritmos para el mismo fin fueron desarrollados, primero para el criterio de D-optimización (Titterington [Tit76], Tsay [Tsa76] y Silvey et al. [Sil78]), y más tarde extendidos para otros criterios (p.e. Torsney [Tor83]). En las próximas secciones se estudiarán en profundidad para el caso de interés: D-optimización.

En cuanto al procedimiento general seguido por estos métodos iterativos, puede resumirse en:

- (i) Se elige un diseño inicial. En principio puede ser cualquier diseño arbitrario,  $\xi^{(0)}$ , tal que la función criterio para este diseño verifique que  $\Psi M(\xi^{(0)}) \neq 0$ .
- (ii) Una sucesión de diseños  $\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \dots$  es obtenida computacionalmente de forma iterativa donde  $\xi^{(n+1)}$  se calcula perturbando ligeramente el diseño anterior  $\xi^{(n)}$  y requiriendo que  $\Psi M(\xi^{(n+1)}) \neq 0$ .
- (iii) El proceso de generar los diseños anteriores terminará en el  $n$ -ésimo paso tras comprobar que el diseño  $\xi^{(n)}$  obtenido es lo suficientemente cercano al óptimo de acuerdo con una regla de parada.

Un punto fundamental en la construcción de estas técnicas algorítmicas es el desarrollo de herramientas que nos permitan conocer cuándo estamos lo “suficientemente” cerca del óptimo. Un indicador de esta distancia es la *eficiencia del diseño*. Aunque esta cantidad no puede calcularse cuando el diseño óptimo es desconocido, estudiaremos a continuación que es posible obtener cotas inferiores de ella para confeccionar una regla de parada.

**Definición 2.1.** *Se define la eficiencia de un diseño  $\xi$  respecto de una función criterio  $\Phi$  homogénea como*

$$Ef_{\Phi}(\xi) = \frac{\min_{\eta \in \Xi} \Psi[M^{-1}(\eta)]}{\Psi[M(\xi)]} = \frac{\Phi(\xi^*)}{\Phi(\xi)},$$

siendo  $\xi^*$  el diseño  $\Phi$ -óptimo.

**Observación 2.1.**

1.  $Ef_{\Phi}(\xi) \in [0, 1]$ . Cuanto más cerca esté del 1 mejor será la eficiencia. (A menudo la eficiencia se expresa en porcentajes).
2. Interpretación de la eficiencia. Supongamos que para  $\xi$  se ha tomado una muestra de tamaño  $N$ , es decir, se han realizado  $N$  experimentos, y que su eficiencia es  $\rho$ . ¿Qué tamaño de muestra se ha de tomar con  $\xi^*$  para obtener la misma precisión en las estimaciones? (Obviamente si  $\xi^*$  es el óptimo, se necesitarán menos observaciones).

$$\rho = \frac{N^* \Psi[M^*]}{N \Psi[M]} = \frac{N^*}{N} \cdot 1 \Rightarrow N^* = \rho \cdot N$$

Así por ejemplo, si la eficiencia de un diseño es del 50%, entonces bastará tomar la mitad de observaciones con el diseño óptimo para obtener la misma precisión que con el diseño original.

### Cota de la eficiencia.

Atendiendo a cada caso de estudio y criterio de optimización elegido, pueden establecerse multitud de cotas, adaptándose las necesidades del problema con objeto de ser lo más preciso posible. Una de las más utilizadas es la siguiente:

De acuerdo con el Lema 1.1

$$F_{\Psi}[M, N] \leq \Psi[N] - \Psi[M],$$

por tanto

$$\inf_N F_{\Psi}[M, N] \leq \Psi[M(\xi^*)] - \Psi[M],$$

y dividiendo por  $\Psi[M]$  resulta:

$$Ef_{\Phi}(\xi) \geq 1 + \frac{\inf_N F_{\Psi}[M, N]}{\Psi[M]}.$$

Además, si  $\Phi$  es diferenciable, por el Lema 1.3. se tiene que:

$$\begin{aligned} Ef_{\Phi}(\xi) &\geq 1 + \frac{\inf_N F_{\Psi}[M, N]}{\Psi[M]} \\ &= 1 + \frac{\inf_{x \in \mathcal{X}} F_{\Psi}[M(\xi), f(x)f^t(x)]}{\Psi[M]}. \end{aligned}$$

Como en este capítulo haremos especial hincapié en el criterio de  $D$ -optimización, vamos a calcular cuál es el valor de la cota anterior explícitamente, concretamente considerando su versión homogénea:

Considerando la función criterio  $\Psi_D[M(\xi)] = [\det M(\xi)]^{-1/m}$ , resulta:

$$\nabla(\log \Psi_D[M(\xi)]) = \frac{1}{m} \nabla(-\log[\det M(\xi)]) = -\frac{1}{m} M^{-1}(\xi).$$

Por otra parte, como

$$\nabla(\log \Psi_D[M(\xi)]) = \frac{\nabla \Psi_D[M(\xi)]}{\Psi_D[M(\xi)]},$$

de ambas igualdades se deduce que:

$$\nabla \Psi_D[M(\xi)] = \frac{-1}{m \det[M(\xi)]^{1/m}} M^{-1}(\xi).$$

Teniendo en cuenta lo anterior,

$$\begin{aligned} F_{\Psi_D}[M(\xi), f(x)f^t(x)] &= \text{Tr} [(\nabla \Psi_D[M(\xi)])(f(x)f^t(x) - M(\xi))] \\ &= \frac{1}{m[\det M(\xi)]^{1/m}} \left\{ m - f^t(x)M^{-1}(\xi)f(x) \right\} \\ &= [\det M(\xi)]^{-1/m} \left\{ 1 - \frac{f^t(x)M^{-1}(\xi)f(x)}{m} \right\}. \end{aligned}$$

De este modo, teniendo en cuenta que  $\Phi_D$  es diferenciable y que

$$Ef_{\Phi}(\xi) \geq 1 + \frac{\inf_{x \in \mathcal{X}} F_{\Psi}[M(\xi), f(x)f^t(x)]}{\Psi[M]},$$

resulta que para  $D$ -optimización la cota para la eficiencia puede escribirse como

$$\begin{aligned} Ef_{\Phi_D}(\xi) &\geq 1 + \frac{\det[M(\xi)]^{-1/m} \left\{ 1 - \frac{f^t(x)M^{-1}(\xi)f(x)}{m} \right\}}{[\det M(\xi)]^{-1/m}} \\ &= 2 - \frac{\max_x d(x, \xi)}{m} \end{aligned}$$

Esta cota de la eficiencia se conoce como **cota de Kiefer**.

Para el criterio de  $D$ -optimización, existe otra cota importante, propuesta por Atwood [Atw69], que se define como sigue:

$$Ef_{\Phi_D}(\xi) \geq \frac{m}{\max_x d(x, \xi)}$$

La cota anterior verifica lo siguiente [Mar06]:

**Proposición 2.1.** *La cota de la eficiencia proporcionada por Atwood [Atw69] mejora los resultados obtenidos por Kiefer [Kie60a].*

Demostración.

$$2 - \frac{\max_x d(x, \xi)}{m} \leq \frac{m}{\max_x d(x, \xi)},$$

es decir,

$$2m \max_x d(x, \xi) - (\max_x d(x, \xi))^2 \leq m^2 \Leftrightarrow 0 \leq (m - \max_x d(x, \xi))^2.$$

□

A modo de recapitulación, y dado que será de gran utilidad para lo que resta de capítulo, se utilizarán las siguientes cotas de la eficiencia para el criterio de  $D$ -optimización:

Cota de Atwood

$$Ef_{\Phi_D}(\xi) \geq \frac{m}{\max_x d(x, \xi)}. \quad (2.1)$$

Cota de Kiefer

$$Ef_{\Phi_D}(\xi) \geq 2 - \frac{\max_x d(x, \xi)}{m}. \quad (2.2)$$

A continuación se estudiarán dos de los algoritmos más utilizados en diseño óptimo de experimentos para el cálculo aproximado de diseños  $D$ -óptimos.

**Observación 2.2.** *En lo que resta de capítulo se considerará abusando de notación:*

$$\Psi_D[M(\xi)] = \det M(\xi) \text{ o bien } \Psi_D[M(\xi)] = \log \det M(\xi).$$

*Obsérvese que no hay pérdida de generalidad ya que el problema de  $\min_{\xi \in \Xi} \Psi[M^{-1}(\xi)]$  es equivalente a  $\max_{\xi \in \Xi} \Psi[M(\xi)]$ , siendo ahora la función criterio  $\Psi$  no decreciente en el sentido de Loewner y cóncava. Recuérdese también que el logaritmo puede añadirse a conveniencia para simplificar los cálculos sin modificarse el resultado final. Las propiedades anteriores pueden definirse de forma análoga.*

## 2.2. Algoritmo de Wynn-Fedorov

La idea propuesta por Wynn [Wyn70a] y Fedorov [Fed72a] para la construcción de medidas de diseño  $\Psi$ -óptimas es la siguiente: supongamos que tenemos una medida de diseño  $\xi^{(n)}$  con matriz de información  $M(\xi^{(n)})$  y que  $\Psi$  es diferenciable en  $M(\xi^{(n)})$ . Determinamos

el punto  $x_{n+1}$ , que es aquél que maximiza  $F_\Psi[M(\xi^{(n)}), f(x)f^t(x)]$  sobre  $\chi$ . Si  $\xi^{(n)}$  no es  $\Psi$ -óptimo, entonces por el Teorema de equivalencia este valor máximo es menor que cero. Así, podemos aumentar  $\Psi$  moviéndonos desde  $M(\xi^{(n)})$  en la dirección de  $f(x_{n+1})f^t(x_{n+1})$ . Esto lo hacemos poniendo más peso en  $x_{n+1}$  que el que pone  $\xi^{(n)}$ . El nuevo diseño se obtiene de acuerdo a la regla:

$$\xi^{(n+1)} = (1 - \alpha_{n+1})\xi^{(n)} + \alpha_{n+1}\xi_{x_{n+1}},$$

siendo  $\xi_{x_{n+1}}$  la medida con probabilidad 1 en  $x_{n+1}$ .

Obsérvese que la matriz de información de  $\xi^{(n+1)}$  viene dada por:

$$M(\xi^{(n+1)}) = (1 - \alpha_{n+1})M(\xi^{(n)}) + \alpha_{n+1}f(x_{n+1})f^t(x_{n+1}).$$

Ahora debemos elegir de manera adecuada la longitud del paso  $\alpha_{n+1}$ , pues no todas las elecciones aseguran la convergencia y menos aún que  $\Psi[M(\xi^{(n+1)})] > \Psi[M(\xi^{(n)})]$ . Tomando  $\alpha_{n+1}$  de manera “adecuada” podemos asegurar esta desigualdad, ya que

$$F_\Psi[M(\xi^{(n)}), f(x_{n+1})f^t(x_{n+1})] > \Psi[f(x_{n+1})f^t(x_{n+1})] - \Psi[M(\xi^{(n)})] > 0.$$

Una posibilidad es elegir  $\alpha_{n+1}$  de manera que proporcione un aumento máximo en  $\Psi$ . Suponiendo que  $\Psi$  es diferenciable, la longitud de paso se determina por  $F_\Psi[M(\xi^{(n+1)}), f(x_{n+1})f^t(x_{n+1})] = 0$ .

Otra forma de elegir longitudes de paso para este tipo de algoritmos iterativos es fijar una sucesión  $\{\alpha_{n+1}\}$  de longitudes de paso de antemano, sin preocuparnos si  $\Psi$  decrece en cada iteración. La teoría general asegura que si hacemos esto, para acercarnos al óptimo  $M(\xi^*)$ , debemos requerir que  $\alpha_{n+1} \rightarrow 0$  cuando  $n \rightarrow \infty$ . Además,  $\sum \alpha_{n+1}$  debe ser divergente.

Fedorov y Hackl [Fed97] proponen las siguientes tres elecciones. Cualquier sucesión  $\{\alpha_{n+1}\}$  tal que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_{n+1} = 0, \quad \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_{n+1} = \infty; \quad (2.3)$$

$$\alpha_{n+1} = \operatorname{arg\,mín}_{\alpha} \Phi((1 - \alpha)\xi^{(n)} + \alpha\xi(x_n)); \quad (2.4)$$

$$\alpha_{n+1} = \begin{cases} \alpha_n, & \text{si } \Phi((1 - \alpha_n)\xi^{(n)} + \alpha_n\xi(x_n)) < \Phi(\xi^{(n)}), \\ \gamma\alpha_n, & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (2.5)$$

La cantidad  $\gamma < 1$  debe ser elegida de manera apropiada.

La regla de elección (2.4) se denomina regla del descenso más pronunciado (*steepest descent*).

## Convergencia para $D$ -optimización

Es de gran interés para el resultado fundamental de este capítulo, el estudio de la convergencia del algoritmo de Wynn-Federov para el criterio de  $D$ -optimización. Esto se debe a que el nuevo algoritmo propuesto sigue, en parte, las estrategias utilizadas por éste. Estas ideas serán de gran importancia para probar la convergencia del nuevo método que proponemos más adelante.

Antes de entrar en la demostración propiamente dicha, será útil conocer las siguientes propiedades:

**Proposición 2.2.** *Consideremos la matriz de información de un diseño continuo arbitrario  $\xi$ , entonces:*

1. *La suma ponderada de las varianzas de la respuesta estimada,  $d(x, \xi)$ , en todos los puntos del diseño  $\xi$  es igual al número de parámetros desconocidos  $m$ :*

$$\sum_{i=1}^k p_i \lambda(x_i) d(x_i, \xi) = m \quad (2.6)$$

o, escrito en el caso más general,

$$\int_{\mathcal{X}} \lambda(x) d(x, \xi) d(\xi(x)) = m.$$

2. El mínimo valor de  $\max_x \lambda(x)d(x, \xi)$  no puede ser menor que  $m$ :

$$\max_x \lambda(x)d(x, \xi) \geq m \quad (2.7)$$

Demostración.

1. Sustituyendo la definición de la suma de las varianzas de la respuesta predicha, se tiene que

$$\begin{aligned} \int_x \lambda(x)d(x, \xi)d(\xi(x)) &= \int_x \lambda(x)f^t(x)M^{-1}(\xi)f(x)d(\xi(x)) \\ &= \text{Tr}[M^{-1}(\xi) \int_x \lambda(x)f^t(x)f(x)d(\xi(x))] \\ &= \text{Tr}[M^{-1}(\xi)M(\xi)] = \text{Tr} I_m = m. \end{aligned}$$

2. Se tiene que

$$\min_x \lambda(x)d(x, \xi) \leq \int_x \lambda(x)d(x, \xi)d(\xi(x)) = m \leq \max_x \lambda(x)d(x, \xi).$$

Luego  $\max_x \lambda(x)d(x, \xi) \geq m$ , con lo que queda demostrada la proposición.

□

A continuación procederemos a demostrar la convergencia del algoritmo. En primer lugar trataremos de dar una expresión del determinante de la matriz de información del diseño en función del obtenido en el paso anterior. El objetivo será estudiar cómo dar este paso de modo que, eligiendo el nuevo punto y su peso convenientemente, conseguiremos que la sucesión se comporte de forma monótona y esté acotada. Comprobando que se llega al diseño óptimo al generar la secuencia de determinantes, lograremos demostrar la convergencia.

**Teorema 2.1.** *Sea  $M(\xi^{(n)})$  la matriz de información de un diseño no degenerado  $\xi^{(n)}$  y sea  $M(\xi_{x_{n+1}})$  la matriz de información de un diseño concentrado en un único punto  $x_{n+1}$ . Entonces el determinante de la matriz de información de una combinación lineal*

convexa de estos diseños  $\xi^{(n+1)} = (1 - \alpha_{n+1})\xi^{(n)} + \alpha_{n+1}\xi_{x_{n+1}}$  es igual a:

$$\det M(\xi^{(n+1)}) = (1 - \alpha_{n+1})^m \left( 1 + \frac{\alpha_{n+1}\lambda(x_{n+1})d(x_{n+1}, \xi^{(n)})}{1 - \alpha_{n+1}} \right) \det M(\xi^{(n)}). \quad (2.8)$$

Demostración.

Por definición, podemos escribir la matriz de información del diseño que acabamos de construir como

$$\begin{aligned} M(\xi^{(n+1)}) &= (1 - \alpha_{n+1})M(\xi^{(n)}) + \alpha_{n+1}\lambda(x_{n+1})f(x_{n+1})f^t(x_{n+1}) \\ &= (1 - \alpha_{n+1}) \left[ M(\xi^{(n)}) + \frac{\alpha_{n+1}}{1 - \alpha_{n+1}}\lambda(x_{n+1})f(x_{n+1})f^t(x_{n+1}) \right] \end{aligned}$$

Llamando  $F = [\alpha_{n+1}\lambda(x_{n+1})/(1 - \alpha_{n+1})]^{1/2}f(x_{n+1})$  y utilizando la propiedad  $|M + FF^t| = |M||I + F^tM^{-1}F|$  (ver p.99 [Fed72a]), podemos escribir la expresión del determinante como

$$\det M(\xi^{(n+1)}) = (1 - \alpha_{n+1})^m \left( 1 + \frac{\alpha_{n+1}\lambda(x_{n+1})f^t(x_{n+1})M^{-1}(\xi^{(n)})f(x_{n+1})}{1 - \alpha_{n+1}} \right) \det M(\xi^{(n)}).$$

Como  $f^t(x_{n+1})M^{-1}(\xi^{(n)})f(x_{n+1}) = d(x_{n+1}, \xi^{(n)})$ , finalmente obtenemos el resultado buscado:

$$\det M(\xi^{(n+1)}) = (1 - \alpha_{n+1})^m \left( 1 + \frac{\alpha_{n+1}\lambda(x_{n+1})d(x_{n+1}, \xi^{(n)})}{1 - \alpha_{n+1}} \right) \det M(\xi^{(n)}).$$

□

**Observación 2.3.** De (2.8) no es difícil concluir que el determinante de la matriz de información del diseño  $\xi^{(n+1)}$  depende de la cantidad  $\alpha_{n+1}$  y de las coordenadas del punto en el cual el diseño  $\xi_{x_{n+1}}$  se concentra. Veremos que es siempre posible encontrar un punto  $x_{n+1}$  y un  $\alpha_{n+1}$  para el cual  $|M(\xi^{(n+1)})| > |M(\xi^{(n)})|$ , si el diseño  $\xi^{(n)}$  no es  $D$ -óptimo.

**Teorema 2.2.** *El valor más grande posible de  $\det M(\xi^{(n+1)})$  para un diseño dado  $\xi^{(n)}$  es:*

$$\begin{aligned} \max_{x,\alpha} \det M(\xi^{(n+1)}) &= \left[ \frac{\lambda(x_{n+1})d(x_{n+1},\xi^{(n)})}{m} \right]^m \\ &\times \left[ \frac{m-1}{\lambda(x_{n+1})d(x_{n+1},\xi^{(n)})-1} \right]^{m-1} \det M(\xi^{(n)}) > \det M(\xi^{(n)}) \end{aligned}$$

donde  $x_{n+1}$  es la solución de la ecuación

$$\lambda(x_{n+1})d(x_{n+1},\xi^{(n)}) = \max_x \lambda(x)d(x,\xi^{(n)}).$$

Demostración.

De (2.8) es fácil ver que para cualquier  $\alpha$ , el determinante  $\det M(\xi^{(n+1)})$  es una función creciente de  $\lambda(x)d(x,\xi^{(n)})$ . En consecuencia, el diseño  $\xi_{x_{n+1}}$  concentrado en el punto  $x_{n+1}$  debe ser aquel que hace máximo  $\lambda(x)d(x,\xi^{(n)})$ . Por tanto  $\max_{x,\alpha} \det M(\xi^{(n+1)})$  se alcanzará cuando  $x_{n+1} = \max_x \lambda(x)d(x,\xi^{(n)})$  y  $\alpha$  satisfacen la ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \log[\det M(\xi^{(n+1)})] = \frac{\lambda(x_{n+1})d(x_{n+1},\xi^{(n)}) - 1}{1 - \alpha + \alpha\lambda(x_{n+1})d(x_{n+1},\xi^{(n)})} - \frac{m-1}{1-\alpha} = 0$$

La solución de la ecuación anterior viene dada por

$$\alpha_{n+1} = \frac{\lambda(x_{n+1})d(x_{n+1},\xi^{(n)}) - m}{(\lambda(x_{n+1})d(x_{n+1},\xi^{(n)}) - 1)m}.$$

Dado que estamos asumiendo que  $\xi^{(n)}$  no es  $D$ -óptimo, por (2.7) se tiene que

$$\lambda(x_{n+1})d(x_{n+1},\xi^{(n)}) - m = \max_x [\lambda(x)d(x,\xi^{(n)}) - m] > 0$$

con lo que  $\alpha_{n+1} > 0$ . Por otro lado, calculando la derivada segunda se comprueba fácilmente que

$$\left. \frac{\partial^2}{\partial^2 \alpha} \log[\det M(\xi^{(n+1)})] \right|_{\alpha_{n+1}, x_{n+1}} < 0.$$

Con lo que efectivamente  $\alpha_{n+1}$  así definido se trata de un máximo de  $\log[\det M(\xi^{(n+1)})]$ . Por tanto

$$\max_{x,\alpha} \log[\det M(\xi^{(n+1)})] > \log[\det M(\xi^{(n)})].$$

Sustituyendo del valor del  $\alpha_{n+1}$  que hemos calculado previamente en la expresión del determinante de la nueva matriz de información, obtenemos

$$\begin{aligned} \det M(\xi^{(n+1)}) \Big|_{\alpha_{n+1}, x_{n+1}} &= \left[ \frac{\lambda(x_{n+1})d(x_{n+1}, \xi^{(n)})}{m} \right]^m \\ &\times \left[ \frac{m-1}{\lambda(x_{n+1})d(x_{n+1}, \xi^{(n)})-1} \right]^{m-1} \det M(\xi^{(n)}). \end{aligned}$$

Combinando las dos últimas expresiones mostradas obtenemos el resultado del enunciado.  $\square$

Como resultado central, veamos que el procedimiento iterativo construido siguiendo las pautas anteriores converge y su diseño límite  $\tilde{\xi}$  coincide con uno de los diseños  $D$ -óptimos.

**Teorema 2.3.** *Supongamos que se satisfacen las condiciones del Teorema de equivalencia. Entonces el procedimiento iterativo anterior converge, en cuyo caso:*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \det M(\xi^{(n)}) = \det M(\xi^*),$$

donde  $M(\xi^*)$  es la matriz de información correspondiente al diseño  $D$ -óptimo.

Demostración.

Sea  $\xi^{(0)}$  un diseño no  $D$ -óptimo. Entonces, del resultado del teorema anterior y de la definición de diseño  $D$ -óptimo se tiene que

$$\det M(\xi^{(0)}) < \det M(\xi^{(1)}) \leq \dots \leq \det M(\xi^{(n)}) \leq \det M(\xi^*).$$

Como toda sucesión monótona, en este caso no decreciente, y acotada es convergente, la sucesión  $\det M(\xi^{(0)}), \det M(\xi^{(1)}), \dots, \det M(\xi^{(n)})$  converge a un límite  $\det M(\hat{\xi})$ . Por tanto, únicamente nos falta por ver que  $\det M(\hat{\xi}) = \det M(\xi^*)$ .

Supongamos por reducción al absurdo que  $\det M(\hat{\xi}) < \det M(\xi^*)$ . Como la sucesión  $\det M(\xi^{(0)}), \det M(\xi^{(1)}), \dots, \det M(\xi^{(n)})$  es convergente, para cualquier  $\gamma > 0$  existe un  $n' > 0$  tal que si  $n > n'$  se verifica que:

$$\det M(\xi^{(n+1)}) - \det M(\xi^{(n)}) \leq \gamma$$

Llamando  $\delta_n = \lambda(x_n)d(x_n, \xi^{(n)}) - m$  y haciendo uso de la expresión del determinante obtenida en el teorema previo, podemos escribir equivalentemente:

$$\det M(\xi^{(n)}) \left[ \left( \frac{\delta_n + m}{m} \right)^m \left( \frac{m-1}{\delta_n + (m-1)} \right)^{m-1} - 1 \right] \leq \gamma$$

La desigualdad anterior puede reescribirse de la siguiente forma:

$$\varphi(\delta_n) = \left( \frac{\delta_n + m}{m} \right)^m \left( \frac{m-1}{\delta_n + (m-1)} \right)^{m-1} \leq 1 + \gamma_1$$

donde  $\gamma_1 = [\det M(\xi^{(n)})]^{-1}\gamma$ . La función  $\varphi(\delta_n)$  es creciente para  $\delta_n > 0$ ; por tanto para cualquier  $\Delta > 0$  habría un  $\gamma$  tal que

$$\lambda(x_n)d(x_n, \xi^{(n)}) - m = \delta_n \leq \Delta.$$

De esta forma siempre podría encontrarse un  $n'(\Delta)$  tal que  $\lambda(x_n)d(x_n, \xi^{(n)}) - m$  sea más pequeña que un número positivo dado  $\Delta$ . Pero estamos suponiendo que  $\det M(\hat{\xi}) < \det M(\xi^*)$  y por (2.7) se tiene que para cualquier  $n$ :

$$\lambda(x_n)d(x_n, \xi^{(n)}) - m \geq \epsilon > 0$$

con lo que eligiendo  $\Delta < \epsilon$  llegamos a contradicción y el teorema queda demostrado.  $\square$

Acabamos de estudiar la convergencia de la versión más general del algoritmo del Wynn-Federov. La dirección en la que nos movemos,

el nuevo punto, resulta ser la elección más ideal en el sentido de que los cálculos van dirigidos a la búsqueda de la mejor de todas ellas. Luego, resulta crucial en este algoritmo tomar siempre como nuevo punto el sugerido, puesto que éste es elegido de forma óptima (bastaría con tomar una dirección cualquiera desde el diseño de partida que nos acerque cierta cantidad al diseño óptimo, pero hemos probado que tomar  $x_{n+1} = \max_x \lambda(x)d(x, \xi^{(n)})$  es la mejor). Sin embargo, de la cantidad avanzada, su peso, no podemos afirmar lo mismo. Podemos elegirla convenientemente verificando ciertas propiedades deseables pero éstas son, en cualquier caso, impuestas de modo que no será óptima.

La elección de la longitud de paso, que no es otra cosa que el peso asignado al nuevo punto, resulta ser una cuestión más arbitraria, siempre y cuando se verifiquen ciertos requerimientos ( $\alpha_{n+1} \rightarrow 0$  cuando  $n \rightarrow \infty$  y  $\sum \alpha_{n+1}$  divergente). Puesto que será de interés para el algoritmo que proponemos más adelante, vamos a definir la longitud de paso conocida como *paso armónico*, consistente en

$$\{\alpha_n\}_{n \in \mathbb{N}} = \left\{ \frac{1}{n} \right\}_{n \in \mathbb{N}}.$$

Así definida, la actualización del diseño en cada iteración seguirá la fórmula

$$\xi^{(n+1)} = (1 - \alpha_{n+1})\xi^{(n)} + \alpha_{n+1}\xi_{x_{n+1}} = \frac{n\xi^{(n)} + \xi_{x_{n+1}}}{n+1}.$$

Esta longitud de paso se enmarca dentro del grupo de las que verifican (2.3). Aunque la monotonicidad de la función criterio no se satisface con esta elección, la convergencia del algoritmo está garantizada.

## Algoritmo para $D$ -optimización

1. Tomamos un diseño inicial  $\xi^{(0)}$  regular formado por  $k$  puntos  $x_1^{(0)}, \dots, x_k^{(0)}$  y pesos  $\omega_1^{(0)} = \xi^{(0)}(x_1^{(0)}), \dots, \omega_k^{(0)} = \xi^{(0)}(x_k^{(0)})$  respectivamente ( $\sum_{i=1}^k \xi^{(0)}(x_i) = 1$ ,  $k \geq m$ ).

2. Calculamos la matriz de información del diseño  $\xi^{(0)}$ ,

$$M(\xi^{(0)}) = \sum_{i=1}^k \xi^{(0)}(x_i) \lambda(x_i) f(x_i) f^t(x_i)$$

y su inversa.

3. Se busca el punto  $x^{(1)}$  que maximiza la función  $\lambda(x)d(x, \xi^{(0)})$  y se calcula su valor en el punto  $x^{(1)}$ :  $\lambda(x^{(1)})d(x^{(1)}, \xi^{(0)})$ .
4. Se construye el diseño  $\xi^{(1)} = (1 - \alpha_1)\xi^{(0)} + \alpha_1\xi_{x^{(1)}}$  que estará formado por los puntos y pesos siguientes:

$$\xi^{(1)} = \left\{ \begin{array}{cccccc} x_1^{(0)} & x_2^{(0)} & \dots & x_k^{(0)} & x^{(1)} \\ (1 - \alpha_1)\omega_1^{(0)} & (1 - \alpha_1)\omega_2^{(0)} & \dots & (1 - \alpha_1)\omega_k^{(0)} & \alpha_1 \end{array} \right\}$$

5. Se elige el valor  $\alpha_1$  que incremente al máximo el valor del determinante de la matriz de información del nuevo diseño  $M(\xi^{(1)})$  que, según el Teorema 2.2, es

$$\alpha_1 = \frac{\lambda(x^{(1)})d(x^{(1)}, \xi^{(0)}) - m}{(\lambda(x^{(1)})d(x^{(1)}, \xi^{(0)}) - 1)m},$$

o bien puede tomarse como longitud de paso cualquiera de las elecciones (2.3), (2.4) o (2.5). Como caso particular de (2.3), también puede considerarse paso armónico  $\alpha_1 = \frac{1}{k+1}$ .

6. Se comprueba si se verifica alguna de las condiciones (ver (2.1) y (2.2)):

$$\frac{m}{\max_x d(x, \xi^{(1)})} \geq \gamma_1$$

$$2 - \frac{\max_x d(x, \xi^{(1)})}{m} \geq \gamma_2$$

donde  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  son precisiones prefijadas.

7. Si se verifica alguna de las condiciones del paso anterior, el diseño  $\xi^{(1)}$  está suficientemente próximo al  $D$ -óptimo. Si no se verifica ninguna de las reglas de parada anteriores, se repiten los pasos del 2 al 7 actualizando  $\xi^{(0)}$  a  $\xi^{(1)}$  y así sucesivamente.

## 2.3. Algoritmo Multiplicativo

La idea propuesta por Silvey, Titterington y Tosney [Sil78] consiste en discretizar el espacio de diseño (definido continuo) de modo que el diseño inicial contenga todos los puntos posibles de la región, situados a distancias suficientemente próximas para cubrir todo el espacio. De esta forma, los puntos del diseño inicial conformarán una malla equiespaciada, donde la distancia entre puntos dependerá de la precisión que el experimentador desee considerar.

Teniendo en cuenta todos los puntos del mallado, que permanecerán fijos a lo largo del proceso, el cálculo del diseño óptimo consistirá en determinar qué peso dar a cada punto. Se trata, por tanto, de dar una regla de actualización de pesos, de manera que sólo aquellos que estén en el soporte del diseño, serán distintos de cero.

**Notación 2.1.** *En este capítulo se considera la versión del algoritmo multiplicativo en la que, una vez realizado el mallado de  $\chi$ , los puntos permanecen constantes. Por cuestiones de notación y para resaltar tal característica, denotaremos por  $\omega^{(n)}$  al diseño  $\xi^{(n)}$  generado en la iteración  $n$ -ésima cuyos puntos,  $x_i^{(n)}$ , son fijos y sus pesos son precisamente  $\omega_i^{(n)}$  con  $i = 1, \dots, k$  cuando no haya riesgo de confusión.*

El objetivo será maximizar una función criterio  $\Phi(\omega)$  en

$$\Omega = \{\omega : \omega_i > 0, \sum_{i=1}^k \omega_i = 1\}.$$

Definiremos también el conjunto,

$$\Omega_+ = \{\omega \in \bar{\Omega} : M(\omega) > 0 \text{ en el sentido de Loewner}\}.$$

Sea  $\delta \in (0, 1]$  y  $\omega^{(0)} \in \Omega_+$ . Una iteración propuesta siguiendo las ideas anteriores es la siguiente

$$\omega_j^{(n+1)} = \frac{\omega_j^{(n)} h(d_j^{(n)}, \delta)}{\sum_{i=1}^k \omega_i^{(n)} h(d_i^{(n)}, \delta)} \quad \text{o} \quad \omega_j^{(n+1)} = \frac{\omega_j^{(n)} h(z_j^{(n)}, \delta)}{\sum_{i=1}^k \omega_i^{(n)} h(z_i^{(n)}, \delta)}, \quad (2.9)$$

donde  $d_j^{(n)} = d_j(\boldsymbol{\omega}^{(n)}) = G_\Phi(\boldsymbol{\omega}^{(n)}, e_j)$  y  $z_j^{(n)} = z_j(\boldsymbol{\omega}^{(n)}) = F_\Phi(\boldsymbol{\omega}^{(n)}, e_j)$ ,  $j = 1, \dots, k$ , son la derivada de Gâteaux y la derivada direccional respectivamente.  $h(x, \delta)$  es una función positiva,  $\partial h(x, \delta)/\partial x > 0$  y si  $\delta = 0$ , entonces  $h(x, \delta)$  es una función constante. Una elección adecuada de esta función es fundamental para acelerar la convergencia, mientras que la elección de la constante  $\delta$  debe asegurar la monotonía del algoritmo.

Obsérvese que  $\omega_i^{(n+1)} \propto \omega_i^{(n)} \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \omega_i} \Big|_{\boldsymbol{\omega}=\boldsymbol{\omega}^{(n)}} \right)$ . Luego, la modificación de los pesos se hará en función de la cantidad de información ganada (medida por  $\Phi$ ) al incrementarse ligeramente cada peso. En otras palabras, la iteración pondrá más peso sobre los puntos que proporcionen un mayor incremento de  $\Phi$ .

Las iteraciones de la forma (2.9) poseen las siguientes propiedades [Tor88]:

1.  $\boldsymbol{\omega}^{(n)}$  es una solución factible.
2.  $F_\Phi(\boldsymbol{\omega}^{(n)}, \boldsymbol{\omega}^{(n+1)}) \leq 0$ . La igualdad se verifica cuando las  $d_i$  que corresponden a los  $\omega_i$  distintos de cero, tengan el mismo valor,  $d$ , es decir,  $d_i = \sum \omega_j d_j = d$ , y por tanto

$$\omega_i^{(n+1)} = \frac{\omega_i^{(n)} h(d_j^{(n)}, \delta)}{\sum_{j=1}^k \omega_j^{(n)} h(d_j^{(n)}, \delta)} = \frac{\omega_i^{(n)} h(d, \delta)}{h(d, \delta) \sum_{j=1}^k \omega_j^{(n)}} = \omega_i^{(n)}.$$

Esta situación ocurre cuando el punto ya no aporta más información. El diseño óptimo se alcanzará, por tanto, cuando dejen de producirse cambios en la actualización de los pesos.

3. El soporte de  $\boldsymbol{\omega}^{(r+1)}$  está incluido en el soporte de  $\boldsymbol{\omega}^{(r)}$ .

Otras propiedades interesantes pueden consultarse en Silvey, Titterton y Torsney [Sil78] y en Torsney y Mandal [Tor01].

Todos los resultados que se muestran a continuación se verifican para  $\delta \in (0, 1]$ . En ocasiones, determinadas elecciones de  $\delta$  pueden llevar a comportamientos oscilatorios y sin embargo otras, pueden ser deseables para garantizar una convergencia rápida. Para más información sobre la elección de  $\delta$  consultar [Sil78] y [Fel89].

## Convergencia para $D$ -optimización

Vamos a demostrar la convergencia del algoritmo multiplicativo centrándonos en el criterio de  $D$ -optimización, para el que se proporciona el resultado fundamental de este capítulo. El procedimiento a seguir se basa en comprobar que la función criterio,  $\Psi$ , verifica ciertas condiciones bajo las que se deduce la convergencia monótona.

Para simplificar la notación definiremos

$$\varphi[M] = -\Psi[M^{-1}], \quad M > 0$$

asumiendo que  $\Psi$  y, en consecuencia,  $\varphi$  son diferenciables sobre el conjunto de matrices invertibles. Sean  $M_1, M_2 \in \mathcal{M}$  matrices simétricas, entonces:

- $\varphi[M]$  es creciente (en el sentido de Loewner):

$$0 < M_1 \leq M_2 \Rightarrow \varphi[M_1] \leq \varphi[M_2] \quad (2.10)$$

$$(M_1 \leq M_2 \Rightarrow M_1^{-1} \geq M_2^{-1} \text{ y como } \Psi \text{ es creciente} \Rightarrow \Psi[M_1^{-1}] \geq \Psi[M_2^{-1}] \Rightarrow -\Psi[M_1^{-1}] \leq -\Psi[M_2^{-1}] \Rightarrow \varphi[M_1] \leq \varphi[M_2])$$

o lo que es lo mismo,  $\nabla\varphi[M]$  es no negativa para  $M$  definida positiva.

- $\varphi[M]$  es cóncava:

$$\alpha\varphi[M_1] + (1 - \alpha)\varphi[M_2] \leq \varphi[\alpha M_1 + (1 - \alpha)M_2], \quad (2.11)$$

para  $\alpha \in [0, 1]$ ,  $M_1, M_2 > 0$ . Utilizando el Lema (1.1) y la observación (1.6), esta propiedad puede escribirse como

$$\varphi[M_2] \leq \varphi[M_1] + \text{Tr}[(\nabla\Psi[M_1])(M_2 - M_1)], \quad M_1, M_2 > 0. \quad (2.12)$$

Éstas son algunas de las propiedades deseables de las funciones criterio que mencionábamos en el capítulo 1. En particular, las anteriores se verifican para los criterios más comunes, entre ellos el criterio de  $D$ -optimización.

Siguiendo la demostración que propone [Yu10a], la idea del procedimiento a seguir para probar la convergencia es la siguiente. Supongamos que la función a minimizar es  $f(\omega)$ . Puesto que el problema de minimización directo de esta función es complicado, se introducirá una nueva variable auxiliar,  $Q$ , y se definirá una nueva función  $g(\omega, Q)$  de modo que los problemas de minimización son equivalentes  $\min_{\omega, Q} g(\omega, Q) = \min_{\omega} f(\omega)$ . Sobre el nuevo problema de minimización conjunta se aplicará una estrategia de minimización condicional iterativa de la que podrá deducirse el comportamiento monótono de la iteración dada por el algoritmo multiplicativo. Comprobando una serie de condiciones suaves sobre la función criterio se logrará demostrar finalmente la convergencia.

**Teorema 2.4. (Monotonía)** *Supongamos que se verifican (2.10) y (2.11). Supongamos también que tras una iteración del algoritmo multiplicativo con  $0 < \delta \leq 1$  se tiene que*

$$M(\omega^{(n)}) > 0, \quad \nabla \Psi[M(\omega^{(n)})] \neq 0 \quad y \quad M(\omega^{(n+1)}) > 0$$

Entonces,

$$\Psi[M(\omega^{(n+1)})] \geq \Psi[M(\omega^{(n)})].$$

Demostración.

En primer lugar veamos que el problema de  $\max_{\omega} \Psi[M(\omega)]$  (equivalentemente,  $\min_{\omega} \varphi[M^{-1}(\omega)]$ ) puede formularse como una minimización conjunta con respecto al diseño y al estimador mínimo-cuadrático balanceado  $\hat{Q}_{WLS}$ .

**Problema 1 :**  $\min_{\omega \in \Omega} -\Psi[M(\omega)] \equiv \min_{\omega \in \Omega} \varphi[(\sum_{i=1}^k \omega_i A_i)^{-1}]$

**Problema 2 :**  $\min_{\omega \in \Omega, Q} g(\omega, Q) \equiv \min_{\omega \in \Omega, Q} \varphi[Q(\Delta \omega)Q^t]$   
 sujeto a :  $Q \cdot G = I_m$

(2.13)

siendo  $Q$  una matriz  $m \times (m \cdot k)$  que debe elegirse adecuadamente como se verá más adelante,  $A_i = f(x_i)f^t(x_i)$  y donde

$$\Delta\omega = \text{Diag}(\omega_1^{-1}, \dots, \omega_k^{-1}) \otimes I_m; \quad G = (A_1^{1/2}, \dots, A_k^{1/2})^t.$$

**Definición 2.2.** Dadas dos matrices  $A \in \mathcal{M}_{m \times n}$  y  $B \in \mathcal{M}_{p \times q}$ , el producto de Kronecker de  $A$  y  $B$ , que denotaremos por  $A \otimes B$ , es la matriz de orden  $mp \times nq$  dada por:

$$A \otimes B := \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \dots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \dots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \dots & a_{mn}B \end{pmatrix}$$

Los problemas 1 y 2 son **equivalentes**.

*Demostración:*

Consideremos el modelo

$$Y = G\theta + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, \Delta\omega)$$

donde  $Y$  es el vector de  $(m \cdot n) \times 1$  observaciones.

Se tiene que  $Q(\Delta\omega)Q^t$  así definido corresponde a la matriz de covarianzas de un estimador lineal insesgado,  $QY$ , de los  $m \times 1$  parámetros del modelo anterior. La restricción  $Q \cdot G = I_m$  garantiza que el estimador sea insesgado.

Elegiremos el estimador mínimo-cuadrático balanceado (WLS) puesto que es el mejor estimador lineal insesgado. Éste tiene la matriz de varianzas-covarianzas más pequeña (en el sentido de orden de Loewner) y, por ser  $\varphi$  creciente, alcanza el valor más pequeño posible evaluada sobre  $\varphi$ .

Veamos que para  $\omega$  fijo,  $g(\omega, Q)$  es minimizado eligiendo  $QY$  como el estimador WLS:

$$\inf_{Q \in \mathcal{M}_m} g(\boldsymbol{\omega}, Q) = g(\boldsymbol{\omega}, \widehat{Q}_{WLS}) \quad (2.14)$$

siendo  $\widehat{Q}_{WLS} = M^{-1}(\boldsymbol{\omega})(\omega_1 A_1^{1/2}, \dots, \omega_k A_k^{1/2})$ ,  $Q \in \mathcal{M}_{m \times mk}$  y  $A_i \in \mathcal{M}_{m \times mk}$ . Ahora:

$$\begin{aligned} g(\boldsymbol{\omega}, \widehat{Q}_{WLS}) &= \varphi[Q_{WLS}(\Delta\boldsymbol{\omega})Q_{WLS}^t] = \\ &= \varphi[M^{-1}(\boldsymbol{\omega})(\omega_1 A_1^{1/2}, \dots, \omega_k A_k^{1/2}) \begin{pmatrix} \omega_1^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & \omega_k^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_1 A_1^{1/2} \\ \vdots \\ \omega_k A_k^{1/2} \end{pmatrix} M^{-1}(\boldsymbol{\omega})^t] \\ &= \varphi[M^{-1}(\boldsymbol{\omega})(A_1^{1/2}, \dots, A_k^{1/2}) \begin{pmatrix} \omega_1 A_1^{1/2} \\ \vdots \\ \omega_k A_k^{1/2} \end{pmatrix} (M^{-1}(\boldsymbol{\omega}))^t] = \\ &= \varphi[M^{-1}(\boldsymbol{\omega}) \cdot \left( \sum_{i=1}^k \omega_i A_i \right) \cdot M^{-1}(\boldsymbol{\omega})] = \\ &= \varphi[M^{-1}(\boldsymbol{\omega}) \cdot M(\boldsymbol{\omega}) \cdot M^{-1}(\boldsymbol{\omega})] = \varphi[M^{-1}(\boldsymbol{\omega})] \end{aligned}$$

Por tanto,

$$g(\boldsymbol{\omega}, \widehat{Q}_{WLS}) = \varphi[M^{-1}(\boldsymbol{\omega})] \quad (2.15)$$

con lo que queda demostrada la equivalencia de los problemas anteriores.  $\square$

Siguiendo el esquema que describíamos antes, el siguiente paso será desglosar el problema 2 en un procedimiento iterativo

- (i)  $\min_Q g(\boldsymbol{\omega}, Q)$  para  $\boldsymbol{\omega}$  fijo.
- (ii)  $\min_{\boldsymbol{\omega}} g(\boldsymbol{\omega}, Q)$  para  $Q$  fijo.

Antes de llevar a cabo esta división, reformulamos el problema del siguiente modo:

**Problema 3 :**  $\min_{\boldsymbol{\omega} \in \Omega} g(\boldsymbol{\omega}, Q)$  como en (2.13)

**Problema 4 :**  $\min_{\boldsymbol{\omega} \in \Omega, \Sigma} H(\Sigma, \boldsymbol{\omega}, Q) = \min_{\boldsymbol{\omega} \in \Omega, \Sigma} \{ \varphi[\Sigma] + \text{Tr}[\nabla\varphi[\Sigma](Q(\Delta\boldsymbol{\omega})Q^t - \Sigma)] \}$   
con  $\Sigma \in \mathcal{M}_{m \times m}$  definida positiva.

Los problemas 3 y 4 son **equivalentes**.

*Demostración:*

Como  $\varphi$  es cóncava, la expresión equivalente de la definición (2.12) implica que

$$H(\Sigma, \boldsymbol{\omega}, Q) \geq \varphi(Q(\Delta\boldsymbol{\omega})Q^t). \quad (2.16)$$

Eligiendo  $\Sigma = Q(\Delta\boldsymbol{\omega})Q^t$ , se obtiene directamente la igualdad buscada:

$$\begin{aligned} H(\Sigma, \boldsymbol{\omega}, Q) &= \varphi[Q(\Delta\boldsymbol{\omega})Q^t] + \text{Tr}[\nabla\varphi[\Sigma](Q(\Delta\boldsymbol{\omega})Q^t - Q(\Delta\boldsymbol{\omega})Q^t)] \\ &= \varphi[Q(\Delta\boldsymbol{\omega})Q^t] + 0 = g(\boldsymbol{\omega}, Q) \end{aligned} \quad (2.17)$$

□

Para resolver problema 4, volvemos a descomponerlo en dos etapas:

- (i)  $\min_{\Sigma} H(\Sigma, \boldsymbol{\omega}, Q)$  para  $\boldsymbol{\omega}$  y  $Q$  fijos.
- (ii)  $\min_{\boldsymbol{\omega}} H(\Sigma, \boldsymbol{\omega}, Q)$  para  $\Sigma$  y  $Q$  fijos.

Obsérvese que la cantidad a minimizar de la parte (ii) es justamente

$$\text{Tr}[\nabla\varphi[\Sigma]Q(\Delta\boldsymbol{\omega})Q^t] = \text{Tr}[Q^t \nabla\varphi[\Sigma]Q(\Delta\boldsymbol{\omega})]$$

y que ésta admite una solución cerrada: si  $Q = (Q_1, \dots, Q_k)$  donde cada  $Q_i$  es una matriz  $m \times m$ , entonces los  $\omega_i^2$  deberían ser proporcionales a  $\text{Tr}[Q_i^t \nabla\varphi[\Sigma]Q_i]$ . Por tanto, la clave será comprobar si la iteración dada por el algoritmo multiplicativo admite en este punto una minimización exacta.

Basándonos en el razonamiento anterior, vamos a expresar la iteración definida en (2.9) como un algoritmo de minimización condicional iterativo involucrando a  $\boldsymbol{\omega}$ ,  $Q$  y  $\Sigma$ .

Para cada iteración,  $n$ , se define:

$$\begin{aligned}
Q^{(n)} &= (Q_1^{(n)}, \dots, Q_k^{(n)}) \\
Q_i^{(n)} &= \omega_i^{(n)} \cdot M^{-1}(\boldsymbol{\omega}^{(n)}) \cdot A_i^{1/2}, \quad i = 1, \dots, k. \text{ (que es } Q_{WLS}) \\
\Sigma^{(n)} &= Q^{(n)}(\Delta\boldsymbol{\omega}^{(n)})Q^{(n)t} = M^{-1}(\boldsymbol{\omega}^{(n)})
\end{aligned}$$

Entonces tenemos,

$$\begin{aligned}
\varphi[M^{-1}(\boldsymbol{\omega}^{(n)})] &= g(\boldsymbol{\omega}^{(n)}) \text{ por (2. 15)} \\
&= H(\Sigma^{(n)}, \boldsymbol{\omega}^{(n)}, Q^{(n)}) \text{ por (2. 17)} \\
&\geq H(\Sigma^{(n)}, \boldsymbol{\omega}^{(n+1)}, Q^{(n)}) \quad (2.18) \\
&\geq g(\boldsymbol{\omega}^{(n+1)}, Q^{(n)}) \text{ por (2. 13) y (2.16)} \quad (2.19) \\
&\geq \varphi(M^{-1}(\boldsymbol{\omega}^{(n+1)})) \text{ por (2. 14) y (2.15)(2.20)}
\end{aligned}$$

Luego, únicamente falta por ver (2.18). La elección de  $\boldsymbol{\omega}^{(n+1)}$  será la que nos proporcionará la desigualdad buscada. Consideremos, por simplicidad,  $h(d_j^{(n)}, \delta) = d_j^\delta(\boldsymbol{\omega}^{(n)})$  en (2.9) de modo que

$$\omega_i^{(n+1)} = \omega_i^{(n)} \frac{d_i^\delta(\boldsymbol{\omega}^{(n)})}{\sum_{j=1}^k \omega_j^{(n)} d_j^\delta(\boldsymbol{\omega}^{(n)})}.$$

Utilizando las definiciones anteriores, podemos escribir la iteración anterior de forma equivalente como

$$\omega_i^{(n+1)} = \frac{r_i^\delta \cdot \omega_i^{1-2\delta}}{\sum_{j=1}^k r_j^\delta \cdot \omega_j^{1-2\delta}}$$

donde  $\omega_i \equiv \omega_i^{(n)}$  y  $r_i \equiv \text{Tr}[Q_i^{(n)t} \cdot \varphi[\Sigma^{(n)}] \cdot Q_i^{(n)}]$ .

Escritos los pesos de esta forma, como  $0 < \delta \leq 1$  por la desigualdad de Jensen se tiene que

$$\begin{aligned}
\left( \sum_{i=1}^k \frac{r_i}{\omega_i} \right)^{1-\delta} &\geq \sum_{i=1}^k \omega_i \left( \frac{r_i}{\omega_i^2} \right)^{1-\delta} \\
\left( \sum_{i=1}^k \frac{r_i}{\omega_i} \right)^\delta &\geq \sum_{i=1}^k \omega_i \left( \frac{r_i}{\omega_i^2} \right)^\delta.
\end{aligned}$$

Multiplicando ambas expresiones resulta

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k \frac{r_i}{\omega_i^{(n)}} &\geq \left( \sum_{i=1}^k r_i^{1-\delta} \cdot \omega_i^{(n)2\delta-1} \right) \cdot \left( \sum_{i=1}^k r_i^\delta \cdot \omega_i^{(n)1-2\delta} \right) = \\ &= \sum_{i=1}^k \left( \frac{r_i}{\frac{r_i^\delta \cdot \omega_i^{(n)1-2\delta}}{\sum_{i=1}^k r_i^\delta \cdot \omega_i^{(n)1-2\delta}}} \right) = \sum_{i=1}^k \frac{r_i}{\omega_i^{(n+1)}} \end{aligned}$$

por tanto,

$$\begin{aligned} \text{Tr}[(\nabla\varphi[\Sigma^{(n)}]) \cdot Q^{(n)} \cdot (\Delta\omega^{(n)}) \cdot Q^{(n)t}] &= \sum_{i=1}^k \frac{r_i}{\omega_i^{(n)}} \geq \\ &\geq \sum_{i=1}^k \frac{r_i}{\omega_i^{(n+1)}} = \text{Tr}[(\nabla\varphi[\Sigma^{(n)}]) \cdot Q^{(n)} \cdot (\Delta\omega^{(n+1)}) \cdot Q^{(n)t}] \end{aligned}$$

Con lo que resulta la desigualdad buscada (2.18).

**Observación 2.4.** Si  $\delta = 1/2$  ( $\equiv \omega_i^{(n+1)} \propto \sqrt{r_i}$ ), se llega a una minimización exacta; mientras que si  $\delta = 1$ , (2.18) resulta ser una igualdad.

En cualquier caso, para cualquier elección de  $\omega^{(n+1)}$  que haga decrecer  $H(\Sigma^{(n)}, \omega^{(n)}, Q^{(n)})$  en (2.18) tendremos la desigualdad deseada:

$$\varphi[M^{-1}(\omega^{(n)})] \geq \varphi[M^{-1}(\omega^{(n+1)})].$$

Además, podemos tomar en cada iteración cualquier  $\delta \in (0, 1]$  de modo que la monotonicidad se mantiene. Por otro lado, estamos suponiendo que  $\omega_i^{(n)}, \omega_i^{(n+1)} > 0 \forall i = 1, \dots, k$ . En caso de ser  $\omega_i^{(n)} = 0$  podríamos eliminar tales puntos y, si al actualizar los pesos alguno de ellos fuese cero,  $\omega_i^{(n+1)} = 0$ , podría solucionarse utilizando un argumento similar para eliminar los puntos con tal característica.

Luego, la monotonicidad se mantiene para  $M(\omega^{(n)})$  y  $M(\omega^{(n+1)})$  definidas positivas, con lo que queda demostrado el teorema.

□

La monotonidad obtenida en el teorema anterior juega un papel fundamental para probar la convergencia global del algoritmo. Para su demostración estudiaremos la siguiente versión del Teorema de equivalencia:

**Teorema 2.5.** *Supongamos que la función criterio  $\Psi$  es diferenciable y cóncava. Definimos*

$$\bar{d}(\omega) = \sum_{i=1}^k \omega_i d_i(\omega) = \text{Tr}[(\nabla \Psi[M(\omega)])M(\omega)],$$

donde  $d_i(\omega) = \text{Tr}[(\nabla \Psi[M(p)])A_i]$ . Entonces, para cada  $\omega^* \in \Omega_+$  son equivalentes:

- (a)  $\omega^*$  maximiza  $\Psi[M(\omega)]$  en  $\Omega_+$ .
- (b)  $d_i(\omega) \leq \bar{d}(\omega^*) \quad \forall i$
- (c)  $\forall i$ , si  $\omega_i^* \neq 0 \Rightarrow d_i(\omega^*) = \bar{d}(\omega^*)$  y si  $\omega_i^* = 0 \Rightarrow d_i(\omega^*) \leq \bar{d}(\omega^*)$ .

Demostración. Puede encontrarse en [Kie60b] y [Whi73b]. □

El teorema anterior sugiere la siguiente regla de parada

$$\max_{1 \leq i \leq k} d_i(\omega^{(n)}) \leq (1 + \lambda) \bar{d}(\omega^{(n)})$$

siendo  $\lambda > 0$  suficientemente pequeño. Veamos ahora la demostración de la convergencia:

**Teorema 2.6. (Convergencia)** *Denotaremos por  $T$  a la aplicación que actualiza los pesos en una iteración del algoritmo multiplicativo. Supongamos que se verifica:*

- (a)  $(\nabla \Psi[M(\omega)]) \geq 0$ ;  $(\nabla \Psi[M(\omega)]) \cdot A_i \neq 0$  con  $\omega \in \Omega_+$ ,  $i = 1, \dots, k$ .

