RESEARCH ARTICLE Bhartiya Krishi Anusandhan Patrika, Volume 38 Issue 4: 320-323 (December 2023)

एल्गोरिथम सर्च का उपयोग करके गैर सामान्य प्रतिक्रिया के साथ मिश्रण प्रयोगों के लिए संतृप्त डी–ऑप्टीमल अभिकल्पनाओं का निर्माण

राहुल बनर्जी[1], सीमा जग्गी[2], एल्दो वर्गीस[3], अर्पण भौमिक[4], सिनी वर्गीस[1], अनिन्दिता दत्ता[1], श्वेतांक लाल[1]

सारांश

मिश्रण प्रयोग संगणकीय सतह डिजाइन की एक खास श्रेणी होते हैं, जहां दो या अधिक घटकों को मिलाकर एक उत्पाद प्राप्त होता है, जिसे तत्व या मिश्रण घटक कहा जाता है। मिश्रण प्रयोगों के मामले में, अक्सर प्राप्त प्रतिक्रिया गुणात्मक होती है। गैर–साधारण प्रतिक्रिया के मामले में, एक लॉजिस्टिक मॉडल सेटअप का उपयोग किया जाता है। इस अध्ययन में, हमने लॉजिस्टिक मॉडल का उपयोग किया है और खोज एल्गोरिदम विकसित करके मिश्रण प्रयोगों के लिए संतृप्त डी–ऑप्टिमल डिजाइन प्राप्त किए हैं। डी–ऑप्टिमलता मानदंड की मान्यता के लिए हमने जनरल इक्विवेलेंस सिद्धांत का उपयोग किया है। लॉजिस्टिक मॉडल के माध्यम से स्थानिक डी–ऑप्टिमल डिजाइन तैयार करने के लिए त्रुटियों का सामान्य वितरण नहीं किया जाता है। यह प्रक्रिया अन्य गैर–रैखिक मॉडलों के लिए भी समान होती है, लेकिन त्रुटि वितरण धारणाओं के कारण फिशर सूचना मैट्रिक्स (FIM) में परिवर्तन होता है।

शब्द कुंजी: उम्मीदवार सेट, डी–ऑप्टिमालिटी, फिशर सूचना मैट्रिक्स, जेनेरल इक्विवैलेन्स थ्योरम, लॉजिस्टिक मॉडल, मिश्रण प्रयोग, संशोधित फेडोरोव एक्सचेंज एल्गोरिथम, गैर सामान्य प्रतिक्रिया।

Construction of Saturated D-optimal Designs for Mixture Experiments with a Non Normal Response using an Algorithmic Search

Rahul Banerjee[1], Seema Jaggi[2], Eldho Varghese[3], Arpan Bhowmik[4], Cini Varghese[1], Anindita Datta[1], Shwetank Lall[1]

10.18805/BKAP630

ABSTRACT

Background: Mixture experiments belong to the response surface design category, involving the combination of multiple components to create a product. These products are commonly encountered in daily life. In some cases, mixture experiments yield qualitative responses, such as taste in a fruit punch. Qualitative variables often deviate from a normal distribution.

Methods: To address non-normal responses, a generalized linear model, specifically the logistic model, is employed. This study utilizes logistic models and develops suitable search algorithms to obtain saturated D-optimal designs for mixture experiments. The validation of D-optimality criteria is based on the General Equivalence Theorem.

Result: For generating locally D-optimal designs, the logistic model is utilized considering non-normally distributed errors. While the procedure remains the same for other nonlinear models, the assumptions regarding error distribution impact the Fisher information matrix (FIM).

Key words: Candidate set, D-optimality, Fisher information matrix, General equivalence theorem, Logistic Models, Mixture experiments, Modified Fedorov exchange algorithm, Non Normal Response.

प्रस्तावना

एक प्रयोग जिसे सांख्यिकीय सिद्धांतों का पालन करते हुए शालीनता से तैयार किया गया है, न केवल प्रयोगकर्ता के प्रश्न का सटीक उत्तर प्रदान करता है बल्कि उपलब्ध संसाधनों के इष्टतम उपयोग में भी मदद करता है। मिश्रण एक ऐसा उत्पाद है जो दो या दो से अधिक घटकों को मिलाकर प्राप्त किया जाता है जिसे अवयव कहा जाता है। ऐसे उत्पाद रोजमर्रा की जिंदगी में पाए जाते हैं (कॉर्नेल, 2002) जैसे कि:

(1) केक तैयार करना: सामग्री दूध, चीनी, आटा, अण्डे, बेकिंग पाउडर आदि।

(2) कंक्रीट निर्माण: रेत, पानी और एक या एक से अधिक प्रकार के सीमेंट का संयोजन।

[1]ICAR-Indian Agricultural Statistics Research Institute, Pusa-110 012, New Delhi, India.
[2]Division of Agricultural Education, ICAR-Krishi Ansuandhan Bhavan-II, Pusa-110 012, New Delhi, India.
[3]ICAR-Central Marine Fisheries Research Institute, Kochi-682 018, Kerala, India.
[4]ICAR-Indian Agricultural Research Institute, Dirpai Chapori, Gogamukh-787 035, Assam, India.

Corresponding Author: Rahul Banerjee, ICAR-Indian Agricultural Statistics Research Institute, New Delhi-110 012, India. Email: rahuliasri@gmail.com

How to cite this article: Banerjee, R., Jaggi, S., Varghese, E., Bhowmik, A., Varghese, C., Datta, A. and Lall, S. (2023). Construction of Saturated D-optimal Designs for Mixture Experiments with a Non Normal Response using an Algorithmic Search. Bhartiya Krishi Anusandhan Patrika. 38(4): 320-323. doi: 10.18805/BKAP630.

Submitted: 27-01-2023 **Accepted:** 28-08-2023 **Online:** 02-11-2023

(3) फ्रूट स्क्वाश/पंच/जैम तैयार करना: विभिन्न मात्रा में फलों के रस का उपयोग करके तैयार किया जाता है चीनी, नमक आदि के साथ।

(4) फोटोग्राफिक फिल्में: सिल्वर हैलाइड, दो स्टेबलाइजर्स के अलग–अलग अनुपात से प्