(b) La asignación de los nuevos pesos es monótona.

$$\omega \in \Omega_+, \quad T(\omega) \neq \omega \Rightarrow \Psi[M(T(\omega))] > \Psi[M(\omega)]$$

(c)  $\Psi$  es estrictamente cóncava y  $(\nabla\Psi)$  es continua en el conjunto de las matrices definidas positivas.

(d) Si  $M$  (definida positiva) tiende a  $M^*$  a medida que  $\Psi[M]$  se incrementa monótonamente, entonces  $M^*$  es no singular.

Sea  $\omega^{(n)}$  generada por una iteración del algoritmo multiplicativo con  $\omega_i^{(0)} > 0 \forall i$ . Entonces:

(i) Todos los pesos límite de la sucesión  $\omega^{(n)}$  son máximos globales de  $\Psi[M(\omega)]$  en  $\Omega_+$ .

(ii) Cuando  $n \rightarrow \infty$ ,  $\Psi[M(\omega^{(n)})]$  crece a  $\sup_{\omega \in \Omega_+} \Psi[M(\omega)]$  monótonamente.

### Demostración.

Para llegar a la conclusión final del teorema se irán demostrando resultados parciales que se muestran en los siguientes lemas:

**Lema 2.1.** *Cualquier punto límite  $\omega^*$  de la sucesión  $\omega^{(n)}$  es un punto fijo de  $T$ , es decir,  $T(\omega^*) = \omega^*$ .*

#### *Demostración*

Sea  $\omega^{(n_j)}$  una subsucesión convergente a  $\omega^*$ . Por las condiciones (b) y (d) se tiene que  $M(\omega^*)$  es definida positiva, es decir,  $\omega^* \in \Omega_+$ . Además, como  $T$  y  $\Psi[M(\cdot)]$  son continuas en  $\Omega_+$  se tiene que

$$\Psi[M(\omega^*)] = \lim_{j \rightarrow \infty} \Psi[M(\omega^{(n_j)})] = \lim_{j \rightarrow \infty} \Psi[M(\omega^{(n_j+1)})] = \Psi[M(T(\omega^*))]$$

donde ambos límites son iguales por la monotonía. Finalmente de (b) obtenemos  $T(\omega^*) = \omega^*$ .  $\square$

**Lema 2.2.** *Supongamos que  $\omega^*$  es un punto límite de la sucesión de  $\omega^{(n)}$  y definamos  $S_+ = \{\omega \in \Omega_+ : \omega_i^* = 0 \Rightarrow \omega_i = 0\}$  como el*

conjunto de los  $\omega$  que son absolutamente continuos con respecto a  $\omega^*$  y satisfacen que  $M(\omega) > 0$ . Entonces, se tiene que

$$\Psi[M(\omega^*)] = \sup_{\omega \in S_+} \Psi[M(\omega)]$$

Además, el supremo es único, esto es:

$$\widehat{\omega} \in S_+, \Psi[M(\widehat{\omega})] = \sup_{\omega \in S_+} \Psi[M(\omega)] \Rightarrow M(\widehat{\omega}) = M(\omega^*)$$

*Demostración*

Por el lema 2.1,  $\omega^*$  es un punto fijo de  $T$ , es decir:

$$\omega_i^* \neq 0 \Rightarrow \text{Tr}[(\nabla \Psi[M(\omega^*)])A_i] = \text{Tr}[(\nabla \Psi[M(\omega^*)])M(\omega^*)].$$

Por el teorema 2.7, como  $\omega^*$  maximiza  $\Psi[M(\omega)]$  en  $S_+$ , queda demostrada la primera parte. La unicidad es inmediata al asumir por la condición (d) que  $\Psi[\cdot]$  es estrictamente cóncava.  $\square$

**Lema 2.3.** *La sucesión  $M(\omega^{(n)})$  tiene un número finito de puntos límite.*

*Demostración*

Para cualquier punto límite  $\omega^*$  de  $\omega^{(n)}$ , por ser  $\Psi[M(\cdot)]$  continua, puede pasarse al límite, de modo que cualquier punto límite de  $M(\omega^{(n)})$  es de la forma  $M(\omega^*)$ . Por el lema anterior,  $M(\omega^*)$  es el único que maximiza  $\Psi[M]$  de entre todas las  $M > 0$  que pueden escribirse de la forma  $M = M(\omega)$  con  $\omega \ll \omega^*$ . Por tanto, dependiendo de las coordenadas de  $\omega^*$  que son 0, habrá menos de  $2^k$  maximizadores degenerados.  $\square$

**Lema 2.4.** *El límite  $M_\infty \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} M(\omega^{(n)})$  existe.*

*Demostración*

Supongamos que  $M(\omega^{(n)})$  tiene  $L < \infty$  puntos límite y sean  $B_i$  con  $i = 1, \dots, L$  las bolas centradas en ellos con intersección vacía. Se sabe que  $L \geq 1$  por estar  $M(\omega^{(n)})$  acotado. La elección de la métrica en este caso es irrelevante. Por estar acotada, se tiene que

para  $n$  suficientemente grande, cada uno de los  $M(\omega^{(n)})$  pertenece exactamente a un  $B_i$ . Supongamos por reducción al absurdo que  $L \geq 2$ ; en otras palabras, que  $M(\omega^{(n)})$  no converge. Entonces existe una subsucesión tal que  $M(\omega^{(n_j)}), M(\omega^{(n_{j+1})})$  siempre pertenecen a bolas distintas. Tomando una subsucesión de la subsucesión anterior si fuera preciso, podemos suponer que  $\omega^{(n_j)} \rightarrow \omega^*$ . Pero por el lema 2.1 también se verificará que  $\omega^{(n_{j+1})} \rightarrow \omega^*$ , lo cual implica que  $M(\omega^{(n_j)}) \rightarrow M(\omega^*)$  y que  $M(\omega^{(n_{j+1})}) \rightarrow M(\omega^*)$  contradiciendo el supuesto de pertenecer a bolas distintas.  $\square$

**Lema 2.5.** *El límite  $M_\infty$  definido en el lema anterior es  $\Psi$ -óptimo:*

$$\Psi[M_\infty] = \sup_{\omega \in \Omega_+} \Psi[M(\omega)]$$

*Demostración*

Por el teorema de equivalencia se tiene que

$$\text{Tr}[(\nabla \Psi[M_\infty])A_i] \leq \text{Tr}[(\nabla \Psi[M_\infty])M_\infty] \quad i = 1, \dots, k$$

Supongamos que no es cierto para  $i = 1$ , entonces por el lema anterior existe  $\lambda > 0$  tal que para  $n$  suficientemente grande se tiene que

$$\text{Tr}[(\nabla \Psi[M(\omega^{(n)})])A_1] > (1 + \lambda) \text{Tr}[(\nabla \Psi[M(\omega^{(n)})])M(\omega^{(n)})]$$

Entonces, de la definición de  $T$  se deduce que

$$\frac{\omega_1^{(n+1)}}{\omega_1^{(n)}} > (1 + \lambda)^\delta \frac{\left(\sum_{i=1}^k \omega_i d_i\right)^\delta}{\sum_{i=1}^k \omega_i d_i^\delta},$$

donde  $d_i = \text{Tr}[(\nabla \Psi[M(\omega^{(n)})])A_i]$ . Sin embargo, el lado derecho de la desigualdad anterior es al menos  $(1 + \lambda)^\delta$  por la desigualdad de Jensen, de lo que resulta

$$\omega_1^{(n+1)} > (1 + \lambda)^\delta \omega_1^{(n)}$$

para  $n$  suficientemente grande lo cual contradice la restricción  $0 < \omega_1^{(n)} \leq 1$ .  $\square$

Con los lemas anteriores se consigue el resultado buscado y con ello el teorema queda demostrado.  $\square$

**Corolario 2.1. (Convergencia para  $D$ -optimización)** *Supongamos que  $A_i \neq 0$ ,  $\omega_i^{(0)}$  con  $i = 1, \dots, k$  y  $M(\omega^{(0)}) > 0$ . Entonces la conclusión del teorema anterior se verifica para el criterio de  $D$ -optimización.*

Demostración.

En primer lugar hemos de verificar (2.10) y (2.11). Resulta obvio que  $\varphi$  así definida es creciente, veamos entonces (2.11). Eligiendo una matriz invertible  $U$  ( $m \times m$ ) que diagonalice simultáneamente a  $M_1$  y a  $M_2$ , es decir,

$$U^t M_1 U^t = \text{Diag}(a_1, \dots, a_m); \quad U^t M_2 U^t = \text{Diag}(b_1, \dots, b_m),$$

por la desigualdad de Jensen, se tiene que

$$\alpha \sum_{i=1}^m \log(a_i) + (1 - \alpha) \sum_{i=1}^m \log(b_i) \leq \sum_{i=1}^m \log(\alpha a_i + (1 - \alpha)b_i)$$

con lo que se demuestra la concavidad y su expresión equivalente (2.12).

Las condiciones anteriores junto con (a) (que ha de verificarse para que las iteraciones estén bien definidas), hacen que el teorema 2.4 sea aplicable y por tanto que se cumpla la monotonía.

Estudiaremos ahora la convergencia. Las condiciones (c) y (d) son requerimientos para asegurar la unicidad de la solución y la propiedad de ser definida positiva por paso al límite, que únicamente involucran a  $\Psi$  y se verifican de forma inmediata.

Únicamente nos falta por ver que se cumple (b). Comprobando la condición de la desigualdad en (2.18) se tiene que (b) se satisface

si  $0 < \delta < 1$ . Si  $\delta = 1$ , entonces (2.18) se reduce a una igualdad. Sin embargo, comprobando las condiciones de igualdad en (2.19) y (2.20), puede verse que la condición (b) se satisface si  $\varphi$  es estrictamente creciente y estrictamente cóncava, esto es

$$M_2 \geq M_1 > 0, M_1 \neq M_2 \Rightarrow \varphi[M_1] > \varphi[M_2]$$

$$M_1, M_2 > 0, M_1 \neq M_2 \Rightarrow \varphi[M_2] < \varphi[M_1] + \text{Tr}[\varphi[M_1](M_2 - M_1)]$$

lo cual se verifica por (2.10) y (2.12). Con lo que queda demostrada la convergencia del algoritmo para el caso que nos ocupa.  $\square$

Acabamos de estudiar la convergencia para el caso particular de  $D$ -optimización. Sin embargo, los resultados de los teoremas y lemas anteriores se verifican para cualquier criterio diferenciable, creciente (en el sentido de Lowener) y cóncavo (o convexo, según la definición de la función) sobre el conjunto de matrices de información no singulares. Así pues, [Yu10a] señala que estas condiciones se satisfacen para los criterios más populares como  $A$ -optimización o  $c$ -optimización.

## Algoritmo para $D$ -optimización

1. Tomamos un diseño inicial  $\omega^{(0)}$  regular formado por un número suficientemente grande de puntos,  $k$ ,  $x_1, \dots, x_k$  y pesos  $\omega_1^{(0)}, \dots, \omega_k^{(0)}$  respectivamente.  
( $\sum_{i=1}^k \omega_i^{(0)} = 1$ ,  $k \geq m$ ,  $\omega^{(0)} \in \Omega_+$ ).
2. Calculamos la matriz de información del diseño  $\omega^{(0)}$ ,

$$M(\omega^{(0)}) = \sum_{i=1}^k \omega_i^{(0)} \lambda(x_i) f(x_i) f^t(x_i)$$

y su inversa.

3. Se calcula la derivada

$$d_i(\omega^{(0)}) = \frac{\partial \Phi}{\partial \omega_i} = \text{Tr}[f^t(x_i)(\nabla \Psi[M(\omega^{(0)})])f(x_i)]$$

con  $\nabla\Psi[M] \equiv \frac{\partial\Psi[M]}{\partial M}$  y se modifican los pesos según la regla de actualización:

$$\omega_i^{(1)} = \omega_i^{(0)} \frac{d_i^\delta(\boldsymbol{\omega}^{(0)})}{\sum_{i=1}^k \omega_i^{(0)} d_i^\delta(\boldsymbol{\omega}^{(0)})}.$$

4. Se construye el nuevo diseño  $\boldsymbol{\omega}^{(1)}$  que estará formado por los mismos puntos y nuevos pesos serán los calculados en el paso anterior:

$$\boldsymbol{\omega}^{(1)} = \left\{ \begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & \dots & x_k \\ \omega_1^{(1)} & \omega_2^{(1)} & \dots & \omega_k^{(1)} \end{array} \right\}$$

5. Se comprueba si se verifica alguna de las condiciones (ver (2.1) y (2.2)):

$$\frac{m}{\max_x d(x, \boldsymbol{\omega}^{(1)})} \geq \gamma_1$$

$$2 - \frac{\max_x d(x, \boldsymbol{\omega}^{(1)})}{m} \geq \gamma_2$$

donde  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  son precisiones prefijadas.

6. Si se verifica la condiciones del paso anterior, el diseño  $\boldsymbol{\omega}^{(1)}$  está suficientemente próximo al  $D$ -óptimo. Si no se verifica la regla de parada anterior se repiten los pasos del 2 al 6 actualizando  $\boldsymbol{\omega}^{(0)}$  a  $\boldsymbol{\omega}^{(1)}$  y así sucesivamente.

## 2.4. Algoritmo Combinado

Desde la aparición de los primeros algoritmos para el cálculo de diseños óptimos, se han desarrollado muchos trabajos dedicados al estudio y mejora de estas técnicas. En la sección anterior se hacía un análisis pormenorizado de dos de las técnicas más utilizadas centrándonos en el caso de  $D$ -optimización, que es el que ha recibido una mayor acogida debido a su interpretación.

Haciendo una pequeña revisión bibliográfica de la evolución de estos trabajos hasta la actualidad, puede deducirse que, en general, las líneas de desarrollo de las técnicas numéricas para el cálculo de diseños óptimos pueden clasificarse en dos grupos: aquellas cuyos fundamentos se basan en la idea original de Wynn y Fedorov ([Wyn70a], [Fed72a]) y, por otro lado, las que siguen los principios de Silvey, Titterton y Torsney [Sil78].

De la primera corriente, la mayor parte de los esfuerzos han ido dirigidos al desarrollo de algoritmos numéricos para la construcción de diseños exactos y aproximados, basándose en esquemas de intercambio y han sido propuestos para construir diseños  $D$ -óptimos. Los trabajos de Wynn [Wyn70a], Mitchell y Miller [Mit70a], Fedorov ([Fed72a], p. 164), Cook y Nachtsheim [Coo80], el algoritmo DETMAX de Mitchell [Mit74a] y el algoritmo de intercambio KL de Atkinson y Donev [Atk89] son algunos de los más destacados. Haines [Hai87] aplica el algoritmo heurístico *simulated annealing* para construir diseños  $D$ -óptimos, mientras que Meyer y Nachtsheim [Mey95a] definen un algoritmo cíclico coordinado para construir diseños  $D$ -óptimos y otros diseños para modelos lineales en espacios continuos.

En cuanto a los trabajos de interés que han surgido a raíz del algoritmo multiplicativo, pueden destacarse los siguientes: Mandal y Torsney [Man06] adaptan el algoritmo multiplicativo para agrupar puntos de diseño, *clusters*, y mejorar así la eficiencia de los diseños alcanzados, Harman y Pronzato [Har07] estudian métodos para eliminar puntos de diseño no óptimos con lo que reducen considerablemente la dimensión del problema, Dette et al. [Det08] dan una variante del algoritmo multiplicativo tomando una longitud de paso mayor en cada iteración que mantiene la convergencia monótona y Torsney y Martín [Tor09b] proponen una modificación de éste que consiste en una aproximación simultánea de puntos y pesos, que puede utilizarse cuando existen estructuras de correlación entre las observaciones y cuando se buscan diseños exactos.

De la trayectoria bibliográfica anterior, puede observarse que las nuevas aportaciones van encaminadas a solventar los problemas que

surgen de los algoritmos estándar o bien son extensiones y/o modificaciones de los mismos. Además, es destacable que la mayoría de los procedimientos anteriores, siguiendo una u otra línea, van dirigidos o bien a la obtención de puntos óptimos donde los pesos son actualizados a conveniencia (corriente WF), o bien a la obtención de pesos óptimos donde se recogen casi todos los puntos del espacio discretizado (corriente AM).

La idea de no predisponer la búsqueda de los diseños al cálculo de puntos o pesos óptimos para modificaciones de pesos deseables o puntos prefijados (no óptimos) respectivamente, es la principal motivación por la que surge el *algoritmo combinado*. La predisposición anterior es la principal causa de los problemas que presentan los algoritmos ya establecidos. Algunos de estos problemas son la convergencia lenta, el reparto del peso entre puntos de diseño similares o la difícil eliminación de puntos que no pertenecen al soporte.

El algoritmo propuesto se basará en ajustar convenientemente las estrategias seguidas por los algoritmos estándar de modo que, las propiedades conjuntas sirvan para solucionar los problemas surgidos al emplear estos métodos de forma aislada.

Supongamos que partimos de un diseño no óptimo  $\xi^{(n)}$  con matriz de información  $M(\xi^{(n)})$  no singular y pesos pertenecientes a  $\Omega_+$ . Supongamos también que el criterio de optimización considerado,  $\Psi$ , es diferenciable en  $M(\xi^{(n)})$ . El procedimiento puede dividirse en dos fases:

(1) Determinación de la dirección óptima:

Se trata de determinar el punto  $x_{n+1}$  que hace máximo el valor de la derivada direccional  $F_{\Psi}[M(\xi^{(n)}), f(x)f^t(x)]$  sobre  $\chi$  siguiendo la idea del algoritmo WF. Incluyendo tal punto en el diseño actual o dándole mayor peso, estaremos moviéndonos desde  $M(\xi^{(n)})$  en la dirección de  $f(x_{n+1})f^t(x_{n+1})$ , con lo que se conseguirá ganar información (medida en términos de  $\Psi$ ) y, por tanto, acercarnos al óptimo.

Para llevar a cabo el paso anterior, se necesitará una reestructuración en el diseño  $\xi^{(n)}$  que conllevará una modificación de los pesos. Como se estudiaba en la sección 2.2., la elección del peso del nuevo punto,  $\alpha_{n+1}$ , resulta ser una cuestión más arbitraria mientras que se mantenga la convergencia. Algunos ejemplos son las elecciones (2.3), (2.4) y (2.5).

Los pesos se actualizarán de acuerdo a la regla

$$\xi_{WF}^{(n+1)} = (1 - \alpha_{n+1})\xi^{(n)} + \alpha_{n+1}\xi_{x_{n+1}}$$

y la matriz de información de esta primera etapa será

$$M(\xi_{WF}^{(n+1)}) = (1 - \alpha_{n+1})M(\xi^{(n)}) + \alpha_{n+1}f(x_{n+1})f^t(x_{n+1}).$$

(2) Determinación de los pesos óptimos:

Una vez conocido hacia dónde tenemos que movernos para alcanzar el óptimo, el siguiente paso será determinar la mejor cantidad de avance. La iteración propuesta por el algoritmo multiplicativo resulta una elección óptima, puesto que la longitud de paso es proporcional a la información ganada. Los pesos se actualizarán conforme a la regla definida en (2.9)

$$\omega_j^{(n+1)} = \frac{\omega_j^{(n)}h(d_j^{(n)}, \delta)}{\sum_{i=1}^k \omega_i^{(n)}h(d_i^{(n)}, \delta)} \quad \text{o} \quad \omega_j^{(n+1)} = \frac{\omega_j^{(n)}h(z_j^{(n)}, \delta)}{\sum_{i=1}^k \omega_i^{(n)}h(z_i^{(n)}, \delta)}.$$

El diseño formado por los puntos del apartado (1) y pesos calculados siguiendo la fórmula anterior lo denotaremos por  $\xi_{AM}^{(n+1)}$ . A partir de él podrá calcularse la matriz de información  $M(\xi_{AM}^{(n+1)})$ .

Tras aplicar los procesos (1) y (2) al diseño inicial  $\xi^{(n)}$ , resultará otro diseño  $\xi_C^{(n+1)}$  y su matriz de información  $M(\xi_C^{(n+1)})$  con el que habremos completado una iteración del *algoritmo combinado*. A continuación se evaluará si éste está lo suficientemente próximo al

óptimo. Este examen actuará como regla de parada, de manera que, de no ser  $\Psi$ -óptimo se repetirá el proceso hasta converger.

La justificación de la doble optimización

$$\begin{cases} x_{n+1} = \arg \text{máx } F_{\Psi}[M(\xi^{(n)}), f(x)f^t(x)] \\ \omega^{(n+1)} \text{ tal que } F_{\Phi}(\omega^{(n)}, \omega^{(n+1)}) \geq 0 \end{cases}$$

tiene como trasfondo poner solución a los problemas surgidos de los algoritmos estándar. En primer lugar, el hecho de que en cada iteración se elijan puntos óptimos hace que la elección de los mismos sea más precisa (no es necesario predisponer un mallado, todos los puntos del espacio de diseño son candidatos). En consecuencia, el proceso es mucho más ágil pues sólo se realizan actualizaciones sobre puntos potenciales. Por otro lado, la actualización óptima de los pesos resulta ser clave para acelerar la convergencia. Con esta elección garantizamos acercarnos al óptimo, no tratándose de un ajuste arbitrario. Además, se facilita la eliminación de puntos que no están en el soporte (les resta su peso en pocas iteraciones) y se reduce considerablemente la aparición de puntos de diseño similares por este mismo motivo.

Una de las ventajas del *algoritmo combinado* es que es un procedimiento general, pudiendo aplicarse sobre cualquier criterio diferenciable. A continuación se describe el pseudocódigo para un criterio  $\Psi$  cualquiera:

### 2.4.1. Algoritmo

1. Tomamos un diseño inicial regular  $\xi^{(0)}$  formado por  $n$  puntos  $x_1, \dots, x_n$  y pesos  $\omega_1^{(0)}, \dots, \omega_n^{(0)}$  respectivamente ( $\sum_{i=1}^n \omega_i^{(0)} = 1$ ,  $n \geq m$ ,  $\omega^{(0)} \in \Omega_+$ ).
2. Calculamos la matriz de información del diseño  $\xi^{(0)}$ ,

$$M(\xi^{(0)}) = \sum_{i=1}^n \omega_i^{(0)} \lambda(x_i) f(x_i) f^t(x_i)$$

y su inversa.

## 3. Determinación de la dirección óptima:

(i) Buscamos el punto

$$x_{n+1} = \arg \max_{x \in \mathcal{X}} F_{\Psi}[M(\xi^{(n)}), f(x)f^t(x)]$$

y calculamos el peso  $\alpha_1$  que se dará al nuevo punto. Elegir una sucesión de longitud de paso verificando (2.3), (2.4) o (2.5). Una posibilidad es considerar paso armónico  $\alpha_1 = \frac{1}{k+1}$ .

(ii) Se construye el diseño  $\xi_{WF}^{(1)} = (1 - \alpha_1)\xi^{(0)} + \alpha_1\xi_{x_{n+1}}$  formado por los puntos y pesos siguientes:

$$\xi_{WF}^{(1)} = \left\{ \begin{array}{cccc} x_1 & \dots & x_n & x_{n+1} \\ \bar{\omega}_1 = (1 - \alpha_1)\omega_1^{(0)} & \dots & \bar{\omega}_n = (1 - \alpha_1)\omega_n^{(0)} & \bar{\omega}_{n+1} = \alpha_1 \end{array} \right\}$$

(iii) Con el diseño anterior se calcula la nueva matriz de información  $M(\xi_{WF}^{(1)})$  y su inversa.

## 4. Determinación de los pesos óptimos:

(i) Para cada  $j = 1, \dots, n+1$  calculamos los pesos óptimos siguiendo la regla (2.9)

$$\omega_j^{(n+1)} = \frac{\omega_j^{(n)} h(d_j^{(n)}, \delta)}{\sum_{i=1}^k \omega_i^{(n)} h(d_i^{(n)}, \delta)} \quad \circ \quad \omega_j^{(n+1)} = \frac{\omega_j^{(n)} h(z_j^{(n)}, \delta)}{\sum_{i=1}^k \omega_i^{(n)} h(z_i^{(n)}, \delta)}$$

(ii) Se construye el nuevo diseño

$$\xi_{AM}^{(1)} = \left\{ \begin{array}{cccc} x_1 & \dots & x_n & x_{n+1} \\ \omega_1^{(1)} & \dots & \omega_n^{(1)} & \omega_{n+1}^{(1)} \end{array} \right\} \stackrel{Not}{=} \xi_C^{(1)}$$

(iii) Con el diseño anterior se calcula la nueva matriz de información  $M(\xi_C^{(1)})$  y su inversa.

## 5. Se comprueba si se verifica la condición

$$1 + \frac{\inf_{x \in \mathcal{X}} F_{\Psi}[M(\xi_C^{(1)}), f(x)f^t(x)]}{\Psi[M(\xi_C^{(1)})]} \geq \gamma$$

donde  $\gamma$  es cierta precisión prefijada.

6. Si se verifica la condición anterior,  
 el diseño  $\xi_C^{(1)}$  está suficientemente próximo al  $\Psi$ -óptimo.  
 Si no se verifica, se repiten los pasos del 3 al 5  
 actualizando  $\xi^{(0)}$  a  $\xi_C^{(1)}$  y así sucesivamente.

Este trabajo se ha centrado en el criterio de  $D$ -optimización ya que éste resultó ser más adecuado para resolver los ejemplos reales que se muestran más adelante. Se realizaron pruebas para diferentes longitudes de paso y, conforme a los resultados obtenidos, se sugiere tomar la longitud de paso armónico. Con esta elección se obtuvieron los mejores rendimientos, de modo que será la seleccionada para probar la convergencia e implementar el nuevo algoritmo para el criterio de  $D$ -optimización.

### 2.4.2. Convergencia para $D$ -optimización

**Teorema 2.7. (Convergencia del algoritmo combinado)**

Dado un diseño inicial regular  $\xi^{(0)}$  formado por  $k$  puntos ( $k \geq m$ ) y pesos  $\omega^{(0)} \in \Omega_+$ , el proceso iterativo definido por el algoritmo combinado para el criterio de  $D$ -optimización converge. Esto es,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \det M(\xi_C^{(n)}) = \det M(\xi^*).$$

Demostración.

Sea  $\xi_C^{(n)}$  el diseño obtenido en la  $n$ -ésima iteración del algoritmo combinado. El siguiente diseño puede escribirse como

$$\xi_C^{(n+1)} = \left\{ \begin{array}{cccc} x_1 & \dots & x_n & x_{n+1} \\ \omega_1^{(n+1)} & \dots & \omega_n^{(n+1)} & \omega_{n+1}^{(n+1)} \end{array} \right\}$$

donde  $x_1, \dots, x_n$  son los puntos de la iteración anterior,

$$x_{n+1} = \arg \max_x \lambda(x) d(x, \xi_C^{(n)})$$

y

$$\omega_i^{(n+1)} = \begin{cases} \left(\frac{1}{n+1}\right) \frac{d(x_i, \xi_{WF}^{(n+1)})}{m} & \text{si } i = n+1 \\ \left(1 - \frac{1}{n+1}\right) \omega_i^{(n)} \frac{d(x_i, \xi_{WF}^{(n+1)})}{m} & \text{si } i \neq n+1 \end{cases}$$

Obsérvese que escrito de este modo se trata esencialmente de una iteración de WF en la que se ha definido una nueva longitud de paso y ésta cumple (2.3):

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \omega^{(n+1)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{n+1}\right) \frac{d(x_{n+1}, \xi_{WF}^{(n+1)})}{m} = 0$$

puesto que  $\frac{d(x_{n+1}, \xi_{WF}^{(n+1)})}{m}$  está acotado por 1. La función de sensibilidad a lo sumo puede valer  $m$  como consecuencia del teorema de equivalencia (observación 1.5). Por otro lado,

$$\sum_{n=1}^{\infty} \omega^{(n+1)} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n+1}\right) \frac{d(x_{n+1}, \xi_{WF}^{(n+1)})}{m} = \infty$$

por ser una serie armónica con exponente  $-1$  en  $n$ , luego divergente.

Por tanto, puesto que cualquier longitud de paso verificando lo anterior no perturba el resultado final del procedimiento WF, el límite coincidirá con el obtenido en tal procedimiento siendo éste  $\det M(\xi^*)$  por el teorema 2.3 con lo que se concluye.

□

### 2.4.3. Algoritmo para $D$ -optimización

El pseudocódigo del algoritmo para el criterio de  $D$ -optimización:

1. Tomamos un diseño inicial regular  $\xi^{(0)}$  formado por  $n$  puntos  $x_1, \dots, x_n$  y pesos  $\omega_1^{(0)}, \dots, \omega_n^{(0)}$  respectivamente ( $\sum_{i=1}^n \omega_i^{(0)} = 1$ ,  $n \geq m$ ,  $\omega^{(0)} \in \Omega_+$ ).

2. Calculamos la matriz de información del diseño  $\xi^{(0)}$ ,

$$M(\xi^{(0)}) = \sum_{i=1}^n \omega_i^{(0)} \lambda(x_i) f(x_i) f^t(x_i)$$

y su inversa.

3. Determinación de la dirección óptima:

(i) Buscamos el punto  $x_{n+1}$  donde se maximiza la función  $\lambda(x)d(x, \xi^{(0)})$  y calculamos el peso que se dará al nuevo punto (paso armónico)

$$x_{n+1} = \underset{x \in \chi}{\operatorname{arg\,m\acute{a}x}} \lambda(x)d(x, \xi^{(0)})$$

$$\alpha_1 = \frac{1}{n+1}.$$

(ii) Se construye el diseño  $\xi_{WF}^{(1)} = (1 - \alpha_1)\xi^{(0)} + \alpha_1\xi_{x_{n+1}}$  formado por los puntos y pesos siguientes:

$$\xi_{WF}^{(1)} = \left\{ \begin{array}{cccc} x_1 & \dots & x_n & x_{n+1} \\ \overline{\omega}_1 = (1 - \alpha_1)\omega_1^{(0)} & \dots & \overline{\omega}_n = (1 - \alpha_1)\omega_n^{(0)} & \overline{\omega}_{n+1} = \alpha_1 \end{array} \right\}$$

(iii) Con el diseño anterior se calcula la nueva matriz de información  $M(\xi_{WF}^{(1)})$  y su inversa.

4. Determinación de los pesos óptimos:

(i) Calculamos los pesos óptimos siguiendo la regla

$$\omega_i^{(1)} = \overline{\omega}_i \cdot \frac{\lambda(x_i) f^t(x_i) M^{-1}(\xi_{WF}^{(n+1)}) f(x_i)}{\sum_{i=1}^{n+1} (\overline{\omega}_i \lambda(x_i) f^t(x_i) M^{-1}(\xi_{WF}^{(n+1)}) f(x_i))}$$

(ii) Se construye el nuevo diseño

$$\xi_{AM}^{(1)} = \left\{ \begin{array}{cccc} x_1 & \dots & x_n & x_{n+1} \\ \omega_1^{(1)} & \dots & \omega_n^{(1)} & \omega_{n+1}^{(1)} \end{array} \right\} \stackrel{\text{Not}}{=} \xi_C^{(1)}$$

(iii) Con el diseño anterior se calcula la nueva matriz de información  $M(\xi_C^{(1)})$  y su inversa.

5. Se comprueba si se verifica alguna de las condiciones (ver (2.1) y (2.2)):

$$\frac{m}{\max_x d(x, \xi_C^{(1)})} \geq \gamma_1$$

$$2 - \frac{\max_x d(x, \xi_C^{(1)})}{m} \geq \gamma_2$$

donde  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  son precisiones prefijadas.

6. Si se verifica alguna de las condiciones del paso anterior, el diseño  $\xi_C^{(1)}$  está suficientemente próximo al  $D$ -óptimo.

Si no se verifica ninguna de las reglas de parada anteriores se repiten los pasos del 3 al 5 actualizando  $\xi^{(0)}$  a  $\xi_C^{(1)}$  y así sucesivamente.

Los resultados recogidos en la próxima sección son prueba del buen funcionamiento y velocidad de resolución del *algoritmo combinado* para el criterio de  $D$ -optimización.

#### 2.4.4. Ejemplos Numéricos para $D$ -optimización

En este apartado se ilustra la efectividad del *algoritmo combinado* en comparación con los algoritmos WF y multiplicativo estudiados en los apartados anteriores para algunos ejemplos de modelos de regresión y considerando el criterio de  $D$ -optimización.

Todos los algoritmos fueron implementados en Wolfram Mathematica 8.0. Para cada uno de los ejemplos que se presentan a continuación, se muestran las tablas con los resultados obtenidos con diferentes diseños iniciales. En ellas se recogen los tiempos de ejecución (medidos en segundos de tiempo de CPU) y número de iteraciones (entre paréntesis). Se incluyen también gráficos donde se muestra la evolución de la cota de eficiencia de los diseños alcanzados durante las iteraciones hasta satisfacer la condición de parada.

Un punto importante en el desarrollo de las pruebas es la **condición de parada**. Para ello se utilizaron las cotas de la eficiencia

(2.2) y (2.1). Puesto que se obtuvieron resultados similares y la cota de Atwood mejora la de Kiefer siguiendo la proposición 2.1, se omitieron las salidas obtenidas con esta última cota. Las pruebas finalizaron cuando la cota de la eficiencia era igual o superior al 99 %. No fue necesario establecer un número máximo de iteraciones puesto que todos los casos de estudio convergieron al óptimo.

Los ejemplos realizados se han clasificado en dos grupos. En el primero, se utilizan modelos polinómicos sencillos, estudiados en la literatura, a modo de ejemplos ilustrativos. En el segundo grupo, los modelos seleccionados son utilizados por los experimentadores en numerosos ejemplos reales. Son modelos no lineales, de mayor complejidad de cálculo.

### Ejemplos Ilustrativos

Con cada uno de los modelos de este apartado se realizaron varias pruebas partiendo de diferentes **diseños iniciales**:

- El primero de ellos es un diseño con el número de puntos establecido por el teorema de Caratheodory y situados de manera equiespaciada en la región de diseño  $\chi = [a, b]$ . Los pesos se distribuyen uniformemente sobre el conjunto de puntos. Así pues

$$\xi_1^{(0)} = \left\{ \begin{array}{cccc} x_1 = a & x_2 = a + \frac{b-a}{n-1} & \dots & x_n = b \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n} & \dots & \frac{1}{n} \end{array} \right\},$$

$$\text{con } n = \frac{m(m+1)}{2} + 1.$$

- El segundo se caracteriza por tener el número de puntos establecido por el teorema de Caratheodory para  $D$ -optimización (más restrictivo, ver p.79 [Fed72a] ) y la localización de los puntos es aleatoria dentro de la región de diseño. La distribución de los pesos es uniforme.

$$\xi_2^{(0)} = \left\{ \begin{array}{cccc} x_1^R & x_2^R & \cdots & x_n^R \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n} & \cdots & \frac{1}{n} \end{array} \right\},$$

con  $n = \frac{m(m+1)}{2}$ .

- El tercero tiene el mínimo número de puntos necesario para que la matriz de información sea no singular. Dicho número se corresponde con el número de parámetros  $m$  del modelo (teorema 1.1). A este tipo de diseños se les llama *diseños saturados*. La distribución de pesos es uniforme y los puntos de diseño se seleccionan aleatoriamente en  $\chi$ .

$$\xi_3^{(0)} = \left\{ \begin{array}{cccc} x_1^R & x_2^R & \cdots & x_n^R \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n} & \cdots & \frac{1}{n} \end{array} \right\},$$

con  $n = m$ .

Todos los diseños están formados por un número pequeño de puntos, con lo que se pretende estudiar la capacidad de búsqueda del algoritmo. El primero de los diseños se pensó que fuera equiespaciado para analizar el comportamiento del algoritmo en caso de tener que alcanzar puntos intermedios, partiendo de puntos que recorren todo el espacio de diseño situados a cierta distancia. La idea de seleccionar los puntos aleatoriamente en los diseños 2 y 3 tiene como trasfondo estudiar su funcionamiento para cualquier diseño inicial arbitrario, sin ninguna predeterminación. El último de ellos se caracteriza, además, por considerar el menor número de puntos posible. Este es el caso más delicado, por ser el más favorable a encontrar singularidad en la matriz de información.

En el algoritmo multiplicativo con el objetivo de no excluir a priori ninguno de los puntos del diseño óptimo, se consideran mallas de puntos equiespaciados suficientemente grandes. En particular  $n = 100$  para la primera y segunda prueba y a  $n = 50$  para la tercera, queriendo estudiar en ésta última las diferencias con AC aun proporcionando una pequeña “ventaja” al AM (pues menos puntos

deben ser actualizados para alcanzar el óptimo). Los pesos iniciales serán uniformemente distribuidos.

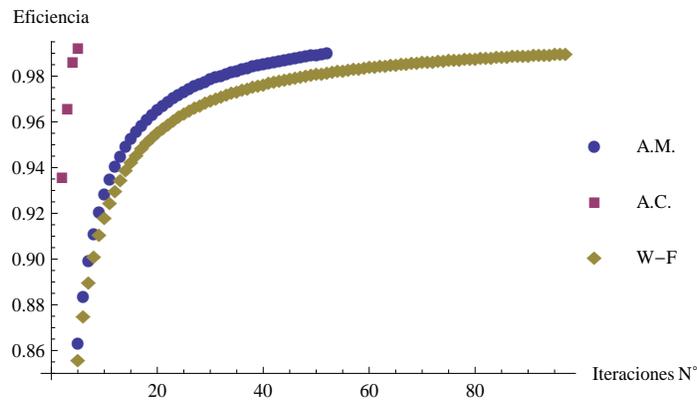
### Ejemplo 1. Regresión lineal simple

El primer modelo considerado es el más sencillo, correspondiente al modelo lineal con dos parámetros:

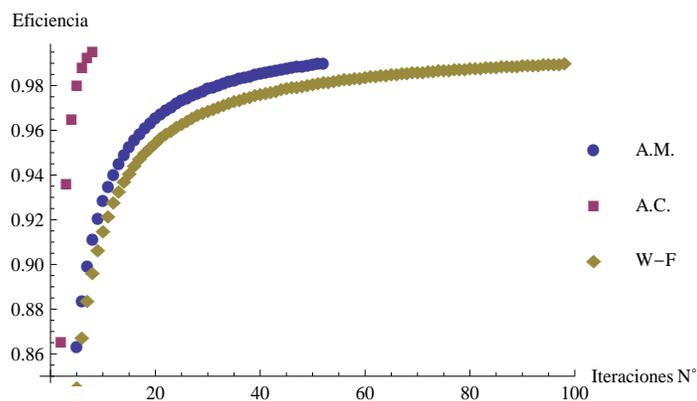
$$\eta_1(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x, \text{ con } \chi = [-1, 1]$$

Algoritmo	$\xi_1^{(0)}$	$\xi_2^{(0)}$	$\xi_3^{(0)}$
AC	1.938 (5)	3.015 (8)	2.25 (6)
WF	27.89 (97)	31.219 (98)	32.109 (98)
AM	8.281 (52)	8.937 (52)	6.609 (37)

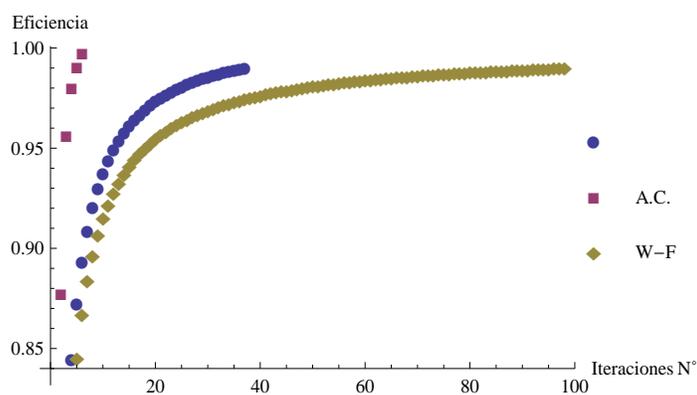
**Tabla 2.1:** Resultados para el modelo de regresión lineal con dos parámetros  $\eta_1(x, \theta)$ .



**Figura 2.1:** Comparación de la cota de la eficiencia para modelo  $\eta_1(x, \theta)$  y diseño  $\xi_1^{(0)}$ .



**Figura 2.2:** Comparación de la cota de la eficiencia para modelo  $\eta_1(x, \theta)$  y diseño  $\xi_2^{(0)}$ .



**Figura 2.3:** Comparación de la cota de la eficiencia para modelo  $\eta_1(x, \theta)$  y diseño  $\xi_3^{(0)}$ .

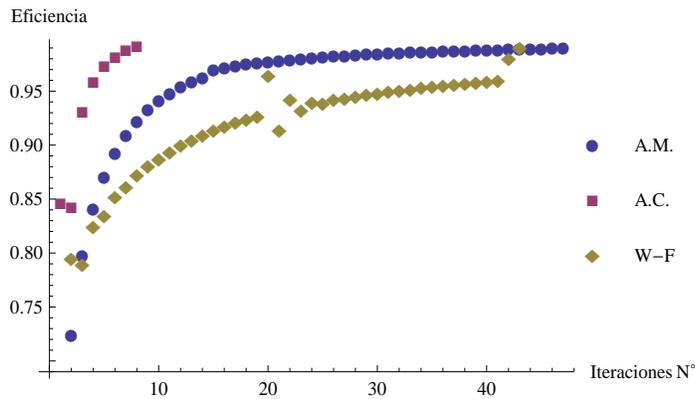
## Ejemplo 2. Regresión Cuadrática

El segundo modelo escogido es el modelo de regresión cuadrática. Este modelo es lineal en los tres parámetros que lo integran:

$$\eta_2(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2, \text{ con } \chi = [-1, 1]$$

Algoritmo	$\xi_1^{(0)}$	$\xi_2^{(0)}$	$\xi_3^{(0)}$
AC	2.718 (8)	3.36 (10)	2.11 (5)
WF	16.375 (43)	18.141 (47)	16.048 (44)
AM	7.749 (47)	7.999 (47)	7.001 (47)

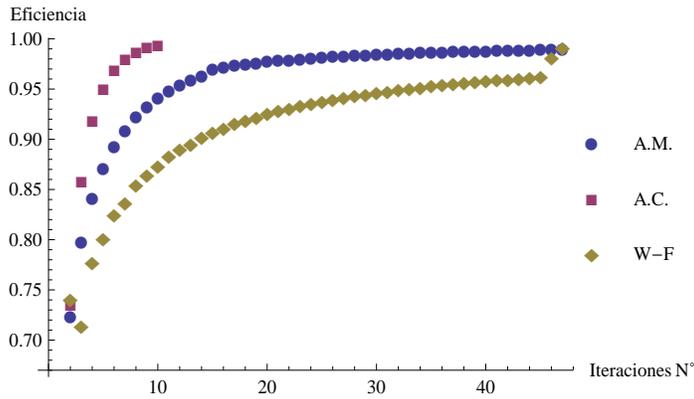
**Tabla 2.2:** Resultados para el modelo de regresión lineal con tres parámetros  $\eta_2(x, \theta)$ .



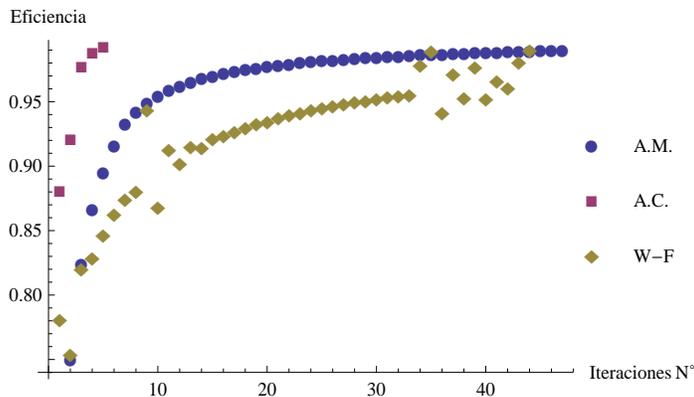
**Figura 2.4:** Comparación de la cota de la eficiencia para modelo  $\eta_2(x, \theta)$  y diseño  $\xi_1^{(0)}$ .

## Ejemplos Reales

Como mencionábamos anteriormente, los modelos que se muestran a continuación han sido frecuentemente usados por los experimen-



**Figura 2.5:** Comparación de la cota de la eficiencia para modelo  $\eta_2(x, \theta)$  y diseño  $\xi_2^{(0)}$ .



**Figura 2.6:** Comparación de la cota de la eficiencia para modelo  $\eta_2(x, \theta)$  y diseño  $\xi_3^{(0)}$ .

tadores. Es por ello que para estos casos de estudio, se han utilizado como diseños iniciales una clase de diseños especiales, a los cuales

los experimentadores recurren con frecuencia para llevar a cabo sus ensayos. Los tres primeros tipos de diseño se caracterizan por tomar siempre los extremos del intervalo y el resto de puntos sigue una regla definida que se describe a continuación:

- Diseño uniformemente distribuido (U). Este diseño viene definido por un parámetro espacial,  $d$ , que permanece constante y corresponde a la distancia entre cada par de puntos consecutivos en el diseño.
- Diseño aritméticamente distribuido (A). En este tipo de diseño, el parámetro espacial crece siguiendo una progresión aritmética,  $id$ , a medida que crece la distancia al centro de la región de diseño, con  $i = 1, 2, \dots, k/2$ . Si  $k$ , el número de puntos de diseño es impar, entonces el centro de  $\chi$  forma parte del soporte.
- Diseño geoméricamente distribuido (G). Se define como un diseño aritméticamente distribuido salvo que el parámetro espacial crece siguiendo una progresión geométrica,  $d^i$ .
- Diseño aleatoriamente distribuido (R). Los puntos de soporte son aleatoriamente seleccionados en  $\chi$  para dar arbitrariedad al diseño inicial.

Para evitar la posibilidad de haber generado un diseño inicial cercano al óptimo, se optó por dar una distribución de pesos uniforme para no favorecer a ningún punto. Por otro lado, el número de puntos del soporte fue el establecido por el teorema de Caratheodory. Este pequeño número de puntos nos servirá para analizar la capacidad de búsqueda del algoritmo. Esta clase de diseños no pueden utilizarse al aplicar el AM por construcción de este algoritmo, de modo que se seguirá la misma estrategia que la descrita en los ejemplos ilustrativos.

Los resultados de los modelos seleccionados se resumen en los gráficos y tablas que se muestran a continuación. En ellos se recogen

la evolución de la cota de la eficiencia con las iteraciones así como los rendimientos computacionales obtenidos respectivamente.

### Ejemplo 3. Modelo de Michaelis Menten

El modelo de Michaelis Menten (MM)

$$\eta_3(x, \theta) = \frac{\nu x}{(k + x)}, \text{ con } \chi = [0, 4] \text{ y } \theta = (\nu, k).$$

se usa para predecir la velocidad de formación de un producto por cantidad de sustrato en una reacción química. La variable independiente,  $x$ , corresponderá a la cantidad de sustrato, el parámetro  $\nu$  denota la saturación máxima y el parámetro  $k$  es la conocida constante de Michaelis-Menten. Si damos como concentración el valor de esta constante, en este punto se alcanzará la mitad de la saturación máxima. Para más información sobre cuestiones de diseño para este modelo consultar [Fid02].

Este modelo también se utiliza frecuentemente en biología para describir la rapidez con que se llega al equilibrio cinético en sistemas enzimáticos y en análisis de datos de fármacos, neurotransmisores y receptores hormonales. Otra aplicación la encontramos en modelos compartimentales, para modelizar la razón de cambio de un compartimento a otro.

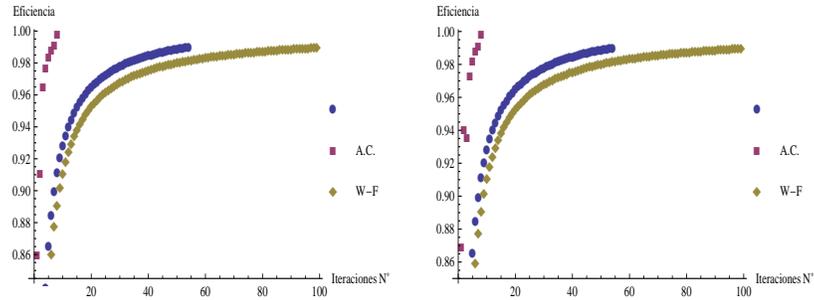
Como puede observarse, se trata de un modelo no lineal en los parámetros por lo que se necesitarán estimaciones iniciales de éstos siguiendo lo estudiado en la sección 1.6. Se tomarán como valores nominales  $\nu_{(0)} = 0.106$  y  $k_{(0)} = 1.7$ .

Los diseños iniciales utilizados para llevar a cabo las pruebas que se muestran en las figuras 2.7 y 2.8 son:

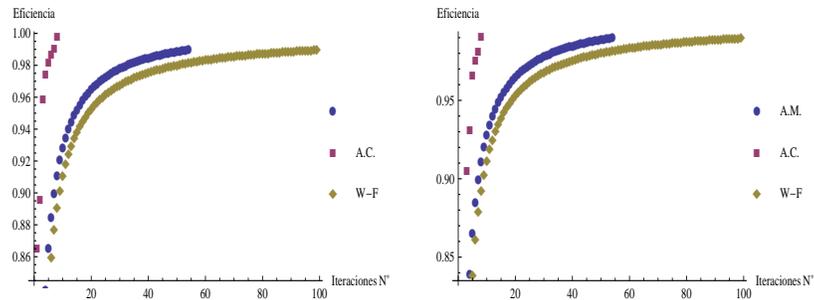
$$\begin{aligned} \xi_U^{(0)} &= \{0, 4/3, 8/3, 4\} \\ \xi_A^{(0)} &= \{0, 8/5, 12/5, 4\} \\ \xi_G^{(0)} &= \{0, 1.41, 2.59, 4\} \\ \xi_R^{(0)} &= \{0.24, 2.19, 2.79, 3.18\}, \end{aligned}$$

Algoritmo	$\xi_U^{(0)}$	$\xi_A^{(0)}$	$\xi_G^{(0)}$	$\xi_R^{(0)}$
AC	1.969 (8)	1.859 (7)	1.984 (8)	1.843 (7)
WF	16.359 (99)	16.499 (99)	16.391 (99)	16.844 (99)
AM	5.203 (54)	5.109 (54)	5.109 (54)	5.11 (54)

**Tabla 2.3** : Resultados para el modelo de Michaelis-Menten  $\eta_3(x, \theta)$ .



**Figura 2.7**: Comparación de la cota de la eficiencia para el modelo  $\eta_3(x, \theta)$  y diseños  $\xi_U^{(0)}$  y  $\xi_A^{(0)}$  respectivamente.



**Figura 2.8**: Comparación de la cota de la eficiencia para el modelo  $\eta_3(x, \theta)$  y diseños  $\xi_G^{(0)}$  y  $\xi_R^{(0)}$  respectivamente.

El diseño  $D$ -óptimo alcanzado en todas las pruebas fue un diseño de pesos uniformes sobre los puntos  $x = 0.9$  y  $4$ .

#### Ejemplo 4. Modelo Compartimental

El último ejemplo es el siguiente modelo compartimental ampliamente usado en farmacología:

$$\eta_4(t, \theta) = \theta_3[e^{-\theta_2 t} - e^{-\theta_1 t}], \quad \chi = [0, 20].$$

En este modelo la respuesta media mide el nivel de concentración de un fármaco en un compartimento de destino en el cuerpo, como por ejemplo el hígado. El interés reside en estudiar el tiempo que el fármaco pasa dentro del compartimento, la concentración máxima y el tiempo transcurrido hasta alcanzarla. Fresen [Fre84] presenta los resultados de un experimento en el que aplicó este modelo para medir la concentración de teofilina en sangre, un estimulante del sistema nervioso central en caballos.

Al igual que el ejemplo anterior, se trata de un modelo no lineal por lo que se necesitarán estimaciones iniciales de éstos. Siguiendo el ejemplo 17.4 de [Atk07], se tomarán como valores nominales  $\theta_1^{(0)} = 4.29$ ,  $\theta_2^{(0)} = 0.0589$  y  $\theta_3^{(0)} = 21.80$ .

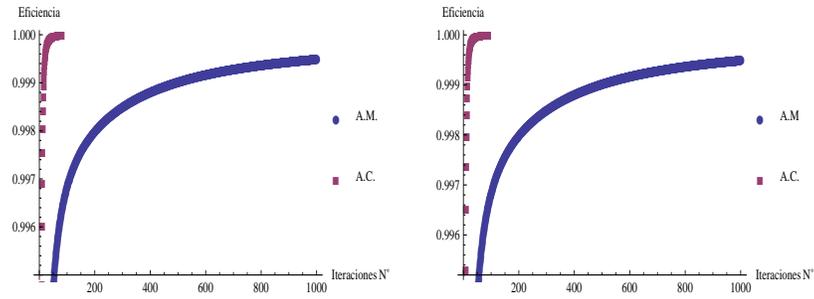
Las figuras 2.9 y 2.10 muestran algunas de las pruebas llevadas a cabo para comparar la eficiencia de los distintos algoritmos considerando como diseños iniciales:

$$\begin{aligned} \xi_U^{(0)} &= \{0, 4, 8, 12, 16, 20\} \\ \xi_A^{(0)} &= \{0, 60/11, 100/11, 120/11, 160/11, 20\} \\ \xi_G^{(0)} &= \{0, 5.83, 9.07, 10.87, 14.11, 20\} \\ \xi_R^{(0)} &= \{1.61, 1.70, 5.35, 6.27, 7.25, 19.8\}. \end{aligned}$$

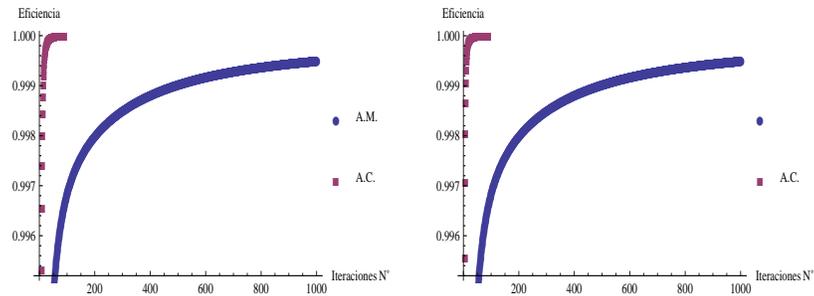
El diseño  $D$ -óptimo alcanzado realizaría  $1/3$  de las observaciones sobre  $t = 0.2$ ,  $1.4$  y  $18$ . En este ejemplo, el algoritmo WF no fue capaz de obtener un diseño suficientemente cercano al óptimo, de modo que los resultados fueron omitidos.

Algoritmo	$\xi_U^{(0)}$	$\xi_A^{(0)}$	$\xi_G^{(0)}$	$\xi_R^{(0)}$
AC	13.734 (81)	15.969 (90)	18.109 (93)	15.188 (90)
WF	---	---	---	---
AM	90.859 (1001)	90.562 (1001)	92.923 (1001)	90.906 (1001)

**Tabla 2.4** : Resultados para el modelo compartimental  $\eta_4(x, \theta)$ .



**Figura 2.9**: Comparación de la cota de la eficiencia para modelo  $\eta_4(x, \theta)$  y diseños  $\xi_U^{(0)}$  y  $\xi_A^{(0)}$  respectivamente.



**Figura 2.10**: Comparación de la cota de la eficiencia para modelo  $\eta_4(x, \theta)$  y diseños  $\xi_G^{(0)}$  y  $\xi_R^{(0)}$  respectivamente.

### 2.4.5. Conclusiones

Como puede comprobarse en las tablas 2.1-2.4 y gráficos 2.1-2.10, el *algoritmo combinado* supone una mejora sustancial con respecto a los algoritmos multiplicativo y Wynn-Federov para el criterio de  $D$ -optimalidad. Se obtuvieron mejores resultados en todos los casos de estudio, de lo cual se deduce que el buen funcionamiento del algoritmo propuesto es independiente del diseño inicial ( $n^\circ$  puntos, localización y pesos) y del modelo elegido.

Cabe destacar que para el último de los ejemplos no fue posible calcular diseños óptimos con el algoritmo de WF ya que su dificultad de cálculo excedía las limitaciones computacionales. Esto pone de manifiesto la limitación de este algoritmo para el cálculo de diseños óptimos.

El algoritmo multiplicativo resultó ser considerablemente más rápido que el WF. Sin embargo, el *algoritmo combinado* superó el mejor de los casos anteriores incluso cuando se fue más tolerante con éste último (ver ejemplos ilustrativos, caso  $\xi_3^{(0)}$  con  $n = 50$ ). También cabe destacar que la variación de tiempo que experimenta el AC desde el modelo más sencillo al más complejo ( $\eta_1(x, \theta)$ ,  $\eta_2(x, \theta)$ ,  $\eta_3(x, \theta)$ ,  $\eta_4(x, \theta)$  en este orden) es relativamente pequeña.

Con el número de iteraciones existen ligeras diferencias con respecto a lo establecido en el párrafo anterior para el tiempo de ejecución en el último ejemplo. No obstante, esto no afecta a efectos de la eficiencia por lo que podemos decir que se mantiene el mismo comportamiento.

Las gráficas ratifican los resultados recogidos en las tablas. En ellas puede observarse cómo el AC alcanza rápidamente la eficiencia requerida mientras para el AM y WF se prolonga en las iteraciones y, por tanto, en el tiempo. Esto conlleva un coste computacional que es reducido significativamente con el *algoritmo combinado*. En las figuras 2.4 y 2.6 puede contemplarse como el WF manifiesta un comportamiento oscilatorio, lo que conlleva a una parada prematura del proceso obteniéndose menor número de iteraciones y menor

tiempo comparando con otras pruebas pero que, en ningún caso, supera los resultados obtenidos con AC.

La eficiencia del *algoritmo combinado* ha sido probada a través de numerosos ejemplos para el criterio de  $D$ -optimalidad. Sin embargo, el algoritmo propuesto puede aplicarse a cualquier criterio de optimalidad diferenciable como se detalló anteriormente. En este sentido, se está implementando para otros criterios. En particular, se han realizado estudios preliminares para  $A$ -optimización. Como línea de investigación futura se pretende analizar su eficiencia para un amplio abanico de criterios así como la prueba de su convergencia.

# Capítulo 3

## Experimentos con Mezclas

### 3.1. Introducción

La formulación óptima de productos para su puesta en el mercado es un reto que afrontan a diario diferentes áreas de las ciencias experimentales y la ingeniería. La búsqueda de la composición óptima de fertilizantes es fundamental para el correcto desarrollo de cierto cultivo, la formulación óptima de un fármaco para mantener las propiedades de solubilidad requeridas o la elección de las cantidades que representen a las distintas familias de hidrocarburos en un combustible de sustitución son algunos de los ejemplos que surgen en la ingeniería agrónoma, en la industria farmacéutica y en la industria petroquímica por citar algunos.

El objetivo fundamental que se persigue en la etapa experimental es determinar qué composición (o composiciones) explican adecuadamente la característica de interés del producto final en cuestión. En otras palabras, identificar las proporciones de las mezclas que mejor describen la propiedad objeto de estudio. Formalmente, un problema de mezclas es aquél en el que las variables controlables por el experimentador son no negativas, pertenecen al intervalo  $[0, 1]$  y son dependientes entre sí a través de la relación  $\mathbf{1}'_q \mathbf{p} = 1$ , siendo  $\mathbf{1}_q = (1, \dots, 1)' \in \mathbb{R}^q$  y  $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_q)'$  el vector de proporciones

relativas en una mezcla de  $q$  ingredientes. Por tanto, la región de diseño  $\chi$  se trata de una región restringida, conocida como *simplex*  $(q - 1)$ -dimensional

$$\mathcal{S} = \{\mathbf{p} \in [0, 1]^q : \mathbf{1}'_q \mathbf{p} = 1\}.$$

Como se verá más adelante, en algunos problemas reales existen restricciones adicionales sobre los componentes,  $0 \leq L_i \leq p_i \leq U_i \leq 1$ ,  $i = 1, \dots, q$  siendo  $L_i$  y  $U_i$  una cota inferior y superior respectivamente del ingrediente  $i$ -ésimo. A este tipo de problemas los denominaremos *problemas de mezclas restringidos*. Estas situaciones se producen fundamentalmente debido a limitaciones propias del experimento o bien debido a la disponibilidad de los ingredientes.

El diseño de experimentos con mezclas es un problema relativamente joven que comienza a estudiarse a mediados de los años 50. En 1955, Claringbold estudió los beneficios de utilizar una clase de diseños “especiales” que denomina *simplex designs* en lugar de los populares diseños factoriales sobre un caso práctico relacionado con el suministro de cierta clase de hormonas en ratones [Cla55]. Sin embargo, el padre del diseño de mezclas es Henry Scheffé [Sch58], [Sch63]. Scheffé estableció los fundamentos de este tipo de problemas y los analizó desde un punto de vista de diseño clásico. Su principal contribución fue definir una nueva clase de diseños que presentan buenas propiedades sobre una clase de modelos que también propone. Los estudiaremos en profundidad en las próximas secciones. Kiefer es pionero en aplicar la teoría de diseño óptimo en experimentos con mezclas (Parte II [Kie61]). En este trabajo el autor calcula los primeros diseños  $D$ -óptimos en problemas de mezclas sencillos a través del Teorema General de Equivalencia.

Una de las revisiones más completas realizadas para este tipo de problemas la encontramos en Cornell [Cor02]. Siguiendo a Cornell, un experimento con mezclas lo consideraremos como aquél en el que la respuesta depende únicamente de las proporciones relativas de los ingredientes que integran la mezcla y no de la cantidad total de mezcla. Como se verá más adelante, existen multitud de variantes

a partir de esta definición. La mayoría de ellas se derivan de situaciones reales como, por ejemplo, problemas en los que se consideran variables-factor en el diseño, experimentos en los que la cantidad total de mezcla es variable, etc. (Véase [Vuc83], [Pre98] y [Pie87]).

## 3.2. Diseños de Mezclas

Un diseño de mezclas es una regla de asignación de unidades experimentales a los tratamientos que, en este caso, corresponden a diferentes mixturas presentes en el simplex. En función de cuál sea la regla de asignación que mencionábamos antes, existen varias clases de diseños distinguidos.

### 3.2.1. Diseños Simplex Lattice (DSL)

Sea  $m \geq 1$  un número entero. Un retículo  $\{q, m\}$ -simplex lattice está formado por la colección de puntos cuyas coordenadas son múltiplos enteros de  $1/m$

$$\{\mathbf{p} \in \mathcal{S}, p_i = \frac{j}{m}, 0 \leq j \leq m, 1 \leq i \leq q\}.$$

**Definición 3.1.** *Un diseño  $\{q, m\}$ -simplex lattice es aquél que tiene los puntos de soporte sobre un retículo  $\{q, m\}$ -simplex lattice.*

Los diseños que satisfacen la definición anterior fueron introducidos por Scheffé en 1958 [Sch58]. La figura 3.1 muestra algunos ejemplos de esta clase de diseños. En esta figura, los vértices del simplex representan los componentes puros, las aristas corresponden a las mezclas binarias de los componentes cuyos vértices se unen y los puntos interiores son las mezclas de tres ingredientes.

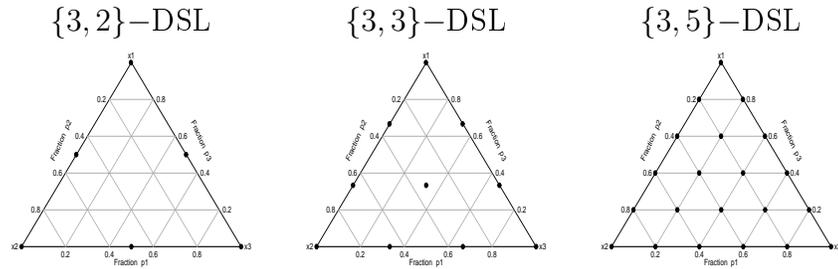


Figura 3.1 : Ejemplos de diseños simplex lattice.

### 3.2.2. Diseños Simplex Centroid (DSC)

En un diseño simplex centroid, los puntos de diseño serán subconjuntos no vacíos de  $q$  componentes verificando que los ingredientes presentes en la mezcla deben estar representados en la misma proporción.

**Definición 3.2.** *Un diseño  $\{q, m\}$ -simplex centroid ( $1 \leq m \leq q$ ) se define como el conjunto de puntos de  $\mathcal{S}$  que tienen  $m$  coordenadas iguales a  $1/j$ ,  $j = 1, \dots, m$ , y las  $q - m$  restantes nulas.*

Los puntos de la forma  $(1/m, \dots, 1/m, 0, \dots, 0)$  (o cualquier permutación de sus coordenadas) son los centroides de los simplex de dimensión menor o igual que  $m - 1$ , también conocidos como *baricentros* de profundidad menor o igual que  $m - 1$ . Scheffé [Sch63] introdujo esta clase de diseños en el caso  $q = m$ . Algunos ejemplos de este tipo de diseños se muestran en la figura 3.2.

### 3.2.3. Diseños Axiales

En los diseños anteriores, todos los puntos de diseño se localizan sobre los vértices, aristas y caras del simplex a excepción del centroide global,  $(1/q, \dots, 1/q)$ , que se encuentra en el interior. Esta nueva clase de diseños se caracteriza por tener todos los puntos de soporte en el interior del simplex. Se denominan ejes del simplex a

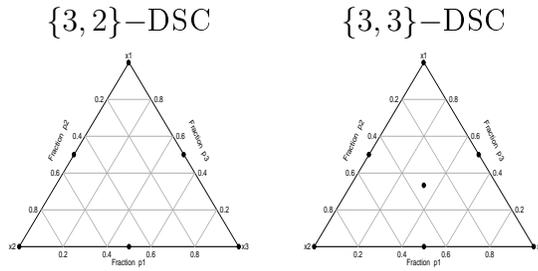


Figura 3.2 : Ejemplos de diseños simplex centroid.

las líneas imaginarias que se extienden desde cada  $(0, \dots, 1^{(i)}, \dots, 0)$  hasta cada  $(\frac{1}{q-1}, \dots, 0^{(i)}, \dots, \frac{1}{q-1})$ ,  $\forall i = 1, \dots, q$ . La longitud del eje es precisamente la mínima de las distancias desde cualquier vértice al lado opuesto.

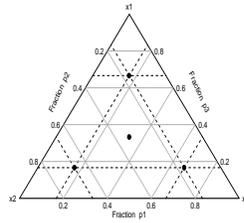
**Definición 3.3.** *Un diseño axial es aquel cuyos puntos de diseño se sitúan sobre los ejes que unen los puntos  $p_i = 0$ ,  $p_j = \frac{1}{q-1}$  para todo  $j \neq i$  hasta el vértice  $p_i = 1$ ,  $p_j = 0$  para todo  $j \neq i$ . Por tanto, los puntos del soporte son de la forma*

$$\left\{ \left( \frac{1 + (q-1)\Delta}{q}, \frac{1-\Delta}{q}, \dots, \frac{1-\Delta}{q} \right) \in \mathcal{S}, \frac{-1}{q-1} < \Delta < 1 \right\},$$

y todas sus permutaciones, donde  $\Delta$  es la distancia de cada punto a la centroide.

$\Delta$  se mide en unidades de  $p_i$  y el valor máximo que puede alcanzar es  $\frac{q-1}{q}$ . Este tipo de diseños fueron propuestos por Cornell [Cor02].

A lo largo de esta tesis, nos referiremos a esta clase de diseños (3.2.1, 3.2.2, 3.2.3) como “diseños clásicos o diseños estándar”. Este tipo de diseños han sido frecuentemente utilizados por los experimentadores ya que aseguran la estimación de los parámetros para cierta clase de modelos que revisaremos a continuación [BS14].



**Figura 3.3** : Ejemplo de diseño axial con  $\Delta = 1/3$ .

### 3.3. Modelos de Mezclas

En un problema de diseño de mezclas, como en cualquier problema de diseño, debe establecerse a priori un modelo que describa la relación composición-respuesta. Sea

$$y(\mathbf{p}) = \boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{\eta}(\mathbf{p}) + \varepsilon(\mathbf{p}), \mathbf{p} \in \mathcal{S}$$

la respuesta observada, donde  $\boldsymbol{\eta}(\mathbf{p})^t = (\eta_1(\mathbf{p}), \dots, \eta_k(\mathbf{p}))$  es un vector de  $k$  funciones de  $\mathbf{p}$  linealmente independientes,  $\boldsymbol{\theta}^t = (\theta_1, \dots, \theta_k)$  es el vector de parámetros desconocidos y  $\varepsilon(\mathbf{p})$  es el término de error que asumiremos que satisface las *condiciones de Gauss-Markov*.

Como para cualquier experimento, la selección de un modelo correcto es muy importante en un experimento con mezclas. En general, los polinomios suelen ser modelos apropiados, pero no para todos los sistemas de mezclas. La dificultad en la interpretación de estos modelos surge de la restricción  $\sum_{i=1}^q p_i = 1$ , la suma de los componentes de la mezcla debe ser la unidad. De modo que no podemos alterar una proporción sin variar al menos otra. A continuación, describiremos brevemente los modelos más utilizados para este tipo de comportamientos.

Los modelos polinómicos son por excelencia los modelos más utilizados en la literatura ya que son suficientemente flexibles en multitud de situaciones prácticas [Don89]. Además, si la superficie de respuesta es lo suficientemente suave en una región de  $\mathcal{S}$ , cualquier

modelo puede aproximarse localmente por su desarrollo en serie de Taylor, de modo que la podemos representar por un polinomio (ver la sección 1.6).

### 3.3.1. Polinomios Canónicos de Scheffé

Los polinomios ordinarios no resultan ser adecuados en problemas de mixtura puesto que están sobreparametrizados. Si consideramos un polinomio completo de grado  $n$

$$\begin{aligned} \eta(\mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}) = & \theta_0 + \sum_{1 \leq i \leq q} \theta_i p_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \theta_{ij} p_i p_j + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} \theta_{ijk} p_i p_j p_k + \\ & + \dots + \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_n \leq q} \theta_{i_1 i_2 \dots i_n} p_{i_1} p_{i_2} \dots p_{i_n}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

con  $\binom{q+n}{n} = m$  parámetros, la restricción

$$\sum_{i=1}^q p_i = 1 \quad (3.2)$$

implica que los parámetros en (3.1) no pueden determinarse de manera única. Para solucionar este inconveniente, Scheffé [Sch58] propone una reparametrización de los polinomios ordinarios utilizando (3.2) y  $p_i^2 = p_i(1 - \sum_{j \neq i} p_j)$  que reduce el número de parámetros

$$\binom{q+n-1}{q-1} = \binom{q+n}{n} - \binom{q+n-1}{n}.$$

A esta clase de polinomios se les conoce como *polinomios canónicos de Scheffé*. A continuación se muestran los polinomios de Scheffé

más utilizados:

$$\eta_{S1C}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i p_i \quad (3.3)$$

$$\eta_{S2C}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i p_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} p_i p_j \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} \eta_{S3C}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) &= \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i p_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} p_i p_j + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \delta_{ij} p_i p_j (p_i - p_j) \\ &+ \sum_{1 \leq i < k < j \leq q} \beta_{ijk} p_i p_j p_k \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\eta_{S3E}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i p_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} p_i p_j + \sum_{1 \leq i < k < j \leq q} \beta_{ijk} p_i p_j p_k. \quad (3.6)$$

Los subíndices  $S1C$ ,  $S2C$ ,  $S3C$  y  $S3E$  se refieren a los modelos de Scheffé lineal, cuadrático, cúbico (completos) y cúbico especial respectivamente. Éste último se obtiene omitiendo el término  $p_i p_j (p_i - p_j)$  en (3.5) y puede generalizarse para polinomios de grado mayor que 3 omitiendo los términos intermedios correspondientes.

Los parámetros de los modelos anteriores contienen información importante sobre la respuesta. Los  $\beta_i$  representan el valor de la respuesta esperada cuando la mezcla sea pura en el componente  $i$ -ésimo. Los  $\beta_{ij}$  cuantifican el efecto que tiene sobre la respuesta la presencia del ingrediente  $i$ -ésimo sobre el  $j$ -ésimo. En este sentido, se dice que mide el “exceso” que se produce en la respuesta con esta mezcla binaria. Cuando  $\beta_{ij} > 0$  se dice que hay *sinergismo* al mezclar los ingredientes  $i$ -ésimo y  $j$ -ésimo, mientras que en caso contrario se dice hay *antagonismo* entre estos dos ingredientes. Sin embargo, si el efecto de sinergismo o antagonismo cambia dependiendo de la cantidad de cada componente en la mezcla binaria, el polinomio de segundo orden resulta insuficiente para explicar este fenómeno. Los coeficientes  $\delta_{ij}$  del modelo cúbico explican precisamente este cambio en el exceso. Por último, los coeficientes  $\beta_{ijk}$  corresponden a la interacción que se produce en la respuesta por esta mezcla ternaria.

Scheffé [Sch58] propone los diseños  $\{q, m\}$ -simplex lattice para ajustar polinomios de Scheffé de orden  $m$  completos en  $q$  componentes argumentando que existe una correspondencia uno a uno entre ambos:

	Polinomio de Scheffé	Diseño Simplex Lattice
$q$	n <sup>o</sup> variables explicativas	n <sup>o</sup> ingredientes (mezcla)
$m$	grado polinomio	n <sup>o</sup> fracciones entre 0 y 1
$\binom{q+m-1}{m}$	n <sup>o</sup> parámetros	n <sup>o</sup> puntos de diseño

**Tabla 3.1:** Correspondencia entre polinomios canónicos de Scheffé completos y diseños simplex lattice

De la tabla 3.1 se deduce que los diseños simplex lattice son diseños saturados para esta clase de modelos (el número de parámetros es igual al número de puntos de diseño). Esta situación permite establecer fórmulas generales para expresar los parámetros de un polinomio de orden  $m$  y  $q$  componentes en función de la respuesta observada en los puntos de un diseño  $\{q, m\}$ -simplex lattice [Sch58].

Más tarde Scheffé introduce los diseños  $\{q, m\}$ -simplex centroid considerando  $q = m$  [Sch63]. Procediendo como en el trabajo anterior, define una clase de polinomios canónicos asociados para los que esta clase de diseños son saturados:

$$\eta_{sqE}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i p_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} p_i p_j + \sum_{1 \leq i < k < j \leq q} \beta_{ijk} p_i p_j p_k + \dots + \beta_{12\dots q} p_1 p_2 \dots p_q \quad (3.7)$$

Éstos son la generalización del polinomio cúbico especial (3.6) para orden  $q$ . El número de puntos de diseño, o lo que es lo mismo, el número de parámetros del modelo, es  $2^q - 1$ . Los coeficientes de regresión en (3.7) están unívocamente determinados por las respuestas observadas en un  $\{q, q\}$ -simplex centroid. Las fórmulas para su cálculo las podemos encontrar en [Sch63].

Las propiedades anteriores han conducido a los experimentadores a adoptar sistemáticamente en sus ensayos esta clase de diseños “estándar” considerando, para modelizar las respuestas, sus polinomios canónicos asociados. Aunque en [Sch58], [Sch63] se ha probado que estos diseños son válidos para estimar los parámetros de forma única, en la mayoría de los casos se desconoce si éstos producen un resultado óptimo con respecto a los criterios establecidos en la sección 1.4. para el modelo considerado. En este sentido, sólo se han establecido comparativas en relación a otras mezclas utilizadas en la literatura. A esto nos referimos cuando indicamos que el diseño de mezclas ha recibido un enfoque clásico del problema.

Existe una clase de polinomios alternativos a los polinomios de Scheffé que se conocen como *polinomios canónicos con término constante* [Sne74]. Se construyen a partir de los de Scheffé, eliminando la dependencia de, por ejemplo,  $p_q$  en función de las otras variables:  $p_q = 1 - \sum_{i=1}^{q-1} p_i$ . De modo que se obtienen polinomios del mismo grado y mismo número de parámetros en una variable menos

$$\eta_{H_1}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\alpha}) = \alpha_0 + \sum_{1 \leq i \leq q-1} \alpha_i p_i \quad (3.8)$$

$$\alpha_0 = \beta_q, \quad \alpha_i = \beta_i - \beta_q,$$

$$\eta_{H_2}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\alpha}) = \alpha_0 + \sum_{1 \leq i \leq q-1} \alpha_i p_i + \sum_{i=1}^{q-2} \sum_{j=i+1}^{q-1} \alpha_{ij} p_i p_j + \sum_{1 \leq i \leq q-1} \alpha_{ii} p_i^2$$

$$\alpha_0 = \beta_q, \quad \alpha_i = \beta_i - \beta_q + \beta_{iq}, \quad (3.9)$$

$$\alpha_{ij} = \beta_{ij} - (\beta_{iq} + \beta_{jq}), \quad \alpha_{ii} = -\beta_{iq},$$

$$\begin{aligned} \eta_{H_{3E}}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\alpha}) &= \alpha_0 + \sum_{1 \leq i \leq q-1} \alpha_i p_i + \sum_{i=1}^{q-2} \sum_{j=i+1}^{q-1} \alpha_{ij} p_i p_j + \sum_{1 \leq i \leq q-1} \alpha_{ii} p_i^2 \\ &+ \sum_{i=1}^{q-2} \sum_{j=i+1}^{q-1} \lambda_{ij} p_i p_j (p_i + p_j) + \sum_{i=1}^{q-3} \sum_{j=i+1}^{q-2} \sum_{k=j+1}^{q-1} \alpha_{ijk} p_i p_j p_k \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\alpha_0 &= \beta_q, & \alpha_i &= \beta_i - \beta_q + \beta_{iq}, & \alpha_{ii} &= -\beta_{iq}, & (3.10) \\
\alpha_{ij} &= \beta_{ij} - (\beta_{iq} + \beta_{jq}) + \beta_{ijk}, & \lambda_{ij} &= -\beta_{ijk}, \\
\alpha_{ijk} &= \beta_{ijk} - (\beta_{ijq} + \beta_{ikq} + \beta_{jkq}),
\end{aligned}$$

que se corresponden con los modelos (3.3), (3.4) y (3.6) respectivamente. El modelo de Scheffé cúbico completo (3.5) y su correspondiente con término constante son equivalentes [Cor02]. La inclusión de la letra  $H$  en los subíndices se refiere a modelos con variable de *holgura*, ya que algunos autores prefieren utilizar esta terminología para nombrar esta clase de modelos.

Los modelos de Scheffé y con término constante son equivalentes puesto que reproducen la misma superficie de respuesta. Sin embargo, aunque unos coeficientes  $\beta_{i_1 \dots i_n}$  pueden escribirse en función de los otros  $\alpha_{i_1 \dots i_n}$  y viceversa, la interpretación de los mismos no es equivalente. Por tanto, los diseños óptimos considerando esta clase de modelos pueden variar con respecto a los obtenidos con los modelos de Scheffé, pues gran parte de los criterios de optimización utilizados persiguen la estimación óptima de los parámetros del modelo y éstos son diferentes.

### 3.3.2. Modelos de mezclas de Cox

Otra variante muy similar a la anterior en forma, pero muy distinta en términos de interpretación, es la que propone Cox [Cox71]. En esta clase de modelos los parámetros representan los cambios que se producen en la respuesta cuando ésta cambia al evaluarse sobre un punto del simplex con respecto a otro. Considérese el modelo de Cox de primer orden

$$\eta_{C_1}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\alpha}) = \alpha_0 + \sum_{i=1}^q \alpha_i p_i. \quad (3.11)$$

El parámetro  $\alpha_i$  en (3.11) mide el efecto que se produce en la respuesta cuando cambia la proporción del componente  $i$ -ésimo, sabiendo que este cambio implica un cambio en al menos uno de los

$q - 1$  componentes restantes. Sea  $\eta(\mathbf{p}, \boldsymbol{\alpha})$  y  $\eta(\mathbf{t}, \boldsymbol{\alpha})$  la respuesta esperada en dos puntos del simplex  $\mathbf{p}$  y  $\mathbf{t} \in \mathcal{S}$ . El cambio producido en la respuesta esperada es

$$\Delta\eta(\mathbf{p}, \boldsymbol{\alpha}) = \eta(\mathbf{p}, \boldsymbol{\alpha}) - \eta(\mathbf{t}, \boldsymbol{\alpha}) = \alpha_i \Delta_i + \sum_{j \neq i} \alpha_j (p_j - t_j)$$

donde  $\Delta_i = p_i - t_i$ . En este tipo de modelos suele asumirse que se verifica  $\sum_{i=1}^q \alpha_i t_i = 0$ , de modo que  $\Delta\eta(\mathbf{p}, \boldsymbol{\alpha}) = \alpha_i \Delta_i / (1 - t_i)$ . Asumir la condición anterior significa que  $\alpha_0$  representa en el modelo el valor de la respuesta en  $\mathbf{t}$ , mientras que el cambio en la respuesta en otro punto cualquier otro punto es  $\Delta\eta(\mathbf{p}, \boldsymbol{\alpha}) = \alpha_i \Delta_i / (1 - t_i)$ . El gradiente de  $\mathbf{t}$  a lo largo de la dirección del llamado *efecto de Cox* para  $p_i$  es  $\alpha_i \Delta_i / (1 - t_i)$  y mide el cambio en el valor de la respuesta por unidad de cambio en  $p_i$ .

Cuando resulta más adecuado considerar un modelo cuadrático para explicar la respuesta,

$$\eta_{C_2}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\alpha}) = \alpha_0 + \sum_{i=1}^q \alpha_i p_i + \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \alpha_{ij} p_i p_j, \quad \alpha_{ij} = \alpha_{ji}, \quad (3.12)$$

el cambio producido,  $\Delta\eta(\mathbf{p}, \boldsymbol{\alpha})$ , contiene el término adicional  $\alpha_{ii} \Delta_i^2 / (1 - t_i)^2$ , de modo que

$$\begin{aligned} \Delta\eta(\mathbf{p}, \boldsymbol{\alpha}) &= \eta(\mathbf{t}, \boldsymbol{\alpha}) + \left( \frac{\alpha_i}{1 - t_i} \right) \Delta_i + \left( \frac{\alpha_{ii}}{(1 - t_i)^2} \right) \Delta_i^2 \\ &= \eta(\mathbf{t}, \boldsymbol{\alpha}) + A_i \Delta_i + B_i \Delta_i^2. \end{aligned}$$

La cantidad  $A_i \Delta_i + B_i \Delta_i^2$  mide el cambio esperado en la respuesta cuando la proporción del  $i$ -ésimo componente se cambia  $\Delta_i$  cantidad.

Por otro lado, los modelos de Cox reproducen superficies de respuesta idénticas a los modelos de Scheffé al igual que ocurre con los modelos incluyendo término constante. De modo que la única diferencia radica en la interpretación de los parámetros, siendo los modelos de Cox más adecuados para reflejar el efecto de los componentes sobre la respuesta.

### 3.3.3. Modelos de mezclas con funciones homogéneas

En algunos casos particulares se ha observado que los modelos polinómicos no explican adecuadamente el efecto aditivo de un componente además de la curvatura de la superficie de respuesta. Un modelo se dice *aditivo* en el componente  $p_1$  si puede expresarse de la forma

$$\eta(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) = f(p_1; \boldsymbol{\beta}) + g(p_2, \dots, p_q; \boldsymbol{\beta}).$$

Si  $f$  fuese una función constante, entonces se dice que  $p_1$  es un ingrediente inactivo en la mezcla, es decir,  $p_1$  no afecta al resultado de la respuesta.

Para estudiar las propiedades de aditividad-inactividad de las mezclas, Becker [Bec68] propone utilizar la siguiente clase de modelos

$$\eta_{B1}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i p_i + h_1(\mathbf{p}) + \dots + h_n(\mathbf{p}) \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \eta_{B2}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) = & \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i p_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} (p_i + p_j) h_{ij}(p_i, p_j) \\ & + \dots + \beta_{12\dots q} (p_1 + \dots + p_q) h_{12\dots q}(p_1, \dots, p_q) \end{aligned} \quad (3.14)$$

donde  $h_i$  y  $h_{ij}$  son funciones homogéneas. Una función es *homogénea de grado  $m$*  si satisface que  $f(ap_1, \dots, ap_q) = a^m(p_1, \dots, p_q)$ , siendo  $a > 0$ . Algunas de las funciones homogéneas más utilizadas son:

- $h(p_i, p_j) = \frac{p_i}{p_i + p_j}$ ,
- $h(p_i, p_j) = \min(p_i, p_j)$ .

Las funciones anteriores garantizan la invarianza en la interpretación de los coeficientes cuando se incorpora a la mezcla el componente aditivo.

### 3.3.4. Modelos de mezclas con términos inversos

Draper y St. John [Dra77] introducen en los polinomios de Scheffé términos que reflejan cambios bruscos en el comportamiento de la respuesta cuando uno o más ingredientes de la mezcla se acercan a la frontera del simplex ( $\eta \rightarrow \pm\infty$  cuando  $p_i \rightarrow 0$ ). Los modelos que sugieren son:

$$\eta_{I1}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i p_i + \sum_{i=1}^q \beta_{-i} \frac{1}{p_i} \quad (3.15)$$

$$\eta_{I2C}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i p_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} p_i p_j + \sum_{i=1}^q \beta_{-i} \frac{1}{p_i} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \eta_{I3C}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) &= \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i p_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} p_i p_j + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \delta_{ij} p_i p_j (p_i - p_j) \\ &+ \sum_{1 \leq i < k < j \leq q} \beta_{ijk} p_i p_j p_k + \sum_{i=1}^q \beta_{-i} \frac{1}{p_i} \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \eta_{I3E}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) &= \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i p_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} p_i p_j + \sum_{1 \leq i < k < j \leq q} \beta_{ijk} p_i p_j p_k \\ &+ \sum_{i=1}^q \beta_{-i} \frac{1}{p_i} \end{aligned} \quad (3.18)$$

donde el término en  $\frac{1}{p_i}$  explica el cambio extremo que se produce en la respuesta cuando el ingrediente  $i$ -ésimo se acerca a los bordes del simplex. Esta clase de modelos están definidos sobre la región

$$S_I(\delta) = \{\mathbf{p} \in \mathcal{S}, p_i \geq \delta, 0 \leq \delta \leq \frac{1}{q}, i = 1, \dots, q\},$$

ya que, por construcción, no pueden tomar valores en la frontera del simplex. [Dra77] y [Cha94] proponen diseños axiales para ajustar los modelos anteriores, ya que éstos exploran el interior del simplex.

### 3.3.5. Modelos *log-contrast*

Si además de reflejar el comportamiento drástico de la respuesta en la frontera del simplex se requiere explicar el efecto de aditividad-inactividad de los componentes, los modelos anteriores resultan ser inapropiados. Los modelos *log-contrast* se definen a partir de los polinomios canónicos haciendo la transformación  $z_i = \log(p_i/p_q)$ , donde el denominador  $p_q$  se elije de forma arbitraria:

$$\begin{aligned}\eta_{L_1}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) &= \beta_0 + \sum_{1 \leq i \leq q-1} \beta_i z_i \\ \eta_{L_2}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) &= \beta_0 + \sum_{1 \leq i \leq q-1} \beta_i z_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q-1} \beta_{ij} z_i z_j.\end{aligned}$$

Los modelos anteriores pueden expresarse de manera equivalente en las formas simétricas

$$\eta_{L_1}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) = \beta_0 + \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i \log(p_i), \quad (3.19)$$

$$\eta_{L_2}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) = \beta_0 + \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i \log(p_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} (\log(p_i) - \log(p_j))^2, \quad (3.20)$$

verificando que  $\sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i = 0$ . La simetría de las formas anteriores implica que todos los términos son independientes del divisor elegido. Esta clase de modelos no está definida en los puntos de la frontera del simplex, de modo que la región de diseño será

$$S_L(\delta) = \{\mathbf{p} \in \mathcal{S}, \delta \leq p_i/p_j \leq \frac{1}{\delta}, i, j = 1, \dots, q, \delta \in (0, 1)\}.$$

Chan [Cha88] obtiene los diseños  $D$ - y  $A$ -óptimos a través de una nueva versión del teorema general de equivalencia que utiliza el principio de dualidad. La clase de diseños óptimos obtenidos son axiales como cabría esperar, pues esta clase de modelos sólo están definidos en puntos interiores del simplex.

### 3.3.6. Polinomios de Kronecker

Draper y Pukelsheim [Dra97] proponen una clase de modelos basados en el álgebra de Kronecker de vectores y matrices. El principal rasgo que los caracteriza es que los regresores son funciones homogéneas de  $p_i$ ,  $i = 1, \dots, q$ . Los términos del modelo se construyen a partir del vector  $\mathbf{p} \otimes \mathbf{p}$  ( $m^2 \times 1$ ) formado por los cuadrados y los productos cruzados de los componentes de  $\mathbf{p}$  con los subíndices ordenados lexicográficamente. Los modelos de Kronecker de primer, segundo y tercer orden son

$$\eta_{K1}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}) = \mathbf{p}^t \boldsymbol{\theta} = \sum_{1 \leq i \leq q} \theta_i p_i \quad (3.21)$$

$$\eta_{K2}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}) = (\mathbf{p} \otimes \mathbf{p})^t \boldsymbol{\theta} = \sum_{1 \leq i \leq j \leq q} \theta_{ij} p_i p_j \quad (3.22)$$

$$\eta_{K3}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}) = (\mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p})^t \boldsymbol{\theta} = \sum_{1 \leq i \leq k \leq j \leq q} \theta_{ijk} p_i p_j p_k \quad (3.23)$$

respectivamente. Si  $\theta_{ij} = \theta_{ji}$ , hay una correspondencia uno a uno entre los coeficientes de los polinomios de Scheffé y los de Kronecker (ver [Dra97]). En el caso del modelo de primer orden, ambos coinciden.

Los polinomios de Kronecker presentan dos ventajas frente a los polinomios de Scheffé. La primera de ellas es consecuencia inmediata de la propiedad de homogeneidad. Si la suma de los componentes fuese  $A \neq 1$ , entonces el resto de términos se verán afectados en la misma proporción  $A^d$ , siendo  $d$  el orden del polinomio. Por otro lado, éstos reflejan mejor la simetría del problema por construcción del producto de Kronecker. Por el contrario, los modelos de Kronecker se encuentran mucho más sobreparametrizados que los de Scheffé. Al haber mayor número de parámetros implicados en el modelo, mayor número de observaciones serán necesarias para construir un diseño.

### 3.3.7. Modelos de mezclas con variables-proceso

Cuando además de las proporciones relativas de los ingredientes en una mezcla intervienen otras variables que afectan a la respuesta, varios autores proponen otra clase de modelos para medir el efecto. Vuchknow et al. [Vuc83] proponen utilizar

$$\eta_V(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{1 \leq i \leq q} \beta_i p_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q+r} \beta_{ij} p_i p_j + \sum_{q+1 \leq i \leq q+r} \beta_{ii} p_i^2, \quad (3.24)$$

donde  $\mathbf{p} \in \mathcal{S}$  y  $p_{q+1}, \dots, p_{q+r}$  son variables-proceso. Otro enfoque es el que plantean [Joh83], [Joh84] con el modelo

$$\eta_j(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) = \eta_{S2C}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) + \phi(z), \quad (3.25)$$

siendo  $z$  la variable-proceso que sólo puede tomar ciertos niveles de valores. Ingredientes y variables procesos no tienen interacción entre sí, pero ambas contribuyen para explicar la respuesta.

### 3.3.8. Modelos en los que interviene la cantidad de mezcla

En ocasiones, la cantidad de la mezcla tiene un efecto positivo o negativo sobre la respuesta que es necesario tener en cuenta en la etapa de diseño. Piepel y Cornell [Pie85] proponen reemplazar los coeficientes de los modelos polinómicos de Scheffé por

$$\beta_i(C) = \sum_{0 \leq m \leq r-1} \beta_{i,m} f_m(C),$$

siendo  $C$  la cantidad de mezcla,  $\beta_{i,m}$  los parámetros del nuevo modelo,  $r$  el número de niveles del factor  $C$  y  $f_m(C)$  una función elegida convenientemente para reflejar el efecto de la cantidad de mezcla sobre la respuesta. Algunos ejemplos son  $f_m(C) = C^m$  o  $f_m(C) = (\log(C))^m$ .

### 3.3.9. Directrices para la elección de un modelo

El modelo considerado resulta fundamental en la etapa de diseño, puesto que los diseños óptimos dependen fuertemente de esta elección. Aunque la forma de la respuesta depende del fenómeno que va a analizarse y, por tanto, de cada experimento en particular, puede establecerse una clasificación muy general conforme a distintas características que distinguen unos modelos de otros.

Si el interés reside en realizar un análisis exploratorio o en estudiar cambios drásticos en la respuesta en cierta región del simplex, entonces se requerirán modelos con propiedades específicas. En este caso, los modelos homogéneos, con términos inversos o log-contrast deberían ser considerados. Si no se conoce ninguna peculiaridad sobre el comportamiento de la respuesta y ésta es lo suficientemente suave, los modelos polinómicos resultan ser los más versátiles para todo tipo de situaciones. En cuanto a la elección del orden del polinomio, los modelos cuadráticos son los más utilizados debido a la interpretabilidad directa de sus coeficientes. Además, se desaconseja considerar polinomios de grado 3 o superiores ya que el número de parámetros involucrados crece considerablemente y, por tanto, mayor número de observaciones serán necesarias para diseñar el experimento. En esta tesis utilizaremos dos tipos de modelos polinómicos que reproducen la misma superficie de respuesta, los modelos de Scheffé y los modelos con término constante. Se considerarán también modelos no lineales que siguen ciertos fenómenos físicos que analizaremos en determinados problemas reales.

Por otro lado indicar que el resto de modelos estudiados en esta sección pueden ser muy útiles en las situaciones específicas que se han mencionado. Estos modelos los estudiaremos en trabajos futuros.

## 3.4. Diseños óptimos para modelos de mezclas

Vamos a realizar una breve revisión de los resultados más importantes obtenidos con los modelos y diseños anteriores, atendiendo a los criterios de optimización que estudiamos en el capítulo 1. En primer lugar, nos centraremos en los modelos de Scheffé, que son los que han recibido mayor atención en la literatura de experimentos con mezclas. Como mencionábamos anteriormente, Kiefer es el primero que aplicó las herramientas de diseño óptimo a este tipo de problemas. Éste demuestra que el  $\{q, 1\}$ -simplex lattice es el diseño  $\Psi_p$ -óptimo para el modelo de primer orden (3.3) [Kie61]. También obtiene que el  $\{q, 2\}$ -simplex centroid y el  $\{q, 3\}$ -simplex centroid son los  $D$ -óptimos para el modelo cuadrático (3.4) y el especial cúbico (3.6) respectivamente. Lim [Lim90] y Mikaeili [Mik93] centran sus trabajos en el modelo cúbico completo (3.5) y calculan los  $D$ -óptimos. Goos et al. [PG16] calculan diseños  $I$ -óptimos para los modelos (3.3)-(3.6) considerando el problema exacto y aproximado. Sin embargo, cabe resaltar que, *no existen resultados para polinomios de grado general* bajo ninguno de los criterios de optimización estudiados.

Una de las principales dificultades que presenta este tipo de problemas es que, cuando se busca un diseño exacto de  $n$  puntos con mezclas de  $q$  componentes, el número de variables en el problema de optimización es muy elevado,  $nq$ . Debido a ello, muchos trabajos consideran diseños aproximados con el objetivo de determinar los pesos óptimos para un diseño prefijado, normalmente un diseño elegido entre una clase de diseños estándar. De este modo, el número de variables en el problema de optimización se reduce a  $n$ . Algunos de los trabajos más destacados que persiguen este objetivo para el modelo cuadrático (3.4) son el de Kiefer [Kie61] que considera el diseño  $\{3, 2\}$ -simplex centroid y el criterio de  $D_A$ -optimización, Yu y Guan [Yu93] para el  $\{3, 2\}$ -simplex centroid y  $A$ -optimización y Gail y Kiefer [Gai77] para el  $\{q, q\}$ -simplex centroid y  $\Psi_p$ -optimización. En cuanto a criterios basa-

dos en la respuesta, Lambrakis [Lam68], [Lam69] calcula los pesos  $I$ -óptimos para una clase de diseños especiales considerando el modelo cuadrático (3.4), mientras que Laake [Laa75] lo hace para del modelo cúbico completo (3.5). Guan y Liu [Gua89], [Gua93] calculan los pesos  $D$ - y  $A$ -óptimos considerando el diseño  $\{q, q\}$ -simplex centroid para el modelo polinómico general de grado  $q - 1$  y Liu y Neudecker [Liu95] realizan este mismo trabajo para  $I$ -optimización. Goos et al. [PG16] calculan y revisan todos los trabajos anteriores para éste último criterio.

En relación a los modelos con término constante y los modelos de Cox, no se han obtenido resultados conforme a los criterios de optimización estudiados hasta donde el autor conoce. Éstos han sido utilizado generalmente para realizar análisis exploratorios de la respuesta.

Liu y Neudecker [Liu97] calculan la localización  $D$ -,  $A$ - e  $I$ -óptima de los pesos considerando el diseño  $\{q, m\}$ -simplex centroid para modelos con funciones homogéneas del tipo (3.13). Becker [Bec78] y Xue y Guan [Xue93] realizan la misma operación considerando modelos de la forma (3.14) y diseños  $\{q, 2\}$ -simplex lattice y  $\{3, 3\}$ -simplex centroid para los criterios de  $I$ - y  $A$ -optimización respectivamente. Los trabajos de Drapper y St. John [Dra77] y Chan y Guan [Cha94] se centran en el cálculo de diseños  $D$ -óptimos axiales para modelos con términos inversos del tipo (3.15)-(3.18). En cuanto a los modelos log-contrast, Chan [Cha88] y Chan y Guan [Cha01] calculan diseños  $D$ - y  $A$ -óptimos axiales considerando el modelo (3.19), mientras que Chan [Cha92] obtiene el diseño  $D$ -óptimo para el modelo (3.20).

La mayor parte de los trabajos de diseño óptimo de experimentos con mezclas desarrollados con los polinomios de Kronecker no persiguen encontrar la optimalidad en el sentido de los criterios de optimización habituales. El objetivo de es encontrar clases de diseños completas bajo la noción de *orden de Kiefer* (ver [Kie61], [Puk93a] p.12, 352, 354).

Sean  $D$  y  $C \in Sym(q)$ , dos matrices del grupo simétrico.

**Definición 3.4.** Se dice que  $C$  es mayorizada por  $D$  y se denota  $C \prec D$  cuando  $C$  está dentro del cierre convexo de la órbita de  $D$  bajo congruencia por la acción de un grupo de transformaciones  $\mathcal{H}$ , es decir,

$$C \prec D \iff C \in \{HDH^t, H \in \mathcal{H}\}.$$

**Definición 3.5.** Se dice que  $C$  es más informativa que  $D$  y se denota  $C \gg D$  cuando  $C$  es mayor, en el sentido de orden de Loewner, que una matriz intermedia  $E$  la cual es mayorizada por  $D$ , es decir,

$$C \gg D \iff C \geq E \in \text{conv}\{HDH^t \in \mathcal{H}\} \text{ para algún } E \in \text{Sym}(q).$$

A esta relación de orden  $\gg$  se le llama orden de Kiefer sobre  $\text{Sym}(q)$  relativo al grupo de transformaciones  $\mathcal{H}$ .

La notación de  $\gg$  también se representa como  $C \geq E \prec D$ . La propiedad de simetría que satisfacen los términos de los polinomios de Kronecker es ideal para establecer las condiciones de orden anteriores. [Dra99] prueban que las mezclas puras son la clase de diseños óptimos completos bajo el orden de Kiefer para el modelo de primer orden (3.21), mientras que [Dra00] establecen que los diseños simplex centroid balanceados (con pesos sobre los puntos de diseño) forman una clase completa para el modelo de orden dos (3.22). Klein [Kle02] encuentra un subespacio cuadrático formado por matrices en bloques que es invariante bajo la acción del grupo  $\mathcal{H}$ . A partir este resultado muestra que la clase de completa de diseños simplex centroid balanceados es  $D$ -,  $A$ - y  $E$ -óptima a través del teorema de equivalencia.

Vuchkov et al. [Vuc83] calcula diseños  $D$ -óptimos para los modelos con variables proceso de la forma (3.24) considerando diseños que son productos de Kronecker de proporciones de la mezcla y factores cualitativos, mientras que para los modelos (3.25) que proponen [Joh83], [Joh84], Prescott y Draper [Pre98] calculan diseños  $D$ -óptimos formando bloques ortogonales. Considerando los modelos con cantidad de mezcla variable que se proponen en [Pie85],

Piepel y Cornell [Pie87] calculan los  $D$ -óptimos a partir de un procedimiento secuencial ayudándose de un software que identifica patrones en los diseños obtenidos.

# Capítulo 4

## Algoritmos para modelos del mezclas

*Los **objetivos** de este capítulo son: proponer nuevos métodos numéricos especializados en la construcción de diseños óptimos exactos para experimentos con mezclas. La mayoría de fenómenos reales donde se encuentran este tipo de sistemas, no responden a modelos lineales y existe un vacío en la literatura al respecto. El objetivo será desarrollar técnicas válidas para modelos lineales y no lineales. En segundo lugar, se buscarán estrategias para resolver problemas de mezclas con restricciones.*

*Las principales **contribuciones** son: En la sección 4.3. se propone un nuevo algoritmo basado en la idea de Silvey, Titterington y Tosney [Sil78]. La adaptación de la iteración multiplicativa es posible considerando una nueva clase de diseños restringidos, los diseños de permutación, que se definen en la sección 4.2. Se propone también una alternativa heurística, basada en algoritmos genéticos, que permite abordar el problema de diseño de mezclas con restricciones lineales sobre los componentes.*

## 4.1. Introducción

El problema de diseño para modelos de mezclas ha recibido un enfoque clásico en la literatura como estudiamos en el capítulo anterior. En la mayoría de las aplicaciones en las que intervienen mezclas, los experimentadores han optado por utilizar diseños estándar, como los *simplex lattice* y *simplex centroid*, para una clase de modelos estándar, generalmente modelos polinómicos. En este sentido, los diseños utilizados en los ensayos únicamente han podido validarse comparando con otros diseños existentes pero, en general, se desconoce cuál de ellos proporcionaría un resultado óptimo.

El diseño óptimo de experimentos está despertando un gran interés en la actualidad en la mayoría de las disciplinas experimentales. Este hecho no se debe únicamente a las ventajas que ofrece en el sentido de optimización de recursos, sino también a su flexibilidad para abordar problemas en condiciones no estándar, tales como restricciones en la región de diseño y la posibilidad de considerar otros modelos, como los no lineales. Para este tipo de modelos no se han propuesto ningunas técnicas específicas, hasta donde los autores saben.

Como mencionábamos anteriormente, el volumen de trabajos de diseño de mezclas ha recibido un enfoque clásico del diseño y son pocos los que se han desarrollado bajo la perspectiva de diseño óptimo. Una revisión bibliográfica actualizada puede encontrarse en [BS14]. En consecuencia, son escasas las metodologías que han sido desarrolladas para diseño óptimo de mezclas. Los procedimientos utilizados para calcular soluciones analíticas o semianalíticas se caracterizan por ser muy específicos de cada problema. Por otro lado, además de la dificultad en los cálculos, en muchas ocasiones no se pueden obtener resultados analíticos. Kiefer [Kie61] determinó los diseños  $D$ -óptimos para modelos cuadráticos utilizando un sistema de polinomios ortogonales para verificar el TGE, Gail y Kiefer [Gai77] extienden este resultado para  $\Psi_p$ -optimización utilizando un método Quasi-Newton. Mikaeili y Lim [Mik89], [Lim90] centran sus trabajos en diferentes polinomios cúbicos recurriendo, de

nuevo, a la idea de los sistemas de polinomios ortogonales y otros resultados teóricos. Chan calcula diseños óptimos para otra clase de modelos: para los *log contrast*, realizando transformaciones a forma canónica y utilizando un TGE basado en el principio de dualidad [Cha88], [Cha92], [Cha01], para los modelos con *términos inversos*, analíticamente calculando la expresión de la función de sensibilidad [Cha94], y para los modelos aditivos, utilizando los multiplicadores de Lagrange [Cha98a], [Cha98b]. También es destacable el trabajo *Optimal designs for experiments with mixtures: a survey*, en el que el autor da una extensa revisión sobre el tema [Cha00]. En base a lo anterior, es destacable que no existen procedimientos generales para el cálculo de soluciones analíticas en problemas de mezclas para polinomios de orden  $n$  u otro tipo de modelos.

Los resultados teóricos existentes sólo pueden aplicarse en ejemplos muy sistemáticos que, en general, se alejan bastante de las condiciones bajo las que se realizan los experimentos con mezclas reales. Las soluciones heurísticas que proporcionan los métodos numéricos son, en la actualidad, la única opción viable para abordar este tipo de problemas. Existen diferentes técnicas disponibles en la literatura para el cálculo de diseños exactos en problemas de mezclas. El método propuesto por McLean y Anderson [McL66], el XVERT (Snee y Marquardt [Sne74]) y el CONSIM (Snee [Sne79]) fueron especialmente desarrollados para calcular una clase de diseños sobre regiones de diseño irregulares llamados *extreme vertices designs*. Los algoritmos de intercambio originalmente creados para calcular diseños óptimos generales fueron adaptados para problemas de mezclas. Algunos de éstos son el algoritmo de Wynn-Fedorov [Wyn70b], [Fed72c], el método de Mitchell y Miller [Mit70b], el algoritmo DETMAX [Mit74b] y el algoritmo cíclico coordinado de Meyer y Nachtsheim [Mey95b]. Estas técnicas son las rutinas más implementadas en los software comerciales. Sin embargo, el alcance de estos métodos es muy limitado. Algunos de los inconvenientes que presentan son que únicamente están implementados para modelos polinómicos y que producen soluciones subóptimas en problemas de mezclas restringidos. El algoritmo multiplicativo (AM)

y sus modificaciones son una popular clase de algoritmos para el cálculo de diseños óptimos aproximados [Tos77], [Sil78], aunque su eficacia también ha sido probada para diseños exactos y con observaciones correladas [Tor09a]. Otra alternativa factible que ha sido también utilizada en este contexto son los algoritmos de optimización metaheurísticos. El método *Particle Swarm Optimization* (PSO) [Wan12], para el caso de diseños aproximados, y los algoritmos genéticos (AGs) [AHL03] son algunos ejemplos. Sin embargo, este último sólo ha sido desarrollado para una clase de modelos muy limitada, generalmente polinomios. En consecuencia, se hace necesario desarrollar nuevas técnicas algorítmicas capaces de afrontar la naturaleza especial de los diseños de mezclas, que permitan soportar grandes cargas computacionales y flexibles con los requerimientos teóricos. En la siguiente sección se propone un nuevo enfoque del algoritmo multiplicativo para abordar la naturaleza especial de los experimentos con mezclas y un nuevo algoritmo genético con operadores mejorados cuya potencia ha podido probarse en modelos matemáticos complejos. Ambos algoritmos se han desarrollado para diseños exactos debido a la estrecha relación de los problemas de mezclas con multitud de situaciones prácticas, donde los experimentadores tienen unas restricciones que solamente les permiten realizar un número determinado de ensayos.

## 4.2. Diseños de Permutación en experimentos con mezclas

Antes de comenzar a describir los nuevos algoritmos, introduciremos una nueva clase de diseños exactos que utilizaremos para la construcción de uno de los algoritmos propuestos. Sea  $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_q)$  un punto correspondiente a una única mezcla y sea

$$\mathcal{P} = \{\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_q) = \sigma(p_1, \dots, p_q), \sum_{i=1}^q p_i = 1, p_i \geq 0, i = 1, \dots, q\}$$

el conjunto de todos los puntos posibles formados permutando sus coordenadas.

**Definición 4.0.** *Llamaremos diseño de permutación de  $\mathbf{p}^1, \dots, \mathbf{p}^s$  mezclas al diseño formado por todas las permutaciones de éstas,*

$$\xi_{\mathcal{P}} = \{\sigma_1(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^1, \sigma_2(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2, \dots, \sigma_s(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^s\}.$$

Este tipo de diseños son conocidos en la literatura como *diseños intercambiables* [Dra99]. En este trabajo se denominarán diseños de permutación.

Considérese un diseño formado por los puntos que se obtienen de permutar una única mezcla cualquiera. Denotaremos por  $\mathbf{p}$  al diseño  $\xi_{\mathcal{P}}$  formado por un único punto abusando de notación. Entonces, la matriz de información de este diseño para un modelo lineal es

$$\mathbf{M}(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{f}(\mathbf{p}_i) \mathbf{f}^t(\mathbf{p}_i), \quad (4.1)$$

mientras que para un modelo no lineal es

$$\mathbf{M}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}^0) = \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\eta}(\mathbf{p}_i, \boldsymbol{\theta}^0) \boldsymbol{\eta}^T(\mathbf{p}_i, \boldsymbol{\theta}^0), \quad (4.2)$$

donde  $\boldsymbol{\eta}(\mathbf{p}_i, \boldsymbol{\theta}^0) = \left( \frac{\partial \eta(\mathbf{p}_i, \boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1}, \dots, \frac{\partial \eta(\mathbf{p}_i, \boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_k} \right)_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^0}^T$  y  $\boldsymbol{\theta}^0$  son valores nominales de  $\boldsymbol{\theta}$  [Che53a]. Así definidos, diseños de permutación y sus matrices correspondientes verifican las siguientes propiedades:

1. Los puntos de diseño son permutaciones de un conjunto “fijo” de proporciones.
2. La matriz de información es no lineal en  $\mathbf{p}$ , tanto para (4.1) como para (4.2).
3. Debido a 2, las funciones criterio no serán convexas como en los criterios “estándar” definidos en la sección 1.4.1.

### 4.3. Algoritmo Multiplicativo para Diseños de Permutación

El nueva idea que sigue el algoritmo propuesto consiste en intercambiar el papel de los pesos de un diseño aproximado por los puntos de diseño de un problema de mezclas. Los ingredientes de un problema de mezclas verifican las mismas propiedades que el vector de pesos en un problema de diseño ordinario. Así, la colinealidad entre proporciones se evita de manera sencilla.

La aplicación directa del planteamiento anterior conduce a dificultades computacionales. Para un diseño de  $N$  puntos y mezclas de  $q$  ingredientes se requieren  $N \cdot q$  actualizaciones simultáneas del algoritmo multiplicativo. Puesto que la regla de actualización es compleja para el caso que nos ocupa (la matriz de información no es lineal en  $\mathbf{p}$ ) y el número de variables es elevado, las pruebas desarrolladas abortaron el proceso por no llegar a converger. La idea que se propone para reducir la dimensión del problema es utilizar diseños de permutación para generar puntos candidatos en el diseño de mezclas. Obsérvese que un único punto de diseño genera  $q!$  puntos por permutación de sus coordenadas, de modo que el número de actualizaciones del algoritmo multiplicativo se reduciría  $q!$  veces en cada iteración considerando esta clase de diseños. Por otro lado, es importante señalar que, la propiedad de invarianza por permutación surge de manera natural en la mayoría de los diseños óptimos obtenidos en la literatura. Por ejemplo, Kiefer muestra la invarianza de los diseños  $\Phi_p$ -óptimos por la acción del grupo  $S_q$  para regresión cuadrática considerando polinomios canónicos de Scheffé [Kie75]. Así, esta clase de diseños “restringidos” presenta buenas propiedades para alcanzar la optimalidad en muchos problemas de mezclas.

#### 4.3.1. Derivadas direccionales

Siguiendo la notación que se estableció en el capítulo 1 para referirnos a la función criterio,  $\Phi(\mathbf{p}) = \Psi[M(\mathbf{p})]$ , el objetivo será encontrar

$\mathbf{p}^* = (p_1^*, \dots, p_q^*)$  de modo que  $\Phi(\mathbf{p}^*) = \max_{\mathbf{p} \in \mathcal{P}} \Phi(\mathbf{p})$ . Para definir la regla de actualización del algoritmo multiplicativo será necesario calcular la expresión de la derivada direccional para el criterio de optimización seleccionado.

Considérese el desarrollo de Taylor de primer orden de las funciones de los elementos de la matriz de información

$$M(\mathbf{p} + \beta \mathbf{t}) \approx M(\mathbf{p}) + \beta \sum_{i=1}^q t_i \frac{\partial M(\mathbf{p})}{\partial p_i}$$

Por definición de la derivada de Gâteaux (1.9) se tiene

$$\begin{aligned} G_{\Phi}(\mathbf{p}, \mathbf{w}) &= \lim_{\beta \rightarrow 0^+} \frac{\Phi(\mathbf{p} + \beta \mathbf{t}) - \Phi(\mathbf{p})}{\beta} = \\ &= \lim_{\beta \rightarrow 0^+} \frac{\Psi[M(\mathbf{p} + \beta \mathbf{t})] - \Psi[M(\mathbf{p})]}{\beta} = \\ &= \lim_{\beta \rightarrow 0^+} \frac{\Psi \left[ M(\mathbf{p}) + \beta \left( \sum_{i=1}^q t_i \frac{\partial M(\mathbf{p})}{\partial p_i} \right) \right] - \Psi[M(\mathbf{p})]}{\beta} = \\ &= G_{\Psi} \left[ M(\mathbf{p}), \sum_{i=1}^q t_i \frac{\partial M(\mathbf{p})}{\partial p_i} \right] \end{aligned}$$

Por la relación existente entre la derivada direccional y la derivada de Gâteaux estudiada en la sección 1.5.2., se tiene que

$$\begin{aligned} F_{\Phi}(\mathbf{p}, \mathbf{t}) &= G_{\Phi}(\mathbf{p}, \mathbf{t} - \mathbf{p}) \\ &= G_{\Psi} \left[ M(\mathbf{p}), \sum_{i=1}^q (t_i - p_i) \frac{\partial M(\mathbf{p})}{\partial p_i} \right] \\ &= F_{\Psi} \left[ M(\mathbf{p}), M(\mathbf{p}) + \sum_{i=1}^q (t_i - p_i) \frac{\partial M(\mathbf{p})}{\partial p_i} \right]. \end{aligned}$$

En particular cuando  $\mathbf{t}$  es el vector unitario  $\mathbf{e}_j = (0, \dots, 1, \dots, 0)$ , se

tiene que

$$\begin{aligned} G_{\Phi}(\mathbf{p}, \mathbf{e}_j) &= G_{\Psi} \left[ M(\mathbf{p}), \frac{\partial M(\mathbf{p})}{\partial p_j} \right], \\ F_{\Phi}(\mathbf{p}, \mathbf{e}_j) &= F_{\Psi} \left[ M(\mathbf{p}), M(\mathbf{p}) + \frac{\partial M(\mathbf{p})}{\partial p_j} - \sum_{i=1}^q p_i \frac{\partial M(\mathbf{p})}{\partial p_i} \right]. \end{aligned}$$

El algoritmo que se propone a continuación ha sido desarrollado para el criterio de  $D$ -optimización, de modo que  $\Psi_D[M(\mathbf{p})] = \log \det M(\mathbf{p})$ . Luego,

$$\frac{\partial \Psi[M(\mathbf{p})]}{\partial p_r} = \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q m_{ij}^{-1}(\mathbf{p}) \frac{\partial m_{ij}^{-1}(\mathbf{p})}{\partial p_r} = \text{Tr} \left[ M^{-1}(\mathbf{p}) \frac{\partial M(\mathbf{p})}{\partial p_r} \right],$$

donde  $m_{ij}(\mathbf{p})$  es el elemento correspondiente a la fila  $i$ -ésima y columna  $j$ -ésima de la matriz de información  $M(\mathbf{p})$ . Por tanto, la derivada direccional para  $D$ -optimización cuando los elementos de la matriz de información son no lineales es de la forma

$$F_{\Phi_D}(\mathbf{p}, \mathbf{e}_j) = \text{Tr} \left[ M^{-1}(\mathbf{p}) \frac{\partial M(\mathbf{p})}{\partial p_j} \right] - \sum_{i=1}^q p_i \text{Tr} \left[ M^{-1}(\mathbf{p}) \frac{\partial M(\mathbf{p})}{\partial p_j} \right]. \quad (4.3)$$

### Condiciones de Optimización

En el capítulo 1 vimos que si  $\Phi$  es convexa (cóncava), un diseño  $\mathbf{p}^*$  es óptimo si

$$F_{\Phi}(\mathbf{p}^*, \mathbf{t}) \geq (\leq) 0 \forall \mathbf{t} \in \mathcal{S},$$

es decir,

$$\max_{\mathbf{t} \in \mathcal{S}} F_{\Phi}(\mathbf{p}^*, \mathbf{t}) \geq (\leq) 0.$$

Si además  $\Phi$  es diferenciable, entonces  $\mathbf{p}^*$  es óptimo si y sólo si

$$\begin{cases} F_{\Phi}(\mathbf{p}^*, \mathbf{e}_j) = 0 & \text{si } p_j > 0 \\ F_{\Phi}(\mathbf{p}^*, \mathbf{e}_j) \geq (\leq) 0 & \text{si } p_j = 0 \end{cases} \quad (4.4)$$

En los diseños de permutación en experimentos con mezclas,  $\Phi$  es una función diferenciable pero no es convexa (cóncava). Por tanto,

las condiciones de primer orden son necesarias para alcanzar los mínimos (máximos) locales, pero es necesario comprobar las condiciones de segundo orden para asegurarlo.

La iteración propuesta para actualizar el ingrediente  $j$ -ésimo de  $\mathbf{p}$  corresponderá

$$p_j^{(n+1)} = \frac{p_j^{(n)} h(d_j^{(n)}, \delta)}{\sum_{i=1}^k p_i^{(n)} h(d_i^{(n)}, \delta)} \quad \text{o} \quad p_j^{(n+1)} = \frac{p_j^{(n)} h(z_j^{(n)}, \delta)}{\sum_{i=1}^k p_i^{(n)} h(z_i^{(n)}, \delta)}, \quad (4.5)$$

donde  $d_j^{(n)} = d_j(\mathbf{p}^{(n)}) = G_\Phi(\mathbf{p}^{(n)}, e_j)$  y  $z_j^{(n)} = z_j(\mathbf{p}^{(n)}) = F_\Phi(\mathbf{p}^{(n)}, e_j)$ ,  $j = 1, \dots, q$ , son la derivada de Gâteaux y la derivada direccional respectivamente,  $\delta \in (0, 1]$  y  $h(x, \delta)$  es una función positiva y estrictamente creciente que debe elegirse de manera adecuada para acelerar la convergencia. Varios autores han proporcionado diferentes funciones para este propósito (ver [Tor92], [Tor01]). En este trabajo, la función  $h(x, \delta)$  elegida fue la función de distribución acumulada de una normal estándar, ya que ésta llevó al algoritmo a converger en tiempos razonables en comparación con otras funciones utilizadas.

De acuerdo con (4.5), diremos que una iteración del AM se ha completado cuando todos los ingredientes que intervienen en la mezcla,  $j = 1, \dots, q$  se hayan actualizado a partir de esta regla. En cuanto a la regla de parada, consistirá en comprobar si se satisface 4.4 bajo cierto nivel de tolerancia y comprobar después las condiciones de segundo orden.

Una limitación que surge de considerar un sólo grupo de permutación es que, en muchos problemas de mezclas,  $q!$  puntos de diseño resultan ser insuficientes para estimar todos los parámetros del modelo. Esto se debe principalmente a que el número de parámetros del modelo es mayor que  $q!$ , o bien, a que existen coordenadas repetidas en el punto generador de la permutación. La situación anterior conduce a la singularidad de la matriz de información. A continuación se propone una extensión del algoritmo presentado para superar este inconveniente.

Considérese la aproximación simultánea de más de un grupo de permutación, esto es  $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_q)$ ,  $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_q), \dots$ . Esta nueva idea tiene la ventaja de reducir notablemente la dimensión del problema. Además, todo punto del simplex es un posible candidato a formar parte del diseño óptimo a pesar de estar considerando una clase de diseños restringidos. A modo de ejemplo vamos a considerar un problema de mezclas en el que se requieren tres grupos de permutación para alcanzar el diseño solución,  $\mathbf{p}^* = (p_1^*, \dots, p_q^*)$ ,  $\mathbf{r}^* = (r_1^*, \dots, r_q^*)$  y  $\mathbf{t}^* = (t_1^*, \dots, t_q^*)$ . El problema a resolver será maximizar  $\Phi[\mathbf{M}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, \mathbf{t})]$  sobre

$$\begin{aligned} \mathcal{P} = \{ & \mathbf{a} = (a_1, \dots, a_q) = \sigma(p_1, \dots, p_q), \mathbf{b} = (b_1, \dots, b_q) = \sigma(r_1, \dots, r_q), \\ & \mathbf{c} = (c_1, \dots, c_q) = \sigma(t_1, \dots, t_q) : \sum_{i=1}^q p_i = 1, \sum_{i=1}^q r_i = 1, \sum_{i=1}^q t_i = 1, \\ & p_i, r_i, t_i \geq 0, i = 1, \dots, q \}. \end{aligned}$$

Por tanto, debe efectuarse la siguiente actualización simultánea

$$\begin{aligned} p_j^{(n+1)} &= \frac{p_j^{(n)} h(x_j^{(n)}, \delta_1)}{\sum_{i=1}^q p_i^{(n)} h(x_i^{(n)}, \delta_1)}, & r_j^{(n+1)} &= \frac{r_j^{(n)} g(y_j^{(n)}, \delta_2)}{\sum_{i=1}^q r_i^{(n)} g(y_i^{(n)}, \delta_2)}, \\ t_j^{(n+1)} &= \frac{t_j^{(n)} f(z_j^{(n)}, \delta_3)}{\sum_{i=1}^q t_i^{(n)} f(z_i^{(n)}, \delta_3)}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

donde

$$x_j^{(n)} = F_{\Phi_D}(\mathbf{p}^{(n)}, e_j), y_j^{(n)} = F_{\Phi_D}(\mathbf{r}^{(n)}, e_j), z_j^{(n)} = F_{\Phi_D}(\mathbf{t}^{(n)}, e_j),$$

y  $h(x, \delta_1)$ ,  $g(y, \delta_2)$  y  $f(z, \delta_3)$  se definen como en (4.5). De acuerdo

con las condiciones (4.4), un diseño  $\xi_{\mathcal{P}}^*$  es el óptimo si

$$\begin{aligned} F_{\Phi}(\mathbf{p}^*, e_j) &= \begin{cases} = 0 & \text{for } p_j^* > 0 \\ \leq 0 & \text{for } p_j^* = 0 \end{cases} \\ F_{\Phi}(\mathbf{r}^*, e_j) &= \begin{cases} = 0 & \text{for } r_j^* > 0 \\ \leq 0 & \text{for } r_j^* = 0 \end{cases} \\ F_{\Phi}(\mathbf{t}^*, e_j) &= \begin{cases} = 0 & \text{for } t_j^* > 0 \\ \leq 0 & \text{for } t_j^* = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

se satisfacen simultáneamente.

## Algoritmo

1. Introducir  $q$ ,  $\xi_{\mathcal{P}}^{(0)} = \{\sigma(\mathbf{p}^{(0)})\}$ ,  $\delta$ ,  $tol$ . Sea  $n = 0$ .
2. Para cada  $j = 1, \dots, q$  actualizar las proporciones

$$p_j^{(n+1)} = \frac{p_j^{(n)} h(x_j^{(n)}, \delta_1)}{\sum_{i=1}^q p_i^{(n)} h(x_i^{(n)}, \delta_1)}$$

donde  $x_j^{(0)} = F_{\Phi_D}(\mathbf{p}^{(0)}, e_j)$  calculado como en (4.3).

3. Se construye el nuevo diseño  $\xi_{\mathcal{P}}^{(1)} = \{\sigma(\mathbf{p}^{(1)})\} \stackrel{Not}{\equiv} \mathbf{p}^{(1)}$ .
4. Si  $\det M(\mathbf{p}^{(1)}) \approx 0$  repetir los pasos del 1 al 3 introduciendo un nuevo grupo de permutación  $\xi_{\mathcal{P}} = \{\sigma(\mathbf{p}^{(0)}, \mathbf{q}^{(0)})\}$ . Actualizar las proporciones

$$p_j^{(n+1)} = \frac{p_j^{(n)} h(x_j^{(n)}, \delta_1)}{\sum_{i=1}^q p_i^{(n)} h(x_i^{(n)}, \delta_1)}, \quad r_j^{(n+1)} = \frac{r_j^{(n)} g(y_j^{(n)}, \delta_2)}{\sum_{i=1}^q r_i^{(n)} g(y_i^{(n)}, \delta_2)}.$$

En otro caso, paso 5.

5. Se comprueba si se verifica la condición

$$\max\{F_{\Phi}(\mathbf{p}, e_j), F_{\Phi}(\mathbf{r}, e_j), \dots, F_{\Phi}(\mathbf{t}, e_j)\} \geq 10^{-tol}, \forall \mathbf{p} \in \xi_{\mathcal{P}}^{(1)}$$

donde  $tol$  es cierta precisión prefijada.

6. Si se verifica la condición del paso anterior, el diseño  $\xi_p^{(1)}$  está suficientemente próximo al  $D$ -óptimo. Si no se verifica la regla de parada anterior se repiten los pasos del 2 al 6 actualizando  $\xi_p^{(0)}$  a  $\xi_p^{(1)}$  y así sucesivamente.

## 4.4. Algoritmo Genético

Cuando se hace indispensable el uso de herramientas numéricas para el cálculo de soluciones aproximadas y se requiere, además, una gran potencia computacional, los Algoritmos Genéticos (AGs) resultan ser una buena elección. En la actualidad, estos métodos de optimización estocásticos se encuentran en auge por la cantidad de ventajas que ofrecen: implementación sencilla, capacidad de búsqueda en tiempos razonables y no requieren la verificación de ciertas propiedades como la continuidad, diferenciabilidad y convexidad de la función criterio. Éstas no se satisfacen en muchos problemas de mezclas y, en general, son difíciles de probar. A pesar de ser métodos heurísticos (la convergencia no está garantizada), numerosos trabajos muestran su buen funcionamiento basado en los principios de *prueba y error* y probabilidad.

El artífice de las ideas que caracterizan estos algoritmos fue Holland [Hol75]. Este trabajo fue ampliado por Goldberg [Gol89], quien popularizó su uso en otros campos del conocimiento. Algunos ejemplos de los trabajos en los se han empleado algoritmos genéticos para resolver problemas de diseño óptimo son los de Borkowski [Bor03] que calcula diseños óptimos exactos para modelos de segundo orden sobre un hipercubo, Heredia-Langer et al. [AHL03] que calculan diseños  $D$ -óptimos y comparan el rendimiento del AG empleado con otros algoritmos de intercambio existentes y Park et al. [YP06] que encuentran diseños  $G$ -óptimos incorporando restricciones de coste en la función objetivo para modelos de segundo orden sobre regiones cuboidales. En particular, para experimentos con mezclas, tan sólo encontramos dos trabajos. Goldfarb et al. [HB05] que utilizan

AGs para obtener diseños con el fin de estimar de forma óptima la varianza de la predicción involucrando variables proceso y Limmun et al. [WL13] que desarrollan un AG para calcular diseños  $D$ -óptimos para modelos polinómicos.

En este tipo de algoritmos es habitual utilizar una terminología específica por analogía semántica a los términos empleados en Genética. Sea  $\mathcal{P}$  la población de  $M$  diseños iniciales de  $n$  puntos aleatoriamente seleccionados en la región de diseño  $\mathcal{S}$ . Las soluciones potenciales del problema, los diseños, se denominan *cromosomas*, mientras que los puntos de soporte de cada diseño (cada una de las mezclas) se llamarán *genes*. Un algoritmo genético consiste en dar una serie de reglas de actualización de los diseños de la población basadas en los procesos naturales de selección, recombinación y mutación, con el objetivo de obtener poblaciones que mejoren a las anteriores, de modo que la última de ellas contenga al diseño óptimo. Los nuevos diseños se generan utilizando la cantidad de información que proporciona cada diseño inicial, medida en términos del valor de la función criterio relativa a la población. Esta cantidad de información es una medida de probabilidad de la bondad del diseño que se conoce como *función fitness*

$$fit_i = \frac{\Phi(\xi_i)}{\sum_{j=1}^M \Phi(\xi_j)}, \quad i = 1, \dots, M.$$

A continuación, una selección adecuada de operadores actúan sobre los miembros de la población.

### Selección.

- *Selección elitista.* Mantiene los  $N_{elite} = P_{elite} \cdot M$  diseños de la actual población con mayor fitness para la siguiente, siendo  $P_{elite}$  la probabilidad de élite establecida. Este operador garantiza que la sucesión de valores de la función fitness del mejor de los diseños en cada iteración sea no decreciente.

- *Selección probabilística.* Selecciona dos diseños *padre* para los siguientes procesos de modo que la probabilidad de ser elegido es proporcional a su fitness. Sean  $i_1^*$  e  $i_2^*$  los índices correspondientes a los miembros de la población elegidos. Entonces,

$$i_1^* = \min\{i : \sum_{s=1}^i fit_s \geq \gamma_1\} \quad \text{y} \quad i_2^* = \min\{i : \sum_{s=1}^i fit_s \geq \gamma_2\},$$

donde  $\gamma_1, \gamma_2 \sim U(0, 1)$  son generados aleatoriamente. El mismo padre puede ser elegido dos veces sin pérdida de generalidad. La finalidad de este operador es extinguir los diseños menos informativos de la actual población.

**Cruce.** El propósito de este operador es crear dos nuevos diseños *hijo* que contenga información similar a los padres, esto es “explotar” las soluciones. La operación de cruce se llevará a cabo o no dependiendo de cierta probabilidad de cruce  $P_C$ . En cada posible intervención, se genera  $\gamma \sim U(0, 1)$  aleatoriamente. Si  $\gamma < P_C$ , entonces el operador de cruce actuará. En otro caso, los hijos permanecerán sin cambio del paso anterior. Después de haber estudiado el ratio de convergencia para distintos valores de  $P_C$ , en este trabajo se ha considerado  $P_C = 0.2$  ya que con éste valor convergieron todos los casos de estudio y en menor tiempo. Para llevar a cabo la recombinación se han empleado dos operadores de cruce:

- *Cruce aritmético.* Sean  $\xi_{i_1^*}$  y  $\xi_{i_2^*}$  los padres seleccionados en la selección probabilística. Los nuevos diseños hijo se crearan a partir de una combinación lineal convexa de los genes de los padres. Por tanto,

$$\xi_{hijo_1} = \lambda \xi_{i_1^*} + (1 - \lambda) \xi_{i_2^*} \quad \text{y} \quad \xi_{hijo_2} = (1 - \lambda) \xi_{i_1^*} + \lambda \xi_{i_2^*}$$

serán los nuevos diseños generados con  $\lambda \sim U(0, 1)$ . Puesto que la recombinación se produce intercambiando información de ambos padres, este tipo de cruce se conoce como *cruce entre padres*.

- *Cruce de un punto.* Este operador actúa en cada gen de cada hijo con probabilidad  $P_C$ . En primer lugar, se fija una posición de las cifras decimales para todas las proporciones. La parte anterior al punto fijado determina la *cabeza* y la posterior la *cola*. El cruce consiste en una permutación aleatoria entre las proporciones de un mismo gen. Puesto que la recombinación se produce dentro del mismo diseño, este tipo de cruce se conoce como *cruce dentro de los padres*. En problemas de mezclas con restricciones lineales, si el punto cruzado quedase fuera de la región factible, se conservaría el punto sin permutar.

**Mutación.** El objetivo de este operador es fomentar la “biodiversidad” de las soluciones para evitar estancamientos en óptimos locales. Su misión será, por tanto, explorar nuevas posibilidades en el espacio de búsqueda. Cada diseño hijo creado en el paso anterior será sometido a mutación con probabilidad  $P_M$  y permanecerá sin cambio con probabilidad  $1 - P_M$ . En este trabajo se ha considerado una probabilidad de mutación  $P_M = 0.05$  después de haber estudiado el ratio de convergencia para un amplio rango de valores de  $P_M$ . La mutación consistirá en reemplazar el diseño actual por uno nuevo aleatoriamente seleccionado en la región factible.

$N_{elite} + 2$  nuevos diseños habrán sido obtenidos al final de este proceso. Las operaciones de *Selección probabilística - Cruce - Mutación* deben realizarse repetidas veces hasta completar una *generación* de  $M$  nuevos diseños. Llegados a este punto, se habrá completado también una iteración del algoritmo genético. Repetir este procedimiento de manera continuada conduce a la obtención de mejores soluciones. El proceso iterativo finalizará cuando el algoritmo haya alcanzado una solución óptima. En este trabajo se estableció como regla de parada no encontrar mejoras sustanciales en el valor de la función criterio del mejor diseño durante un número de iteraciones consecutivas suficientemente grande  $N_{max}$

$$\frac{\Phi(\xi_{i+1}^{best}) - \Phi(\xi_i^{best})}{\Phi(\xi_{i+1}^{best})} \leq 10^{-tol}.$$

Existen multitud de operadores en la literatura para construir un AG. La naturaleza heurística del método implica que la selección de los operadores es un punto clave para la convergencia del algoritmo. Cabe destacar que los operadores propuestos en este trabajo funcionaron adecuadamente en todos los casos de estudio. Por otro lado, resulta de especial relevancia que si los diseños iniciales yacen sobre una subregión del simplex, los operadores del algoritmo multiplicativo propuesto tienen la propiedad de generar las nuevas generaciones de diseños dentro de la misma subregión. De este modo, el algoritmo proporcionado servirá para abordar problemas de mezclas restringidos. La efectividad del AG en estas situaciones se ilustra en la siguiente sección.

## Algoritmo

1. Introducir  $M$ ,  $\mathcal{P}^{(0)} = \{\xi_1, \dots, \xi_M\}$ ,  $N_{elite}$ ,  $P_{elite}$ ,  $P_C$ ,  $P_M$ ,  $N_{max}$  y  $tol$ .
2. Para cada  $i = 1, \dots, M$ , se calcula el fitness

$$fit_i = \frac{\Phi(\xi_i)}{\sum_{j=1}^M \Phi(\xi_j)}.$$

3. Selección

3.1 *Selección elitista*. Seleccionar los  $N_{elite} = P_{elite} \cdot M$  diseños con mayor fitness.

3.2 *Selección probabilística*. Seleccionar dos diseños padres, el  $i_1^*$ -ésimo y el  $i_2^*$ -ésimo, siendo

$$i_1^* = \min\{i : \sum_{s=1}^i fit_s \geq \gamma_1\} \quad \text{y} \quad i_2^* = \min\{i : \sum_{s=1}^i fit_s \geq \gamma_2\},$$

donde  $\gamma_1, \gamma_2 \sim U(0, 1)$ .

4. Cruce

Sea  $\gamma \sim U(0, 1)$ . Si  $\gamma < P_C$ , entonces

4.1 *Cruce aritmético*. Crear

$$\xi_{hijo_1} = \lambda \xi_{i_1}^* + (1 - \lambda) \xi_{i_2}^* \quad \text{y} \quad \xi_{hijo_2} = (1 - \lambda) \xi_{i_1}^* + \lambda \xi_{i_2}^*$$

a partir de los padres seleccionados en 3.2,  $\xi_{i_1}^*$  y  $\xi_{i_2}^*$ , siendo  $\lambda \sim U(0, 1)$ .

4.2 *Cruce de un punto*. Sea  $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_q)$  un gen perteneciente a cualquiera de los  $\xi_{hijo_i}$ ,  $i = 1, 2$ .

$$\mathbf{p} = (0.abc_1 \mid def_1, \dots, 0.abc_q \mid def_q),$$

donde  $abc_j$  y  $def_j$  son las cifras decimales que integran la cabeza y la cola respectivamente del ingrediente  $j$ -ésimo. Mantener  $abc_j \quad \forall j = 1, \dots, q$  en  $\mathbf{p}$  y reemplazar las colas por  $\sigma(def_1, \dots, def_q)$ , donde  $\sigma$  es una permutación aleatoria de sus coordenadas.

En otro caso, permanecer sin cambio.

5. Mutación. Sea  $\gamma \sim U(0, 1)$ . Si  $\gamma < P_M$ , reemplazar los diseños anteriores por otros nuevos aleatoriamente seleccionados en  $S$ . En otro caso, permanecer sin cambio.
6. Repetir 3.2 - 5 hasta haber obtenido una nueva generación  $\mathcal{P}^{(1)}$  de  $M$  diseños.
7. Se comprueba si se verifica la condición

$$\frac{\Phi(\xi_1^{best}) - \Phi(\xi_0^{best})}{\Phi(\xi_1^{best})} \leq 10^{-tol}$$

durante  $N_{max}$  iteraciones consecutivas, donde  $tol$  es cierta precisión prefijada,  $\xi_1^{best}$  y  $\xi_0^{best}$  son los diseños con mayor fitness en  $\mathcal{P}^{(1)}$  y  $\mathcal{P}^{(0)}$  respectivamente.

8. Si se verifica la condición del paso anterior, el diseño  $\xi_1^{best}$  está suficientemente próximo al  $D$ -óptimo. Si no se verifica la regla de parada anterior se repiten los pasos del 2 al 7 actualizando  $\mathcal{P}^{(0)}$  a  $\mathcal{P}^{(1)}$  y así sucesivamente.

## 4.5. Ejemplos Numéricos

En los ejemplos que se muestran a continuación se han calculado diseños  $D$ -óptimos exactos para diferentes modelos utilizando las

nuevas metodologías propuestas. Las pruebas se realizaron para modelos con tres o cuatro ingredientes ya que son los más frecuentes en la literatura para sistemas de mezclas. En general, en el análisis de experimentos con mezclas se utiliza un número pequeño de componentes ya que introducir demasiados no contribuye a una mejor explicación de la respuesta y los experimentos pueden resumirse en pocas “familias” de ingredientes. Los dos algoritmos propuestos se desarrollaron con el software *Wolfram Mathematica 10.3* y los diseños obtenidos se representaron con *R 3.2.3 software* utilizando el paquete *mixexp*. Por otro lado, se ha utilizado Algoritmo Cíclico Coordinado (ACC) de Meyer y Nachtsheim [Mey95b] para comparar, cuando ha sido posible, su resultado con el de los algoritmos propuestos. Para implementar el algoritmo ACC se utilizó el software *JMP 12*. Los niveles de tolerancia utilizados en las reglas de parada de los ejemplos fueron  $10^{-5}$  y  $10^{-3}$  para el algoritmo genético y el algoritmo multiplicativo respectivamente, puesto que este último tiene una regla de parada más estricta. Se estableció  $N_{max} = 100$  en la regla de parada del algoritmo genético para alcanzar el óptimo y la función  $h(x, \delta)$  seleccionada para la iteración del multiplicativo fue la función de distribución acumulada de una normal estándar.

La efectividad de los algoritmos propuestos se ilustra a continuación mediante diferentes casos de estudio que surgen en la industria farmacéutica, química y petroquímica.

#### 4.5.1. Formulación de tabletas de *tramadol*

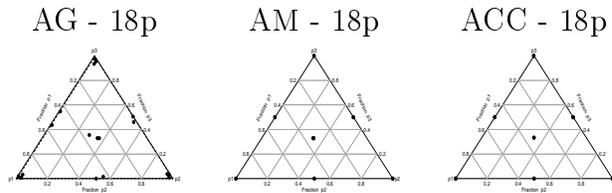
En farmacología, los modelos polinómicos son comúnmente utilizados para explicar sistemas de suministro de fármacos. El siguiente ejemplo viene motivado por un problema real que persigue determinar el efecto que produce la modificación de la liberación del *carboxymetil xyloglucan* para su suministro oral [Mad13]. En particular, se utilizó un modelo especial cúbico (4.7) para tres ingredientes,  $p_1 =$  carboxymethyl xyloglucan,  $p_2 =$  agente gelificante

(HPMCK100M),  $p_3$  = fosfato dicálcico (DCP), para explicar el porcentaje de liberación del fármaco al cabo de unas horas en términos de su formulación:

$$E[y(\mathbf{p})] = \theta_1 p_1 + \theta_2 p_2 + \theta_3 p_3 + \theta_{12} p_1 p_2 + \theta_{13} p_1 p_3 + \theta_{23} p_2 p_3 + \theta_{123} p_1 p_2 p_3. \quad (4.7)$$

Una práctica habitual de los experimentadores es recurrir a diferentes software para obtener el diseño de sus experimentos. En general, los diseños estándar que señalábamos en el capítulo anterior, como los simplex lattice o simplex centroid, son los que se proponen por defecto en este tipo de programas. El diseño  $\{3, 3\}$ -simplex centroid fue el diseño  $D$ -óptimo obtenido en todas las pruebas (ver figura 4.1). En los gráficos de la figura, los vértices del simplex representan los componentes puros, las aristas corresponden a las mezclas binarias de los componentes cuyos vértices se unen y los puntos interiores son las mezclas de tres ingredientes. Por tanto, la elección de los experimentadores se corrobora en este trabajo con los algoritmos propuestos y el ACC. Además, para este modelo en particular existe una solución analítica (ver [Kie61]). Por tanto, sirva este ejemplo para validar las técnicas propuestas, al menos cuando hay información disponible en la literatura. La validación de estas nuevas metodologías es un punto fundamental de este trabajo puesto que en la mayoría de problemas de mezclas las soluciones analíticas son inabordables y los métodos numéricos se convierten en la única alternativa viable.

La tabla 4.5.1 recoge la mediana del tiempo de CPU (en segundos) de tres ejecuciones de cada algoritmo para cada escenario. Los diseños mostrados en la figura 4.1 así como el número de iteraciones, valor de la función criterio y eficiencias relativas de la tabla 4.5.1 corresponden a la prueba cuya mediana fue seleccionada. Los resultados fueron robustos a pesar de la naturaleza heurística del AG, de modo que no se observaron diferencias relevantes entre pruebas. Las eficiencias mostradas,  $Ef_{\Phi}^R$ , deben entenderse como las eficiencias de cada diseño con respecto al mejor de los diseños encontrados



**Figura 4.1:** Diseños  $D$ -óptimos calculados con los algoritmos propuestos y el ACC para el modelo (4.7).

para el escenario en cuestión. De la tabla 4.5.1 se deduce que el AM es más preciso que el AG aunque requiere más tiempo de cálculo. En este caso, el valor de la función criterio obtenido con los diseños obtenidos con el ACC fue el mismo que se obtuvo con el AM.

Nº puntos	Algoritmo	$\Phi_D[\xi^*]$	$n_{it}$	$t$	$Ef_{\Phi_D}^R$
18	AG	0.2882	2989	595	97
	AM	0.2962	14	960	100

**Tabla 4.1:** Valor de la función criterio, número de iteraciones, tiempo de ejecución (s) y eficiencia relativa de los diseños mostrados en la figura 4.1.

#### 4.5.2. Leyes de mixtura para la viscosidad de fluidos

Una aplicación interesante de los modelos de mezclas se encuentra en el campo de la química e ingeniería química. Para estudiar la cinética de la viscosidad de un fluido, existen diferentes leyes que describen los comportamientos de las mezclas. En los últimos años, el diseño óptimo de experimentos se ha convertido en una herramienta fundamental para el calcular estimaciones óptimas de los parámetros del modelo. La viscosidad de un fluido no es función

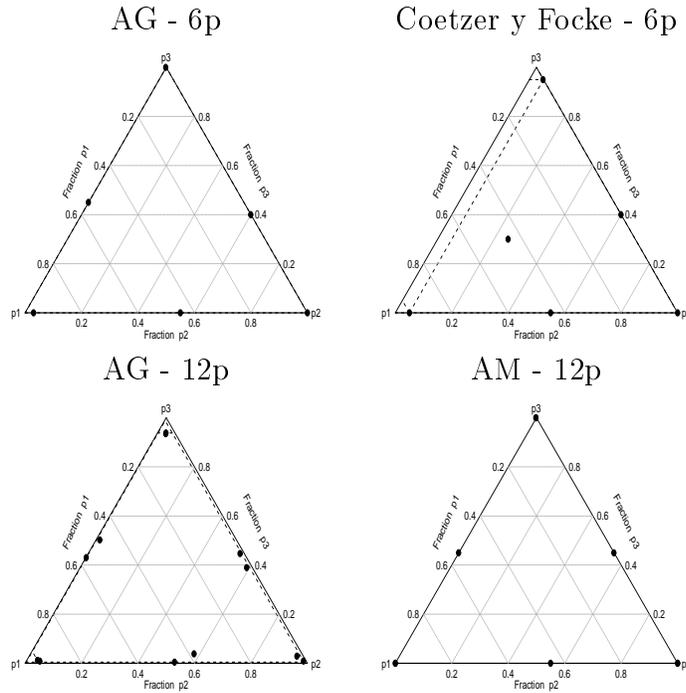
lineal de la formulación del mismo, de modo que los investigadores deben ajustar modelos matemáticos complejos para su predicción. El modelo elegido para este ejemplo es una famosa ley de mezclas (4.8), propuesta por Grunberg y Nissan [Gru49], que forma parte de la clase de modelos conocidos como *power-mean-mixture models* (Focke et al. [Foc07]):

$$E[y(\mathbf{p}, \boldsymbol{\theta})] = \boldsymbol{\eta}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}) = \text{Exp} \left( \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \text{Ln}(\theta_{ij}) p_i p_j \right) \quad (4.8)$$

siendo  $p_1$  =acetona,  $p_2$  =metanol,  $p_3$  =agua y la respuesta explica la viscosidad de la mezcla. El modelo considerado (4.8) es un modelo no lineal en los parámetros, de modo que se hace necesario utilizar las herramientas descritas en 1.6. En este sentido, los diseños calculados serán localmente óptimos. Vamos a considerar  $\theta_{ij} = \theta_{ji}$  para evitar la sobreparametrización del modelo y tomaremos de [Foc07] los valores nominales de los parámetros.

Coetzer y Focke [Coe10] calculan un diseño  $D$ -óptimo de 6 puntos para este modelo utilizando una técnica de optimización no lineal con restricciones. Aunque los diseños de la figura 4.2 parecen muy similares entre sí, las pequeñas variaciones que se producen en la localización de algún punto de diseño conducen a importantes variaciones de la función criterio. El diseño que proporcionan Coetzer y Focke [Coe10] tiene una eficiencia de un 89.83% con respecto al diseño calculado con el algoritmo genético con el mismo número de puntos. Por otro lado, un grupo de permutación resultó ser insuficiente para estimar todos los parámetros del modelo con el AM (pues alcanza el punto generador  $(1, 0, 0)$  que sólo proporciona tres puntos distintos). Por tanto, el algoritmo añade un nuevo grupo de permutación, lo cual implica añadir  $q!$  puntos al diseño. Para comparar los resultados obtenidos con los dos algoritmos propuestos, se realizaron también las pruebas con el AG y 12 puntos de diseño. El diseño que alcanza el AM obtiene de nuevo el mejor resultado a pesar de necesitar un mayor gasto computacional como puede verse

en la tabla 4.5.2. Hasta donde el autor conoce, los algoritmos existentes en la literatura no están disponibles para modelos complejos como es el caso de los modelos no lineales. Por esta razón, el ACC no pudo probarse en este caso de estudio.



**Figura 4.2:** Diseños  $D$ -óptimos calculados con los algoritmos propuestos y con el método [Coe10] para el modelo (4.8).

Los siguientes ejemplos son problemas de mezclas con restricciones. El AM que se propone en esta tesis no permite abordar este tipo de problemas. Esto se debe a que los puntos formados por permutación de uno perteneciente a una subregión del simplex definida por restricciones lineales pueden no estar contenidos dentro de la subregión. Una de las líneas de investigación abiertas en este contexto consiste precisamente en explorar nuevas posibilidades de la iteración multiplicativa para abortar este tipo de situaciones. Sin

Nº puntos	Algoritmo	$\Phi_D[\xi^*]$	$n_{it}$	$t$	$Ef_{\Phi_D}^R$
6	AG	0.3924	65666	22291	100
	Coetzer & Focke	0.3525	-	-	89.83
12	AG	0.7170	11951	921	89
	AM	0.8048	51	3312	100

**Tabla 4.2:** Valor de la función criterio, número de iteraciones, tiempo de ejecución (s) y eficiencia relativa de los diseños mostrados en la figura 4.2

embargo, el AG ha sido especialmente diseñado para superar esta dificultad. Por construcción del algoritmo, si los diseños iniciales yacen sobre una subregión del simplex, los operadores proporcionados mantienen las siguientes generaciones de diseños dentro de la misma región. Los siguientes ejemplos ilustran la efectividad del AG en este tipo de problemas.

### 4.5.3. Control del tamaño de nanopartículas

Las ciclodextrinas naturales o modificadas son excipientes frecuentemente utilizados en la industria farmacéutica para reducir la toxicidad y mejorar la estabilidad, solubilidad y biodisponibilidad de fármacos hidrofóbicos (Choisnard et al. [Cho05]). La capacidad de las nanopartículas para asociarse a un fármaco depende en parte de su tamaño. [Cho05] estudian el tamaño de las  $\beta$ -ciclodextrina anfílicas ( $\beta$ CDA) utilizando un procedimiento de nanoprecipitación que depende fuertemente de la formulación del disolvente. El tamaño de las nanopartículas se explica a partir de un polinomio de segundo orden completo que depende de las proporciones de  $p_1$  =agua,  $p_2$  =acetona y  $p_3$  =etanol. Algunos estudios preliminares mostraron que algunas formulaciones del disolvente conducían a resultados incoherentes. Sería necesario controlar la alta solubilidad del  $\beta$ CDA para evitar la baja intensidad para separar ondas

de distinta frecuencia al atravesar el medio (*scattering*) puesto que se está considerando un disolvente orgánico. De esta forma, la región experimental se limitó por las restricciones:  $0.4 \leq p_1 \leq 0.7$  y  $0 \leq p_2, p_3 \leq 0.6$ .

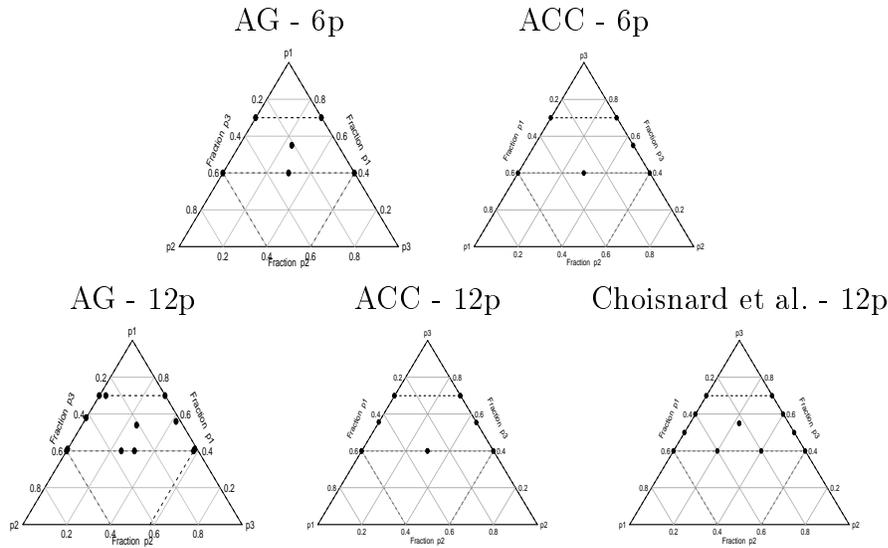
El AG propuesto está preparado para abordar este tipo de problemas de modo que se utilizará para resolver este ejemplo. Además, por tratarse de un modelo polinómico, lo podemos comparar con el ACC. El modelo que utilizan los experimentadores [Cho05] no es adecuado porque no es un polinomio canónico. Los parámetros del modelo no pueden estimarse de manera única y, en consecuencia, el diseño que utilizan lleva a la singularidad de la matriz de información. En este trabajo proponemos la siguiente reparametrización del modelo original de los experimentadores

$$E[y(\mathbf{p})] = \theta_1 p_1 + \theta_2 p_2 + \theta_3 p_3 + \theta_{12} p_1 p_2 + \theta_{13} p_1 p_3 + \theta_{23} p_2 p_3. \quad (4.9)$$

El modelo anterior no sólo evita que la matriz de información sea singular sino que además reduce el número de parámetros del modelo, de modo que se necesitan menos observaciones para estimar los parámetros. Para este caso de estudio se proponen dos diseños: uno con el mínimo número de puntos necesario para estimar los parámetros (*diseño saturado*) y otro con el mismo número de puntos que utilizan los experimentadores (ver figura 4.3). Los resultados obtenidos con el diseño que proporciona el ACC así como el utilizado en [Cho05] fueron omitidos de la tabla 4.5.3 puesto que la función criterio tomó valores próximos a cero.

#### 4.5.4. Formulación de microemulsiones

Un sistema de microemulsión es un método de recuperación mejorada del petróleo. El agua y el petróleo no son sustancias miscibles a temperatura ambiente, de modo que la mezcla debe realizarse bajo condiciones extremas para evitar la incompatibilidad entre estos



**Figura 4.3:** Diseños  $D$ -óptimos calculados con AG, ACC y con el método utilizado en [Cho05] para el modelo (4.9).

Nº puntos	Algoritmo	$\Phi_D[\xi^*]$	$n_{it}$	$t$
6	AG	0.3174	35791	1124
12	AG	0.0595	3192	187

**Tabla 4.3:** Valor de la función criterio, número de iteraciones y tiempo de ejecución (s) de los diseños mostrados en la figura 4.3

fluidos. En este sentido, la elección de la formulación de los ingredientes que forman el sistema de microemulsión es determinante para el buen funcionamiento del mecanismo. La incorporación de pequeñas cantidades de surfactantes, cosurfactantes y salmuera al agua hace que estos fluidos sean compatibles formando una estructura conocida como *microemulsión*. Este efecto tan deseable para la recuperación del petróleo se debe a las propiedades que aportan a la mezcla dichas sustancias. Jerirani et al. [Jer12] modelizan la IFT

(*interfacial tension*), que es una medida de intercambio de energía entre dos fluidos inmiscibles, mediante un polinomio cúbico especial (4.10).

$$E[y(\mathbf{p})] = \theta_1 p_1 + \theta_2 p_2 + \theta_3 p_3 + \theta_4 p_4 + \theta_{12} p_1 p_2 + \theta_{13} p_1 p_3 + \theta_{14} p_1 p_4 + \theta_{23} p_2 p_3 + \theta_{24} p_2 p_4 + \theta_{34} p_3 p_4 + \theta_{123} p_1 p_2 p_3 + \theta_{124} p_1 p_2 p_4 + \theta_{134} p_1 p_3 p_4 + \theta_{234} p_2 p_3 p_4 \quad (4.10)$$

Valores bajos de IFT producen un sistema de microemulsión más efectivo. Por tanto, ajustar el modelo de manera óptima es indispensable para encontrar los valores que minimizan la respuesta. Las sustancias que intervienen en la predicción de la IFT son  $p_1$  =alcohol isopropílico (IPA),  $p_2$  =cloruro de sodio (NaCl),  $p_3$  =polisorbato 80 (*Tween80*) y  $p_4$  =agua.

Un rasgo especial que hace que este sistema funcione correctamente es que la cantidad de agua debe ser muy grande en comparación con la del resto de componentes para que la microemulsión sea efectiva. A pesar de que la existencia de estas sustancias en la mezcla es prácticamente inapreciable, el efecto que producen es significativamente positivo. En particular, estas restricciones son:  $0.01 \leq p_1 \leq 0.04$ ,  $0 \leq p_2 \leq 0.03$ ,  $0.002 \leq p_3 \leq 0.02$  y  $0.91 \leq p_4 \leq 0.98998$ . Debido a que la región de diseño es muy reducida, la búsqueda del óptimo será una difícil tarea.

En [Jer12] consideran un diseño  $I$ -óptimo de 20 puntos para modelizar la IFT. Como se mencionó en el capítulo inicial, este criterio tiene como finalidad la estimación óptima del promedio de la varianza predicha; a diferencia del criterio de  $D$ -optimización que persigue la estimación óptima de los parámetros del modelo. En este trabajo proponemos alternativamente diferentes diseños  $D$ -óptimos para obtener el mejor modelo para estimar el IFT. La tabla 4.5.4 muestra los resultados obtenidos con el AG en este complicado ejemplo de mezclas restringido. Siguiendo el esquema del caso previo, calcularemos el diseño  $D$ -óptimo saturado y el diseño  $D$ -óptimo con el mismo número de observaciones que realizaron los experimentadores. La información que reportan los diseños obtenidos con AG es notablemente mayor que la de los diseños

calculados con el ACC. Los valores de la función criterio para el diseño alcanzado con este último algoritmo fueron  $2.6791 \cdot 10^{-7}$  y  $3.997 \cdot 10^{-7}$  para los diseños de 14 y 20 puntos respectivamente. Por tanto, los diseños obtenidos con el ACC tienen una eficiencia del 18% y del 11% respectivamente con respecto a los obtenidos con el AG. Los valores tan bajos que toma la función criterio se debe a que la región de diseño es muy limitada. Los resultados obtenidos son prueba de la potencia del algoritmo propuesto para alcanzar el máximo en regiones muy limitadas donde la superficie respuesta es muy plana. Por otro lado, se pone en duda la  $I$ -optimalidad del diseño proporcionado por [Jer12]. El diseño  $D$ -óptimo de 20 puntos que se ha obtenido con el AG evaluado sobre la función criterio de  $I$ -optimalidad es  $5.1491 \cdot 10^8$ , mientras que con el de los experimentadores resulta  $7.6994 \cdot 10^{10}$ . Esta situación se produce probablemente porque el método de optimización empleado para alcanzar el  $I$ -óptimo no es adecuado o lo suficientemente potente. Esto sugiere como línea de investigación futura la extensión del AG propuesto a otros criterios de optimalidad.

Nº puntos	Algoritmo	$\Phi_D[\xi^*]$	$n_{it}$	$t$	$Ef_{\Phi_D}^R$
14	AG	$1.5130 \cdot 10^{-6}$	368	12545	100
20	AG	$3.7206 \cdot 10^{-6}$	459	20050	100
	Jeirani et al.	$2.5230 \cdot 10^{-7}$	-	-	7

**Tabla 4.4:** Valor de la función criterio, número de iteraciones, tiempo de ejecución (s) y eficiencia relativa de los diseños calculados para el modelo (4.10)

#### 4.5.5. Conclusiones

Los métodos numéricos son en la actualidad la única alternativa viable para resolver problemas DOE para modelos de mezclas debido a la complejidad del planteamiento analítico. La tónica general

para resolver esta clase de problemas ha sido emplear los algoritmos originalmente desarrollados para resolver problemas de diseño óptimo en situaciones "estándar". Sin embargo, su alcance parece muy limitado (como puede observarse en los resultados obtenidos con el ACC) y se desconoce cómo se comportan ante modelos complejos como, por ejemplo, modelos no lineales. En este sentido, únicamente se han implementado sobre una clase acotada de modelos, generalmente polinomios.

En este capítulo se proponen dos algoritmos para el cálculo de diseños  $D$ -óptimos exactos en problemas de diseño óptimo para modelos de mezclas. Los excelentes resultados alcanzados por las nuevas metodologías se ilustran a lo largo de diferentes ejemplos reales que surgen en la industria farmacéutica, química y petroquímica. En primer lugar, el AM es un algoritmo bien conocido en diseño óptimo de experimentos y su convergencia ha sido ampliamente estudiada para diseños aproximados. Su aplicación sobre problemas de mezclas exactos no es inmediata, de modo que un nuevo enfoque se proporciona en 4.3 para esta clase de problemas. La idea consiste en considerar grupos de permutaciones de puntos como puntos del soporte. Cuando aparecen coordenadas repetidas en el punto generador, es posible que un único grupo de permutación sea insuficiente para estimar todos los parámetros del modelo. El nuevo algoritmo está preparado para superar esta dificultad, incorporando de manera sistemática nuevos grupos de permutación y realizando una aproximación simultánea de todos los grupos. Por otro lado, se propone un método de optimización estocástica basado en AG, fácil de implementar y muy potente en términos computacionales. Éste algoritmo es flexible fundamentalmente en dos aspectos: no requiere verificar propiedades sobre la función criterio y puede aplicarse sobre problemas con restricciones adicionales. En este sentido, el AG se propone como una alternativa heurística cuando el resto de métodos requieren gran potencial computacional y cuando los problemas derivados de ejemplos reales necesitan mantener ciertas restricciones en las cantidades de los ingredientes.

El AM alcanza los mejores diseños en términos de eficiencia a pesar

de considerar una clase de diseños restringidos, los diseños de permutación. Por otro lado, el esfuerzo que requiere el AG para resolver los casos de estudios es inferior al que requiere AM. Sin embargo, las diferencias no son especialmente importantes, pues ambos alcanzaron el óptimo en tiempos razonables y convergieron en todos los ejemplos. El punto fuerte de AG es precisamente su capacidad de resolver problemas fuertemente restringidos.

Los diseños  $D$ -óptimos obtenidos fueron avalados por la literatura, al menos cuando pueden aplicarse otras técnicas algorítmicas (ACC) o cuando hay soporte teórico disponible. Además, en este capítulo se recomiendan diseños más eficientes a los experimentadores para llevar a cabo los ensayos pertinentes. Los algoritmos proporcionados obtienen diseños que mejoran sus resultados.



# Capítulo 5

## Diseños robustos para modelos de mezclas

*Los **objetivos** de este capítulo son: En primer lugar adaptar la teoría de diseño óptimo robusto para experimentos con mezclas. En segundo lugar, proponer estrategias de construcción que permitan adaptar las técnicas propuestas por [Dae13] a la naturaleza especial de los modelos de mezclas. Por último, aplicar la metodología desarrollada para resolver un problema real que consiste en alcanzar la composición óptima de un sucedáneo de gasolina diésel para modelizar el autoencendido en condiciones de motor HCCI.*

*Las principales **contribuciones** son: En la sección 5.3. se obtienen resultados teóricos que permiten alcanzar la expresión analítica de la densidad minimizante para mezclas binarias. En la sección 5.3. se proporciona un nuevo algoritmo general, basado en algoritmos genéticos, para el cálculo de diseños  $D$ - e  $I$ -óptimo robustos exactos para mezclas de más de dos ingredientes. Se propone además una clase eficiente de diseños restringidos, los diseños intercambiables. Por último, el algoritmo propuesto permitió resolver el problema real anteriormente planteado.*

## 5.1. Introducción

En numerosas ocasiones los experimentos con mezclas no pueden reproducirse bajo condiciones uniformes y la respuesta no depende únicamente de los ingredientes sino también de las condiciones bajo las que se realizan estos procesos [Pre04]. Esta situación puede llevar a producir desviaciones del modelo considerado y los diseños óptimos dependen fuertemente de esta elección. Por otro lado, en la etapa de diseño, los experimentadores deben seleccionar un modelo cuando aún no tienen información acerca del fenómeno que va a estudiarse. Si el modelo está “sobreespecificado” se perderá eficiencia puesto que estarán utilizando recursos para estimar parámetros innecesarios. Si por el contrario el modelo está especificado “débilmente”, con el diseño óptimo no será posible estimar la verdadera respuesta. Por tanto, asumir un modelo cuya forma es desconocida a priori puede llevar a resultados inadecuados tras la aplicación directa de la teoría de diseño óptimo de experimentos.

Box y Draper fueron los primeros en advertir los peligros de asumir un modelo inexacto [Box]. En este trabajo defienden que diseñar experimentos que son robustos contra la falta de especificidad de la respuesta es más importante que el diseño óptimo de experimentos: “... *the optimal design in typical situations in which both variance and bias occur is very nearly the same as would be obtained if variance were ignored completely and the experiment designed so as to minimize the bias alone*”. Bajo esta perspectiva, proponen utilizar como medida de la calidad de un diseño el error cuadrático medio, que se descompone en dos términos correspondientes a la varianza y al sesgo. Se buscarán, por tanto, diseños que minimicen esta cantidad. En este trabajo seguiremos la noción de robustez que plantearon Box y Draper, aunque este problema puede tratarse desde puntos de vista muy diferentes. A continuación se resumen las distintas corrientes de estudio de la robustez del modelo.

La robustez entendida como la firmeza de un diseño contra la falta de especificidad del modelo, ha seguido dos líneas de investigación bien diferenciadas. La primera de ellas se basa en la teoría de dise-

ño continuo que requiere el tratamiento analítico del sesgo. De esta aproximación del problema se obtienen, por tanto, diseños asintóticos. El primer trabajo realizado en esta línea fue desarrollado por Läuter [Lau74]. Su idea consiste en considerar una clase de modelos  $\mathcal{F}$  que pertenecen a una clase de funciones conocidas pudiendo ser de soporte finito o infinito. Para el caso finito, los criterios considerados son

1.  $\max_{\xi \in \Xi} \sum_{f \in \mathcal{F}} Q^*(f)p(f)|M_f(\xi)|$
2.  $\max_{\xi \in \Xi} \sum_{f \in \mathcal{F}} Q^*(f)p(f) \text{Ln}\{|M_f(\xi)|\}$
3.  $\min_{\xi \in \Xi} \max_{x \in \mathcal{X}} \sum_{f \in \mathcal{F}} Q^*(f)p(f)V_f(x, \xi)$

donde  $Q^*(f)$  es el peso asignado al modelo  $f$  y  $p(f)$  es una función para homogeneizar (en orden de magnitud) la función criterio en relación al modelo  $f$ . Obsérvese que en el caso finito, si  $Q^*(f) = Q \forall f \in \mathcal{F}$  y  $p(f) = p \forall f \in \mathcal{F}$ , entonces el criterio 2 es equivalente a  $\prod_{f \in \mathcal{F}} |M_f(\xi)|$ . Éste será uno criterios más explotados en la segunda corriente que detallaremos a continuación, con la salvedad de que en la aproximación de Läuter los diseños alcanzados son asintóticos. En este trabajo se dan condiciones bajo las que se verifican teoremas de equivalencia entre los criterios anteriores así como procedimientos iterativos para el cálculo de los diseños. Aunque muchos trabajos han sido desarrollados en este sentido [Coo82], [Det01], [Puk93b], generalmente para modelos de regresión polinómicos de grado desconocido, la idea que ha recibido una mayor acogida y una vasta extensión en la literatura es la propuesta por Wiens [Wie90]. Éste introduce los diseños con sesgo acotado, es decir, los diseños deben optimizar una función de un modelo potencial sujeto a una función contaminante que es desconocida pero acotada y continua. Para una revisión de sus trabajos consultar [Wie92], [Wie98], [Liu97], [Fan03]. Puesto que este será el *leitmotiv* de este capítulo, se detallarán sus fundamentos en la siguiente sección. Los trabajos anteriores se enmarcan dentro de la que denominaremos *corriente teórica*.

La segunda corriente de investigación está enfocada en un sentido más práctico del diseño. El fin último será proporcionar diseños exactos a los experimentadores cuando éstos barajan un conjunto de modelos posibles. Esta noción de robustez no es tan amplia como en el enfoque teórico, pues se parte de una serie de modelos predeterminados por el usuario. Bajo este marco se encuentran dos trabajos destacables. Heredia-Langer et al. [AHL04] construye un algoritmo genético para calcular diseños exactos partiendo de un conjunto de  $m$  modelos candidatos. La clave para alcanzar diseños robustos está en definir una función de deseabilidad para cada modelo candidato

$$d = \begin{cases} \left(\frac{y-A}{B-A}\right)^s & \text{si } A \leq y \leq B \\ d = 1 & \text{si } y \geq B \\ d = 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (5.1)$$

donde  $y$  es el valor de la función a optimizar,  $B$  es el valor máximo que puede alcanzar la función criterio elegida para el modelo candidato,  $A$  es una cota inferior y  $s$  es una constante que controla la penalización que recibe la función cuando se aleja del objetivo. Las funciones de deseabilidad individuales  $d_i$  para cada modelo candidato,  $i = 1, \dots, m$ , se combinan en una función objetivo general

$$D^* = \{d_1 \cdot d_2 \cdot \dots \cdot d_m\}^{1/m}, \quad 0 \leq D^* \leq 1.$$

El diseño óptimo robusto será aquel que maximiza el valor de  $D^*$ . Otro trabajo fundamental enmarcado dentro de esta *corriente práctica*, es el método desarrollado por DuMouchel y Jones siguiendo la teoría bayesiana [DuM94]. Los términos del modelo se clasifican en *primarios* o *potenciales*. Los primarios permanecen siempre en el modelo, mientras que los potenciales son posibles candidatos a formar parte de éste, que se incorporarán bajo cierta probabilidad a priori. Formalmente, supongamos que hay  $s_1$  y  $s_2$  términos primarios y potenciales respectivamente. Sea  $\mathbf{X} = (\mathbf{X}_{pri} | \mathbf{X}_{pot})$  con  $s_1 + s_2$  columnas y sea  $\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{\beta}_{pri} | \boldsymbol{\beta}_{pot})$ . A los términos primarios se les dota de una distribución previa no informativa, mientras que

a los términos potenciales se les dota de una distribución a priori  $N(0, \kappa \mathbf{I})$ , donde  $\kappa$  es un parámetro de precisión. Asumiendo  $\sigma = 1$  y los datos normalmente distribuidos  $\mathbf{Y}|\beta \sim N(\mathbf{X}\beta, \mathbf{I})$ , calculan la distribución a posteriori  $\beta|\mathbf{Y} \sim N(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}, \mathbf{A}^{-1})$ , donde

$$\mathbf{A} = [\mathbf{X}'\mathbf{X} + \mathbf{K}/\kappa^2]$$

es la matriz cuyo determinante debe ser maximizado para alcanzar el diseño óptimo. La matriz  $\mathbf{K}$  es una matriz diagonal, cuadrada de orden  $s_1 + s_2$  cuyos elementos de la diagonal son 0 los  $s_1$  primeros y 1 los  $s_2$  restantes. Agboto y Nachtsheim extienden estas ideas definiendo el popular *Bayesian Model Robust Optimal Design Criterion* [Agb05].

La revisión anterior es un compendio de métodos para la obtención de diseños robustos contra la falta de especificidad del modelo. Sin embargo, no todos ellos son aplicables a problemas de diseño con características especiales. En particular, nos referimos a los problemas de mezclas. Como señala Wiens en [Wie15]: “this is another area that is relatively unexplored by robust designers”. Los únicos trabajos que están preparados para abordar estas necesidades especiales se enmarcan dentro de la *corriente práctica*. El algoritmo genético de Heredia-Langer et al. [AHL04] es uno de ellos. Smucker et al. [BS09] proporcionan un algoritmo de intercambio para el cálculo de diseños exactos siguiendo el criterio de Läuter

$$\phi(\mathbf{M}_{\mathcal{F}}(\xi)) = \prod_{f \in \mathcal{F}} |\mathbf{M}_f(\xi)|$$

y muestran varios ejemplos de problemas de mixturas. En la tesis de Smucker [Smu10] se propone, además, el criterio maximin

$$\xi^* = \max_{\xi \in \Xi} \arg \min_{f \in \mathcal{F}} G_f(\xi),$$

siendo  $G_f(\xi) = \frac{D_f(\xi)}{v_f}$  la  $D$ -eficiencia generalizada para el modelo candidato  $f$ . Es decir,  $D_f(\xi) = \left(\frac{|M_f(\xi)|}{|M_f(\xi^*)|}\right)^{1/p}$  y  $v_f$  es el peso que da el experimentador al modelo  $f$ . Este criterio, que busca diseños optimizando la peor de las eficiencias de entre los modelos candidatos,

es probado en esta memoria en diferentes problemas de mezclas. Sin embargo, el desarrollo de los métodos de la *corriente teórica* para la construcción de diseños de mezcla robustos no ha sido estudiado hasta el momento. Recuérdese que la aproximación del problema que incluye una función contaminante en el modelo es mucho más general que el enfoque práctico, ya que el experimentador no tiene que predisponer la forma de los modelos candidatos. No obstante, no debemos olvidar que, en definitiva, los experimentadores requerirán un diseño exacto para implementar sus ensayos y ésto no es inmediato a partir de la teoría de diseño continuo. Para cubrir esta necesidad practica se propondrán, además, diferentes esquemas de implementación de los diseños a partir de los resultados teóricos obtenidos.

## 5.2. Teoría de diseño robusto

El problema de diseño robusto consiste en determinar la mejor estrategia para la selección de los valores de las variables controlables y sus proporciones, de modo que la información extraída sea óptima a pesar de poder producirse pequeñas variaciones del modelo considerado. Con la mejor estrategia para el muestreo se refiere a identificar cuántas observaciones tomar en cada punto de la región de diseño,  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_q) \in \chi$ , siguiendo las indicaciones anteriores. Como se introdujo en el capítulo inicial, existen varios tipos de diseño disponibles. En este capítulo se construirán dos clases de diseños:

$$\xi_n = \left\{ \begin{array}{ccc} \mathbf{x}_1 & \dots & \mathbf{x}_k \\ \xi_1 = n_1/n & \dots & \xi_k = n_k/n \end{array} \right\} \quad \text{y} \quad \xi_\infty = \left\{ \begin{array}{c} \mathbf{x} \\ m(\mathbf{x}) \end{array} \right\} \quad \forall \mathbf{x} \in \chi,$$

el primero de ellos corresponde a un diseño discreto, donde  $\xi_i = \frac{n_i}{n}$  representa la proporción de observaciones  $n_i$  del total  $n$  que deben tomarse sobre el  $i$ -ésimo punto del diseño; y el segundo corresponde a un diseño continuo con soporte infinito, donde  $m(\mathbf{x})$  es la función de masa o densidad sobre cada punto de la región de

diseño. Asumiremos que la medida de diseño  $\xi_n$  converge débilmente a  $\xi_\infty$  de modo que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^k \xi_{n,i} (Y_i - \mathbf{f}'(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\theta}) = \int_{\chi} (Y - \mathbf{f}'(\mathbf{x})\boldsymbol{\theta}) m(\mathbf{x}) dx,$$

siendo

$$Y(\mathbf{x}) = \mathbf{f}'(\mathbf{x})\boldsymbol{\theta} + \varepsilon \quad (5.2)$$

el modelo considerado por el experimentador, definido por un vector  $\mathbf{f}'(\mathbf{x})$  de  $k$  regresores asumiendo errores aleatorios, aditivos, incorrelados y con varianza constante  $\sigma_\varepsilon^2$ . De aquí en adelante denotaremos por  $\xi$  para referirnos a  $\xi_n$  o  $\xi_\infty$  indiferentemente cuando no haya riesgo de confusión.

Mientras que en diseño óptimo clásico se asume que la respuesta sigue exactamente la forma (5.2), en la práctica ocurre que ésta es únicamente una forma aproximada de la respuesta

$$E(Y|\mathbf{x}) \approx \mathbf{f}'(\mathbf{x})\boldsymbol{\theta}.$$

El diseño óptimo robusto propone un marco más realista para este problema considerando una clase de posibles respuestas [Wie92]

$$E(Y|\mathbf{x}) = \mathbf{f}'(\mathbf{x})\boldsymbol{\theta} + \psi(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \chi, \quad (5.3)$$

donde  $\psi$  es una función desconocida que pertenece a cierta clase de funciones  $\Psi$ . Sin embargo, considerar (5.3) implica que los parámetros no están definidos de forma única. Por ejemplo, el modelo podría formularse de manera equivalente como sigue

$$E[Y|\mathbf{x}] = \mathbf{f}'(\mathbf{x})(\boldsymbol{\theta} + \phi) + (\psi(\mathbf{x}) - \mathbf{f}'(\mathbf{x})\phi), \quad \mathbf{x} \in \chi.$$

Este inconveniente puede resolverse fácilmente definiendo los parámetros como los “deseables”

$$\boldsymbol{\theta} = \arg \min_{\boldsymbol{\vartheta}} \int_{\chi} \{E(Y|\mathbf{x}) - \mathbf{f}'(\mathbf{x})\boldsymbol{\vartheta}\}^2 dx, \quad (5.4)$$

en otras palabras, como aquellos que minimizan las diferencias entre la verdadera respuesta y el modelo considerado. Esta condición de mínimo implica que

$$\psi(\mathbf{x}) = E(Y|\mathbf{x}) - \mathbf{f}'(\mathbf{x})\boldsymbol{\theta} \quad (5.5)$$

y  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  son ortogonales en  $L^2$

$$\int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \mathbf{0}. \quad (5.6)$$

La definición de los parámetros queda ahora unívocamente determinada considerando (5.5) y (5.6) asumiendo que  $\mathbf{A} = \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}'(\mathbf{x})d\mathbf{x}$  es invertible.

Cuando la respuesta considerada es (5.2) pero el verdadero modelo es (5.3), aparece un sesgo en el estimador mínimo cuadrado de los parámetros del modelo  $\hat{\boldsymbol{\theta}}$  y de la respuesta predicha  $\hat{Y}(\mathbf{x})$ . El diseño óptimo robusto trata precisamente esta situación, buscando obtener diseños que proporcionan estimadores de  $\boldsymbol{\theta}$  y  $Y$  relativamente eficientes contra la falta de especificidad de la respuesta. En este caso, a diferencia del diseño óptimo de experimentos clásico, el error cuadrático medio de los estimadores (*Mean Squared Error*, MSE) resulta más adecuado que la varianza para medir la calidad de un diseño. Vamos a considerar la matriz del error cuadrático medio de los estimadores de los parámetros del modelo

$$\text{MSE}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \frac{\sigma_{\varepsilon}^2}{n} \mathbf{M}^{-1}(\xi) + \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{b}(\psi, \xi) \mathbf{b}'(\psi, \xi) \mathbf{M}^{-1}(\xi), \quad (5.7)$$

donde

$$\mathbf{M}(\xi) = \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}'(\mathbf{x})m(\mathbf{x})d\mathbf{x}, \quad \mathbf{b}(\psi, \xi) = \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})m(\mathbf{x})d\mathbf{x}$$

con  $\mathbf{M}(\xi)$  invertible. El primer término de (5.7) corresponde a la matriz de varianzas-covarianzas del estimador mínimo cuadrado de  $\boldsymbol{\theta}$  asumiendo homocedasticidad en los errores y varianza constante  $\sigma_{\varepsilon}^2$ . El segundo corresponde al cuadrado del sesgo  $E(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta})^2$ . Por

otro lado, también consideraremos el error cuadrático medio de la respuesta predicha  $\hat{Y}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}'(\mathbf{x})\boldsymbol{\theta}$

$$\text{MSE}(\hat{Y}(\mathbf{x})) = \frac{\sigma_\varepsilon^2}{n} \mathbf{f}'(\mathbf{x})\mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{f}(\mathbf{x}) + (\mathbf{f}'(\mathbf{x})\mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{b}(\psi, \xi))^2. \quad (5.8)$$

Al igual que en diseño óptimo clásico, debe establecerse una función criterio a partir de las matrices (5.7) y (5.8) para optimizar algún aspecto del modelo. Esta función, definida a partir del conjunto de diseños  $\Xi$ , debe tomar un valor de la recta real indicando la bondad del diseño. Las funciones criterio más utilizadas en diseño robusto se derivan precisamente de los criterios alfabéticos que se definieron en el primer capítulo. En este contexto, se conocen como *funciones pérdida*. En este trabajo se ha considerado el determinante de MSE de los estimadores de los parámetros del modelo y la integral del MSE de la respuesta predicha, que se corresponden con los criterios de  $D$ -óptimalidad e  $I$ -óptimalidad respectivamente. La justificación en la elección de los criterios es debida, por un lado, a que  $D$ -óptimalidad es el criterio que más atención ha recibido en la literatura, y por otro, a que la metodología basada en superficies respuestas están ganando una popularidad importante en diseño de experimentos, e  $I$ -óptimalidad es una de ellas. De hecho, Goos et al. [PG16] defienden que el diseño de mezclas es un caso particular de diseño de superficies respuesta y, por tanto, los diseños  $I$ -óptimos resultan más adecuados para este tipo de experimentos. A continuación se definen formalmente estos criterios

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_D(\psi, \xi) &= \det \text{MSE}(\psi, \xi)^{1/p} = \frac{\sigma_\varepsilon^2}{n} \left( \frac{1 + \mathbf{b}'(\psi, \xi) \left[ \frac{\sigma_\varepsilon^2}{n} \mathbf{M}(\xi) \right]^{-1} \mathbf{b}(\psi, \xi)}{\det \mathbf{M}(\xi)} \right)^{1/p}, \\ \mathcal{L}_I(\psi, \xi) &= \int_{\mathcal{X}} \text{MSE}(\hat{Y}(\mathbf{x})) = \\ &= \frac{\sigma_\varepsilon^2}{n} \text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{M}^{-1}(\xi)) + \mathbf{b}'(\psi, \xi) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{A}\mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{b}(\psi, \xi) + \int_{\mathcal{X}} \psi^2(\mathbf{x}) dx. \end{aligned}$$

En este trabajo adoptaremos una estrategia *minimax* para controlar en las estimaciones los errores debido al sesgo (inadecuación del

modelo considerado) y debido a la varianza (muestreo). Por tanto, nuestra postura será la construcción de diseños minimizando la variabilidad en el peor de los casos, esto es, cuando la falta de especificidad de la respuesta sea lo más grande posible. Se define un diseño óptimo robusto como

$$\xi^* = \arg \min_{\xi \in \Xi} \max_{\psi \in \Psi} \mathcal{L}(\psi, \xi).$$

La maximización sobre  $\psi$  debe realizarse sobre un vecindario del modelo asumido, de modo que se hace necesario establecer una cota sobre  $\psi$ . Para este propósito existen diferentes estructuras de vecindario disponibles en la literatura (ver por ejemplo [Pes82], [Li82]). En este trabajo se ha utilizado la estructura introducida por Huber [Hub75] y extendida por Wiens [Wie92]

$$\Psi = \left\{ \psi : \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{0}, \int_{\mathcal{X}} \psi^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \leq \frac{\tau^2}{n} \right\},$$

donde  $\tau$  es una constante que define el radio del vecindario. La cota sobre  $\psi$  es un infinitésimo de orden  $O(n^{-1})$ , que se hace necesario para un tratamiento asintótico de MSE. En otras palabras, la condición anterior fuerza al sesgo de los estimadores a decrecer en el mismo orden que el error estándar. Por otro lado, este clase de vecindario  $L^2$  tiene la ventaja de recoger una amplia gama de respuestas alternativas y generales.

Aún habiendo acotado la clase de “funciones contaminantes” a considerar, la búsqueda de óptimo resulta impracticable. Wiens [Wie92] prueba que el máximo sobre  $\Psi$  se encuentra sobre la subclase de funciones  $\{\psi_{\beta}(\mathbf{x}) = \mathbf{r}'(\mathbf{x})\boldsymbol{\beta} \mid \|\boldsymbol{\beta}\| = 1\}$  de modo que

$$\mathbf{b}(\psi, \xi) = \mathbf{b}(\psi_{\beta}, \xi) = \frac{\tau}{\sqrt{n}} \mathbf{G}(\xi)^{1/2} \boldsymbol{\beta} \quad (5.9)$$

siendo

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\xi) &= \mathbf{K}(\xi) - \mathbf{H}(\xi), & \mathbf{H}(\xi) &= \mathbf{M}(\xi) \mathbf{A}^{-1} \mathbf{M}(\xi), \\ \mathbf{K}(\xi) &= \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}'(\mathbf{x}) m^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \end{aligned}$$

y  $\mathbf{r}(\mathbf{x}) = (\tau/n)\mathbf{G}(\xi)^{-1/2}(m(\mathbf{x})\mathbf{I}_p - \mathbf{M}(\xi)\mathbf{A}^{-1})\mathbf{f}(\mathbf{x})$ . Conforme a lo anterior,  $\max_{\psi} \mathcal{L}(\psi, \xi)$  puede formularse equivalentemente como un problema de maximización en  $\mathbb{R}^n$  sobre la esfera unidad. Utilizando este resultado, las funciones pérdida  $\mathcal{L}_D$  y  $\mathcal{L}_I$  son  $(\sigma_\varepsilon^2 + \tau^2)/n$  veces

$$l_D(\xi) = \max_{\psi_\beta} \mathcal{L}_D(\psi, \xi) = (1 - \nu) \left( \frac{1 + \frac{\nu}{1-\nu} ch_{max} \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{G}(\xi)}{\det \mathbf{M}(\xi)} \right)^{1/p}, \quad (5.10)$$

$$l_I(\xi) = \max_{\psi_\beta} \mathcal{L}_I(\psi, \xi) = (1 - \nu) tr(\mathbf{A} \mathbf{M}^{-1}(\xi)) + \nu ch_{max} \mathbf{K}(\xi) \mathbf{H}^{-1}(\xi), \quad (5.11)$$

donde se ha definido  $\nu = \frac{\tau^2}{\sigma_\varepsilon^2 + \tau^2}$ . Obsérvese que así formuladas (5.10) y (5.11), los diseños calculados únicamente dependerán de  $\tau^2$  y  $\sigma_\varepsilon^2$  a través de  $\nu$ . De modo que el experimentador debe proporcionar un valor de esta constante en función de su certidumbre acerca de los errores debido al sesgo frente a la varianza.

Los resultados anteriores pueden extenderse para diseños discretos como las versiones límite de los anteriores. Nuestro interés será, por tanto, calcular diseños minimizando la pérdida para el máximo autovalor de las matrices anteriores. No obstante, este procedimiento no es directo para experimentos con mezclas, dependiendo del número de ingredientes, modelo considerado y función pérdida seleccionada. A continuación se detalla la metodología desarrollada en esta tesis para cada caso de estudio.

### 5.3. Diseños $D$ –óptimo robustos para mezclas binarias

El objetivo de la presente sección será calcular diseños óptimo robustos en problemas de mezclas siguiendo la teoría estudiada en el apartado anterior. En particular, se tratarán experimentos consistentes en mezclas de dos ingredientes. Considérese el polinomio

canónico de Scheffé de segundo orden

$$\eta(\mathbf{p}, \boldsymbol{\beta}) = \beta_1 p_1 + \beta_2 p_2 + \beta_{12} p_1 p_2 \quad (5.12)$$

con  $(p_1, p_2) \in \mathcal{S}^1 = \mathcal{S}$  y diseños continuos. Las técnicas de construcción que proporcionan Daemi y Wiens [Dae13] son generales y pueden utilizarse en cualquier problema de diseño robusto. Sin embargo, encontrar una expresión algebraica de los autovalores en la función pérdida es un punto crucial para la aplicación de esta metodología y no resulta un procedimiento directo. En particular, en problemas no estándar como el caso que nos ocupa, donde no pueden asumirse libremente hipótesis que simplifiquen el problema, se hace necesario desarrollar nuevas estrategias teórico-prácticas para sortear la impracticabilidad de esta metodología. En esta tesis, la clave para el cálculo de diseños  $D$ -óptimo robustos continuos ha sido la invarianza de (5.10) a través de transformaciones afines de la región de diseño y el desarrollo de resultados teóricos que nos han permitido establecer condiciones bajo las que un diseño es óptimo.

El modelo (5.12) puede ser formulado de manera equivalente como

$$\eta(\mathbf{p}, \bar{\boldsymbol{\theta}}) = \bar{\theta}_0 + \bar{\theta}_1 p + \bar{\theta}_{11} p^2.$$

donde  $p \stackrel{Not}{=} p_1 \in [0, 1]$ , el segundo ingrediente involucrado puede deducirse implícitamente de la relación  $p_2 = 1 - p_1$  y el vector de funciones regresoras es ahora  $f(\mathbf{p}) = (1, p, p^2)^t$ . Resulta conveniente considerar esta forma del modelo incluyendo el término constante ya que tiene la ventaja de reducir el problema a una sola variable y evita la dependencia entre proporciones.

Consideremos la transformación afín

$$\begin{aligned} T : [0, 1] &\longrightarrow \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]. \\ p &\longmapsto p - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

El modelo transformado será considerado sin perder generalidad, puesto que la teoría asegura la invarianza del criterio de  $D$ -optimización bajo la acción del grupo de transformaciones lineales actuando por composición en  $\mathcal{S}$  y verificando  $f(T(\mathbf{p})) = A_T f(\mathbf{p})$  con  $|A_T| =$

$\pm 1$  [Wie93]. Veamos ahora que la transformación elegida verifica las hipótesis anteriores:

Sea  $f(T(\mathbf{p})) = (1, p - \frac{1}{2}, (p - \frac{1}{2})^2)^t$ , de modo que

$$f(T(\mathbf{p})) = \begin{pmatrix} 1 \\ p - \frac{1}{2} \\ p^2 - p + \frac{1}{4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1 & 0 \\ 1/4 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ p \\ p^2 \end{pmatrix} = A_T f(p)$$

con  $|A_T| = 1$ . Denotando  $x = p - 1/2$  y  $\mathcal{S}' = T(\mathcal{S}) = [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$  la nueva región de diseño, el modelo transformado queda

$$\eta(\mathbf{x}, \bar{\boldsymbol{\theta}}) = \left(\frac{1}{2}\bar{\theta}_1 + \frac{1}{2}\bar{\theta}_2 + \frac{1}{4}\bar{\theta}_{12}\right) + (\bar{\theta}_1 - \bar{\theta}_2)x - \bar{\theta}_{12}x^2.$$

De modo que renombrando los parámetros conforme a los términos en  $x^i$  abusando de notación

$$\eta(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_{11} x^2 \quad (5.13)$$

resulta el vector de funciones regresoras

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (1, x, x^2)'. \quad (5.14)$$

Sea  $\Xi$  el conjunto de diseños con medida absolutamente continua en  $\mathcal{S}'$ . Vamos a probar que podemos reducir el espacio de búsqueda sobre  $\Xi$  al subconjunto de diseños simétricos considerando el modelo (5.13).

**Definición 5.1.** *Se dice que un diseño continuo  $\xi$  con densidad asociada  $m$  es simétrico si para cada  $x \in \mathcal{X}$ ,  $\exists -x \in \mathcal{X}$  y se verifica que  $m(x) = m(-x)$ .*

Para cada  $\xi \in \Xi$  con densidad  $m$  y  $\psi \in \Psi$  se define

$$\hat{\xi}(x) = \xi(-x), \quad \hat{\psi}(x) = \psi(-x).$$

Sea  $\Xi_s$  el subconjunto de diseños simétricos en  $\Xi$

$$\Xi_s = \{\xi \in \Xi, \hat{\xi}(x) = \xi(x)\},$$

y sea  $\Psi_s$  el subconjunto de funciones simétricas en  $\Psi$

$$\Psi_s = \{\psi \in \Psi, \hat{\psi}(x) = \psi(x)\}.$$

**Teorema 5.1.** *Si existe  $\xi^* = \inf_{\xi \in \Xi_s} \max_{\psi \in \Psi_s} \mathcal{L}_D(\psi, \xi)$  y  $\psi^* = \max_{\psi \in \Psi} \mathcal{L}_D(\psi, \xi^*) \in \Psi_s$ , entonces  $\xi^* = \inf_{\xi \in \Xi} \max_{\psi \in \Psi} \mathcal{L}_D(\psi, \xi)$ .*

Demostración.

En primer lugar demostraremos que

$$\inf_{\xi \in \Xi} \max_{\psi \in \Psi_s} \mathcal{L}_D(\psi, \xi) = \inf_{\xi \in \Xi_s} \max_{\psi \in \Psi_s} \mathcal{L}_D(\psi, \xi). \quad (5.15)$$

Todo diseño simétrico puede escribirse de la forma  $\xi_s = \frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\hat{\xi}$ . Nuestro interés reside en obtener una expresión de la pérdida en términos de  $\xi_s$  y buscar una relación con un diseño  $\xi \in \Xi$  cualquiera.

$$\begin{aligned} \mathbf{b}(\psi, \xi) &= \int_{S'} \mathbf{f}(x)\psi(x)m(x)(dx), \\ \mathbf{b}(\psi, \hat{\xi}) &= \int_{S'} \mathbf{f}(x)\psi(x)m(-x)dx = - \int_{S'} \mathbf{f}(-y)\psi(-y)m(y)dy \\ &= - \int_{S'} P\mathbf{f}(y)\psi(-y)m(y)dy = -P\mathbf{b}(\hat{\psi}, \xi), \end{aligned}$$

donde se ha aplicado el cambio de variable  $y = -x$  y  $P$  es la matriz de la simetría inducida en los regresores

$$f(-x) = \begin{pmatrix} 1 \\ -x \\ x^2 \end{pmatrix} = Pf(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix}.$$

Se verifica que  $M(\hat{\xi}) = PM(\xi)P'$  de modo que  $|M(\hat{\xi})| = |M(\xi)|$  y definiendo

$$N(\xi, \psi) = \mathbf{b}'(\psi, \xi) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{b}(\psi, \xi),$$

se tiene que

$$N(\hat{\xi}, \psi) = \mathbf{b}'(\hat{\psi}, \xi) P'P'^{-1}\mathbf{M}^{-1}(\xi) P^{-1}P\mathbf{b}(\hat{\psi}, \xi) = N(\xi, \hat{\psi}).$$

En virtud de la convexidad de la función pérdida (5.10) (ver [Wie93]), se tiene que

$$N(\xi_s, \psi) = N\left(\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2}\hat{\xi}, \psi\right) \leq \frac{1}{2}N(\xi, \psi) + \frac{1}{2}N(\xi, \hat{\psi}).$$

y esta desigualdad implica

$$\mathcal{L}_D(\psi, \xi_s) \leq \frac{1}{2}\mathcal{L}_D(\psi, \xi) + \frac{1}{2}\mathcal{L}_D(\hat{\psi}, \xi).$$

Puesto que en (5.15) la maximización es sobre  $\Psi_s$  se verifica

$$\mathcal{L}_D(\psi, \xi_s) \leq \mathcal{L}_D(\psi, \xi).$$

De modo que no es posible “mejorar” la pérdida sobre  $\Xi$  que sobre el subconjunto de diseños simétricos  $\Xi_s$ . En otras palabras, el ínfimo se encuentra en una subclase menos favorable de diseños, la de los diseños simétricos. La desigualdad  $\mathcal{L}_D(\psi, \xi_s) \geq \mathcal{L}_D(\psi, \xi)$  es directa, de modo que se satisface (5.15) como queríamos ver.

Para demostrar el enunciado basta con ver que para cualquier diseño  $\xi \in \Xi$  se verifica que

$$\max_{\psi \in \Psi} \mathcal{L}_D(\psi, \xi) \geq \max_{\psi \in \Psi_s} \mathcal{L}_D(\psi, \xi) \geq \max_{\psi \in \Psi_s} \mathcal{L}_D(\psi, \xi_s) = \max_{\psi \in \Psi} \mathcal{L}_D(\psi, \xi^*),$$

donde la primera desigualdad es directa, la segunda se satisface por (5.15) y la última se verifica por las hipótesis que se formularon en el enunciado. Tomando ínfimos sobre  $\Xi$  en

$$\max_{\psi \in \Psi} \mathcal{L}_D(\psi, \xi^*) \leq \max_{\psi \in \Psi} \mathcal{L}_D(\psi, \xi),$$

se concluye.  $\square$

Nuestro propósito será hallar el diseño  $\xi^*$  que minimice en  $\Xi_s$  el  $\max_{\psi \in \Psi} \mathcal{L}_D(\psi, \xi)$  y comprobar después la función  $\psi \in \Psi$  en la que se alcanzó dicho máximo verifica  $\psi = \hat{\psi}$ . En otras palabras, si  $m(x)$  es una densidad simétrica y la pérdida es maximizada en  $\psi(x) = \mathbf{r}'(x)\boldsymbol{\beta}^*$  tal que  $\psi(x) = \psi(-x)$ , entonces se habrá alcanzado el diseño óptimo robusto global.

El siguiente teorema proporciona una valiosa herramienta para comprobar si un diseño simétrico es el diseño  $D$ -óptimo robusto global.

**Teorema 5.2.** *La condición suficiente para que un diseño simétrico sea  $D$ -óptimo robusto es que*

$$\beta^* = (\beta_1^* \quad 0 \quad \beta_3^*)' \quad (5.16)$$

donde  $\beta^*$  es el autovector correspondiente al máximo autovalor de la matriz  $\mathbf{G}(\xi)^{1/2}\mathbf{M}^{-1}(\xi)\mathbf{G}(\xi)^{1/2}$  con  $\|\beta^*\| = 1$ .

Demostración.

Considerando diseños simétricos se tiene que

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(-x) &= \frac{\tau}{\sqrt{n}}G(\hat{\xi})^{1/2}(m(-x)I_p - M(\hat{\xi})A(\hat{\xi})^{-1})f(-x) \\ &= \frac{\tau}{\sqrt{n}}G(\hat{\xi})^{1/2}(m(x)I_p - M(\hat{\xi})A(\hat{\xi})^{-1})Pf(x). \end{aligned}$$

Por tanto,

$$M(\hat{\xi})A(\hat{\xi})^{-1}P = PM(\xi)P'P'^{-1}A(\xi)^{-1}P^{-1}P = PM(\xi)A(\xi)^{-1},$$

utilizando que  $A(\hat{\xi}) = PA(\xi)P'$  y  $M(\hat{\xi}) = PM(\xi)P'$ , resultando así

$$\mathbf{r}(-x) = \frac{\tau}{\sqrt{n}}G(\hat{\xi})^{1/2}P(m(x)I_p - M(\xi)A(\xi)^{-1})f(x).$$

Puesto que  $G(\hat{\xi}) = PG(\xi)P'$  y por tanto  $G(\hat{\xi})^{-1/2}P = PG(\xi)^{-1/2}$ , es claro que  $\mathbf{r}(-x) = P\mathbf{r}(x)$ . Entonces

$$\beta^* = (\beta_1^* \quad 0 \quad \beta_3^*)' \Leftrightarrow P\beta^* = \beta^*$$

lo cual implica

$$\psi(-x) = (P\mathbf{r}(x))'\beta^* = \mathbf{r}'(x)P\beta^* = \mathbf{r}'(x)\beta^* = \psi(x)$$

como queríamos ver.  $\square$

En lo que resta de sección se consideraran diseños simétricos y, tras haber calculado los diseños  $D$ -óptimo robustos, se verificará la condición (5.16).

Sea  $m(x)$  la densidad correspondiente a un diseño simétrico. Vamos a definir

$$\mu_j = \int_{S'} x^j m(x) dx, \quad \kappa_j = \int_{S'} x^j m^2(x) dx,$$

de modo que las matrices que intervienen en la pérdida corresponden

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1/12 \\ 0 & 1/12 & 0 \\ 1/12 & 0 & 1/80 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}(\xi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \mu_2 \\ 0 & \mu_2 & 0 \\ \mu_2 & 0 & \mu_4 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{K}(\xi) = \begin{pmatrix} \kappa_0 & 0 & \kappa_2 \\ 0 & \kappa_2 & 0 \\ \kappa_2 & 0 & \kappa_4 \end{pmatrix}.$$

Obsérvese que las matrices anteriores poseen un número elevado de elementos nulos. Ésta simplificación se debe a las consideraciones anteriores: simetría en la región de diseño y paridad en la función de densidad. Gracias a esta simplificación es posible alcanzar una expresión algebraica de los autovalores de la pérdida.

Sea  $d(\xi) = \mu_4 - \mu_2^2$ , entonces

$$\mathbf{M}^{-1}(\xi) = \frac{1}{d(\xi)} \begin{pmatrix} \mu_4 & 0 & -\mu_2 \\ 0 & \frac{d(\xi)}{\mu_2} & 0 \\ -\mu_2 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{K}(\xi) &= \frac{1}{d(\xi)} \begin{pmatrix} \mu_4 & 0 & -\mu_2 \\ 0 & \frac{d(\xi)}{\mu_2} & 0 \\ -\mu_2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa_0 & 0 & \kappa_2 \\ 0 & \kappa_2 & 0 \\ \kappa_2 & 0 & \kappa_4 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{d(\xi)} \begin{pmatrix} \mu_4 \kappa_0 - \mu_2 \kappa_2 & 0 & \mu_4 \kappa_2 - \mu_2 \kappa_4 \\ 0 & \frac{d(\xi) \kappa_2}{\mu_2} & 0 \\ \kappa_2 - \mu_2 \kappa_0 & 0 & \kappa_4 - \mu_2 \kappa_2 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{M}(\xi) &= 180 \begin{pmatrix} \frac{1}{80} - \frac{1}{12} \mu_2 & 0 & \frac{1}{80} \mu_2 - \frac{1}{12} \mu_4 \\ 0 & \frac{\mu_2}{15} & 0 \\ \mu_2 - \frac{1}{12} & 0 & \mu_4 - \frac{1}{12} \mu_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2.25 - 15\mu_2 & 0 & 2.25\mu_2 - 15\mu_4 \\ 0 & 12\mu_2 & 0 \\ 180\mu_2 - 15 & 0 & 180\mu_4 - 15\mu_2 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$\mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{G}(\xi) = \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{K}(\xi) - \mathbf{A}^{-1}(\xi) \mathbf{M}(\xi)$$

$$\begin{aligned} &= \begin{pmatrix} \frac{\mu_4 \kappa_0 - \mu_2 \kappa_2}{d(\xi)} & 0 & \frac{\mu_4 \kappa_2 - \mu_2 \kappa_4}{d(\xi)} \\ 0 & \frac{\kappa_2}{\mu_2} & 0 \\ \frac{\kappa_2 - \mu_2 \kappa_0}{d(\xi)} & 0 & \frac{\kappa_4 - \mu_2 \kappa_2}{d(\xi)} \end{pmatrix} \\ &- \begin{pmatrix} 2.25 - 15\mu_2 & 0 & 2.25\mu_2 - 15\mu_4 \\ 0 & 12\mu_2 & 0 \\ 180\mu_2 - 15 & 0 & 180\mu_4 - 15\mu_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \theta_1 \kappa_0 + \theta_2 \kappa_2 + \theta_5 & 0 & \theta_1 \kappa_2 + \theta_2 \kappa_4 + \theta_6 \\ 0 & \theta_4 \kappa_2 + \theta_9 & 0 \\ \theta_2 \kappa_0 + \theta_3 \kappa_2 + \theta_7 & 0 & \theta_2 \kappa_2 + \theta_3 \kappa_4 + \theta_8 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}\theta_1 &= \frac{\mu_4}{d(\xi)}, \quad \theta_2 = -\frac{\mu_2}{d(\xi)}, \quad \theta_3 = \frac{1}{d(\xi)}, \quad \theta_4 = \frac{1}{\mu_2}, \\ \theta_5 &= 15\mu_2 - 2.25, \quad \theta_6 = 15\mu_4 - 2.25\mu_2, \\ \theta_7 &= 15 - 180\mu_2, \quad \theta_8 = 15\mu_2 - 180\mu_4, \quad \theta_9 = -12\mu_2.\end{aligned}$$

Entonces

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_D(\xi) &= (1 - \nu) \left( \frac{1 + \frac{\nu}{1-\nu} ch_{\max}(\mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{G}(\xi))}{|\mathbf{M}(\xi)|} \right)^{1/p} \\ &= (1 - \nu) \left( \frac{1}{\mu_2 d(\xi)} + \frac{\frac{\nu}{1-\nu}}{\mu_2 d(\xi)} \max\{\rho_1(\xi), \rho_2(\xi)\} \right)^{1/p},\end{aligned}\tag{5.17}$$

donde

$$\rho_1(\xi) = \theta_4 \kappa_2 + \theta_9 \tag{5.18}$$

y  $\rho_2(\xi)$  es la mayor de las raíces características de

$$\begin{pmatrix} \theta_1 \kappa_0 + \theta_2 \kappa_2 + \theta_5 & \theta_1 \kappa_2 + \theta_2 \kappa_4 + \theta_6 \\ \theta_2 \kappa_0 + \theta_3 \kappa_2 + \theta_7 & \theta_2 \kappa_2 + \theta_3 \kappa_4 + \theta_8 \end{pmatrix},$$

es decir,

$$\begin{aligned}\rho_2(\xi) &= \frac{\theta_1 \kappa_0 + 2\theta_2 \kappa_2 + \theta_3 \kappa_4 + (\theta_5 + \theta_8)}{2} + \\ &\quad \left\{ \left[ \frac{(\theta_1 \kappa_0 + \theta_5) - (\theta_3 \kappa_4 + \theta_8)}{2} \right]^2 + (\theta_1 \kappa_2 + \theta_2 \kappa_4 + \theta_6)(\theta_2 \kappa_0 + \theta_3 \kappa_2 + \theta_7) \right\}^{1/2}.\end{aligned}$$

Reagrupando términos en  $\rho_2$ , es posible obtener una expresión de la forma

$$\rho_2(\xi) = \alpha_0 + \boldsymbol{\alpha}' \boldsymbol{\kappa} + \sqrt{\beta_0 + \boldsymbol{\beta}' \boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}' \mathbf{C} \boldsymbol{\kappa}},$$

donde

$$\boldsymbol{\kappa} = \begin{pmatrix} \kappa_0 \\ \kappa_2 \\ \kappa_4 \end{pmatrix} = \int_{S'} \begin{pmatrix} 1 \\ x^2 \\ x^4 \end{pmatrix} m^2(x) dx, \tag{5.19}$$

y  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$ ,  $\alpha_{3 \times 1}$ ,  $\beta_{3 \times 1}$ ,  $C_{3 \times 3}$  dependen únicamente del diseño a través de  $\mu_2$ ,  $\mu_4$ . Por tanto, se trata de buscar la densidad  $m(x)$  que minimiza (5.17) para  $\rho_{i^*} = \max\{\rho_1(\xi), \rho_2(\xi)\}$  sujeto a las condiciones de contorno  $\int_{S'} x^j m(x) dx = \mu_j$  con  $j = 0, 2, 4$  ( $\mu_0 = 1$ ). Las constantes y matrices anteriores en términos de los  $\theta_i$  son precisamente

$$\alpha_0 = \left( \frac{\theta_5 + \theta_8}{2} \right), \quad \beta_0 = \left( \frac{\theta_5 - \theta_8}{2} \right)^2 + \theta_6 \theta_7, \quad \alpha = \begin{pmatrix} \frac{\theta_1}{2} \\ \theta_2 \\ \frac{\theta_3}{2} \end{pmatrix},$$

$$\beta = \begin{pmatrix} \frac{\theta_1}{2}(\theta_5 - \theta_8) + \theta_2 \theta_6 \\ \theta_1 \theta_7 + \theta_3 \theta_6 \\ -\frac{\theta_3}{2}(\theta_5 - \theta_8) + \theta_2 \theta_7 \end{pmatrix}, \quad C = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \theta_1^2 & \theta_1 \theta_2 & \theta_2^2 - \frac{\theta_1 \theta_3}{2} \\ \theta_1 \theta_2 & 2\theta_1 \theta_3 & \theta_2 \theta_3 \\ \theta_2^2 - \frac{\theta_1 \theta_3}{2} & \theta_2 \theta_3 & \frac{1}{2} \theta_3^2 \end{pmatrix}. \quad (5.20)$$

### 5.3.1. Estrategias Puras

Sea  $l_j(\xi)$  la función pérdida (5.17) evaluada en el  $j$ -ésimo autovalor. El primer enfoque a seguir en la búsqueda de soluciones es asumir que uno de los autovalores es máximo para todo  $\nu \in [0, 1]$ . Supongamos que es el  $j$ -ésimo autovalor. Si el diseño  $\xi_{j^*}$  minimizando  $l_j(\xi)$  verifica que  $l_j(\xi_{j^*}) \geq l_k(\xi_{j^*})$  para cada  $\nu \in [0, 1]$  y cada  $k \neq j$ , entonces  $\xi_{j^*}$  es el diseño minimax buscado. Este planteamiento se conoce como “estrategia pura” y deben estudiarse tantas como autovalores candidatos existan en el problema.

#### 1ª Estrategia pura

El objetivo será encontrar la densidad minimizante de  $l_1(\xi)$  asumiendo inicialmente  $\mu_2$  y  $\mu_4$  fijos. En consecuencia,  $\theta_i$  con  $i = 1, \dots, 9$  y  $d(\xi)$  también serán fijos. Este planteamiento permite resolver el problema de minimización: la densidad buscada depende ahora únicamente de los  $\kappa_i$  ( $i = 0, 2, 4$ ) puesto que el resto de términos de  $l_1(\xi)$  se añadirán al problema como condiciones de contorno y serán considerados, por tanto, como *constantes*. Formalmente, el problema será

$$m_1 = \arg \min \int_{S'} x^2 m^2(x) dx$$

sujeto a

$$\int_{S'} m(x)dx = 1, \quad \int_{S'} x^2 m(x)dx = \mu_2, \quad \int_{S'} x^4 m(x)dx = \mu_4,$$

$\forall m(x) \geq 0$ . Para encontrar la densidad minimizante, utilizaremos el siguiente método variacional: sea  $\xi$  un diseño cualquiera con densidad  $m$  y definamos el diseño

$$\xi_{(t)} = (1-t)\xi_1 + t\xi, \quad 0 \leq t \leq 1, \quad (5.21)$$

con densidad  $m_{(t)}(x) = (1-t)m_1(x) + tm(x)$ , como una combinación lineal convexa de la densidad que suponemos ser la minimizadora  $m_1(x)$ , que se alcanzará en  $t = 0$ , y otra cualquiera  $m(x)$ . Utilizando la teoría de los multiplicadores de Lagrange (Pierre [Pie86]) para resolver el problema sin restricciones, será suficiente encontrar el diseño  $\xi_1$  de modo que

$$\Phi(t; \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \int_{S'} \left\{ \begin{array}{l} x^2 m_{(t)}^2(x) - 2\lambda_1 m_{(t)}(x) \\ -2\lambda_2 x^2 m_{(t)}(x) - 2\lambda_3 x^4 m_{(t)}(x) \end{array} \right\} dx \quad (5.22)$$

sea minimizado en  $t = 0$  para cada diseño absolutamente continuo  $\xi$  satisfaciendo las condiciones de contorno.

La condición de primer orden de (5.22) evaluada en  $t = 0$  resulta

$$\begin{aligned} 0 &\leq \Phi'(0; \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \\ &= \int_{S'} [2x^2(m(x) - m_1(x)) - 2\lambda_1(m(x) - m_1(x)) \\ &\quad - 2\lambda_2 x^2(m(x) - m_1(x)) - 2\lambda_3 x^4(m(x) - m_1(x))] dx \\ &= 2 \int_{S'} (m(x) - m_1(x)) [\{x^2\}m_1(x) - \{\lambda_1 + \lambda_2 x^2 + \lambda_3 x^4\}] dx, \end{aligned}$$

donde se ha utilizado que  $\frac{d}{dt} m_{(t)}(x)|_{t=0} = (m(x) - m_1(x))$  y  $m_{(0)}(x) = m_1(x)$ . La igualdad se alcanzará precisamente para

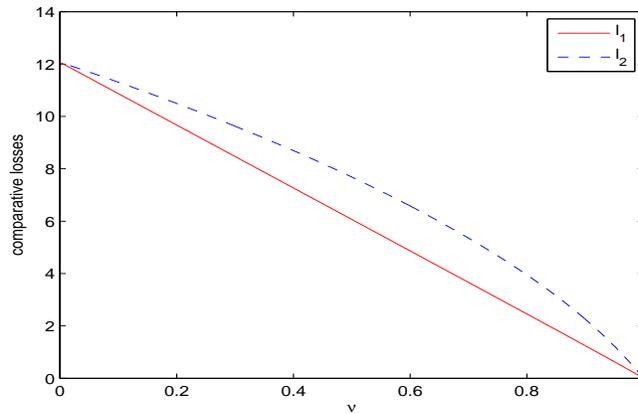
$$m_1(x; \omega_1) = \left( \frac{\lambda_1 + \lambda_2 x^2 + \lambda_3 x^4}{x^2} \right)^+, \quad (5.23)$$

con  $\boldsymbol{\omega}_1 = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$  obteniéndose así la expresión de la densidad minimizante buscada. El signo  $+$  se refiere a la parte positiva de la función para garantizar que la densidad sea no negativa. Obsérvese que la expresión de la densidad está sobreparametrizada. Por ejemplo, considerando  $\lambda_2 \neq 0$ , dividiendo todas las constantes entre ésta se obtiene

$$m(x; \boldsymbol{\omega}) = \left( \frac{a + x^2 + bx^4}{x^2} \right)^+, \quad (5.24)$$

con  $\boldsymbol{\omega} = (a, b)$ . Si  $\lambda_2$  fuese 0, entonces (5.24) sería la versión límite de (5.23). En definitiva, será suficiente considerar la subclase  $\Xi'$  de diseños con densidades de la forma (5.24). La determinación de las constantes  $a^*$  y  $b^*$  para las que el diseño  $\xi^*$  con densidad  $m(x; \boldsymbol{\omega}^*)$  minimiza  $l_1(\xi)$  en  $\Xi'$  verificando las condiciones de contorno se llevará a cabo numéricamente utilizando una rutina de minimización. Este procedimiento se explicará con detalle más adelante.

Tras el cálculo de las densidades minimizantes para cada  $\nu \in [0, 1]$ , se comprueba si se satisface la condición  $l_1(\xi_{1^*}) \geq l_2(\xi_{1^*}) \forall \nu \in [0, 1]$ :



**Figura 5.1:** Valor de la pérdida evaluada en cada autovalor  $\rho_1(\xi)$  y  $\rho_2(\xi)$  para el diseño óptimo  $\xi_{1^*}$  para cada  $\nu \in [0, 1]$ .

La figura 5.1 muestra que la primera estrategia pura falla drásticamente. En particular,  $l_2(\xi_{1^*})$  supera  $l_1(\xi_{1^*})$  para todo valor de  $\nu$ . Se procede, por tanto, al estudio del segundo autovalor candidato.

### 2ª Estrategia pura

Razonando de manera análoga al caso anterior, hallaremos

$$m_1 = \arg \min \rho_2(\xi) = \arg \min \alpha_0 + \boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{\kappa} + \sqrt{\beta_0 + \boldsymbol{\beta}'\boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}'\mathbf{C}\boldsymbol{\kappa}},$$

sujeto a

$$\int_{S'} m(x)dx = 1, \quad \int_{S'} x^2 m(x)dx = \mu_2, \quad \int_{S'} x^4 m(x)dx = \mu_4,$$

$\forall m(x) \geq 0$  con  $\boldsymbol{\kappa}$  y  $\alpha_0, \beta_0, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \mathbf{C}$  definidos como en (5.19) y (5.20) respectivamente.

Utilizando el método variacional (5.21), el objetivo será encontrar la expresión de la densidad minimizante de

$$\Phi(t; \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \int_{S'} \left\{ \begin{array}{l} \rho_2(t) - 2\lambda_1 m_{(t)}(x) \\ -2\lambda_2 x^2 m_{(t)}(x) - 2\lambda_3 x^4 m_{(t)}(x) \end{array} \right\} dx, \quad (5.25)$$

que se alcanzará para  $t = 0$  siendo

$$\rho_2(t) = \alpha_0 + \boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{\kappa}_{(t)} + \sqrt{\beta_0 + \boldsymbol{\beta}'\boldsymbol{\kappa}_{(t)} + \boldsymbol{\kappa}'_{(t)}\mathbf{C}\boldsymbol{\kappa}_{(t)}} \quad (5.26)$$

$$\boldsymbol{\kappa}_{(t)} = m_{(t)}^2(x) \begin{pmatrix} 1 \\ x^2 \\ x^4 \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

Calculamos primero la derivada del primer término del integrando:

$$\begin{aligned} \rho_2'(0) &= \boldsymbol{\alpha}' \frac{d}{dt} \boldsymbol{\kappa}_{(t)} \Big|_{t=0} + \frac{1}{2} \frac{\frac{d}{dt}(\beta_0 + \boldsymbol{\beta}'\boldsymbol{\kappa}_{(t)} + \boldsymbol{\kappa}'_{(t)}\mathbf{C}\boldsymbol{\kappa}_{(t)}) \Big|_{t=0}}{\sqrt{\beta_0 + \boldsymbol{\beta}'\boldsymbol{\kappa}_{(1)} + \boldsymbol{\kappa}'_{(1)}\mathbf{C}\boldsymbol{\kappa}_{(1)}}} \\ &= 2(m(x) - m_1(x))m_1(x) \left[ \boldsymbol{\alpha}' + \frac{1}{2\sqrt{K_{(1)}}} \boldsymbol{\beta}' + 2\boldsymbol{\kappa}'_{(1)}\mathbf{C} \right] \begin{pmatrix} 1 \\ x^2 \\ x^4 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Por tanto, la densidad minimizante se obtendrá de la condición

$$\begin{aligned} 0 &\leq \Phi'(0; \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \\ &= \int_{S'} (m(x) - m_1(x)) [m_1(x) \{ \boldsymbol{\alpha}' + \frac{1}{2\sqrt{K_{(1)}}} \boldsymbol{\beta}' + 2\boldsymbol{\kappa}'_{(1)} \mathbf{C} \} \begin{pmatrix} 1 \\ x^2 \\ x^4 \end{pmatrix} \\ &\quad - \{ \lambda_1 + \lambda_2 x^2 + \lambda_3 x^4 \}] dx. \end{aligned}$$

La igualdad se alcanzará para

$$m_1(x; \boldsymbol{\omega}_1) = \left( \frac{a_1 + b_1 x^2 + c_1 x^4}{d_1 + e_1 x^2 + f_1 x^4} \right)^+,$$

donde  $\boldsymbol{\omega}_1 = (a_1, b_1, c_1, d_1, e_1, f_1)$  y, en términos de

$$\begin{aligned} K_1 &= \theta_1 \kappa_0 + \theta_5, \\ K_2 &= \theta_3 \kappa_4 + \theta_8, \\ K_3 &= \theta_1 \kappa_2 + \theta_3 \kappa_2 + \theta_6, \\ K_4 &= \theta_2 \kappa_0 + \theta_3 \kappa_2 + \theta_7, \\ K &= (\beta_0 + \boldsymbol{\beta}' \boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}' \mathbf{C} \boldsymbol{\kappa}) \end{aligned}$$

evaluados en  $\xi_1$  como en (5.21), se ha definido  $a_1 = \lambda_1$ ,  $b_1 = \lambda_2$ ,  $c_1 = \lambda_3$  y

$$d_1 = \frac{\theta_1}{2} \left( 1 + \frac{1}{\sqrt{K}} \left( \frac{1}{2} K_1 - \frac{1}{2} K_2 + \frac{\theta_2}{\theta_1} K_3 \right) \right), \quad (5.28)$$

$$e_1 = \theta_2 + \frac{1}{2\sqrt{K}} (\theta_3 K_3 + \theta_1 K_4), \quad (5.29)$$

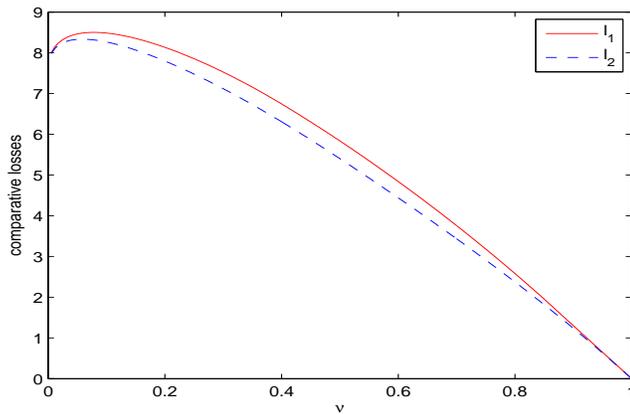
$$f_1 = \frac{\theta_3}{2} \left( 1 + \frac{1}{\sqrt{K}} \left( \frac{1}{2} K_2 - \frac{1}{2} K_1 + \frac{\theta_2}{\theta_3} K_4 \right) \right). \quad (5.30)$$

Utilizando un argumento similar al que se siguió para la obtención de (5.24), se obtiene la expresión buscada:

$$m(x; \boldsymbol{\omega}) = \left( \frac{a + bx^2 + cx^4}{d + x^2 + ex^4} \right)^+,$$

con  $\omega = (a, b, c, d, e)$ .

Tras determinar numéricamente las constantes y obtener así la densidad minimizante para cada  $\nu \in [0, 1)$ , procedimiento que se detallará en la próxima subsección, se tiene que la condición  $l_2(\xi_{2^*}) \geq l_1(\xi_{2^*})$  se incumple en todos los casos (ver Figura 5.2). Tras el fallo de las estrategias puras, se hace estrictamente necesario el desarrollo de una nueva metodología para el cálculo de los diseños  $D$ -óptimos robustos.



**Figura 5.2:** Valor de la pérdida evaluada en cada autovalor  $\rho_1(\xi)$  y  $\rho_2(\xi)$  para el diseño óptimo  $\xi_{2^*}$  para cada  $\nu \in [0, 1]$ .

### 5.3.2. Estrategia General de Construcción

La principal contrariedad encontrada en el apartado anterior surge de obtener un autovalor máximo diferente para cada valor de  $\nu$ . Este inconveniente puede solventarse dividiendo el problema en dos: cada parte corresponderá al subproblema donde cada autovalor es máximo. Esta condición podrá añadirse después al problema de minimización como una restricción más. La descripción formal de

esta “estrategia general de construcción” viene dada por el siguiente teorema:

**Teorema 5.3.** *Sea  $\{l_j(\xi)\}_{j=1}^J$  la función pérdida correspondiente al autovalor  $j$ -ésimo. Un diseño minimax  $\xi^*$  minimizando la pérdida*

$$l(\xi) = \max_{1 \leq j \leq J} \{l_j(\xi)\},$$

*puede obtenerse de la forma siguiente: considérese una partición de conjunto de los diseños  $\Xi = \cup_{k=1}^J \Xi_k$ , donde*

$$\Xi_k = \left\{ \xi \mid l_k(\xi) = \max_{1 \leq j \leq J} \{l_j(\xi)\} \right\}.$$

*Para cada  $j = \{1, \dots, J\}$ , se define  $\xi_j$  como el diseño minimizante de cada  $l_j(\xi)$  en  $\Xi_j$ . Entonces, el diseño buscado  $\xi^*$  será el diseño  $\xi_{j^*}$  verificando  $j^* = \arg \min_{1 \leq j \leq J} \{l_j(\xi_j)\}$ .*

Demostración. Puede encontrarse en Daemi y Wiens [Dae13]

De acuerdo con el resultado anterior, en primer lugar ha de resolverse el problema de minimización en cada  $\Xi_j$  con  $j = 1, 2$ . Esto es encontrar la densidad minimizante de  $l_1(\xi)$  sujeto a  $l_1(\xi) \geq l_2(\xi)$  por un lado, y por otro, hallar el minimizador de  $l_2(\xi)$  sujeto a  $l_2(\xi) \geq l_1(\xi)$  asumiendo en ambos casos  $\mu_2$  y  $\mu_4$  fijos que se añadirán al problema como condiciones de contorno. Ésto último implicará que los  $\theta_i$ ,  $i = 1, \dots, 9$  y  $d(\xi)$  también serán considerados como constantes, de modo que las desigualdades entre  $l_1$  y  $l_2$  pueden formularse equivalentemente como desigualdades entre  $\rho_1$  y  $\rho_2$ . La condición de la desigualdad puede formularse como igualdad añadiendo una variable de holgura y será incorporada al problema de minimización como otra restricción más.

### Minimización sobre $\Xi_1$

El planteamiento del problema es el siguiente:

$$m_1 = \arg \min \int_{S'} x^2 m^2(x) dx,$$

sujeto a

$$\int_{S'} m(x)dx = 1, \quad \int_{S'} x^2 m(x)dx = \mu_2, \quad \int_{S'} x^4 m(x)dx = \mu_4,$$

$$\rho_1(\xi) - \rho_2(\xi) - \delta_1 = 0,$$

$\forall m(x) \geq 0$  donde  $\delta_1$  es una variable de holgura. Utilizando el método variacional (5.21), los multiplicadores de Lagrange y la expresión de los autovalores (5.18) y (5.26), se tiene que la función a minimizar para  $t = 0$  es como sigue

$$\begin{aligned} \Phi(t; \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4) &= \\ &= \int_{S'} \{x^2 m_{(t)}^2(x) - 2\lambda_1 m_{(t)}(x) - 2\lambda_2 x^2 m_{(t)}(x) - 2\lambda_3 x^4 m_{(t)}(x) \\ &- \lambda_4 [\theta_4 x^2 m_{(t)}^2(x) + \theta_9 - (\alpha_0 + \boldsymbol{\alpha}' \boldsymbol{\kappa}_{(t)} + \sqrt{\beta_0 + \boldsymbol{\beta}' \boldsymbol{\kappa}_{(t)} + \boldsymbol{\kappa}'_{(t)} \mathbf{C} \boldsymbol{\kappa}_{(t)})}]\} dx. \end{aligned}$$

Procediendo como antes, se obtiene la condición de primer orden

$$\begin{aligned} 0 \leq \Phi'(0; \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4) &= 2 \int_{S'} [\{D_1 + F_1 x^2 + E_1 x^4\} m_1(x) - \\ &- \{a_1 + b_1 x^2 + c_1 x^4\}] (m_1(x) - m(x)) dx \end{aligned}$$

donde se ha denotado  $a_1 = \lambda_1$ ,  $b_1 = \lambda_2$ ,  $c_1 = \lambda_3$ ,  $D_1 = \lambda_4 d_1$ ,  $E_1 = 1 - \lambda_4(\theta_4 - e_1)$  y  $F_1 = \lambda_4 f_1$ , con  $d_1$ ,  $e_1$  y  $f_1$  definidas en (5.28), (5.29) y (5.30) respectivamente. La igualdad se obtiene para la densidad que se muestra a continuación, dividiendo entre alguna constante no nula para evitar la sobreparametrización

$$m(x; \boldsymbol{\omega}) = \left( \frac{a + bx^2 + cx^4}{d + x^2 + ex^4} \right)^+,$$

con  $\boldsymbol{\omega} = (a, b, c, d, e)$ .

### Minimización sobre $\Xi_2$

El problema de minimización es el siguiente

$$m_1 = \arg \min \rho_2(\xi) = \arg \min \alpha_0 + \boldsymbol{\alpha}' \boldsymbol{\kappa} + \sqrt{\beta_0 + \boldsymbol{\beta}' \boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}' \mathbf{C} \boldsymbol{\kappa}},$$

sujeto a

$$\int_{S'} m(x)dx = 1, \quad \int_{S'} x^2 m(x)dx = \mu_2, \quad \int_{S'} x^4 m(x)dx = \mu_4,$$

$$\rho_2(\xi) - \rho_1(\xi) - \delta_2 = 0,$$

$\forall m(x) \geq 0$  donde  $\delta_2$  es una variable de holgura. Utilizando un argumento similar al seguido en los casos anteriores se obtiene la siguiente función a minimizar en  $t = 0$

$$\begin{aligned} \Phi(t; \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4) = & \int_{S'} \{ \alpha_0 + \boldsymbol{\alpha}' \boldsymbol{\kappa}_{(t)} + \sqrt{\beta_0 + \boldsymbol{\beta}' \boldsymbol{\kappa}_{(t)} + \boldsymbol{\kappa}'_{(t)} \mathbf{C} \boldsymbol{\kappa}_{(t)}} \\ & - 2\lambda_1 m_{(t)}(x) - 2\lambda_2 x^2 m_{(t)}(x) - 2\lambda_3 x^4 m_{(t)}(x) - \lambda_4 [\alpha_0 + \boldsymbol{\alpha}' \boldsymbol{\kappa}_{(t)} + \\ & + \sqrt{\beta_0 + \boldsymbol{\beta}' \boldsymbol{\kappa}_{(t)} + \boldsymbol{\kappa}'_{(t)} \mathbf{C} \boldsymbol{\kappa}_{(t)}} - (\theta_4 x^2 m_{(t)}^2(x) + \theta_9) \} dx. \end{aligned}$$

Razonando como antes se obtiene

$$\begin{aligned} 0 \leq \Phi'(0; \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4) = & 2 \int_{S'} [\{ \bar{D}_1 + \bar{F}_1 x^2 + \bar{E}_1 x^4 \} m_1(x) - \\ & - \{ a_1 + b_1 x^2 + c_1 x^4 \} (m_1(x) - m(x))] dx \end{aligned}$$

donde se ha denotado  $a_1 = \lambda_1$ ,  $b_1 = \lambda_2$ ,  $c_1 = \lambda_3$ ,  $\bar{D}_1 = d_1(1 - \lambda_4)$ ,  $\bar{E}_1 = e_1(1 - \lambda_4) + \theta_4 \lambda_4$  y  $\bar{F}_1 = f_1(1 - \lambda_4)$ , con  $d_1$ ,  $e_1$  y  $f_1$  definidas en (5.28), (5.29) y (5.30) respectivamente. Y denotando  $\boldsymbol{\omega} = (a, b, c, d, e)$ , obtenemos finalmente la expresión de la densidad minimizante

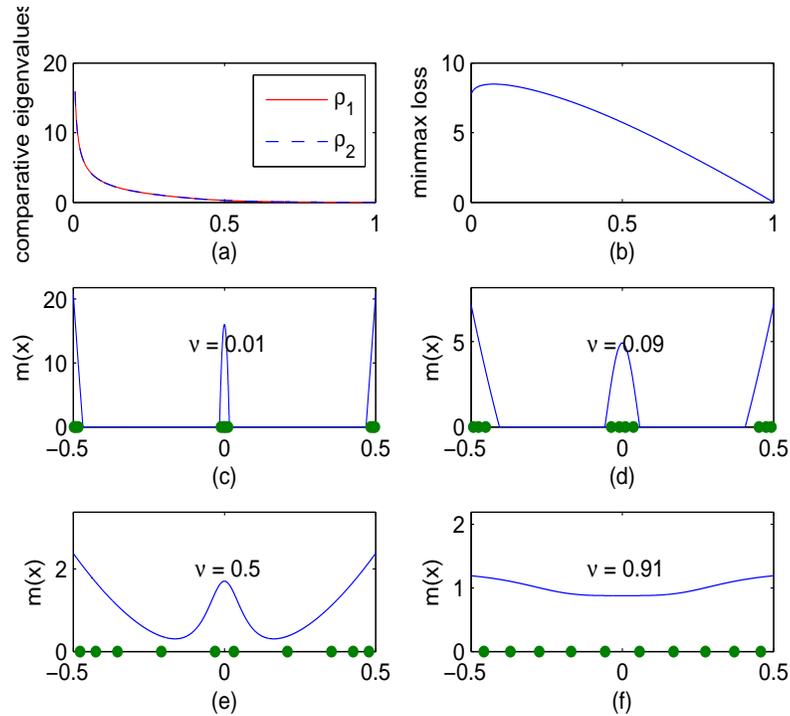
$$m(x; \boldsymbol{\omega}) = \left( \frac{a + bx^2 + cx^4}{d + x^2 + ex^4} \right)^+. \quad (5.31)$$

### Minimización sobre $\Xi$ y resultados

Al hallar la densidad minimizante en cada partición de  $\Xi$ , se ha encontrado analíticamente que ésta tiene la misma expresión. Por tanto, será suficiente considerar densidades de la forma (5.31). El problema consistirá en determinar el vector de constantes  $\boldsymbol{\omega}^* = (a^*, b^*, c^*, d^*, e^*)$  con el que el diseño  $\xi^*$  con densidad  $m^*(x) =$

$m(x; \omega^*)$  minimiza (5.10) sujeto a las condiciones de contorno. Este problema debe resolverse para cada valor de  $\nu \in [0, 1]$ . El cálculo de las constantes se llevó a cabo numéricamente, utilizando una rutina de optimización no lineal sin restricciones en MATLAB. La única condición impuesta es que  $m^*(x)$  es una medida de probabilidad y, por tanto, las constantes se normalizaron en cada iteración. Un punto fundamental para la convergencia del algoritmo de minimización es la elección del punto de inicio de estas constantes. Para este propósito se analizó el “comportamiento límite” de  $\nu$ . El diseño óptimo para  $\nu = 0$  se corresponde con el diseño  $D$ -óptimo clásico, que en este caso es conocido y tiene como puntos de soporte  $\pm 0.5$  y  $0$  con densidad uniforme. Tomando  $a = 20$ ,  $b = -20000$ ,  $c = 80000$ ,  $d = 1/300$  y  $e = 100/300$  se obtiene una densidad de tales características, de modo que resultaron ser unos buenos valores iniciales. Los valores de estas constantes fueron actualizándose secuencialmente utilizando un incremento de  $\nu$  de  $0.001$ . Fue necesario establecer una longitud de paso pequeña para garantizar precisión en el punto de inicio en cada evaluación. Cuando el diseño óptimo clásico es desconocido, una estrategia muy recurrente es considerar *diseños uniformes* partiendo de  $\nu = 1$ . Siguiendo a [Kon15], éstos son frecuentemente óptimos contra desviaciones de la forma (5.3). Por otro lado, todas las integrales para el cálculo de los elementos de las matrices de la pérdida fueron calculadas utilizando la *regla de Simpson* sobre una malla de  $10.000$  puntos.

La Figura 5.3 ilustra algunos ejemplos de los resultados obtenidos. Como puede observarse en (a), los autovalores evaluados en el diseño óptimo  $\xi^*$  toman prácticamente el mismo valor para cada  $\nu$ . Este comportamiento puede corroborarse tras haber estudiado previamente el fallo de las estrategias puras. De (b) se deduce que la pérdida es mayor cuando más importancia relativa se pone sobre la varianza frente al sesgo. Las gráficas (c)-(f) muestran las densidades minimizantes para ciertos valores de  $\nu$  seleccionados. El código QR de la figura 5.4 muestra una animación gráfica de la evolución de la densidad óptima a medida que aumenta  $\nu$ . La tabla 5.1 recoge los



**Figura 5.3:** Diseños  $D$ -óptimos robustos  $\xi^*$  para el modelo de Scheffé (5.13). (a) Autovalores  $(\rho_1(\xi^*), \rho_2(\xi^*))$  vs.  $\nu$ ; (b) Valor de la pérdida  $l(\xi^*)$ ; (c)-(f) densidades  $D$ -óptimas robustas  $m^*(x)$  y diseño de 10 puntos para los valores de  $\nu$  seleccionados.

valores de las constantes que se obtuvieron numéricamente y que determinan las expresiones de las densidades  $D$ -óptimas robustas de la forma (5.31) que se muestran en la Figura 5.3.

Sin embargo, los experimentadores no pueden llevar a la práctica sus experimentos a partir de densidades continuas. Por tanto, se hace necesario proporcionar diseños exactos a partir de las densidades obtenidas. En este trabajo se ha considerado

$$x_i = \xi^{-1} \left( \frac{i - 1/2}{n} \right), \quad i = 1, \dots, n.$$



**Figura 5.4:** Evolución de la densidad  $D$ -óptimo robusta,  $m(x; \omega^*)$ , a medida que  $\nu$  aumenta.

$\nu$	a	b	c	d	e	$l(\xi^*)$
0.01	0.04081	-150	683.5	0.002549	0.01475	8.109
0.09	0.05028	-15.42	91.56	0.01023	0.1231	8.474
0.5	0.009662	-0.2874	11.19	0.005664	0.1913	5.734
0.91	0.2531	0.9048	33.91	0.2883	26.3	1.136

**Tabla 5.1:** Constantes que definen las densidades (5.31) para los valores de  $\nu$  seleccionados.

puesto que estos diseños convergen débilmente a  $\xi$  y son los diseños de  $n$  puntos más cercanos a  $\xi$  considerando la distancia de Kolmogorov (ver Xu y Yuen [Xu11]). En la Figura 5.3 se muestran sobre el eje  $x$  de las gráficas (c)-(f) los diseños exactos de 10 puntos siguiendo este esquema de implementación. Puede observarse para  $\nu = 0.01$  que el diseño coincide con el  $D$ -óptimo clásico poniendo  $1/3$  de las observaciones en los extremos y en el punto medio de la región de diseño. A medida que se va dando más importancia al sesgo que a la varianza, esto es, a medida que  $\nu$  se aproxima a 1, se observa que los puntos de diseño se van distribuyendo de forma más uniforme por la región de diseño hasta alcanzar en el último de los casos, (f), una distribución uniforme casi perfecta. Este comportamiento se encuentra frecuentemente en diseño robusto: para buscar protección contra la falta de especificidad del modelo, la mejor estrategia será tomar las observaciones cubriendo el espacio de diseño de manera que no se favorezca ninguna región, esto es

uniformemente.

Los resultados anteriores corresponden a las soluciones obtenidas con problema transformado a través de la transformación lineal  $T$ . La tabla 5.2 recoge las primeras coordenadas de los 10 puntos de diseño en el espacio original, el simplex  $\mathcal{S}$ , calculadas a partir de la discretización que se muestra en las gráficas (c)-(f) de la Figura 5.3. Los puntos de soporte del problema original son los pares  $(p, 1 - p)$  donde  $p$  se ha obtenido a partir de la transformación inversa  $T^{-1}$ .

$\nu$	$p$									
0.01	0.003	0.008	0.016	0.489	0.497	0.503	0.511	0.984	0.992	0.998
0.09	0.007	0.024	0.048	0.463	0.490	0.510	0.537	0.952	0.976	0.993
0.5	0.022	0.074	0.146	0.291	0.469	0.531	0.708	0.854	0.926	0.978
0.91	0.042	0.130	0.225	0.330	0.443	0.557	0.670	0.775	0.870	0.958

**Tabla 5.2:** Primeras coordenadas de los 10 puntos de diseño sobre el simplex  $\mathcal{S}$  a partir de la discretización mostrada en la Figura (5.3).

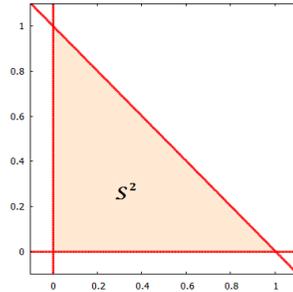
En el caso de  $I$ -optimización no fue posible obtener una expresión analítica de la densidad minimizante. Los resultados teóricos necesarios para simplificar el problema y obtener así una expresión algebraica de los autovalores, no pudieron extenderse puesto que no puede garantizarse la convexidad de esta función pérdida.

## 5.4. Diseños óptimo robustos para mezclas de tres componentes

En esta sección se extenderán los resultados del apartado anterior para problemas de mezclas donde intervengan tres ingredientes en el compuesto. Considérese un polinomio de Scheffé de segundo orden incluyendo el término constante para tres ingredientes

$$\eta(\mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}) = \theta_0 + \theta_1 p_1 + \theta_2 p_2 + \theta_{11} p_1^2 + \theta_{22} p_2^2 + \theta_{12} p_1 p_2. \quad (5.32)$$

El tercer componente puede deducirse de la relación  $p_3 = 1 - p_1 - p_2$ . La región de diseño será  $\mathcal{S}^2$  (ver Figura 5.5) y el vector de regresores  $f(p_1, p_2) = (1, p_1, p_2, p_1^2, p_2^2, p_1 p_2)$ . Esta formulación equivalente del polinomio canónico de Scheffé de segundo orden para tres componentes, permite ahorrar una variable en procesos sucesivos.



**Figura 5.5 :**  $\mathcal{S}^2 = \{\mathbf{p} = (p_1, p_2) \in [0, 1]^2 : p_1 + p_2 \leq 1\}$ .

Bajo este marco, aparecen ciertas dificultades que impiden aplicar el procedimiento seguido para las mezclas binarias. Es por ello que se abre la siguiente disertación:

**Observación 5.1.**

- *Los autovalores a calcular en la pérdida son las raíces características de una matriz de orden 6. Para emplear la teoría de los multiplicadores de Lagrange se necesitaría obtener una expresión algebraica de las raíces del polinomio característico de esta matriz que será de grado 6. Sin embargo, como consecuencia de un resultado importante de la teoría de Galois se tiene que*

**Teorema 5.4. (Teorema de Imposibilidad de Abel):**  
*No es posible encontrar las soluciones de la ecuación general*

$$a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0 = 0$$

para  $n \geq 5$  mediante un número finito de operaciones aritméticas de los coeficientes que integran la ecuación.

*Demostración.* Véase [Pes03].

El teorema no indica que no exista solución. De hecho, el teorema fundamental del álgebra garantiza la existencia de soluciones (si se permitieran soluciones complejas en el problema). Este teorema tan sólo muestra la inexistencia de una expresión algebraica para soluciones generales. Pese a lo ello, pudiera ocurrir que para nuestro caso particular fuese posible alcanzarlas. Sin embargo, las expresiones de los elementos de la matriz de la pérdida son funciones complejas de las extensiones bidimensionales de  $\mu_j$  y  $\kappa_j$  por lo que no fue posible obtenerlas.

Los métodos numéricos resultan ser la única alternativa viable para calcular de los autovalores. Asimismo, será necesario desarrollar un algoritmo, especializado en este tipo de problemas, para la minimización numérica de la pérdida. Esta será la estrategia adoptada en este trabajo para abordar el problema general.

- Otra posibilidad es considerar una clase de diseños restringidos que, simplificando el problema y mediante transformaciones elementales de la región de diseño, permitan obtener una expresión algebraica de los autovalores. Este enfoque del problema continuo será tratado más adelante.

En primer lugar, se describirá el procedimiento desarrollado para resolver el problema general. La minimización numérica de la pérdida conlleva la discretización del problema. Sea  $\mathcal{S}_D^2$  la región de diseño discretizada

$$\mathcal{S}_D^2 = \{(p_{1i}, p_{2j}) \in [0, 1]^2 : p_{1i} + p_{2j} \leq 1\}$$

donde

$$p_{1i} = \left\{ \frac{1}{k} i, i = 1, \dots, k \right\}, \quad p_{2j} = \left\{ \frac{1}{k} j, j = 1, \dots, k \right\}$$

siendo  $k$  el número de nodos del intervalo  $[0, 1]$ . El número total de puntos de soporte será  $N = \frac{k(k+1)}{2}$ . Nuestro interés será obtener diseños  $\xi$  que asignen una medida de probabilidad óptima  $\xi_{ij}^* = \xi^*(p_{1i}, p_{2j}) = \xi(\mathbf{p})$  sobre cada punto del retículo  $\mathcal{S}_D^2$ . Consideraremos, por tanto, diseños exactos de  $n$  puntos que ponen peso  $\xi_{ij} > 0$  sobre un máximo de  $n$  puntos de la cuadrícula y cero en el resto. Para diseños discretos se definen análogamente al caso continuo las matrices que intervienen en la pérdida:

$$\begin{aligned} A &= N^{-1} \sum_{i=1}^k \sum_{j=0}^{k-i} f(p_{1i}, p_{2j}) f'(p_{1i}, p_{2j}), \\ M(\xi) &= \sum_{i=1}^k \sum_{j=0}^{k-i} \xi_{ij} f(p_{1i}, p_{2j}) f'(p_{1i}, p_{2j}), \\ K(\xi) &= \sum_{i=1}^k \sum_{j=0}^{k-i} \xi_{ij}^2 f(p_{1i}, p_{2j}) f'(p_{1i}, p_{2j}), \\ H(\xi) &= M(\xi) A^{-1} M(\xi), \\ G(\xi) &= K(\xi) - H(\xi). \end{aligned}$$

A continuación se introducirá el algoritmos genético propuesto en este trabajo para llevar a cabo la minimización numérica. En particular, se describirán tanto los operadores como su funcionamiento especialmente desarrollados para el tipo de problemas que nos ocupa.

### 5.4.1. Algoritmo Genético

Puesto que en 4.4 se introdujeron sus fundamentos así como una pequeña revisión bibliográfica, en este apartado nos limitaremos a detallar las novedades del AG propuesto para el cálculo de diseños de mezclas óptimo robustos. En primer lugar reseñar que, si los trabajos en los que se emplean AGs dentro del campo DOE para

problemas de mixtura son escasos, más reducida es aún la literatura si incorporamos la robustez al problema. El único trabajo existente se debe a Heredia-Langer et al. [AHL04], quienes consideran la función de deseabilidad (5.1) para alcanzar diseños robustos para un conjunto de modelos candidatos prefijados por el experimentador. Sin embargo, el desarrollo de AGs para diseño de mezclas que busca protección contra perturbaciones de la respuesta utilizando un abanico infinito de modelos posibles, esto es, a través de la inclusión de una función contaminante, es una de las aportaciones más novedosas que se recogen en este trabajo.

Sea  $\mathcal{P}$  la población inicial de  $M$  diseños de  $n$  puntos aleatoriamente seleccionados en la región de diseño  $\mathcal{S}_D^2$  y sean  $i_1, \dots, i_M$  los índices correspondientes a la posición de los diseños iniciales  $\xi_1, \dots, \xi_M$  ordenados de menor a mayor valor de la pérdida. El valor de la función fitness que se asignará al diseño  $j$ -ésimo será

$$fit_j = \frac{1}{\sqrt{i_j} \cdot \sum_{k=1}^M \left( \frac{1}{\sqrt{i_k}} \right)}, \quad j = 1, \dots, M.$$

Los operadores que actuarán sobre los miembros de la población son:

### Selección.

- *Selección elitista.* Mantiene los  $N_{elite} = P_{elite} \cdot M$  diseños de la actual población con mayor fitness para la siguiente, siendo  $P_{elite}$  la probabilidad de élite establecida.
- *Selección probabilística.* Selecciona dos diseños *padre* para los siguientes procesos de modo que la probabilidad de ser elegido es proporcional a su fitness. Sean  $i_1^*$  e  $i_2^*$  los índices correspondientes a los miembros de la población elegidos. Entonces,

$$i_1^* = \min\left\{i : \sum_{s=1}^i fit_s \geq \gamma_1\right\} \quad \text{y} \quad i_2^* = \min\left\{i : \sum_{s=1}^i fit_s \geq \gamma_2\right\},$$

donde  $\gamma_1, \gamma_2 \sim U(0, 1)$  son generados aleatoriamente.

**Cruce.** El propósito de este operador es crear un nuevo diseño *hijo* que contenga información similar a los padres. La operación de cruce se llevará a cabo o no dependiendo de cierta probabilidad de cruce  $P_C$ . Sea  $\gamma_3 \sim U(0, 1)$  generado aleatoriamente. Si  $\gamma_3 < P_C$ , entonces el operador de cruce actuará. En otro caso, el diseño hijo será el mejor de los padres. En este trabajo se consideró  $P_C = 0.9$  y se ha creado un nuevo operador para satisfacer las necesidades especiales de los problemas de mezclas.

- *Cruce unitario.* Denotaremos por  $P_1$  y  $P_2$  a los diseños padre elegidos en la selección probabilística. En primer lugar,

$$hijo^{(1)} = \max\{P_1, P_2\}, \text{ siendo } hijo_{ij}^{(1)} = \max\{\xi_{ij}^{P_1}, \xi_{ij}^{P_2}\}.$$

La operación anterior puede generar un exceso de probabilidad que debe ser eliminada,  $exceso = 1 - \sum_{ij} hijo_{ij}^{(1)}$ . Puesto que todos los posibles valores que pueden tomar los pesos son múltiplos enteros de  $1/n$  (recuérdese que se consideran diseños exactos), el número de múltiplos de probabilidad a eliminar será  $mult = exceso \cdot n$ . El pseudocódigo del proceso anterior será

Mientras  $mult \neq 0$ : hacer

1. Contar el número de coordenadas distintas de cero en  $hijo^{(1)}$ ,  $nzc$ .
2. Definir el vector *eliminar* de tamaño  $1 \times nzc$ , donde las primeras  $\min(mult, nzc)$  coordenadas son iguales a  $1/n$  y el resto cero.
3. Reducir el exceso de probabilidad:  
 $(hijo^{(1)} > 0) = (hijo^{(1)} > 0) - Perm(eliminar)$ ,  
 donde *Perm* es un vector que contiene una permutación aleatoria de las coordenadas del vector *eliminar*.
4. Actualizar los pesos del paso 3 en  $hijo^{(1)}$  creando  $hijo^{(2)}$ .

### Mutación.

Recuérdese que este operador es el encargado de preservar la “biodiversidad” de las soluciones. Por tanto, debe generar más oportunidades para incorporar nuevas soluciones cuando el algoritmo esté lejos del óptimo y reducir la biodiversidad en caso contrario. Por tanto, la operación de cruce se llevará a cabo o no dependiendo de cierta probabilidad de cruce  $P_M$  que se actualizará en función del estado en el que se encuentre el algoritmo:

$$P_M = P_{M_{ini}} \left( 1 - \frac{\textit{invariante}}{\textit{invariantetotal}} \right)$$

donde  $P_{M_{ini}}$  es la probabilidad de mutación inicialmente determinada, *invariante* es el número de iteraciones que el mejor de los diseños de la actual población ha permanecido sin cambio e *invariantetotal* es el número de iteraciones prefijado que el mejor de los diseños ha de permanecer invariante para ser considerado óptimo. Así definida, la probabilidad de mutación irá reduciéndose progresivamente a medida que el algoritmo se vaya acercando al óptimo. El diseño hijo creado en el paso anterior será sometido a mutación con probabilidad  $P_M$  y permanecerá sin cambio con probabilidad  $1 - P_M$ . En este trabajo se ha considerado una probabilidad inicial  $P_{M_{ini}} = 0.1$  y el siguiente operador de cruce

- *Mutación unitaria.* Un nuevo diseño será generado a partir de una permutación aleatoria de la distribución de pesos del diseño hijo anterior sobre  $\mathcal{S}_D^2$ .

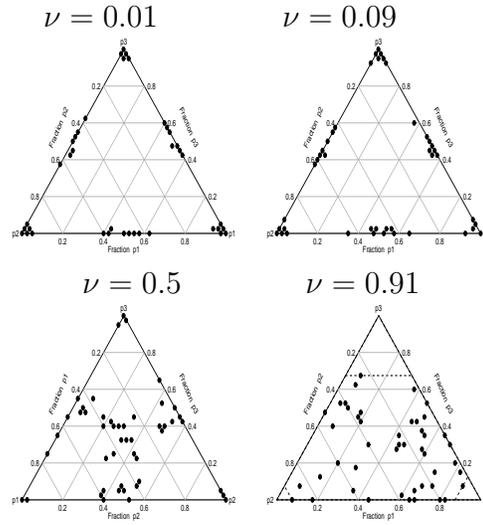
$N_{elite} + 1$  nuevos diseños serán sido obtenidos al final de este proceso. Las operaciones de *Selección probabilística - Cruce - Mutación* deben realizarse repetidas veces hasta completar una *generación* de  $M$  nuevos diseños. Así se habrá completado una iteración del AG. La regla de parada utilizada fue alcanzar *invariante=invariantetotal*; es decir, no encontrar mejoras en el fitness del mejor diseño durante un número suficientemente grande de iteraciones consecutivas. En

particular, 1000 iteraciones consecutivas fueron consideradas para los ejemplos que se ilustran más adelante.

Los operadores propuestos en este trabajo convergieron en todos los casos de estudio y en tiempos razonables. A continuación se muestran varios ejemplos numéricos considerando diseños de  $n = 48$  puntos. Se han considerado diferentes valores de  $\nu$  para mostrar diseños óptimos cercanos a los clásicos que minimizan la varianza ( $\nu \rightarrow 0$ ) así como diseños altamente influenciados por el sesgo ( $\nu \rightarrow 1$ ). Las figuras 5.6 y 5.7 muestran los diseños  $D$ - e  $I$ -óptimos robustos calculados. Como puede verse en la mayoría de ejemplos, los puntos de diseño se localizan entorno a *clusters* alrededor de diseños estándar. En particular, para  $D$ -optimización, se obtuvo un diseño  $\{3, 2\}$ -simplex lattice para los casos “casi clásicos” mientras que para  $\nu = 0.5$  resultó un diseño  $\{3, 3\}$ -simplex centroid, aunque este último menos definido. A medida que el valor de  $\nu$  aumenta, los puntos de diseño se localizan más repartidos por la región de diseño sin seguir ningún patrón claro como cabría esperar debido al sesgo introducido. En cuanto a  $I$ -optimización, resulta relevante que los diseños permanecen invariantes entorno a un  $\{3, 3\}$ -simplex centroid a medida que  $\nu$  varía. En este sentido se ha probado que, cuando se consideran diseños exactos, las matrices de los sumandos que intervienen en (5.11), correspondientes a la traza y a  $ch_{max}$ , son proporcionales y el factor de proporcionalidad es, además, el número de puntos de soporte

$$AM^{-1}(\xi) = n \cdot \mathbf{K}(\xi) \mathbf{H}^{-1}(\xi). \quad (5.33)$$

En los diseños obtenidos pueden deducirse ciertas propiedades geométricas. Una de las más destacables es que los puntos de diseño se sitúan de forma simétrica a lo largo de las medianas del simplex, propiedad que llamaremos *intercambiabilidad*. Este fenómeno sucede en todos los diseños  $I$ -óptimos robustos calculados y en la mayoría de los  $D$ -óptimos. Este fenómeno tiene la ventaja de no favorecer ninguno de los ingredientes en la mezcla de modo que puede ser una característica de diseño interesante para experimentadores. Vamos a considerar dos clases de diseños restringidos siguiendo esta



**Figura 5.6:** Diseños  $D$ -óptimos robustos obtenidos con AG para varios ejemplos de  $\nu$ .

idea y con propósito de comparar rendimientos entre los diferentes tipos de diseños.

### 5.4.2. Diseños Restringidos

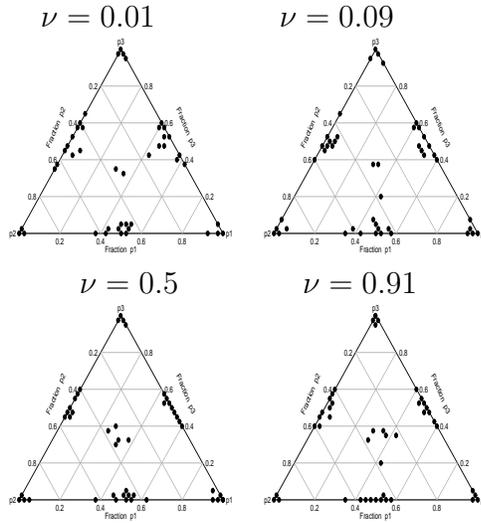
*Diseños Óptimos Robustos Intercambiables (DORI)*

Sea  $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_q)$  una mezcla de  $\mathcal{S}^{q-1}$  y sea

$$\mathcal{P}(\mathbf{p}) = \{\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_q) = \sigma(p_1, \dots, p_q)\}$$

el conjunto de todas las mezclas posibles formadas por permutación de sus coordenadas. Observa que  $\forall \mathbf{p} \in \mathcal{S}^{q-1}, \mathcal{P}(\mathbf{p}) \subset \mathcal{S}^{q-1}$  y  $\#\mathcal{P}(\mathbf{p}) = q!$ .

**Definición 5.1.** *Un diseño discreto  $\xi$  es intercambiable si todos los puntos del conjunto  $\mathcal{P}(\mathbf{p})$  tienen el mismo peso,  $\xi(\mathbf{p}) =$*



**Figura 5.7:** Diseños  $I$ -óptimos robustos obtenidos con AG para varios ejemplos de  $\nu$ .

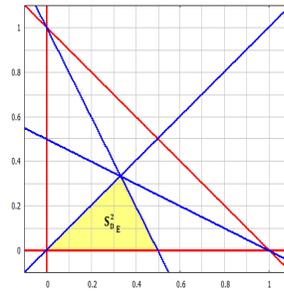
$\xi(\mathbf{a}) \forall \mathbf{a} \in \mathcal{P}(\mathbf{p})$ , y esto se verifica  $\forall \mathbf{p} \in \mathcal{S}^{q-1}$ . Por tanto, un diseño intercambiable de  $n$  puntos necesita únicamente  $n/q!$  mezclas para ser generado

$$\xi = \left\{ \begin{array}{cccc} \mathcal{P}(\mathbf{p}_1) & \mathcal{P}(\mathbf{p}_2) & \dots & \mathcal{P}(\mathbf{p}_{n/q!}) \\ \xi_1 & \xi_2 & \dots & \xi_{n/q!} \end{array} \right\},$$

donde  $\xi_i = \xi(\mathbf{a}) \forall \mathbf{a} \in \mathcal{P}(\mathbf{p}_i)$ ,  $i = 1, \dots, n/q!$  y  $\sum_{i=1}^{n/q!} q! \cdot \xi_i = 1$ .

La simetría a partir de las medianas del simplex implica que la región de diseño puede reducirse a la subregión  $\mathcal{S}_{D_E}^2$  representada en la Figura 5.8. Esta simplificación reduce el número de evaluaciones ya que el número de puntos de la malla es  $1/q!$  veces inferior al caso general.

Vamos a denotar análogamente al caso continuo abusando de no-



**Figura 5.8:**  $\mathcal{S}_{D_E}^2 = \{(p_{1i}, p_{2j}) \in [0, 1]^2 : p_{1i} \geq p_{2j}, p_{2j} \leq -2p_{1i} + 1\}$ .

tación

$$\mu_{st} = \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^i \xi_{ij} p_{1i}^s p_{2j}^t.$$

La propiedad de intercambiabilidad implica

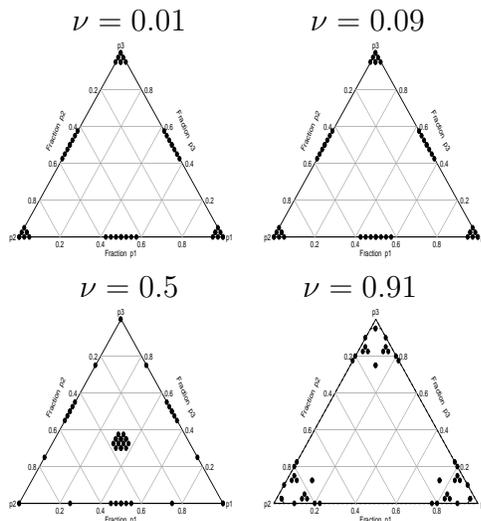
$$\begin{aligned} \mu_{10} &= \mu_{01} = \mu_1 & \mu_{12} &= \mu_{21} \\ \mu_{20} &= \mu_{02} = \mu_2 & \mu_{13} &= \mu_{31} \\ \mu_{30} &= \mu_{03} = \mu_3 & \mu_{40} &= \mu_{04} = \mu_4, \end{aligned}$$

de modo que la matriz de información

$$M(\xi) = \begin{pmatrix} 1 & \mu_1 & \mu_1 & \mu_2 & \mu_2 & \mu_{11} \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu_{11} & \mu_3 & \mu_{12} & \mu_{12} \\ \mu_1 & \mu_{11} & \mu_2 & \mu_{12} & \mu_3 & \mu_{12} \\ \mu_2 & \mu_3 & \mu_{12} & \mu_4 & \mu_{22} & \mu_{13} \\ \mu_2 & \mu_{12} & \mu_3 & \mu_{22} & \mu_4 & \mu_{13} \\ \mu_{11} & \mu_{12} & \mu_{12} & \mu_{13} & \mu_{13} & \mu_{22} \end{pmatrix}. \quad (5.34)$$

es una matriz simétrica con elementos repetidos y lo mismo ocurre con  $K(\xi)$ . La simplificación anterior reduce significativamente el coste computacional. Teniendo en cuenta estas consideraciones, se han calculado los diseños  $D$ - e  $I$ -óptimos robustos adaptando los operadores que se describieron en la sección anterior. Las figuras 5.9 y 5.10 recogen los diseños exactos de  $n = 48$  puntos

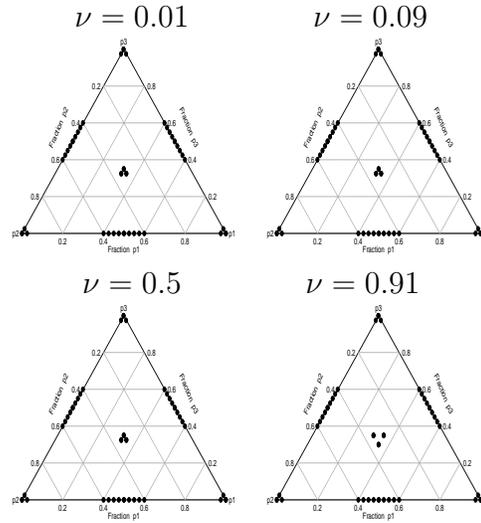
obtenidos. En el caso de  $D$ -optimización se alcanzó de nuevo un  $\{3, 2\}$ -simplex lattice para valores bajos de  $\nu$  y un  $\{3, 3\}$ -simplex centroid para  $\nu = 0.5$ ; mientras que para  $I$ -optimización se obtuvo un  $\{3, 3\}$ -simplex centroid en todos los ejemplos. Los diseños intercambiales proporcionan localizaciones más precisas de los puntos de diseño que en caso general en aquellos ejemplos donde se obtuvieron diseños estándar; lo que se traducirá, como se verá más adelante, en un aumento de la calidad de los diseños obtenidos con este tipo de diseños restringidos.



**Figura 5.9:** Diseños  $D$ -óptimos robustos intercambiales obtenidos con AG para varios ejemplos de  $\nu$ .

### *Diseños Óptimos Robustos Parcialmente Intercambiables (DORPI)*

Una crítica de la clase de diseños anterior es que la intercambiabilidad es una propiedad muy exigente, que requiere la invarianza bajo cualquier permutación de las coordenadas que integran la mezcla. Analizando el caso de  $D$ -optimización, se observa que los puntos de diseño necesitan mayor libertad para cubrir la región de diseño en los ejemplos con  $\nu > 0.5$  y esto es algo que no se consigue con los



**Figura 5.10:** Diseños  $I$ -óptimos robustos intercambiables obtenidos con AG para varios ejemplos de  $\nu$ .

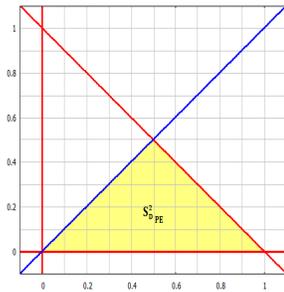
diseños intercambiables. Por tanto, se consideró una nueva clase de diseños, más flexibles, a los que se referirá como parcialmente intercambiables. Sea  $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_m)$  un conjunto de  $m$  permutaciones de las coordenadas de  $\mathbf{p} \in \mathcal{S}^{q-1}$  ( $m < q!$ ) y sea  $\sigma(\mathbf{p})$  el conjunto de puntos invariantes por éstas.

**Definición 5.1.** Un diseño discreto  $\xi$  es parcialmente intercambiable si  $\forall \mathbf{p} \in \mathcal{S}^{q-1}$ ,  $\xi(\mathbf{p}) = \xi(\sigma(\mathbf{p}))$ .

Vamos a considerar el siguiente caso de intercambiabilidad parcial: para cada mezcla de tres ingredientes  $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3)$ , considérese los puntos invariantes permutando las dos primeras coordenadas para cada  $p_3$  fijo en  $[0, 1]$ .  $n/2$  puntos de diseño serán necesarios para determinar completamente un diseño parcialmente intercambiable de  $n$  puntos

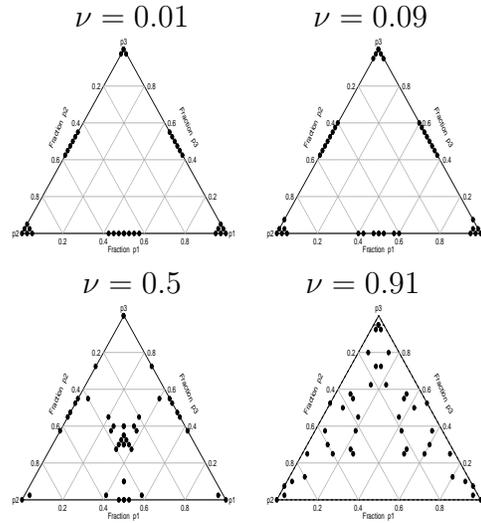
$$\xi = \left\{ \begin{array}{ccccc} (p_1, p_2, p_3)_1 & (p_2, p_1, p_3)_1 & \dots & (p_1, p_2, p_3)_{n/2} & (p_2, p_1, p_3)_{n/2} \\ \xi_1 & \xi_1 & \dots & \xi_{n/2} & \xi_{n/2} \end{array} \right\},$$

con  $\sum_{i=1}^{n/2} 2 \cdot \xi_i = 1$ . Los mismos diseños se obtendrían sin pérdida de generalidad intercambiando cualesquiera  $p_i$  y  $p_j$ ,  $i, j = 1, 2, 3$ ,  $i \neq j$ . Esta propiedad implica geoméricamente que los puntos de diseño se sitúan simétricamente con respecto a una de las medianas del simplex, la correspondiente a la proporción prefijada. De nuevo, la región de diseño se reduce, aunque no es tan reducida como en el caso anterior. Denotaremos la región de diseño por  $\mathcal{S}_{D_{PE}}^2$  (ver Figura 5.11).



**Figura 5.11:**  $\mathcal{S}_{D_{PE}}^2 = \{(p_{1i}, p_{2j}) \in [0, 1]^2 : p_{1i} \geq p_{2j}, p_{1i} + p_{2j} \leq 1\}$ .

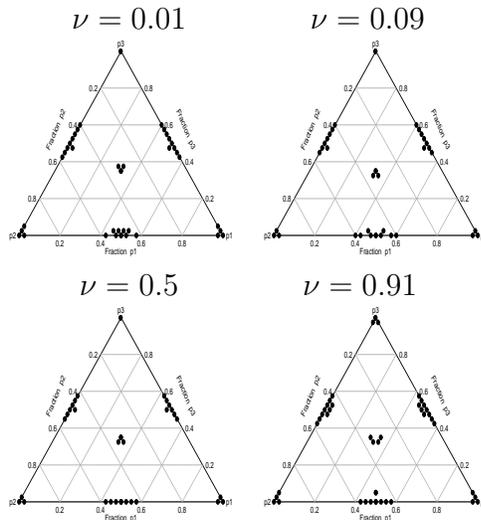
La simetría en esta clase de diseños conlleva simplificaciones en la búsqueda del óptimo similares a DORI lo cual supone un importante ahorro computacional. Se calcularon diseños  $D$ - e  $I$ -óptimos robustos parcialmente intercambiables de  $n = 48$  puntos adaptando apropiadamente los procedimientos que se describieron con anterioridad (ver figuras 5.12 y 5.13). Los diseños alcanzados fueron muy similares al caso anterior. Se mantienen, por tanto, las mismas características y, además, se consiguió una mayor flexibilidad en la localización de los puntos de diseño en el caso  $\nu = 0.91$  para  $D$ -optimización tal y como se esperaba por definición de esta clase de diseños.



**Figura 5.12:** Diseños  $D$ -óptimos robustos parcialmente intercambiables obtenidos con AG para varios ejemplos de  $\nu$ .

### 5.4.3. Resultados

En este apartado se compararán rendimientos entre los diseños calculados restringidos y sin restringir, con objeto de orientar al lector acerca de la estrategia más conveniente para llevar a cabo sus experimentos. En cada uno de los escenarios en los que se probó el AG se desarrollaron tres pruebas, de modo que las tablas 5.4.3 y 5.4 recogen la mediana del tiempo de ejecución sobre las tres actuaciones del algoritmo. En cada prueba se utilizó una población diferente de diseños iniciales aleatoriamente seleccionados, aunque la población fue la misma para calcular los DOR, DORI y DORPI para no favorecer así ninguno de los casos. Los diseños mostrados en las figuras 5.6, 5.7, 5.9, 5.10, 5.12 y 5.13 así como las pérdidas y el número de iteraciones de las tablas corresponden a la prueba cuya mediana fue seleccionada. No obstante, los resultados obtenidos en cada prueba fueron bastante robustos y no se observaron



**Figura 5.13:** Diseños  $I$ -óptimos robustos parcialmente intercambiables obtenidos con AG para varios ejemplos de  $\nu$ .

variaciones importantes. Esto pone de manifiesto que la naturaleza estocástica del método no afecta al funcionamiento del algoritmo.

### D-optimización

Se alcanzaron diseños estándar en la mayoría de ejemplos. En particular, un diseño  $\{3, 2\}$  – *simplex lattice* para  $\nu = 0.01$  y  $\nu = 0.09$  tanto en el caso general como en los restringidos. El diseño obtenido se trata de un resultado óptimo, que puede corroborarse en la literatura [Kie61]. Los teoremas de equivalencia prueban que en efecto éste es el  $D$ -óptimo. Sirva esta verificación para validar el AG propuesto, ya que se ha podido comprobar su capacidad para encontrar el óptimo, al menos en los casos donde hay información disponible en la literatura. Cuando sesgo y varianza tienen igual importancia a la hora de construir el diseño óptimo ( $\nu = 0.5$ ), el

$\{3, 3\}$  – *simplex centroid* resulta ser el más adecuado. Sin embargo, el diseño alcanzado cuando el sesgo adquiere más relevancia en la fuente de error ( $\nu = 0.91$ ) no sigue ningún patrón en la distribución espacial de los puntos de diseño. De hecho, no se encontró ningún punto repetido en el diseño, ni puntos próximos alrededor de una zona del simplex. Esta situación es típica en diseño robusto cuando se busca protección contra el tipo de desviaciones que estamos considerando [Kon15]. Los diseños calculados verificaron la propiedad de intercambiabilidad total y parcial en los casos de estudio en los que se obtuvieron diseños estándar. Por tanto, diseños generales y restringidos proporcionan resultados parecidos, obteniendo además que las condiciones para verificar la regla de parada se alcanzan antes con los diseños restringidos.

La tabla 5.4.3 muestra valores muy similares de la pérdida para los diseños restringidos y generales para los tres primeros escenarios de  $\nu$ . A pesar de que las diferencias son pequeñas, se observa una ligera mejora en la calidad de los DORPI. Por otro lado, los DORIs requieren menor número de iteraciones para verificar la regla de parada y las iteraciones son más ligeras ( $\bar{t}_{DORI} = 0.0093$  vs.  $\bar{t}_{DOR} = 0.0122$  y  $\bar{t}_{DORPI} = 0.0104$ ). El caso  $\nu = 0.91$  no se trata de un diseño intercambiable total o parcial de modo que la información proporcionada por los diseños restringidos es inferior al caso general como cabría esperar. La intercambiabilidad puede ser una condición muy severa cuando los puntos de diseño requieren mayor libertad para ocupar la región de diseño. Sin embargo, la pérdida de información con DORPI no difiere tanto del caso general.

### I-optimización

En cuanto a  $I$ –optimización, resultó un diseño  $\{3, 3\}$  – *simplex centroid* en todos los escenarios de  $\nu$  analizados e independientemente si el diseño calculado era restringido o no. En este caso diremos que se trata de un diseño óptimo robusto *estable*, lo cual es una propiedad muy deseable para los experimentadores puesto

$D$ -opt $\nu$	DOR			DORPI			DORI		
	n° it.	t	minloss	n° it.	t	minloss	n° it.	t	minloss
0.01	10830	128.1	26.52	6191	61.7	25.47	1367	12.9	26.1
0.09	6242	75.0	24.88	3862	39.5	23.71	1526	14.1	23.83
0.5	14370	177.9	10.94	7614	81.3	10.46	1209	11.2	10.45
0.91	2525	31.7	0.5289	3504	37.4	0.8104	1550	14.8	1.04

**Tabla 5.3:** Número de iteraciones (n° it.), tiempo de ejecución (en segundos) y valor de la pérdida de los diseños  $D$ -óptimos robustos generales, parcialmente intercambiables e intercambiables (DOR, DORPI y DORI respectivamente).

que éste es el diseño que deben elegir independientemente del conocimiento que tengan acerca de la adecuación del modelo en el fenómeno estudiado. Además, la optimalidad de diseños “casi clásicos” obtenidos ( $\nu = 0.01$  y  $\nu = 0.09$ ) también está probada en la literatura [PG16].

De la tabla 5.4 puede deducirse que no hay diferencias importantes en la calidad de los diseños restringidos y generales. De nuevo se observa que se requieren menos iteraciones para alcanzar el óptimo con DORI y DORPI y el tiempo empleado en cada iteración es inferior al empleado en el caso general ( $\bar{t}_{DORI} = 0.0098$  y  $\bar{t}_{DORPI} = 0.0110$  vs.  $\bar{t}_{DOR} = 0.0129$ ). Por otro lado, al igual que ocurría en todos los ejemplos de este capítulo, se observa que cuanto mayor es la importancia relativa que se da al sesgo, el valor de la pérdida va decreciendo.

Como se introdujo en la disertación al inicio de sección, la única alternativa factible para resolver el problema continuo en mixturas de tres componentes, es imponer tantas condiciones como sean necesarias para obtener una expresión algebraica de los autovalores. En el próximo apartado se expone un enfoque del problema siguiendo esta idea.

$I$ -opt $\nu$	n° it.	DOR			DORPI			DORI		
		t	minloss	n° it.	t	minloss	n° it.	t	minloss	
0.01	8049	101.0	3.577	5143	61.6	3.49	2047	20.2	3.522	
0.09	6628	87.0	3.345	3722	38.6	3.176	1674	16.4	3.239	
0.5	12540	164.5	1.812	7900	82.0	1.756	1301	12.6	1.791	
0.91	14120	179.0	0.3451	6234	69.9	0.3428	1712	16.9	0.3437	

**Tabla 5.4:** Número de iteraciones (n° it.), tiempo de ejecución (en segundos) y valor de la pérdida de los diseños  $I$ -óptimos robustos generales, parcialmente intercambiables e intercambiables (DOR, DORPI y DORI respectivamente).

#### 5.4.4. Aproximación del problema continuo

##### *Diseños Óptimos Robustos Simétricos y Parcialmente Intercambiables (DORSPI)*

Un punto fundamental en la búsqueda de una expresión algebraica de los autovalores es encontrar simplificaciones en los elementos de las matrices  $A$ ,  $M(\xi)$  y  $K(\xi)$ . En definitiva, esto es encontrar el mayor número de ceros posibles. Con este propósito, no sólo habrá que considerar una nueva clase de diseños restringidos sino que además será necesario explorar una subregión del simplex.

Sea  $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3)$  una mezcla de tres ingredientes cualquiera y sea  $(p_1, p_2) \in \mathcal{S}^2$  su proyección en las dos primeras coordenadas. La región de diseño debe verificar

**Definición 5.1.** Una región  $\mathcal{R} \in \mathbb{R}^2$  se dice que es simétrica e intercambiable si  $\forall (x, y) \in \mathcal{R}, \exists (y, x), (-x, y), (y, -x), (x, -y), (-y, x), (-x, -y), y (-y, -x) \in \mathcal{R}$ .

Vamos a definir el conjunto  $\overline{(x, y)} = \{(x, y), (y, x), (-x, y), (y, -x), (x, -y), (-y, x), (-x, -y), (-y, -x)\}$ . Entonces,

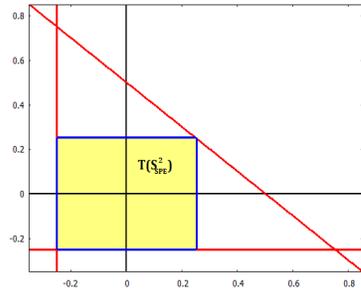
**Definición 5.1.** Se dice que un diseño continuo de tres ingredientes  $\xi$  es simétrico y parcialmente intercambiable si para cada  $p_3 \in [0, 1]$  fijo, los puntos del conjunto  $\overline{(p_1, p_2)}$  tienen la misma densidad para todo  $(p_1, p_2) \in \mathcal{R}$ . En otras palabras, si  $\xi$  tiene

por densidad asociada  $m$ , entonces debe verificarse que  $m(p_1, p_2) = m(a_1, a_2) \forall (a_1, a_2) \in \overline{(p_1, p_2)}$ .

El primer problema que debemos enfrentar es que  $\mathcal{S}^2$  no es una región simétrica y parcialmente intercambiable. Por tanto, se considerará la subregión más grande del simplex que mantenga tales propiedades:  $[0, \frac{1}{2}] \times [0, \frac{1}{2}]$ . Sin embargo, la simetría únicamente podrá verificarse si aplicamos una transformación afín

$$\begin{aligned} T : [0, \frac{1}{2}] \times [0, \frac{1}{2}] &\longrightarrow [-\frac{1}{4}, \frac{1}{4}] \times [-\frac{1}{4}, \frac{1}{4}]. \\ (p_1, p_2) &\longmapsto (x = p_1 - \frac{1}{4}, y = p_2 - \frac{1}{4}) \end{aligned}$$

Sea  $\chi = T(\mathcal{S}_{SPE}^2) = [-\frac{1}{4}, \frac{1}{4}] \times [-\frac{1}{4}, \frac{1}{4}]$  la subregión trasladada del simplex simétrica y parcialmente intercambiable (véase 5.14). Los criterios de  $D$ - e  $I$ -optimalidad son invariantes por esta clase de transformaciones [Dae13] de modo que puede considerarse el problema transformado sin pérdida de generalidad. Somos conscientes



**Figura 5.14** :  $T(\mathcal{S}_{SPE}^2) = [-\frac{1}{4}, \frac{1}{4}] \times [-\frac{1}{4}, \frac{1}{4}]$ .

de que son muchas hipótesis las que se deben asumir para alcanzar una solución continua con tres ingredientes y considerando el modelo (5.47). Éste es el “precio” que debemos pagar por alcanzar un resultado analítico en este contexto. Heo et al. [GH01] consideraron una clase de densidades predeterminadas de la forma  $m_\beta(\mathbf{x}) = \max(0, \sum_j \beta_j f_j(x_1^2, \dots, x_q^2))$  que dan como resultado diseños simétricos e intercambiables. En este trabajo, además de considerar el

problema en un marco más restringido como es el de las mezclas, se consiguió alcanzar analíticamente la expresión de las densidades óptimas considerando DORSPI.

Denotaremos por

$$\mu_{st} = \int_{-1/4}^{1/4} \int_{-1/4}^{1/4} x^s y^t m(x, y) dx dy,$$

$$\kappa_{st} = \int_{-1/4}^{1/4} \int_{-1/4}^{1/4} x^s y^t m^2(x, y) dx dy,$$

los momentos  $s$ -,  $t$ -ésimos de primer y segundo orden respectivamente, definidos en la subregión bidimensional del simplex del problema continuo. La simetría y parcial intercambiabilidad implican

$$\begin{aligned} \mu_{st} = 0, \quad \kappa_{st} = 0 & \quad \text{si } s \text{ o } t \text{ es impar} \\ \mu_{20} = \mu_{02} = \mu_2 & \quad \kappa_{20} = \kappa_{02} = \kappa_2 \\ \mu_{40} = \mu_{04} = \mu_4 & \quad \kappa_{40} = \kappa_{04} = \kappa_4 \end{aligned}$$

de modo que

$$M(\xi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \mu_2 & \mu_2 & 0 \\ 0 & \mu_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu_2 & 0 & 0 & 0 \\ \mu_2 & 0 & 0 & \mu_4 & \mu_{22} & 0 \\ \mu_2 & 0 & 0 & \mu_{22} & \mu_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu_{22} \end{pmatrix}, \quad K(\xi) = \begin{pmatrix} \kappa_0 & 0 & 0 & \kappa_2 & \kappa_2 & 0 \\ 0 & \kappa_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_2 & 0 & 0 & 0 \\ \kappa_2 & 0 & 0 & \kappa_4 & \kappa_{22} & 0 \\ \kappa_2 & 0 & 0 & \kappa_{22} & \kappa_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \kappa_{22} \end{pmatrix},$$

y

$$A = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 0 & 1/192 & 1/192 & 0 \\ 0 & 1/192 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/192 & 0 & 0 & 0 \\ 1/192 & 0 & 0 & 1/5120 & 1/9216 & 0 \\ 1/192 & 0 & 0 & 1/9216 & 1/5120 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/9216 \end{pmatrix}.$$

### **$D$ -optimización**

La matriz cuyos autovalores han de obtenerse para el cálculo de la pérdida tiene la forma

$$M^{-1}(\xi)G(\xi) = M^{-1}(\xi)K(\xi) - A^{-1}M(\xi) = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & c & c & 0 \\ 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 & e & f & 0 \\ d & 0 & 0 & f & e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g \end{pmatrix}, \quad (5.35)$$

donde se ha definido

$$\begin{aligned} a &= \theta_1\kappa_0 + \theta_2\kappa_2 + \theta_9 & e &= \theta_3\kappa_2 + \theta_6\kappa_4 + \theta_7\kappa_{22} + \theta_{13} \\ b &= \theta_5\kappa_2 + \theta_{11} & f &= \theta_3\kappa_2 + \theta_7\kappa_4 + \theta_6\kappa_{22} + \theta_{14} \\ c &= \theta_1\kappa_2 + \theta_3(\kappa_4 + \kappa_{22}) + \theta_{10} & g &= \theta_8\kappa_{22} + \theta_{15} \\ d &= \theta_3\kappa_0 + \theta_4\kappa_2 + \theta_{12} \end{aligned},$$

en términos de

$$\begin{aligned} \theta_1 &= \frac{1}{d(\xi)}(\mu_{22} + \mu_4), \quad \theta_2 = \frac{1}{d(\xi)}(-2\mu_2), \quad \theta_3 = \frac{1}{d(\xi)}(-\mu_2), \\ \theta_4 &= \frac{1}{d(\xi)}, \quad \theta_5 = \frac{1}{\mu_2}, \quad \theta_6 = \frac{(\mu_4 - \mu_2^2)}{d(\xi) \cdot c(\xi)}, \quad \theta_7 = \frac{(\mu_2^2 - \mu_{22})}{d(\xi) \cdot c(\xi)}, \quad \theta_8 = \frac{1}{\mu_{22}}, \\ \theta_9 &= 480\mu_2 - 14, \quad \theta_{10} = 240\mu_{22} - 14\mu_2 + 240\mu_4, \quad \theta_{11} = -192\mu_2, \\ \theta_4 &= \frac{1}{d(\xi)}, \quad \theta_{13} = 240\mu_2 - 11520\mu_4, \quad \theta_{14} = 240\mu_2 - 11520\mu_{22}, \end{aligned}$$

$$\theta_{15} = -9216\mu_{22}, \quad d(\xi) = -2\mu_2^2 + \mu_{22} + \mu_4 \text{ y } c(\xi) = \mu_4 - \mu_{22}.$$

Por tanto, las raíces características de  $M^{-1}(\xi)G(\xi)$  son

$$\rho_1(\xi) = b = \alpha_0 + \boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{\kappa}, \text{ raíz doble} \quad (5.36)$$

$$\rho_2(\xi) = g = \beta_0 + \boldsymbol{\beta}'\boldsymbol{\kappa}, \quad (5.37)$$

$$\rho_3(\xi) = e - f = \gamma_0 + \boldsymbol{\gamma}'\boldsymbol{\kappa}, \quad (5.38)$$

$$\begin{aligned} \rho_4(\xi) &= \frac{a + e + f + \sqrt{(e + f - a)^2 + 8cd}}{2} \\ &= \frac{\delta_0 + \boldsymbol{\delta}'\boldsymbol{\kappa} + \sqrt{\omega_0 + \boldsymbol{\omega}'\boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}'C\boldsymbol{\kappa}}}{2}, \end{aligned} \quad (5.39)$$

$$\begin{aligned} \rho_5(\xi) &= \frac{a + e + f - \sqrt{(e + f - a)^2 + 8cd}}{2} \\ &= \frac{\delta_0 + \boldsymbol{\delta}'\boldsymbol{\kappa} - \sqrt{\omega_0 + \boldsymbol{\omega}'\boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}'C\boldsymbol{\kappa}}}{2}, \end{aligned} \quad (5.40)$$

donde

$$\boldsymbol{\kappa} = \begin{pmatrix} \kappa_0 \\ \kappa_2 \\ \kappa_4 \\ \kappa_{22} \end{pmatrix} = \int_{-1/4}^{1/4} \int_{-1/4}^{1/4} \begin{pmatrix} 1 \\ x^2 \\ x^4 \\ x^2y^2 \end{pmatrix} m^2(x, y) dx dy, \quad (5.41)$$

y  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$ ,  $\gamma_0$ ,  $\delta_0$ ,  $\omega_0$ ,  $\boldsymbol{\alpha}_{4 \times 1}$ ,  $\boldsymbol{\beta}_{4 \times 1}$ ,  $\boldsymbol{\gamma}_{4 \times 1}$ ,  $\boldsymbol{\delta}_{4 \times 1}$  y  $C_{4 \times 4}$  únicamente dependen del diseño por medio de  $\mu_2$ ,  $\mu_4$ ,  $\mu_{22}$ . De aquí en adelante se omitirá  $\rho_5(\xi)$  ya que éste es menor que  $\rho_4(\xi)$  y nuestro interés reside en identificar el máximo autovalor para el cálculo de la pérdida. Recapitulando, el objetivo será encontrar la densidad  $m(x, y)$  que minimiza la pérdida (5.10) para  $\max\{\rho_1(\xi), \rho_2(\xi), \rho_3(\xi), \rho_4(\xi)\}$  bajo las condiciones de contorno  $\mu_{st}$ . Las expresiones de las constantes y las matrices anteriores en términos de los  $\theta_i$  son precisamente

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \theta_{11}, \quad \beta_0 = \theta_{15}, \quad \gamma_0 = \theta_{13} - \theta_{14}, \quad \delta_0 = \theta_9 + \theta_{13} + \theta_{14}, \\ \omega_0 &= (\theta_9 + \theta_{13} + \theta_{14})^2 + 8\theta_{10}\theta_{12}, \quad \boldsymbol{\alpha}' = (0 \ \theta_5 \ 0 \ 0), \quad \boldsymbol{\beta}' = (0 \ 0 \ 0 \ \theta_8), \\ \boldsymbol{\gamma}' &= (0 \ 0 \ \theta_6 - \theta_7 \ \theta_7 - \theta_6), \quad \boldsymbol{\delta}' = (\theta_1 \ 2\theta_3 + \theta_2 \ \theta_6 + \theta_7 \ \theta_6 + \theta_7) \\ \boldsymbol{\omega}' &= \begin{pmatrix} -2\theta_1(\theta_9 + \theta_{13} - \theta_9) + 8\theta_3\theta_{10} \\ 2\theta_3(\theta_{13} + \theta_{14} - 2\theta_9) - 2\theta_2(\theta_{13} + \theta_{14} - \theta_9) + 8\theta_1\theta_{12} + 8\theta_4\theta_{10} \\ 2\theta_6\theta_{13} + 2\theta_7\theta_{14} - 2\theta_9(\theta_6 + \theta_7) + 8\theta_3\theta_{12} \\ 2\theta_6\theta_{14} + 2\theta_7\theta_{13} - 2\theta_9(\theta_6 + \theta_7) + 8\theta_3\theta_{12} \end{pmatrix}' \end{aligned}$$

C =

$$\begin{pmatrix} \theta_1^2 & \theta_1(\theta_2+2\theta_3) & 4\theta_3-\theta_1(\theta_6+\theta_7) & 4\theta_3-\theta_1(\theta_6+\theta_7) \\ \theta_1(\theta_2+2\theta_3) & \theta_2^2+2\theta_3^2-4\theta_2\theta_3+8\theta_1\theta_4 & (\theta_3-\theta_2)(\theta_6+\theta_7)+\theta_3\theta_4 & (\theta_3-\theta_2)(\theta_6+\theta_7)+\theta_3\theta_4 \\ 4\theta_3-\theta_1(\theta_6+\theta_7) & (\theta_3-\theta_2)(\theta_6+\theta_7)+\theta_3\theta_4 & \theta_6^2+\theta_7^2 & 2\theta_7\theta_6 \\ 4\theta_3-\theta_1(\theta_6+\theta_7) & (\theta_3-\theta_2)(\theta_6+\theta_7)+\theta_3\theta_4 & 2\theta_7\theta_6 & \theta_6^2+\theta_7^2 \end{pmatrix}.$$

Vamos a definir

$$l_i(\xi) = (1 - \nu) \left( \frac{1 + \frac{\nu}{1-\nu} \cdot \rho_i(\xi)}{\mu_2^2 \cdot \mu_{22} \cdot c(\xi) \cdot d(\xi)} \right)^{1/p},$$

como la pérdida para  $D$ -optimización evaluada en el  $i$ -ésimo autovector. Siguiendo la metodología de la sección 3, el primer planteamiento será analizar la existencia de estrategias puras. Como se podrá comprobar más adelante en la figura 5.15 (a), las estrategias puras fallan de modo que es necesario utilizar la estrategia general de construcción [Dae13] para encontrar la densidad buscada. El problema de minimización de  $l_1(\xi)$  sobre  $\Xi_1$  asumiendo  $\mu_2, \mu_4, \mu_{22}$  constantes es

$$m_1 = \arg \min \rho_1(\xi) = \arg \min \alpha_0 + \boldsymbol{\alpha}' \boldsymbol{\kappa},$$

sujeto a

$$\int_{-1/4}^{1/4} \int_{-1/4}^{1/4} m(x, y) dx dy = 1, \quad \int_{-1/4}^{1/4} \int_{-1/4}^{1/4} x^2 m(x, y) dx dy = \mu_2,$$

$$\int_{-1/4}^{1/4} \int_{-1/4}^{1/4} x^4 m(x, y) dx dy = \mu_4, \quad \int_{-1/4}^{1/4} \int_{-1/4}^{1/4} x^2 y^2 m(x, y) dx dy = \mu_{22}$$

$$\rho_1(\xi) - \rho_2(\xi) - \delta_1 = 0, \quad \rho_1(\xi) - \rho_3(\xi) - \delta_2 = 0, \quad \rho_1(\xi) - \rho_4(\xi) - \delta_3 = 0$$

$\forall m(x, y) \geq 0$  donde  $\delta_1, \delta_2, \delta_3$  son variables de holgura. Utilizando

el método variacional (5.21), se definen

$$\begin{aligned}\rho_1^t(\xi) &= b = \alpha_0 + \boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{\kappa}_t, \\ \rho_2^t(\xi) &= g = \beta_0 + \boldsymbol{\beta}'\boldsymbol{\kappa}_t, \\ \rho_3^t(\xi) &= e - f = \gamma_0 + \boldsymbol{\gamma}'\boldsymbol{\kappa}_t, \\ \rho_4^t(\xi) &= \frac{a + e + f + \sqrt{(e + f - a)^2 + 8cd}}{2} \\ &= \frac{\delta_0 + \boldsymbol{\delta}'\boldsymbol{\kappa}_t + \sqrt{\omega_0 + \boldsymbol{\omega}'\boldsymbol{\kappa}_t + \boldsymbol{\kappa}_t' C \boldsymbol{\kappa}_t}}{2},\end{aligned}$$

siendo

$$\boldsymbol{\kappa}_t = \begin{pmatrix} \kappa_0^t \\ \kappa_2^t \\ \kappa_4^t \\ \kappa_{22}^t \end{pmatrix} = \int_{-1/4}^{1/4} \int_{-1/4}^{1/4} \begin{pmatrix} 1 \\ x^2 \\ x^4 \\ x^2 y^2 \end{pmatrix} m_t^2(x, y) dx dy.$$

Será suficiente, por tanto, con encontrar el diseño  $\xi_1$  para el que

$$\begin{aligned}\Phi(t; \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5, \lambda_6, \lambda_7) &= \\ &= \int_{-1/4}^{1/4} \int_{-1/4}^{1/4} \left\{ \begin{array}{l} \rho_1^t(\xi) - 2\lambda_1 m_t(x, y) - 2\lambda_2 x^2 m_t(x, y) - 2\lambda_3 x^4 m(x, y) \\ - 2\lambda_4 x^2 y^2 m_t(x, y) - 2\lambda_5 [\rho_1^t(\xi) - \rho_2^t(\xi)] \\ - 2\lambda_6 [\rho_1^t(\xi) - \rho_3^t(\xi)] - 2\lambda_7 [\rho_1^t(\xi) - \rho_4^t(\xi)] \end{array} \right\} dx dy\end{aligned}$$

sea minimizado en  $t = 0$ , considerando cualquier diseño absolutamente continuo  $\xi_{(t)}$  satisfaciendo las condiciones de contorno. Un razonamiento análogo al utilizado en la sección 3 muestra que la condición de primer orden evaluada en  $t = 0$  resulta

$$\begin{aligned}0 \leq \Phi'(0; \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5, \lambda_6, \lambda_7) &= \\ &= 2 \int_{-1/4}^{1/4} \int_{-1/4}^{1/4} \left\{ \begin{array}{l} \{e_1 + f_1(x^2 + y^2) + g_1(x^4 + y^4) + h_1 x^2 y^2\} m_1(x, y) - \\ \{a_1 + b_1(x^2 + y^2) + c_1(x^4 + y^4) + d_1 x^2 y^2\} \cdot (m_1(x, y) - m(x, y)) \end{array} \right\} dx dy\end{aligned}$$

para todo  $m(\cdot)$ , donde en términos de

$$\begin{aligned} K_1 &= c_{11}\kappa_0 + c_{21}\kappa_2 + c_{31}\kappa_4 + c_{41}\kappa_{22}, \\ K_2 &= c_{21}\kappa_0 + c_{22}\kappa_2 + c_{32}\kappa_4 + c_{42}\kappa_{22}, \\ K_3 &= c_{31}\kappa_0 + c_{32}\kappa_2 + c_{33}\kappa_4 + c_{43}\kappa_{22}, \\ K_4 &= c_{41}\kappa_0 + c_{42}\kappa_2 + c_{43}\kappa_4 + c_{44}\kappa_{22}, \\ K &= \omega_0 + \boldsymbol{\omega}'\boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}'\mathbf{C}\boldsymbol{\kappa}, \end{aligned}$$

todos ellos evaluados en  $\xi_1$ , se ha definido

$$a_1 = \lambda_1, \quad b_1 = \frac{\lambda_2}{2}, \quad c_1 = \frac{\lambda_3}{2}, \quad d_1 = \lambda_4$$

y

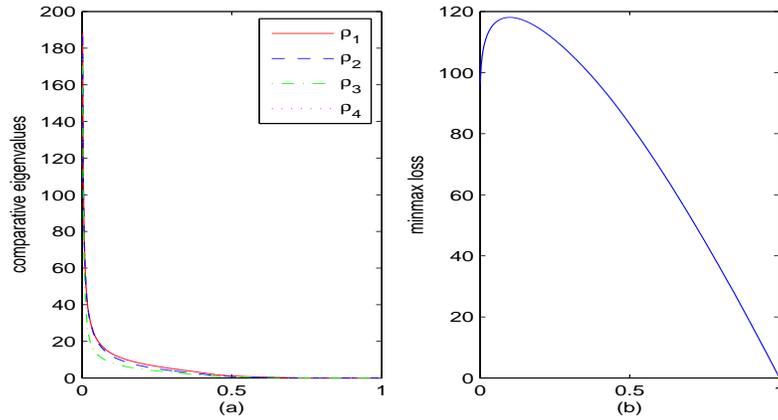
$$\begin{aligned} e_1 &= \frac{\lambda_7}{2} \left[ \theta_1 + \frac{1}{2\sqrt{K}} (\omega_1 + 2K_1) \right], \\ f_1 &= \frac{\theta_5}{2} (1 - \lambda_5 - \lambda_6 - \lambda_7) + \frac{\lambda_7}{4} \left[ 2\theta_3 + \theta_2 + \frac{1}{2\sqrt{K}} (\omega_2 + 2K_2) \right], \\ g_1 &= \frac{\lambda_6}{2} (\theta_6 - \theta_7) + \frac{\lambda_7}{4} \left[ \theta_6 + \theta_7 + \frac{1}{2\sqrt{K}} (\omega_3 + 2K_3) \right], \\ h_1 &= \lambda_5\theta_8 + \lambda_6(\theta_6 - \theta_7) + \frac{\lambda_7}{2} \left[ \theta_6 + \theta_7 + \frac{1}{2\sqrt{K}} (\omega_4 + 2K_4) \right]. \end{aligned}$$

Por tanto, la densidad minimizante buscada  $m_1(x, y)$  es de la forma

$$m_1(x, y) = \left( \frac{a_1 + b_1(x^2 + y^2) + c_1(x^4 + y^4) + d_1x^2y^2}{e_1 + f_1(x^2 + y^2) + g_1(x^4 + y^4) + h_1x^2y^2} \right)^+, \quad (5.42)$$

donde el signo  $+$  denota la parte positiva de la función, garantizando con esto que la densidad sea no negativa. La expresión (5.42) está sobreparametrizada, de modo que dividiendo entre cualquier constante no nula es posible evitar un parámetro. Por ejemplo, supongamos  $f_1 \neq 0$  obteniendo así la densidad

$$m(x, y; \boldsymbol{\omega}) = \left( \frac{a + b(x^2 + y^2) + c(x^4 + y^4) + dx^2y^2}{e + (x^2 + y^2) + f(x^4 + y^4) + gx^2y^2} \right)^+, \quad (5.43)$$



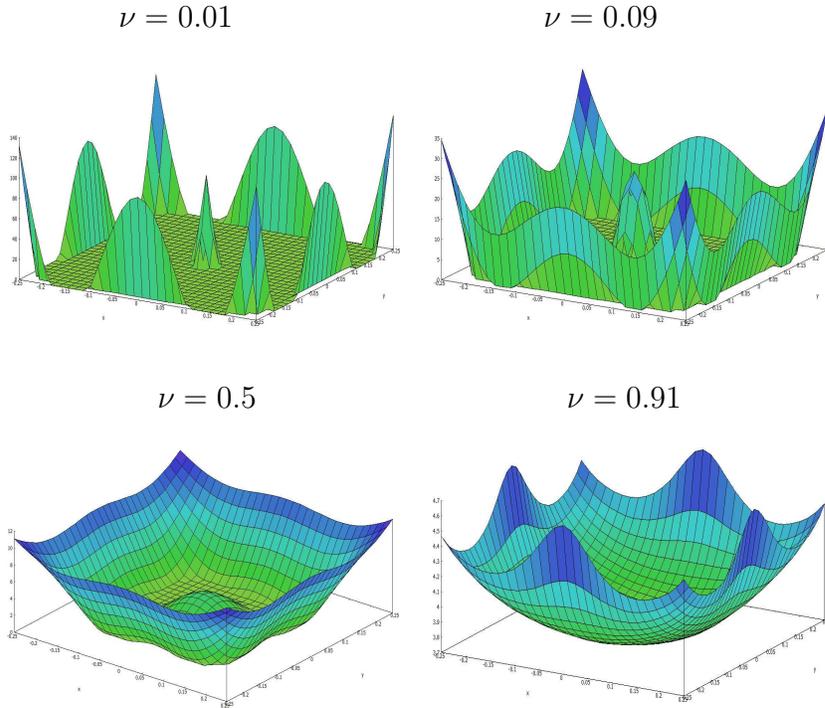
**Figura 5.15:** Diseños  $D$ -óptimos robustos simétricos y parcialmente intercambiables  $\xi_*$ . (a) Autovalores  $(\rho_1(\xi_*), \rho_2(\xi_*), \rho_3(\xi_*), \rho_4(\xi_*))$  vs.  $\nu$ ; (b) Valor de la pérdida  $l(\xi_*)$ ;

donde se ha definido  $\omega = (a, b, c, d, e, f, g)$ . Repitiendo el mismo procedimiento para resolver el problema de minimización de cada  $l_i(\xi)$  sobre  $\Xi_i$ ,  $i = 2, 3, 4$ , se tiene que la densidad es también de la forma (5.43). Luego únicamente debemos centrar la atención en la subclase de diseños  $\Xi''$  con densidades de esta forma y determinar numéricamente el vector de constantes  $\omega^*$  de manera similar al método utilizado para mezclas binarias.

La figura 5.15 (a) muestra que todos los autovalores evaluados en el óptimo toman valores muy próximos en todo el rango de  $\nu$ , lo cual implica el fallo de las estrategias puras. Por otro lado, el valor de la pérdida se reduce cuando el sesgo se enfatiza tal y como puede observarse en (b). Este comportamiento se observó en todos los ejemplos anteriores y se debe a la definición de (5.10).

Las gráficas de la figura 5.16 corresponden a las densidades minimizantes para para varios ejemplos de  $\nu$ . En los casos en los que se da mayor importancia a la varianza, las densidades ponen más observaciones sobre los extremos, puntos medios y centro de la región

de diseño  $T(\mathcal{S}_{SPE}^2)$ ; mientras que el reparto de observaciones es uniforme prácticamente cuando se considera el sesgo (obsérvese que la densidad para  $\nu = 0.91$  oscila entre 3.9 y 4.7). La tabla 5.5 contiene los valores de las constantes que se obtuvieron numéricamente para obtener las densidades óptimas de la figura 5.16. El código QR de la figura 5.17 muestra una animación gráfica de la evolución de la densidad óptima a medida que aumenta  $\nu$ .



**Figura 5.16:** Diseños  $D$ -óptimos robustos simétricos y parcialmente intercambiables para varios ejemplos de  $\nu$  sobre  $T(\mathcal{S}_{SPE}^2)$ .

Los experimentadores requieren llevar a cabo los ensayos en un número finito de pruebas. Por tanto, es necesario proporcionar un diseño discreto a partir de las densidades continuas obtenidas. Para este propósito, se ha utilizado el método propuesto por Heo et al.

$\nu$	a	b	c	d	e	f	g
0.01	0.02548	-844.1	1.384e+004	3642	0.000264	1.342	10.24
0.09	0.03333	-86.9	1665	634.3	0.001365	0.4431	0.4418
0.5	0.01074	-3.863	199.2	98.86	0.001426	0.8618	0.7193
0.91	0.000244	2.497	936.6	15.05	0.0001026	193.7	2.155

**Tabla 5.5:** Valor de las constantes que generan las densidades (5.43) y se muestran en la figura 5.16.



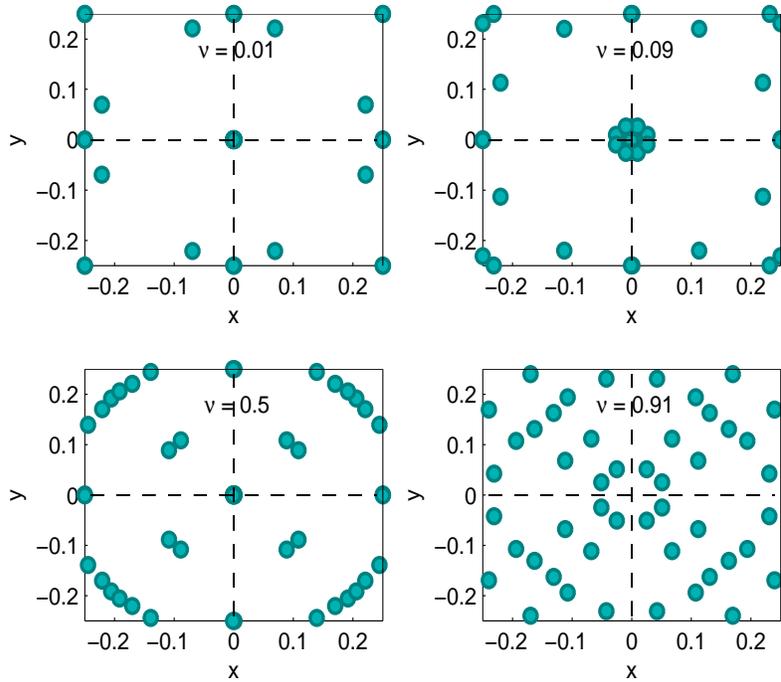
**Figura 5.17:** Evolución de la densidad  $D$ -óptimo robusta simétrica y parcialmente intercambiable sobre  $T(\mathcal{S}_{SPE}^2)$ ,  $m(x, y; \omega^*)$ , a medida que  $\nu$  aumenta.

[GH01] que consiste en minimizar las diferencias entre momentos empíricos y teóricos (derivados de las densidades obtenidas) hasta un orden suficientemente alto. Se calcularon diseños de  $n = 48$  puntos de modo que únicamente fue necesario calcular  $n_0 = n/8$  puntos sobre  $(x, y) \in \{0 \leq x \leq y \leq 0.25\}$  ya que el resto pueden deducirse por simetría e intercambiabilidad parcial. El problema de minimización

$$\sum_{j=1}^J \sum_{k=0}^j (e_{2j,2k} - E_{\xi_*}[X^{2j}Y^{2k}])^2, \quad (5.44)$$

fue llevado a cabo utilizando una potente rutina de minimización no lineal con restricciones lineales en  $\mathbb{R}$ , donde se ha denotado por  $e_{2j,2k} = \sum_{i=1}^{n_0} (x_i^{2j} y_i^{2k} + x_i^{2k} y_i^{2j}) / 2n_0$  al  $j, k$ -ésimo momento empírico y  $J$  corresponde al menor entero que hace que  $J(J+3)/2$  exceda el número de coordenadas a calcular  $2n_0$ . El problema así planteado ( $n = 48$ ,  $n_0 = 6$  y  $J = 4$ ) minimizará las discrepancias entre 14 momentos de orden par. La ecuación (5.44) obliga a eliminar los

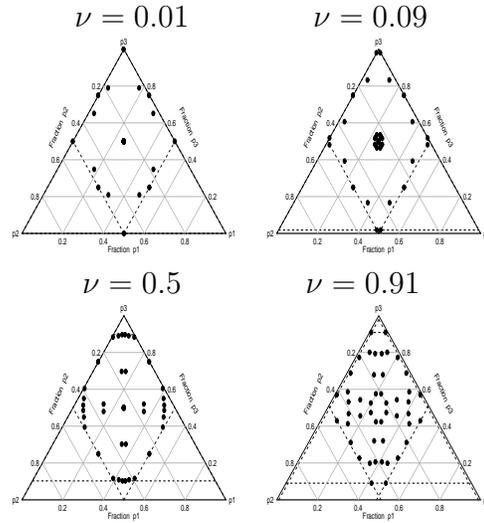
momentos con al menos uno de órdenes impar ya que éstos deben ser cero como consecuencia de la simetría e intercambiabilidad parcial. Los diseños discretos obtenidos mediante este procedimiento se muestran en la figura 5.18. Sin embargo, recuérdese que ésta es la solución del problema bidimensional trasladado. Los diseños óptimos solución del problema original se presentan en la figura 5.19.



**Figura 5.18:** Diseños discretos que aproximan las densidades continuas de la figura 5.16 sobre  $T(\mathcal{S}_{SPE}^2)$ .

### I-optimización

En este apartado se razonará análogamente al procedimiento anterior para la construcción de los diseños  $I$ -óptimos. La matriz cuyos



**Figura 5.19:** Diseños discretos mostrados en la figura 5.18 sobre el simplex.

autovalores han de determinarse para la pérdida (5.11) es de nuevo una matriz dispersa de la forma

$$K(\xi)H^{-1}(\xi) = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & c & c & 0 \\ 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 & e & f & 0 \\ d & 0 & 0 & f & e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g \end{pmatrix}, \quad (5.45)$$

donde se han definido

$$\begin{aligned} a &= \theta_1\kappa_0 + \theta_2\kappa_2 & e &= \theta_6\kappa_2 + \theta_7\kappa_4 + \theta_8\kappa_{22} \\ b &= \theta_5\kappa_2 & f &= \theta_6\kappa_2 + \theta_8\kappa_4 + \theta_7\kappa_{22} \\ c &= \theta_3\kappa_0 + \theta_4\kappa_2 & g &= \theta_9\kappa_{22} \\ d &= \theta_1\kappa_2 + \theta_3(\kappa_4 + \kappa_{22}) \end{aligned},$$

siendo, como antes,  $\theta_1, \dots, \theta_9$  funciones no lineales de  $\mu_2$ ,  $\mu_4$  y  $\mu_{22}$ . Las expresiones algebraicas de los autovalores tienen la forma (1.36)-

(1.40) y  $\rho_5(\xi)$  puede ser eliminado siguiendo el mismo argumento que para  $D$ -optimización. Las expresiones de  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$  y  $C$  correspondientes son

$$\alpha' = (0 \ \theta_5 \ 0 \ 0), \quad \beta' = (0 \ 0 \ 0 \ \theta_9), \quad \gamma' = (0 \ 0 \ \theta_7 - \theta_8 \ \theta_8 - \theta_7)$$

$$\delta' = (\theta_1 \ \theta_2 + 2\theta_6 \ \theta_7 + \theta_8 \ \theta_7 + \theta_8)$$

y  $C =$

$$\begin{pmatrix} \theta_1^2 & \theta_1(4\theta_3 - 2\theta_6 + \theta_2) & 4\theta_3^2 - \theta_1(\theta_7 + \theta_8) & 4\theta_3^2 - \theta_1(\theta_7 + \theta_8) \\ \theta_1(4\theta_3 - 2\theta_6 + \theta_2) & (2\theta_6 - \theta_2)^2 + 8\theta_1\theta_4 & 4\theta_3\theta_4 + (2\theta_6 - \theta_2)(\theta_7 + \theta_8) & 4\theta_3\theta_4 + (2\theta_6 - \theta_2)(\theta_7 + \theta_8) \\ 4\theta_3^2 - \theta_1(\theta_7 + \theta_8) & 4\theta_3\theta_4 + (2\theta_6 - \theta_2)(\theta_7 + \theta_8) & (\theta_7 + \theta_8)^2 & (\theta_7 + \theta_8)^2 \\ 4\theta_3^2 - \theta_1(\theta_7 + \theta_8) & 4\theta_3\theta_4 + (2\theta_6 - \theta_2)(\theta_7 + \theta_8) & (\theta_7 + \theta_8)^2 & (\theta_7 + \theta_8)^2 \end{pmatrix}$$

Sea

$$tr(\xi) = \frac{1}{96\mu_2} + \frac{1}{9216\mu_{22}} - \frac{5\mu_{22} - 9\mu_4 - 240\mu_2\mu_{22} + 240\mu_2\mu_4 + 4\mu_2^2}{23040(2\mu_2^2\mu_{22} - 2\mu_2^2\mu_4 - \mu_{22}^2 + \mu_4^2)} + \frac{24\mu_{22} - \mu_2 + 24\mu_4}{96(-2\mu_2^2 + \mu_{22} + \mu_4)}$$

el primer sumando de (5.11),  $Tr(AM^{-1}(\xi))$ . Vamos a denotar a la pérdida para  $I$ -optimización evaluada en el  $i$ -ésimo autovalor como

$$l_i(\xi) = (1 - \nu)tr(\xi) + \nu\rho_i(\xi).$$

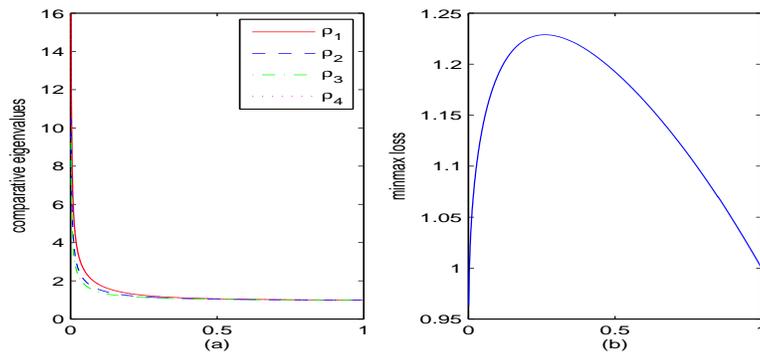
Las estrategias puras fallan de nuevo (ver figura 5.20 (a)), de modo que se utilizará la estrategia general de construcción para alcanzar los diseños óptimos. Resolviendo el problema de minimización de cada  $l_i(\xi)$  sobre  $\Xi_i$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$ , se tiene que la densidad minimizante buscada es de la forma

$$m(x, y; \omega) = \left( \frac{a + b(x^2 + y^2) + c(x^4 + y^4) + dx^2y^2}{e + (x^2 + y^2) + f(x^4 + y^4) + gx^2y^2} \right)^+. \quad (5.46)$$

La determinación de las constantes  $\omega^* = (a^*, b^*, c^*, d^*, e^*, f^*, g^*)$  fue llevada a cabo numéricamente como en casos anteriores.

La figura 5.20 (a) revela que los autovalores  $\rho_1$  y  $\rho_4$  toman valores idénticos para  $\nu \in [0, 0.16]$  y éste es precisamente el máximo. Sin embargo, a partir de 0.16 todos los autovalores se confunden impidiendo así que se haga efectiva alguna estrategia pura. En (b) se

muestra el valor de la  $I$ -pérdida para los diseños óptimos. Las densidades minimizantes obtenidas para varios ejemplos de  $\nu$  se recogen en las gráficas de la figura 5.21, donde se observa comportamientos similares a  $D$ -optimización. Aunque en este último se detecta que pone más densidad en el centro de la región de diseño para el caso “casi clásico” comparando con las densidades  $I$ -óptimas. La tabla 5.6 recoge el valor de las constantes que dan como resultado las densidades que se muestran en la figura 5.21. El código QR de la figura 5.22 muestra una animación gráfica de la evolución de la densidad óptima a medida que aumenta  $\nu$ .

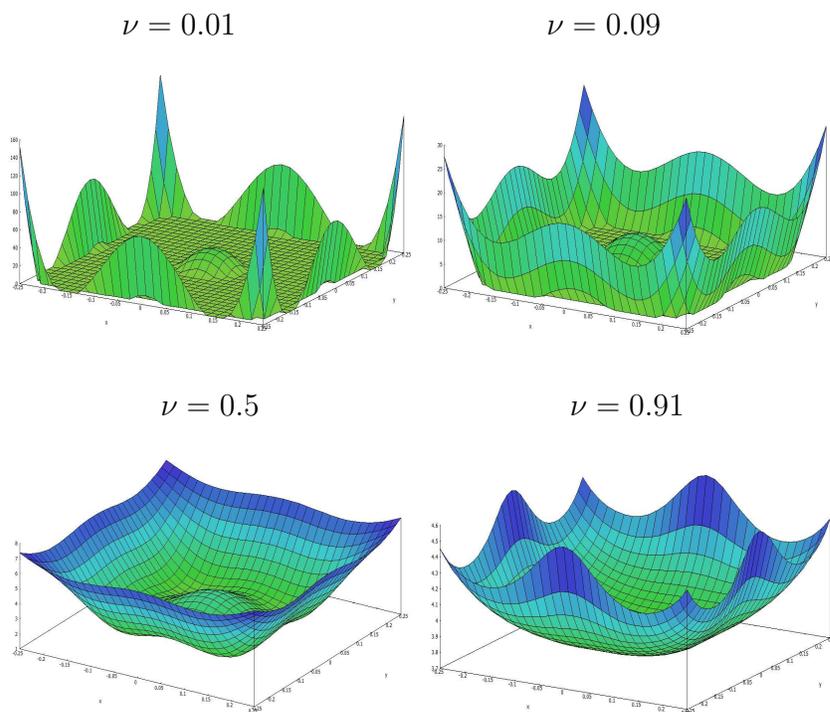


**Figura 5.20:** Diseños  $I$ -óptimos robustos simétricos y parcialmente intercambiables  $\xi_*$ . (a) Autovalores  $(\rho_1(\xi_*), \rho_2(\xi_*), \rho_3(\xi_*), \rho_4(\xi_*))$  vs.  $\nu$ ; (b) Valor de la pérdida  $l(\xi_*)$ ;

$\nu$	a	b	c	d	e	f	g
0.01	0.198	-261.9	4593	1143	0.008414	2.559	0.9489
0.09	0.1027	-27.14	635	258.8	0.01119	1.643	1.637
0.5	0.003344	1.393	70.15	37.34	0.0006148	0.2523	0.6074
0.91	0.0005823	3.258	387	10.09	0.0001929	82.44	0.8351

**Tabla 5.6:** Valor de las constantes que generan las densidades (5.46) y se muestran en la figura 5.21.

Al igual que en el caso anterior, debemos proporcionar un diseño



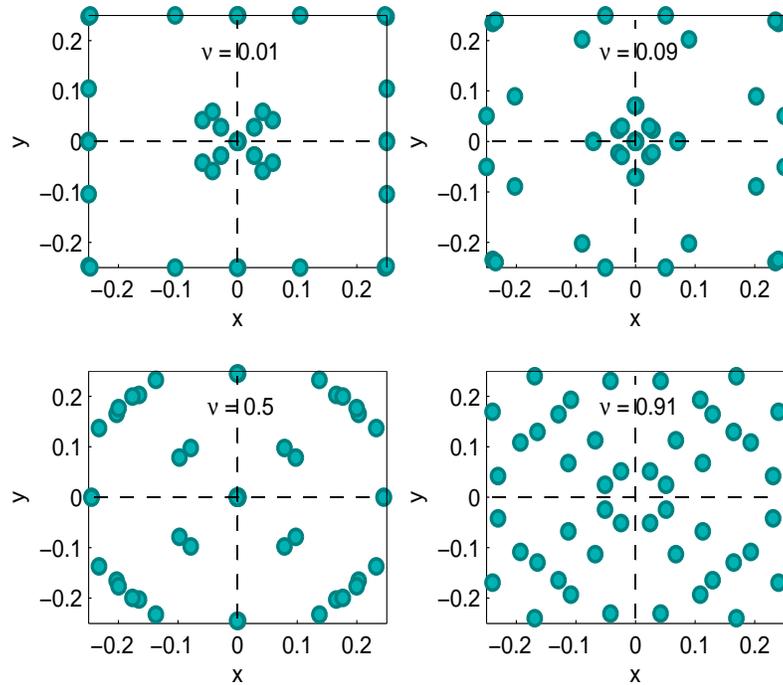
**Figura 5.21:** Diseños  $I$ -óptimos robustos simétricos y parcialmente intercambiables para varios ejemplos de  $\nu$  sobre  $T(\mathcal{S}_{SPE}^2)$ .



**Figura 5.22:** Evolución de la densidad  $I$ -óptimo robusta simétrica y parcialmente intercambiable sobre  $T(\mathcal{S}_{SPE}^2)$ ,  $m(x, y; \omega^*)$ , a medida que  $\nu$  aumenta.

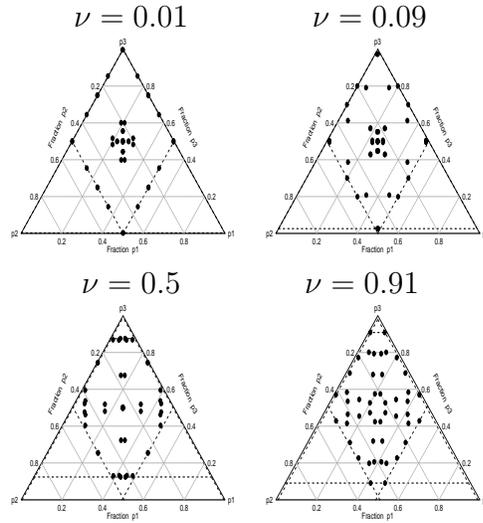
discreto a los experimentadores para poder llevar a cabo sus ensa-

ynos. Siguiendo el mismo esquema que para  $D$ -optimización resultaron los diseños que se muestran en la figura 5.23. Sin embargo, nuestro interés reside en obtener un diseño solución en el espacio original de proporciones. De modo que, realizando las operaciones oportunas, se obtienen los diseños sobre el simplex que se muestran en la figura 5.24.



**Figura 5.23:** Diseños discretos que aproximan las densidades continuas de la figura 5.16 sobre  $T(\mathcal{S}_{SPE}^2)$ .

La tabla 5.7 recoge las pérdidas de los diseños obtenidos tras la discretización de la solución continua. Como puede observarse, la calidad de estos diseños es significativamente inferior a los diseños obtenidos con AG, al tratarse de diseños definidos sobre una subregión del simplex. Concluimos, por tanto, que el método numérico propuesto en este trabajo proporciona para mezclas ternarias



**Figura 5.24:** Diseños discretos mostrados en la figura 5.18 sobre el simplex.

los mejores resultados a pesar de no obtener con éste un resultado analítico.

	$D$ -DORSPI	$I$ -DORSPI
$\nu$	minloss	minloss
0.01	136.73	4.62
0.09	131.33	5.09
0.5	73.02	3.30
0.91	18.36	1.57

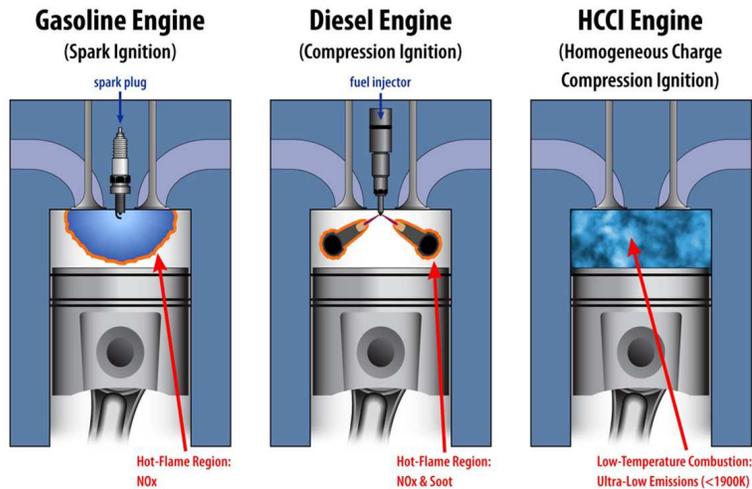
**Tabla 5.7:** Valor de la  $D$ - e  $I$ -pérdida de los diseños que se muestran en las figuras 5.19 y 5.24 respectivamente.

## 5.5. Un ejemplo real

La industria automotriz es uno de los sectores económicos más importantes a nivel mundial por el volumen de ingresos que genera. Son muchos los institutos de investigación y empresas privadas que invierten grandes cantidades de dinero en diseñar y desarrollar motores con mejores prestaciones. Los motores HCCI (*Homogeneous Charge Compression Ignition*) son precisamente un ejemplo de ello. Aunque es aún un concepto muy joven de combustión interna, parece que tras su desarrollo se obtendrán resultados muy prometedores para el futuro de este sector.

Los motores de gasolina tienen problemas de rendimiento a carga parcial. Para conseguir una mezcla homogénea de aire y combustible en la cámara, este tipo de motor utiliza una válvula de mariposa que estrangula la entrada de aire de modo que entrará menor cantidad de aire cuando se inyecta menos combustible, produciendo pérdidas y aumentando el trabajo de renovación de la carga. Esta situación aleja a los motores de gasolina convencionales en cuanto a los diésel en consumo. Aunque el problema anterior se corrige fácilmente en los motores diésel mediante la inyección directa en el cilindro, este sistema también conlleva varios inconvenientes. El más relevante es el escape de gases contaminantes. El motor HCCI surge como una combinación de los motores convencionales de gasolina y diésel para suplir estas necesidades. La mezcla de aire y combustible se realiza fuera de la cámara de combustión como en los motores de gasolina de inyección directa, pero no se enciende por una chispa sino que se autoinflama por compresión como en los motores de ciclo diésel (ver figura 5.25). Su rendimiento a carga media-baja es mucho mayor que el de un motor de gasolina y su emisión de óxidos de nitrógeno ( $NO_x$ ) y partículas de hollín es mucho menor que el diésel, lo cual está en perfecta consonancia con las reglamentaciones más exigentes acerca de emisiones contaminantes.

Aunque ningún motor HCCI ha sido producido a escala comercial, numerosas empresas multinacionales han desarrollado prototipos de éste. Algunos de los más destacados son el 2.2 Ecotec modificado



**Figura 5.25:** Comparación del sistema de autoencendido en motores convencionales de gasolina y diésel y el nuevo motor HCCI (fuente <http://cheme.scripts.mit.edu/green-group/hcci-engines/>)

instalado en el Opel Vectra y Saturn Aura por la General Motors (2007-2009), el DiesOtto de Mercedes-Benz, los CCS (*Combined Combustion System*) y GCI (*Gasoline Compression Ignition*) de Volkswagen, el GDCI de Hyundai (*Gasoline Direct Injection Compression Ignition*) y el SkyActiv-G Generation 2 de Mazda.

El principal problema que ha frenado el lanzamiento de estos motores en salones del automóvil es controlar con precisión el momento del autoencendido. A diferencia de los motores tradicionales en los que se controla mediante fenómenos físicos, en los motores HCCI son procesos que dependen principalmente de la cinética química del combustible. Ésta es extremadamente sensible a la composición de la carga así como otros procesos difíciles de controlar como, por ejemplo, la evolución de presión y temperatura durante la carrera de compresión. Por esta razón, las investigaciones se dirigen a encontrar la formulación óptima del combustible de sustitución para

realizar los ensayos. Se emplean complejos modelos informáticos de mecánica de fluidos y cinética química y posteriormente los resultados se contrastan con experimentos en motores.

Este trabajo persigue, por tanto, proponer un combustible de sustitución para la simulación del autoencendido del combustible diésel en condiciones HCCI que mejore las capacidades predictivas de los combustibles de sustitución más utilizados en la actualidad. Esta idea fue investigada en la tesis de J. Sanz Argent [Arg10] desde un punto de vista experimental. En este trabajo proponemos una nueva metodología basada en diseño óptimo de experimentos incorporando la robustez del modelo para la determinación de la composición óptima.

Los combustibles comerciales más utilizados en automoción (gasolina y diésel) están formados por miles de especies, de modo que no es factible encontrar un mecanismo cinético-químico que describa los procesos de oxidación de cada especie y sus interacciones. Por esta razón, en las simulaciones se utilizan combustibles sustitutos formados por pocas especies para reproducir alguna de las propiedades del combustible comercial, siendo la elección de un combustible sustituto función tanto del mecanismo al que sustituye como de la propiedad que debe mimetizar. La elección de las sustancias que formarán el combustible de sustitución debe seguir los siguientes criterios: simplicidad, debe contener el mínimo número de especies; disponibilidad, debe tener un mecanismo cinético de oxidación validado; afinidad, debe representar a las principales familias de hidrocarburos; semejanza, debe simular adecuadamente las características de autoencendido. Las principales familias presentes en la composición de combustible diésel son las parafinas (alcanos), los aromáticos y los naftenos (cicloalcanos) de modo que siguiendo el criterio de afinidad debería existir un representante de cada familia. En este trabajo utilizaremos como representantes de cada familia el *n-heptano*, *tolueno* y el *ciclohexano* respectivamente, siguiendo a [Arg10] que se apoyan fundamentalmente en el criterio de disponibilidad para esta elección. Para establecer de forma más precisa el criterio de semejanza, es necesario definir el autoen-

cendido. Sabiendo que la combustión de este tipo de compuestos siguen un proceso de oxidación en dos etapas, se define el autoencendido como el instante en que se ha liberado el 10% del calor total correspondiente a la combustión principal, es decir, después de las llamas frías. Los datos útiles para determinar la composición óptima del combustible de sustitución se recogen a través de un mecanismo complejo que consiste en comparar valores de tiempo de autoencendido mediante un proceso experimental, utilizando un motor monocilíndrico alimentado con combustible diésel, y modelado, utilizando el código comercial de modelado cinético químico CHEMKIN [RK04] que depende del mecanismo de sustitución. Para cada composición candidata se han calculado los valores experimentales y modelados en  $N$  condiciones de operación diferentes (grado de la carga, tasa de EGR, avance de la inyección y régimen de giro) puesto que el autoencendido no sólo es sensible a la composición del combustible sino también a otros factores difíciles de controlar. Así, cada valor útil, se calcula siguiendo la fórmula

$$\text{MSE} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (AIC_{i_{exp}} - AIC_{i_{mod}})^2}{N}},$$

donde  $AIC_{i_{exp}}$  y  $AIC_{i_{mod}}$  son los ángulos de inicio de la combustión experimentales y modelados respectivamente obtenidos en el  $i$ -ésimo ensayo, medidos en  $CAD$  (*crank angle degrees*, grados de giro de cigüeñal) y definidos respecto al  $PMS$  (punto muerto superior). El combustible de sustitución que presente un menor valor de MSE será el que mejor cumpla el criterio de semejanza.

En la tesis de J. Sanz [Arg10] se utilizaron mecanismos candidatos a partir de los correspondientes compuestos individuales desarrollados por tres grupos de investigación (Lawrence Livermore National Laboratory, Nancy y CRECK del Politécnico de Milán) ya que éstos cuentan con un mecanismo cinético validado para los naftenos y han desarrollado mecanismos de oxidación para el n-heptano y el tolueno. Los mecanismos utilizados fueron de dos tipos: de dos especies, n-heptano y tolueno, y de tres especies, añadiendo el ciclohexano. La metodología empleada para determinar la composición

óptima fue diferente dependiendo del número de especies. Para mezclas binarias se asume que existe un mínimo absoluto que se calcula mediante un método de descenso, variando los porcentajes máxicos de las dos especies y calculando el MSE para cada candidato. En el caso de tres ingredientes, el objetivo será ajustar el MSE a través de un modelo de regresión polinómico y, a partir de éste, calcular mediante métodos numéricos la composición que minimice la superficie respuesta. Ambas metodologías presentan varios inconvenientes. No está probado que la relación que sigue el MSE sea diferenciable, de modo que un método de descenso podría proporcionar resultados incorrectos. Por otro lado, se desconoce la adecuación de un modelo polinómico en el caso de tres ingredientes y el criterio con el que se seleccionaron las mezclas para ajustar el modelo. Además, los resultados presentados en [Arg10] llevan a discusión. Las composiciones óptimas alcanzadas con valores más bajos del MSE son precisamente en las que se emplean las tres especies (ver tabla 4.5, p.101) y, sin embargo, optan por elegir la binaria (50 % n-heptano, 50 % tolueno) apelando al criterio de simplicidad y justificando que no reproduce adecuadamente la combustión principal para determinadas condiciones de funcionamiento (lo cual también ocurre con la mezcla seleccionada, ver figuras 4.6 y 4.7, p.104-105). Esto indica que los métodos empleados por los experimentadores no fueron adecuados para alcanzar el óptimo. Para superar estos inconvenientes se propone un nuevo enfoque del problema, basado en la metodología desarrollada en el apartado anterior.

El nuevo planteamiento parte considerando mezclas de tres ingredientes puesto que las mezclas binarias, en caso de ser las óptimas, son un caso particular de las compuestas de tres especies. Se consideró un modelo polinómico de Scheffé para explicar el MSE por varios motivos. El primero de ellos es que los experimentadores utilizaron un modelo de regresión polinómico para el caso de tres especies. Por otro lado, no se conoce ninguna peculiaridad en el comportamiento de la respuesta de este fenómeno, de modo que, siguiendo las directrices del apartado 3.3.9, los modelos polinómicos resultan ser los más versátiles para todo tipo de situaciones. En

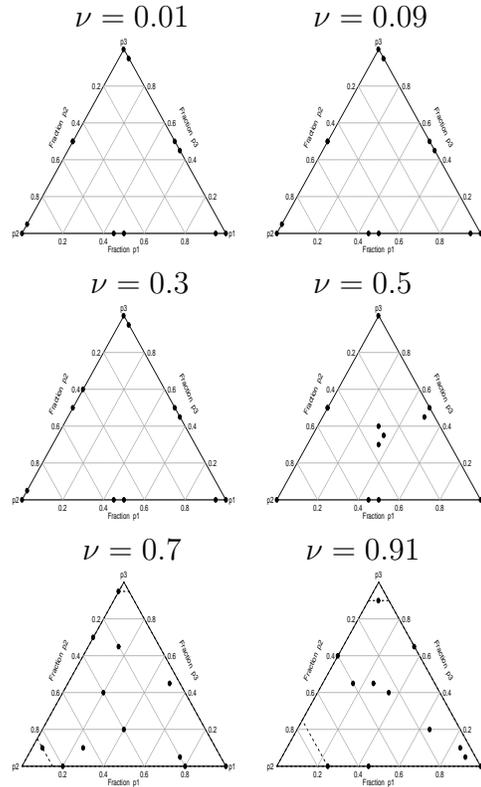
cuanto al grado del polinomio, se consideró un modelo cuadrático por sus buenas propiedades en relación al número de parámetros e interpretabilidad de los mismos siguiendo también el apartado 3.3.9:

$$\eta(\mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}) = \theta_0 + \theta_1 p_1 + \theta_2 p_2 + \theta_{11} p_1^2 + \theta_{22} p_2^2 + \theta_{12} p_1 p_2, \quad (5.47)$$

donde  $p_1$  representa al n-heptano,  $p_2$  al tolueno y  $p_3$ , implícitamente determinado por la relación  $p_3 = 1 - p_1 - p_2$ , al ciclohexano. Las técnicas DOE están justificadas en este estudio ya que permiten optimizar el número de recursos materiales y económicos (ensayos y tiempo de cálculo) y, además, garantizan una buena estimación de la respuesta. Por esta razón, se ha elegido el criterio de  $D$ -optimalidad, pues el fin último es alcanzar un buen ajuste del MSE. La inclusión de la robustez en el problema aporta principalmente dos importantes ventajas: por un lado, tenemos protección frente al desconocimiento del modelo asumido, y por otro, recogemos las perturbaciones que podrían producirse en la respuesta provocadas por cambios en las condiciones de operación del motor. Recuérdese que se trata de un fenómeno complejo, en el que intervienen otros factores no controlables que afectan al autoencendido.

Utilizando el algoritmo genético proporcionado en este trabajo, se calcularon los diseños  $D$ -óptimos robustos de 12 puntos para diferentes valores de  $\nu$  (ver figura 5.26). Obsérvese que se ha obtenido un diseño  $\{3, 2\}$ -simplex lattice para  $\nu = 0.01, 0.09, 0.3$  y un  $\{3, 3\}$ -simplex centroid para  $\nu = 0.5$ . Todos los diseños se propusieron a los experimentadores, debiendo elegir éstos en función de la certeza que tengan sobre la adecuación del modelo. Los valores de las pérdidas de los diseños calculados así como el número de generaciones necesarias para alcanzarlos se muestran en la tabla (5.8).

Como se ha comentado anteriormente, una práctica habitual en los experimentadores es recurrir a diseños estándar para llevar a cabo sus ensayos. Los diseños más utilizados en la literatura para el modelo de Scheffé de segundo orden son el  $\{3, 2\}$ -simplex lattice y



**Figura 5.26:** Diseños  $D$ -óptimos robustos de 12 puntos propuestos a los experimentadores.

el  $\{3, 3\}$ -simplex centroid. Para mostrar la importancia de la elección del diseño cuando el sesgo aparece en los experimentos, se han calculado las eficiencias de estos diseños estándar en distintos casos en los que el sesgo cobra mayor fuerza. Por ejemplo, considerando  $\nu = 0.7$  un diseño  $\{3, 2\}$ -simplex lattice es 40% eficiente frente al propuesto en este trabajo, mientras que un  $\{3, 3\}$ -simplex centroid sería 25% eficiente. Para el caso más extremo ( $\nu = 0.91$ ), las eficiencias son aún más bajas, siendo un 28% la del  $\{3, 2\}$ -simplex lattice y un 20% la del  $\{3, 3\}$ -simplex centroid.

$\nu$	n° it	minloss
0.01	2567	25.42
0.09	2331	23.22
0.3	2300	17.49
0.5	1771	11.3
0.7	1803	1.99
0.91	1161	0.6782

**Tabla 5.8:** Valor de la pérdida y número de iteraciones de los diseños propuestos a los experimentadores.

Puesto que sólo disponemos de valores de la respuesta (MSE) para el diseño  $\{3, 2\}$ –simplex lattice, vamos a ajustar el modelo de Scheffé de segundo orden para este diseño replicado utilizando el método clásico de mínimos cuadrados. Los valores de MSE vienen dados por la siguiente expresión

$$\eta(p_1, p_2) = 38.04 + 80.97p_1 + 66.64p_2 + 46.51p_1^2 + 54.55p_2^2 + 53.73p_1p_2 \quad (5.48)$$

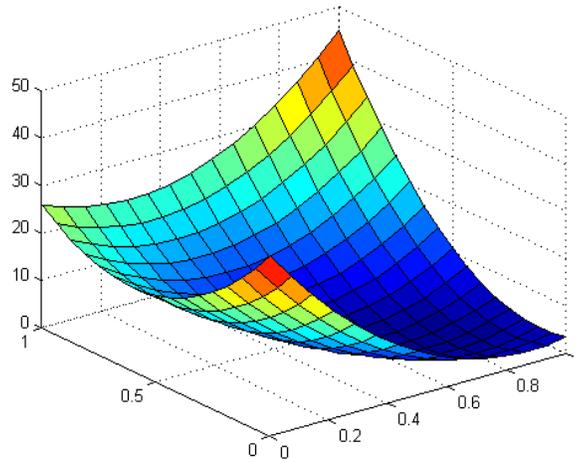
con  $(p_1, p_2) \in \mathcal{S}$ . La forma de la superficie respuesta se muestra en la figura 5.27.

Para alcanzar la mezcla óptima, la que más de parezca al diésel con respecto al criterio de semejanza, será necesario resolver el problema de minimización

$$(p_1^*, p_2^*) = \arg \min_{\substack{\eta(p_1, p_2) \geq 0 \\ 0 \leq p_1, p_2 \leq 1 \\ p_1 + p_2 \leq 1}} \eta(p_1, p_2),$$

donde  $p_3^* = 1 - p_1^* - p_2^*$ . Utilizando una rutina de minimización no lineal con restricciones lineales en *Mathematica 11*, se obtiene que la mezcla óptima del combustible de sustitución es:

24% *n* – heptano, 45% tolueno, 31% ciclohexano.



**Figura 5.27:** Forma de la superficie de respuesta del MSE para el modelo ajustado (5.48).

Los valores obtenidos se acercan más a la composición del diésel original (37 % parafinas, 29 % aromáticos y 34 % naftenos en masa [JH08]) que la encontrada en [Arg10], pues en este trabajo se obtiene 50 % n-heptano, 50 % tolueno. Por tanto, se recomienda la composición del combustible de sustitución alcanzada con la nueva metodología propuesta en este trabajo para llevar a cabo experimentos sobre el autoencendido de los motores HCCI.

## 5.6. Conclusiones

Una de las críticas más fuertes que recibe el diseño óptimo de experimentos es la elección de un modelo en una etapa en la que aún no se han recogido observaciones. En muchas situaciones, los experimentadores desconocen la relación exacta entre variables controlables y respuesta, y los diseños óptimos dependen fuertemente de esta elección. Los experimentos con mezclas se enfrentan con frecuencia

a esta situación, pues las complejas condiciones bajo las que se realizan los ensayos provocan desviaciones en la respuesta considerada. Para reducir esta dependencia, en este capítulo se proponen estrategias de construcción de los diseños óptimos cuando la respuesta varía en un vecindario del modelo considerado.

Se han desarrollado diferentes metodologías en función de las necesidades requeridas. En el caso de mezclas binarias, se planteó el problema continuo y se demostraron las condiciones bajo las que un diseño simétrico es el diseño óptimo robusto global. Considerando éstos como candidatos y mediante la transformación del problema, fue posible aplicar las técnicas de construcción de Daemi y Wiens [Dae13] que permitieron alcanzar la expresión analítica de la densidad minimizante y verificar después que son los  $D$ -óptimos robustos globales. Para valores bajos de  $\nu$  se obtuvo el diseño  $D$ -óptimo clásico como cabía esperar; mientras que la distribución de los puntos sobre la región de diseño fue más uniforme a medida que se puso más importancia al sesgo. Este comportamiento es habitual en diseño robusto [Kon15].

El planteamiento del problema continuo para más de dos ingredientes no pudo abordarse debido a la complejidad que presenta. Para solucionar este inconveniente, se proporcionó un nuevo algoritmo, basado en algoritmos genéticos, con operadores diseñados especialmente para problemas de mezclas. Esta nueva metodología implica la discretización del problema, de modo que se calcularon diseños  $D$ - e  $I$ -óptimos robustos exactos. Cabe destacar que el algoritmo desarrollado es general, de modo que puede utilizarse independientemente del número de ingredientes del problema y del modelo considerado.

En la mayoría de los diseños obtenidos se observaron ciertas propiedades geométricas en la disposición de los puntos de diseño sobre el simplex. Esto motivó a considerar clases de diseños restringidos que mantienen la simetría a lo largo de las medianas del simplex a los se ha denominado *diseños intercambiables*. La propiedad de intercambiabilidad tiene la aplicación práctica de no favorecer ninguno de los ingredientes de la mezcla para explicar la respuesta, de modo

que puede ser un rasgo del diseño interesante para los experimentadores. Por otro lado, la intercambiabilidad puede ser una condición muy estricta en los casos en los que no se mantiene esta propiedad, de modo que se consideraron también otra clase de diseños más flexibles que son los *diseños parcialmente intercambiables*.

Los resultados obtenidos con los diseños generales y restringidos son muy similares. Además, el gasto computacional que se requiere para calcular los diseños generales es notablemente superior al requerido con los restringidos. Como la mayoría de los diseños generales obtenidos fueron intercambiables, se sugiere considerar esta clase de diseños restringidos por su simplicidad y el ahorro computacional que supone. Cabe destacar que el diseño  $\{3, 3\}$ -simplex centroid puede utilizarse independientemente del conocimiento que el experimentador tenga sobre la adecuación del modelo cuando se considera el criterio de  $I$ -optimización.

Se propone una alternativa continua para el problema de diseño con tres ingredientes que consiste en considerar una clase de diseños restringidos sobre una región restringida del simplex. Se propone también una discretización de la densidad óptima minimizante para el caso bidimensional que permite proporcionar diseños exactos a los experimentadores. Sin embargo, los diseños obtenidos son menos informativos que los calculados con el algoritmo genético debido a las severas condiciones impuestas.

Por último, el diseño obtenido con la metodología desarrollada para mezclas de tres ingredientes y el criterio de  $D$ -optimización, fue el elegido para modelizar las diferencias entre el combustible de sustitución y el diésel original en el autoencendido bajo condiciones HCCI. A partir del modelo ajustado y mediante una rutina de minimización no lineal con restricciones lineales se ha obtenido la composición óptima del sucedáneo que más se asemeja al diésel en el autoencendido. Los valores obtenidos son similares a la composición del diésel original (37% parafinas, 29% aromáticos y 34% naftenos en masa [JH08]). Por tanto, la nueva metodología basada en diseño óptimo de experimentos incorporando la robustez del

modelo puede resultar muy beneficiosa en multitud de situaciones prácticas.



# Capítulo 6

## Conclusiones e investigación futura

### 6.1. Conclusiones

Esta memoria se ha dedicado al desarrollo de herramientas teóricas y numéricas para la construcción de diseños óptimos en problemas de mezclas. Un experimento con mezclas es aquel en el que las variables controlables por el experimentador son proporciones, de modo que la región de diseño es un simplex  $(q-1)$ -dimensional. La naturaleza de este tipo de problemas requiere modelos especiales y diseños experimentales específicos. Los problemas de mezclas aparecen frecuentemente en situaciones reales de las ciencias experimentales y la ingeniería, que buscan la formulación óptima de sus productos. Bajo este marco, el problema de diseño ha sido estudiado en diferentes contextos. La mayoría de los fenómenos reales se explican a partir de modelos no lineales. En el capítulo 4 se proporcionan dos algoritmos que permiten la construcción de diseños óptimos para este tipo de modelos. Uno de estos nuevos algoritmos es un método heurístico que permite, además, abordar problemas de mezclas restringidos. Este tipo de situaciones aparecen frecuentemente en los experimentos puesto que existen limitaciones sobre las cantidades

de los ingredientes (capítulo 4). Por otro lado, los experimentadores enfrentan a menudo el problema de considerar un modelo en una etapa en la que aún no se han recogido observaciones y los diseños óptimos dependen fuertemente de esta elección. En el capítulo 5 se proponen estrategias de construcción de diseños óptimos robustos para reducir esta dependencia. Los resultados obtenidos así como las metodologías desarrolladas han permitido extender la teoría clásica de diseño óptimo a este tipo de escenarios.

La mayor parte de los resultados obtenidos se han presentado en congresos nacionales e internacionales y se han publicado en revistas indexadas en JCR (véase [Gut13], [Gut15a], [Gut15b], [Mar15], [Gut16a], [Gut16b], [Gut16c], [Gut16d], [RMM16]).

Aunque en cada capítulo se ha reservado la última sección para recoger los objetivos y las contribuciones originales de los mismos, es útil hacer un resumen de todo el trabajo conjunto:

1. El **capítulo 1** introduce la teoría de diseño óptimo de experimentos. Entendiendo sus fundamentos desde la definición más elemental, se construyen resultados teóricos que son herramientas imprescindibles para el cálculo de los diseños óptimos. Revisando la teoría de modelos lineales, se definen los tipos de diseño y sus correspondientes matrices de información. Dependiendo de la finalidad del estudio, pueden definirse diferentes funciones de la matriz de información, es decir, el criterio de optimización. Se revisan los teoremas de equivalencia de Kiefer y Whittle y las condiciones de optimización que nos permiten conocer cuando el óptimo ha sido alcanzado. El capítulo finaliza describiendo la extensión de esta teoría para modelos no lineales y los diferentes enfoques que pueden adoptarse para evitar la dependencia de los valores de los parámetros del modelo.
2. El **capítulo 2** comienza revisando los algoritmos más utilizados en diseño óptimo para el cálculo de soluciones aproximadas. En particular, se realiza un estudio de los fundamentos,

la convergencia y la implementación del algoritmo de Wynn-Fedorov y del algoritmo multiplicativo, centrándonos en el criterio de  $D$ -optimización. La contribución principal de este capítulo es un nuevo método para el cálculo de diseños óptimos, el *algoritmo combinado*. Ajustando convenientemente las estrategias de los algoritmos anteriores para corregir los problemas que surgen al utilizarlos por separado, se desarrolla un nuevo algoritmo que mejora notablemente la velocidad de convergencia (ver gráficos 2.1-2.10). El ahorro computacional que supone es elevado y permite obtener diseños cuando los cálculos que se requieren con los algoritmos convencionales exceden los límites computacionales (ver tablas 2.1-2.4). Además, se ha obtenido la prueba de la convergencia para el caso de  $D$ -optimización (Teorema 2.7). La demostración se basa en escribir una iteración del algoritmo propuesto como una sucesión de longitudes de paso y verificar después que se satisfacen las condiciones (2.3). Diferentes ejemplos ilustran la rapidez de cálculo y la eficiencia alcanzada por los diseños obtenidos con el algoritmo combinado.

3. En el **capítulo 3** se introducen los experimentos con mezclas. Un experimento con mezclas es aquél en el que la respuesta depende únicamente de las proporciones relativas de los ingredientes que integran la mezcla, de modo que la región de diseño es un simplex  $(q - 1)$ -dimensional. La teoría de diseño de experimentos con mezclas se ha desarrollado fundamentalmente desde el punto de vista de diseño clásico. En este capítulo se realiza una revisión de las clases de diseños estándar más utilizados por los experimentadores (diseños simplex lattice, simplex centroid y axiales) y se exponen los modelos de mezclas que se encuentran con mayor frecuencia para explicar este tipo de comportamientos, prestando especial atención a los polinomios canónicos de Scheffé. Éstos son los más utilizados en la literatura. En este capítulo se ha tratado de establecer unas directrices para la elección de los modelos de mezclas, dependiendo del comportamiento de la respuesta

ante diferentes situaciones prácticas. Por último, se ha realizado una recopilación de los trabajos existentes en la literatura sobre el diseño óptimo de experimentos en problemas de mezclas.

4. En el **capítulo 4** se expone la necesidad de desarrollar algoritmos especializados para el cálculo de diseños óptimos en experimentos con mezclas. La mayoría de fenómenos reales donde se encuentran este tipo de sistemas no responden a modelos lineales, existiendo un vacío en la literatura al respecto. Las contribuciones originales de este capítulo son dos nuevas metodologías para el cálculo de diseños  $D$ -óptimos exactos para modelos de mezclas lineales y no lineales.

El primer algoritmo propuesto, basado en el algoritmo multiplicativo, se construye a partir de una clase especial de diseños restringidos, los diseños de permutación, ya que la aplicación directa de dicho algoritmo lleva a dificultades computacionales. Los diseños de permutación se basan en considerar el conjunto de puntos formados por permutación de las coordenadas de un punto fijo para generar puntos candidatos al óptimo. El enfoque anterior reduce considerablemente la dimensión del problema. El nuevo algoritmo consiste en adaptar la iteración multiplicativa (2.9) propuesta por [Sil78] para diseños de permutación. Para ello fue necesario obtener la derivada direccional para el criterio de  $D$ -optimización cuando los elementos de la matriz de información son no lineales (ver (4.3)). Además, se propone una extensión del mismo que permite considerar más de un grupo de permutación a partir de la regla de actualización simultánea (4.6).

El segundo algoritmo se trata de un método de optimización estocástico basado en algoritmos genéticos. Consiste en dar una serie de reglas de actualización de los diseños de una población inicial basadas en los procesos naturales de selección, recombinación y mutación, con el objetivo de generar poblaciones que mejoren a las anteriores, de modo que la última de

ellas contenga al diseño óptimo. La clave para el correcto funcionamiento es la elección de los operadores que lo definen. Los operadores elegidos en este trabajo no sólo resolvieron con éxito todos los casos de estudio, sino que además permiten abordar problemas de mezclas con restricciones lineales. Éstos han sido especialmente diseñados para conservar las soluciones dentro de una subregión del simplex si la población inicial se elige dentro de la misma.

El buen funcionamiento de las nuevas metodologías se ilustra a lo largo del capítulo a través de diferentes ejemplos reales que surgen en la industria farmacéutica, química y petroquímica. En las tablas 4.1 y 4.2 puede observarse que el algoritmo multiplicativo alcanza los mejores diseños en términos de la eficiencia. Por otro lado, el esfuerzo computacional que requiere el algoritmo genético es inferior al que requiere el multiplicativo. El punto fuerte del algoritmo genético es su capacidad de resolver problemas con restricciones lineales muy severas (ver tablas 4.3 y 4.4). Los diseños obtenidos (ver figuras 4.1-1.3) resultaron ser mucho más eficientes que los que utilizaron los experimentadores.

5. El **capítulo 5** está dedicado a desarrollar estrategias para la construcción de diseños  $D$ - e  $I$ -óptimos robustos para modelos de mezclas. Para reducir la dependencia existente entre los diseños óptimos y el modelo considerado, en este capítulo se proponen estrategias para la construcción de diseños óptimos cuando la respuesta varía en un vecindario del modelo considerado. El capítulo comienza con una revisión de trabajos y la teoría de diseño robusto. La principal aportación de este capítulo es la propuesta e implementación de nuevas técnicas de construcción de estos diseños.

Considerando el problema continuo se obtuvieron diseños  $D$ -óptimos robustos para mezclas binarias. El teorema 5.1. establece las condiciones de optimización bajo las que un diseño simétrico es el  $D$ -óptimo global. A partir de este resultado

y mediante la transformación del problema original fue posible utilizar las técnicas propuestas por [Dae13] para obtener una expresión analítica de la densidad óptima. En los diseños obtenidos la distribución de los puntos del soporte sobre la región de diseño es más uniforme a medida que aumenta la importancia relativa sobre el sesgo frente a la varianza (ver figura 5.3 (c)-(f)).

No fue posible abordar el problema continuo para más de dos ingredientes debido a la complejidad que presenta. Para solucionar este problema se propone un nuevo algoritmo, basado en algoritmos genéticos, con operadores especializados para calcular diseños  $D$ - e  $I$ -óptimos robustos exactos. Cabe destacar que esta técnica es general, de modo que puede utilizarse independientemente del número de ingredientes y del modelo elegido. Además, se proporciona una clase de diseños restringidos, *diseños intercambiables*, con los que se obtienen resultados muy similares a los diseños generales (ver tablas 5.3 y 5.4). Considerar esta clase de diseños aumenta la precisión en la localización de los puntos de diseño sobre el simplex y reduce significativamente el coste computacional. Para abordar el problema continuo con tres ingredientes, se propone una clase de diseños restringidos sobre una región restringida del simplex (ver figuras 5.17 y 5.21). Sin embargo, debido a las condiciones impuestas, los diseños obtenidos no son tan informativos como en el caso general.

Por último, el diseño  $D$ -óptimo robusto para tres ingredientes alcanzado mediante el algoritmo propuesto fue sugerido a los experimentadores para modelizar el autoencendido en condiciones de un motor HCCI. A partir del modelo ajustado y mediante una rutina de minimización se obtuvo la composición óptima de sucedáneo de gasolina que más se asemeja al diésel original.

## 6.2. Líneas de investigación futuras

El trabajo realizado en esta memoria ha permitido profundizar y ampliar las herramientas existentes para la construcción de diseños óptimos. En particular, se ha centrado en un tipo de problemas: los experimentos con mezclas. Los trabajos existentes en la literatura desde esta perspectiva son escasos a pesar de ser de gran interés para numerosas aplicaciones de las ciencias experimentales y la ingeniería. Profundizar en esta temática nos ha permitido, además, abrir nuevos caminos de investigación, surgiendo ideas que quedan pendientes de explorar.

Las diferentes contribuciones de esta memoria se enmarcan en tres grandes bloques: capítulo 2, 4 y 5. Siguiendo la división anterior, podemos establecer tres líneas:

1. El algoritmo combinado es una herramienta fundamental para acelerar la convergencia en el cálculo de los diseños  $D$ -óptimos aproximados. Aunque se han desarrollado modificaciones de los algoritmos estándar para este propósito y este mismo criterio, no existe mucha literatura en relación a otros criterios de optimización. Se pretende adaptar el algoritmo combinado para los criterios estudiados en el apartado 1.4.1. Como se indicó anteriormente, ya se ha implementado para el criterio de  $A$ -optimización y, en la actualidad, se están realizando pruebas con algunos ejemplos. Nos planteamos también extender la demostración de la convergencia para el caso general de  $\Psi_p$ -optimización así como para otros criterios basados en la respuesta.

En muchas situaciones reales la respuesta no puede explicarse mediante un modelo lineal y no existe información disponible acerca de valores nominales de los parámetros. Para abordar este problema, se plantea la posibilidad de adaptar el algoritmo combinado para diseños secuenciales. Éstos consisten en ir actualizando en cada iteración las estimaciones de los parámetros conforme al diseño que acaba de calcularse.

Por otro lado, también se plantea extender el algoritmo para un escenario más general considerando varias variables de diseño. Sea  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \chi$ , siendo  $\chi$  un espacio de diseño  $n$ -dimensional.

2. Una limitación que presenta el algoritmo multiplicativo para diseños de permutación es que no permite resolver problemas de mezclas con restricciones lineales. Considérese, por simplicidad, que sólo una de las proporciones  $p_j$  está limitada por

$$0 < L_j \leq p_j \leq U_j < 1.$$

La idea que se plantea consiste en considerar transformaciones de la forma  $W_j = A^t p_j + c$  propuestas por [Tor09b], donde

$$A = \frac{1}{U_j - L_j} [(\mathbf{I}_N | \mathbf{0}_N) - (\mathbf{0}_N | \mathbf{I}_N)]$$

y  $c = (1/(U_j - L_j))(-L_j, 0, \dots, 0, U_j)$ , para aplicar la iteración multiplicativa. En caso de tener más de una variable restringida, transformar análogamente al caso anterior.

Por otro lado, se pretende explorar un nuevo enfoque de este algoritmo para el caso de restricciones no lineales. Asimismo, se plantea generar nuevos operadores para adaptar el algoritmo genético a esta situación.

En el ejemplo 4.5.4. queda de manifiesto que no existen métodos eficaces para el cálculo de otros diseños  $\Phi$ -óptimos. Esto sugiere extender las dos metodologías propuestas a otra clase de criterios de optimización. La principal dificultad se encuentra en el algoritmo multiplicativo, pues los elementos de la matriz de información son no lineales en las proporciones. Por tanto, se hace necesario el cálculo de la derivada direccional para el caso no lineal para otros criterios. En este sentido, se han obtenido las derivadas para  $A$ - y  $E$ -optimización:

$$F_{\Phi_A}(\mathbf{p}, \mathbf{e}_j) = \text{Tr} \left[ \mathbf{M}^{-2}(\mathbf{p}) \frac{\partial \mathbf{M}(\mathbf{p})}{\partial p_j} \right] - \sum_{i=1}^q p_i \text{Tr} \left[ \mathbf{M}^{-2}(\mathbf{p}) \frac{\partial \mathbf{M}(\mathbf{p})}{\partial p_j} \right]$$

$$F_{\Phi_E}(\mathbf{p}, \mathbf{e}_j) = \left\{ \mathbf{u}^t \frac{\partial \mathbf{M}(\mathbf{p})}{\partial p_j} \mathbf{u} \right\} - \sum_{i=1}^q p_i \left\{ \mathbf{u}^t \frac{\partial \mathbf{M}(\mathbf{p})}{\partial p_j} \mathbf{u} \right\},$$

donde  $\mathbf{u}$  el autovector correspondiente al máximo autovalor de  $M(\mathbf{p})$ . Sin embargo, está pendiente la implementación de los mismos.

3. Los diseños robustos son especialmente interesantes en las aplicaciones prácticas en las que se desconoce si el modelo considerado explica adecuadamente la respuesta. En los ejemplos se obtuvo que la propiedad de intercambiabilidad surge de manera natural en la mayoría de diseños óptimos, especialmente para el criterio de  $I$ -optimización en el que se encontró la relación (5.33). Bajo este marco, se está explorando la posibilidad de encontrar un resultado teórico que justifique este comportamiento.

Una idea que se plantea para abordar el problema continuo en el simplex  $(q - 1)$ -dimensional es descomponer el simplex en subregiones simétricas e intercambiables. Considerando dentro de estas regiones clases de diseños restringidos podría encontrarse una expresión general de la densidad óptima minimizante para mezclas de  $q$  ingredientes. La principal complicación la encontramos en la forma del simplex, ya que éste no puede descomponerse en subregiones simétricas e intercambiables disjuntas. De este modo, se necesita una expresión que reajuste las densidades en las regiones con intersección. Otra alternativa factible consiste en calcular la densidad óptima sobre una única subregión simétrica e intercambiable del simplex y considerar también fijos en el diseño los llamados *puntos generadores* que propone [Dra99].

Por último, la propiedad de simetría que verifican por construcción los polinomios de Kronecker que se estudiaron en el

apartado 3.3.6 es deseable para encontrar la optimalidad en los diseños intercambiables. Se pretende, por tanto, explorar el enfoque de diseño óptimo robusto para esta clase de modelos de mezclas.

# Bibliografía

- [Agb05] V. K. Agboto and C. J. Nachtsheim. *Bayesian model robust designs*. Technical report, University of Minnesota, 2005.
- [AHL03] D.C. Montgomery C.M. Borror A. Heredia-Langner, W.M. Carlyle and G.C. Runger. Genetic algorithms for the construction of d-optimal designs. *Journal of Quality Technology*, 35:28–46, 2003.
- [AHL04] D. C. Montgomery W. M. Carlyle A. Heredia-Langner and C. M. Borror. Model-robust optimal designs:a genetic algorithm approach. *Journal of Quality Technology*, 36:263–279, 2004.
- [Amo09] M. Amo Salas. *Diseños Experimentales en Modelos Compartimentales con Observaciones Correladas*. Tesis doctoral, E.T.S.I. Industriales, Universidad Castilla-La Mancha, 2009.
- [Arg10] J. Sanz Argent. *Análisis cinético químico del proceso de autoencendido del combustible diésel en condiciones de carga homogénea*. Tesis Doctoral. Ediciones de la Universidad de Castilla-La Mancha, 2010.
- [Atk89] A. C. Atkinson and A. N. Donev. The construction of exact D-optimum experimental designs with applications to blocking response surface designs. *Biometrika*, 76(3):515–526, 1989.

- [Atk92] A. C. Atkinson and A. N. Donev. *Optimum Experimental Designs*. New York: Oxford Science Publications, 1992.
- [Atk07] A. C. Atkinson, A. N. Donev, and R. D. Tobias. *Optimum experimental designs, with SAS*. Oxford University Press, 2007.
- [Atw69] C. L. Atwood. Optimal and efficient designs of experiments. *The Annals of Mathematical Statistics*, 40(5):1570–1602, 1969.
- [Atw73] C. L. Atwood. Sequences converging to D-optimal designs of experiments. *Annals of Statistics*, 1:342–352, 1973.
- [Atw76] C. L. Atwood. Convergent design sequences, for sufficiently regular optimality criteria. *Annals of Statistics*, 4:1124–1138, 1976.
- [Atw80] C. L. Atwood. Convergent design sequences, for sufficiently regular optimality criteria, II: singular case. *Annals of Statistics*, 8:894–912, 1980.
- [Bat80a] D. M. Bates and D.G. Watts. *Non linear Regression Analysis and Its Applications*. Wiley, 1980.
- [Bat80b] D. M. Bates and D.G. Watts. Relative curvature measures of nonlinearity. *Journal of the Royal Stat. Society*, 42(Series B 40):1–25, 1980.
- [Bec68] N.G. Becker. Models for the response of a mixture. *Journal of the Royal Statistical Society*, 1(37):107–112, 1968.
- [Bec78] N.G. Becker. Models and designs for experiments with mixtures. *Australian Journal of Statistics*, 20(3):195–208, 1978.
- [Bor03] J. J. Borkowsk. Using genetic algorithm to generate small exact response surface designs. *Journal of Probability and Statistical Science*, 1:65–88, 2003.

- [Box] G.E.P. Box and N.R. Draper. A basis for the selection of a response surface design.
- [BS09] E. del Castillo B. J. Smucker and J. L. Rosenberger. Exchange algorithms for constructing model-robust experimental designs. *Journal of Quality Technology*, 31(1):28–42, 2009.
- [BS14] Manisha Pal B. K. Sinha, N.K. Mandal and P. Das. *Optimal mixture experiments*. Springer, Series: Lecture Notes in Statistics. vol. 1028, 2014.
- [Cha88] L.Y. Chan. Optimal design for a linear log contrast model for experiments with mixtures. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 20:105–113, 1988.
- [Cha92] L.Y. Chan. D-optimal design for a quadratic log contrast model for experiments with mixtures. *Communications in Statistics. Theory and Methods*, 10(21):2909–2930, 1992.
- [Cha94] L.Y. Chan and Y.N. Guan. Design in mixture models with inverse terms for two components. *Private communication*, 1994.
- [Cha98a] Guan Y.N. Chan, L.Y. and Zhang C.Q.  $a$ -optimal design for an additive quadratic mixture model. *Statistica Sinica*, 8(3):979–990, 1998.
- [Cha98b] Meng J.H. Jiang Y.C. Chan, L.Y. and Y.N. Guan. D-optimal axial designs for quadratic and cubic additive mixture models. *Australian and New Zealand Journal of Statistics*, 40(3):359–371, 1998.
- [Cha00] L.Y. Chan. Optimal designs for experiments: a survey. *Communications in statistics. Theory and methods*, 29:2281–2312, 2000.
- [Cha01] L.Y. Chan and Y.N. Guan. A- and d-optimal designs for a log contrast model for experiments with mixtures. *Journal of Applied Statistics*, 28(5):537–546, 2001.

- [Che53a] Chernoff. Locally optimal designs for estimating parameters. *The Annals of Mathematical Statistics*, (24):582–602, 1953.
- [Che53b] H. Chernoff. Locally optimal designs for estimating parameters. *The Annals of Mathematical Statistics*, 24:586–602, 1953.
- [Cho05] L. Choisnard, A. Géze, M. Bigan, J.L. Putaux, and D. Wouessidjewe. Efficient size control of amphiphilic cyclodextrin nanoparticles through a statistical mixture design methodology. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 3(8):593–600, 2005.
- [Cla55] P. J. Claringbold. Use of simplex designs in the study of the joint action of related hormones. *Biometrics*, 11:174–185, 1955.
- [Coe10] R.L.J. Coetzer and W.W. Focke. Optimal designs for estimating the parameters in weighted power-mean-mixture models. *Chemometrics*, (24):34–42, 2010.
- [Coo80] R. D. Cook and C. J. Nachtsheim. A comparison of algorithms for constructing exact D-optimal designs. *Technometrics*, 22:315–324, 1980.
- [Coo82] R. D. Cook and C. J. Nachtsheim. Model-robust, linear-optimal designs. *Technometrics*, 24:49–54, 1982.
- [Cor02] J.A. Cornell. En *Experiments with Mixtures*, New York. Wiley, 2002.
- [Cox71] D.R. Cox. A note on polynomial response functions for mixtures. *Biometrika*, 58(1):155–159, 1971.
- [Dae13] M. Daemi and D. P. Wiens. Techniques for the construction of robust regression designs. *The Canadian Journal of Statistics*, 41(4):679–695, 2013.

- [Det01] H. Dette and T. Franke. Robust designs for polynomial regression by maximizing a minimum of  $d$ - and  $d_1$ -efficiencies. *The Annals of Statistics*, 29(4):1024–1049, 2001.
- [Det08] H. Dette, A. Pepelyshev, and A. Zhigljavsky. Improving updating rules in multiplicative algorithms for computing D-optimal designs. *Computational Statistics and Data Analysis*, 53:312–320, 2008.
- [Don89] A. N. Donev. Design of experiments with both mixture and qualitative factors. *J. R. Statist. Soc.*, 51(2B):297–302, 1989.
- [Dra77] N.R. Draper and R.C. John. A mixtures models with inverse term. *Technometrics*, 1B(19):37–46, 1977.
- [Dra97] N.R. Draper and F. Pukelsheim. Mixture models based on homogeneous polynomials. *Journal of Statistical Planning and Inference*, (71):303–311, 1997.
- [Dra99] N.R. Draper and F. Pukelsheim. Kiefer ordering of simplex designs for first- and second-degree mixture models. *Journal of Statistical Planning and Inference*, (79):325–348, 1999.
- [Dra00] Heiligers B. Pukelsheim F. Draper, N.R. Kiefer ordering of simplex designs for second-degree mixture models with four or more ingredients. *The Annals of Statistics*, 28(2):578–590, 2000.
- [DuM94] W. DuMouchel and B. Jones. A simple bayesian modification of d-optimal designs to reduce dependence on the assumed model. *Technometrics*, 36(1):37–47, 1994.
- [Elf52] G. Elfving. Optimum allocation in linear regression theory. *The Annals of Mathematical Statistics*, 23:255–262, 1952.

- [Fan03] Z. Fang and D. P. Wiens. Robust regression designs for approximate polynomial models. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 117:305–321, 2003.
- [Fed72a] V. V. Fedorov. *Theory of optimal experiments*. New York: Academic Press, 1972.
- [Fed72b] V. V. Fedorov and M. B. Maljutov. Optimal designs in regression problems. *Math. Operationsforsch. Stat.*, 3:281–308, 1972.
- [Fed72c] V.V. Fedorov. En *Theory of optimal experiments*, New York. Academic Press, 1972.
- [Fed97] V. V. Fedorov and P. Hackl. *Model-Oriented Design of Experiments*. Lect. Notes in Statistics: Springer-Verlag New York, Inc., 1997.
- [Fel89] J. Fellman. An empirical study of a class of iterative searches for optimal designs. *J. Stat. Planning and Inference*, 21:85–92, 1989.
- [Fid02] J. Lopez Fidalgo and W.K. Wong. Design issues for the michaelis-menten model. *J. theor. Biol.*, 215:1–11, 2002.
- [Foc07] W. Focke, C. Sandrock, and S. Kok. Weighted-power-mean mixture model: Empirical mixing laws for liquid viscosity. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, (46):4660–4666, 2007.
- [Fre84] J. Fresen. *Aspect of bioavailability studies*. M.Sc. Dissertation, Department of Mathematical Statistics, University of Capetown, 1984.
- [Gai77] Z. Gail and J. Kiefer. Comparaison of simplex designs for quadratic mixture models. *Technometrics*, 4(19):445–453, 1977.

- [GH01] B. Schmuland G. Heo and D. P. Wiens. Restricted minimax robust designs for misspecified regression models. *The Canadian Journal of Statistics*, 29:117–128, 2001.
- [Gol89] D. E. Goldberg. *Genetic Algorithm in Search, Optimization, and Machine Learning*. Addison-Wesley: New York, 1989.
- [Gri77] P. R. Gribik and K. O. Kortanek. Equivalence theorems and cutting plane algorithms for a class of experimental design problems. *SIAM J. Appl. Math.*, 32:232–259, 1977.
- [Gru49] L. Grunberg and A. Nissan. Mixing law for viscosity. *Nature*, (164):799, 1949.
- [Gua89] Y. Guan and C. Lui.  $d$ -optimal design for the multilinear polynomial model of  $q - 1$  degree. *Math. Statist. Appl. Prob.*, 4(3):353–361, 1989.
- [Gua93] Y. Guan and C. Liu.  $a$ -optimal for the multilinear polynomial model of  $q - 1$  degree. *Journal of Northeast University of Technology*, 14(2):198–202, 1993.
- [Gut13] Irene García Camacha Gutiérrez and Raúl Martín Martín. *Algoritmo Combinado para el cálculo de diseños D-óptimos*. Actas XXXIV Congreso Nacional de Estadística e Investigación Operativa. VIII Jornadas de Estadística Pública. Castellón, 2013.
- [Gut15a] Irene García Camacha Gutiérrez and Raúl Martín Martín. *Diseño Robusto para modelos de mezclas*. Actas XXXV Congreso Nacional de Estadística e Investigación Operativa. IX Jornadas de Estadística Pública. Pamplona, 2015.
- [Gut15b] Irene García Camacha Gutiérrez and Raúl Martín Martín. *Robust design for diesel fuel surrogate models*. Proceedings of the 27th European Conference on Operational Research. Glasgow. Reino Unido, 2015.

- [Gut16a] Irene García Camacha Gutiérrez and Raúl Martín Martín. *Diseño Robusto en experimentos con mezclas*. Actas XXXVI Congreso Nacional de Estadística e Investigación Operativa. X Jornadas de Estadística Pública. Toledo, 2016.
- [Gut16b] Irene García Camacha Gutiérrez and Raúl Martín Martín. *Diseños D-óptimos en problemas de mezclas. Un enfoque robusto frente a perturbaciones de la respuesta*. VI Jornadas Doctorales de la Universidad de Castilla-La Mancha. Toledo, 2016.
- [Gut16c] Irene García Camacha Gutiérrez and Raúl Martín Martín. *Optimal-Robust design for Mixture Models*. Proceedings of Model-Oriented Data Analysis and Optimum Design. Hamminkeln-Dingden. Alemania, 2016.
- [Gut16d] Irene García Camacha Gutiérrez and Raúl Martín Martín. Robust designs for mixture experiments. *Computational Statistics and Data Analysis*, II. Statistical Methodology for Data Analysis, 2016.
- [Hai87] L. M. Haines. The application of annealing algorithm to the construction of exact optimal designs for non-linear problems. *Journal Royal Statistical Society*, Ser.B(2):569–583, 1987.
- [Har07] R. Harman and L. Pronzato. Improvements on removing nonoptimal support points in d-optimum design algorithms. *Stat. Probab. Lett*, 77:90–94, 2007.
- [HB05] D.C. Montgomery H.B. Borror, C.M. Borror and C.M. Anderson-Cook. Using genetic algorithms to generate mixture-process experimental designs involving control and noise variables. *Journal of Quality Technology*, 37:60–74, 2005.
- [Hol75] J. H. Holland. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. MIT Press: Cambridge, 1975.

- [Hub75] P. J. Huber. Robustness and designs. *A Survey of Statistical Design and Linear Models*, In Srivastava, J.N. (Ed.) North Holland, Amsterdam:287–303, 1975.
- [Jer12] Z. Jerirani, B.M. Jan, B.S. Ali, I.S. Noor, S.C. Hwa, and W. Saphanuchart. The optimal mixture design of experiments: Alternative method in optimizing the aqueous phase composition of a microemulsion. *Chemometrics*, (112):1–7, 2012.
- [JH08] J. Benajes J.J. Hernández, J. Sanz-Argent and S. Molina. Selection of a diesel fuel surrogate for the prediction of auto-ignition under hcci engine conditions. *Fuel*, 87:655–665, 2008.
- [Joh83] P.W.M. John. Experimental designs for quadratic blending with process variables. *Proceedings of the 44<sup>th</sup> session of the International Statistical Institute. Madrid.*, I:143–146, 1983.
- [Joh84] P.W.M. John. Experiments with mixtures involving process variables. *Centre for Statistical Sciences. Technical report. University of Texas*, 8, 1984.
- [Kie59] J. Kiefer and J. Wolfowitz. Optimum design in regression problems. *The Annals of Mathematical Statistics*, 30:271–294, 1959.
- [Kie60a] J. Kiefer. Optimum experimental designs V, with applications to systematic and rotatable designs. *Proc. Fourth Berkeley Symp. Math. Statisti. Prob.*, 1:381–405, 1960.
- [Kie60b] J. Kiefer and J. Wolfowitz. The equivalence of two extremum problems. *Canad. J. Math.*, 12:363–366, 1960.
- [Kie61] J. Kiefer. Optimum design in regression problems. *Ann. Mathm. Statist.*, 32(2):298–325, 1961.

- [Kie74] J. Kiefer. General equivalence theory for optimum designs (approximate theory). *The Annals of Statistics*, 2:848–879, 1974.
- [Kie75] J. Kiefer. Optimal design: Variation in structure and performance under change of criterion. *Biometrika*, 62(2):277–288, 1975.
- [Kle02] T. Klein. Invariant symmetric block matrices for the design of mixture experiments. *Institut für Mathematik, Universität Augsburg*, Report 443, 2002.
- [Kon15] L. Kong and D. P. Wiens. Model-robust designs for quantile regression. *Journal of the American Statistical Association*, 110:233–245, 2015.
- [Laa75] P. Laake. On the optimal allocation of observations in experiments with mixtures. *Scandinavian Journal of Statistics*, 2:153–157, 1975.
- [Lam68] P. Lambrakis. Experiments with  $p$ -component mixtures. *Journal of The Royal Statistical Society*, 30(B):137–144, 1968.
- [Lam69] P. Lambrakis. Experiments with mixtures: an alternative to the simplex-lattice design. *Journal of The Royal Statistical Society*, 31(2B):234–245, 1969.
- [Lau74] E. Lauter. Experimental design in a class of models. *Statistics*, 5:379–398, 1974.
- [Li82] K. C. Li and W. Notz. Robust design for nearly linear regression. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 6:135–151, 1982.
- [Li08] G. Li and D. Majumdar. D-optimal designs for logistic models with three and four parameters. *J. Stat. Planning and Inference*, 138:1950–1959, 2008.

- [Lim90] Y.N. Lim. D-optimal design for cubic polynomial regression on the  $q$ -simplex. *Journal of Statistical Planning and Inference*, (25):141–152, 1990.
- [Liu95] S. Liu and H. Neudecker. A  $v$ -optimal design for schef-fé's polynomial model. *Statistics and Probability Letters*, 23:253–258, 1995.
- [Liu97] S. X. Liu and D. P. Wiens. Robust designs for approximate polynomial regression. *Journal of Statistical Planning and Inferences*, 64:369–381, 1997.
- [Mad13] A.R. Madgulkar, M.R. Bhalekar, R.R. Padalkar, and M.T. Shaikh. Optimization of carboxymethyl-xyloglucan-based tramadol matrix tablets using simplex centroid mixture design. *Journal of Pharmaceutics*, 2013.
- [Man] A. Mandal, W. K. Wong, and Y. Yu. Recent developments of algorithms for finding optimal designs and their applications.
- [Man06] S. Mandal and B. Torsney. Construction of optimal designs using a clustering approach. *J. Stat. Planning and Inference*, 136(3):1120–1134, 2006.
- [Mar06] R. Martín Martín. *Construcción de diseños óptimos para modelos con variables no controlables*. Tesis doctoral, Universidad Castilla-La Mancha, Ciudad Real, 2006.
- [Mar15] Raúl Martín Martín and Irene García Camacha Gutiérrez. Combined algorithm to compute d-optimal designs. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 278:248 – 257, 2015.
- [McL66] R.A. McLean and V.L. Anderson. Extreme vertices design of mixture experiments. *Technometric*, 3(8):447–454, 1966.

- [Mey95a] R. K. Meyer and C. J. Nachtsheim. The coordinate-exchange algorithm for constructing exact optimal experimental designs. *Technometrics*, 37:60–69, 1995.
- [Mey95b] R.K. Meyer and C.J. Nachtsheim. The coordinate-exchange algorithm for constriction exact optimal experimental designs. *Technometrics*, (37):60–69, 1995.
- [Mik89] F. Mikaeili. D-optimal design for cubic without 3-way effect on the simplex. *Journal of Statistical Planning and Inference*, (21):107–115, 1989.
- [Mik93] F. Mikaeili.  $d$ -optimal design for full cubic on  $q$ -simplex. *Journal of Statistical Planing and Inference*, 35:121–130, 1993.
- [Mit70a] T. J. Mitchell and F. L. Miller Jr. Use of design repair to construct design for special linear model. *Mathematical Division Annual Progress Report (ORNL-4661)*, 1970.
- [Mit70b] T.J. Mitchell and J.R. Miller. Use of design repair to construct design for special linear model. *Mathematical Division Annual Progress Repor (ORNL-4661)*, Oak Ridge National Laboratory, 1970.
- [Mit74a] T. J. Mitchell. An algorithm for construction of D-optimal experimental designs. *Technometrics*, 16:203–210, 1974.
- [Mit74b] TJ Mitchell. An algorithm for construction of d-optimal experimental designs. *Technometrics*, (16):203–210, 1974.
- [Paz86] A. Pazman. *Foundations of optimum experimental design*. D. Reidel publishing company, Dordrecht, 1986.
- [Pes82] L. Pesotchinsky. Optimal robust designs: Linear regression in  $r^k$ . *The Annals of Statistics*, 10:511–525, 1982.
- [Pes03] P. Pesic. *Abel's proof*. The MIT Cambridge Press. Massachusetts. Londres, 2003.

- [PG16] B. Jones P. Goos and U. Syafitri. I-optimal design of mixture experiments. *Journal of the American Statistical Association*, 111(514):899–911, 2016.
- [Pie85] G.F. Piepel and J.A. Cornell. Models for mixture experiments when the response depends on the total amount. *Technometrics*, 27(3):219–227, 1985.
- [Pie86] D. A. Pierre. *Optimization Theory with Applications*. Dover. New York, 1986.
- [Pie87] G. F. Piepel and J.A. Cornell. Designs for mixture-amount experiments. *Journal of Quality Technology*, 19(1):11–28, 1987.
- [Pre98] P. Prescott and N. R. Draper. Mixture designs for constrained components in orthogonal blocks. *Journal of Applied Statistics*, 25(5):613–638, 1998.
- [Pre04] P. Prescott. Modelling in mixture experiments including interactions with process variables. *Quality Technology and Quantitative Management*, 1(1):87–103, 2004.
- [Puk93a] F. Pukelsheim. *Optimal design of experiments*. Wiley, New York, 1993.
- [Puk93b] F. Pukelsheim and J. L. Rosenberger. Experimental designs for model discrimination. *Journal of the American Statistical Association*, 88(422):642–649, 1993.
- [RK04] J.A. Miller M.E. Coltrin J.F. Grear E. Meeks et al. R.J. Kee, F.M. Rupley. *CHEMKIN Release 4.0*. Reaction Design, Inc., San Diego, CA, 2004.
- [RMM16] Irene García Camacha Gutiérrez Raúl Martín Martín and Ben Torsney. Efficient algorithms for constructing d-optimal designs for linear and non-linear models in mixture experiments. *Statistical Papers*, 2016.

- [Roc72] R. T. Rockafellar. *Convex analysis*. New Jersey: Princeton University Press., 1972.
- [Rod99] C. Rodríguez and I. M. Torreblanca. *Diseño óptimo de experimentos para modelos de regresión*. Universidad de Almería, Servicio de publicaciones, Almería, 1999.
- [Rod00] J. M. Rodríguez Díaz. *Criterios Característicos en Diseño óptimo de Experimentos*. Tesis doctoral, Facultad de Ciencias, Universidad de Salamanca, 2000.
- [Rod07] L. J. Rodríguez Aragón. *Diseño óptimo de Experimentos en Procesos Industriales*. Tesis doctoral, E.T.S.I. Industriales, Universidad de Castilla-La Mancha, 2007.
- [Sch58] H. Scheffé. Experiments with mixtures. *J. Roy. Statist. Soc.*, 20(2B):344–360, 1958.
- [Sch63] H. Scheffé. The simplex-centroid design for experiments with mixtures. *J. Roy. Statist. Soc.*, 25(2B):235–263, 1963.
- [Sil78] S. D. Silvey, D. M. Titterington, and B. Torsney. An algorithm for optimal designs on a finite design space. *Communications in Statistics*, A, 14:1379–1389, 1978.
- [Sil78] S.D. Silvey, D.M. Titterington, and B. Torsney. An algorithm for optimal designs on a finite design space. *Communications in Statistic*, A(14):1379–1389, 1978.
- [Smu10] B. J. Smucker. *By design: exchange algorithms to construct exact model-robust and multiresponse experimental designs*. Tesis Doctoral. The Pennsylvania State University, 2010.
- [Sne74] R.D. Snee and D.W. Marquardt. Extreme vertices designs for linear mixture models. *Technometrics*, (16):399–408, 1974.

- [Sne79] R.D. Snee. Experimental designs for mixture systems with multicomponent constraints. *Communications in Statistics. Theory and Methods*, 4(8):306–326, 1979.
- [Tit76] D. M. Titterington. Algorithms for computing D-optimal designs on a finite design space. *Conference on Information Sciences and Systems, Dept. Elect. Eng., Johns Hopkins Univ. Baltimore, MD*:213–216, 1976.
- [Tor83] B. Torsney. A moment inequality and monotonicity of an algorithm. *Proc. of the Internat. Symp. on SemiInfinite Prog. and Appl. (Edited by Kortanek, K.O. and Fiacco, A. V.) at the Univ. of Texas, Austin. Lecture Notes in Econ. and Math. Sys.*, 215:249–260, 1983.
- [Tor88] B. Torsney. Computing optimizing distributions with applications in designs estimation and image processing. *Optimal Design and Analysis of Experiments. Editors: Y. Dodge, V.V. Fedorov and H.P. Wynn. North Holland*, páginas 361–370, 1988.
- [Tor92] B. Torsney and A. M. Alahmadi. *Further development of algorithms for constructing optimizing distributions*. Model Oriented Data Analysis, Proc. 2 IIASA Workshop in St. Kyrik, Bulgaria (Edited by Fedorov V. V. m Muller, W. G. and Vuchkov, I. N. ), Physica- Verlag: 121- 129., 1992.
- [Tor01] B. Torsney and S. Mandal. Construction of constrained optimal designs. *Atkinson, A. and Bogacka, B. and Zhigljavsky A. (eds.), Optimun Design 2000, Dordrecht: Kluwer*, páginas 141–152, 2001.
- [Tor09a] B. Torsney and R. Martín-Marín. Multiplicative algorithms for computing optimum designs. *Journal of Statistical Planning and Inference*, (139):3947–3961, 2009.

- [Tor09b] B. Torsney and R. Martin-Martin. Multiplicative algorithms for computing optimum designs. *J. Stat. Planning and Inference*, 139:3957–3961, 2009.
- [Tos77] B. Tosney. Contribution to discussion of “maximum likelihood estimation via the em algorithm” by Dempster et al. *Journal of Royal Statistical Society*, B(39):26–27, 1977.
- [Tsa76] J. Y. Tsay. On the sequential construction of D-optimal designs. *J. Amer. Stat. Assoc.*, 71:671–674, 1976.
- [Vuc83] Yontchev Ch. A. Vuchkov, I.N. and D.L. Damgaliev. Continuous d-optimal designs for experiments with mixtures and process variables. *Mathematische Operationsforschung und Statistik (Ser. Statistics)*, 14(1):33–51, 1983.
- [Wan12] W. Wang, R.B. Chen, C.C. Huang, and W.K. Wong. Particle swarm optimization techniques for finding optimal mixture designs. *Technique report*, 2012.
- [Whi71] P. Whittle. *Optimization under Constraints*. Wiley, London, 1971.
- [Whi73a] L. V. White. An extension of the general equivalence theorem to non linear models. *Biometrika*, 60(2):345–348, 1973.
- [Whi73b] P. Whittle. Some general points in the theory of optimal experimental design. *Journal Royal Statistical Society, Ser. B*, 35(1):123–130, 1973.
- [Wie90] D. P. Wiens. Robust minimax designs for multiple linear regression. *Linear Algebra Applications*, 127:327–340, 1990.
- [Wie92] D. P. Wiens. Minimax designs for approximately linear regression. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 31:353–371, 1992.

- [Wie93] D. P. Wiens. Designs for approximately linear regression: Maximizing the minimum coverage probability of confidence ellipsoids. *The Canadian Journal of Statistics*, 21(1):59–70, 1993.
- [Wie98] D. P. Wiens. Minimax robust designs and weights for approximately speiced regression models with heteroscedastic errors. *Journal of the American Statistical Association*, 93:1449–1450, 1998.
- [Wie15] D. P. Wiens. *Robustness of Design*. Chapter 20 of Handbook of Design and Analysis of Experiments, Chapman and Hall/CRC, 2015.
- [WL13] J. J. Borkowski W. Limmun and C. Chomtee. Usign a genetic algorithm to generate d-optimal designs for mixture experiments. *Quality and Reliability Engineering International*, 29:1055–1068, 2013.
- [Wu78] C. F. J. Wu and H. P. Wynn. The convergence of general step-length algorithms for regular optimum design criteria. *Annals of Statistics*, 6:1273–1285, 1978.
- [Wyn70a] H. P. Wynn. The sequential generation of D-optimum experimental designs. *The Annals of Statistics*, 6(6):1273–1285, 1970.
- [Wyn70b] H.P. Wynn. The sequential generation of d-optimum experimental designs. *The Annals of Statistics*, 6(6):1273–1285, 1970.
- [Wyn72] H. P. Wynn. Results in the theory and construction of D-optimum experimental design. *Journal Royal Statistical Society, Ser. B.* 34(2):133–147, 1972.
- [Xu11] X. Xu and W. Y. Yuen. Applications and implementations of continuous robust designs. *Communications in Statistics - Theory and Methods*, 40(6):969–988, 2011.

- [Xue93] H. Xue and Y. Guan.  $a$ -optimal designs of parameter estimate for becker's homogeneous models. *Journal of Northeast University of Technology*, 14(5):513–517, 1993.
- [YP06] J.W. Fowler Y. Park, D.C. Montgomery and C.M. Borrer. Cost-constrained  $g$ -efficient response surface designs for cuboidal regions. *Quality and Reliability Engineering International*, 22:121–139, 2006.
- [Yu93] D. Yu and Y. Guan.  $a$ -optimal designs of parameter estimate for mixture models of two-degree. *Journal of Northeast University of Technology*, 14(3):307–311, 1993.
- [Yu10a] Y. Yu. Monotonic convergence of a general algorithm for computing optimal designs. *The Annals of Statistics*, (38):1593–1606, 2010.
- [Yu10b] Y. Yu. Monotonic convergence of a general algorithm for computing optimal designs. *The Annals of Statistics*, 38:1593–1606, 2010.
- [Yu11] Y. Yu.  $D$ -optimal designs via a cocktail algorithm. *Stat. Comput.*, 21:475–481, 2011.



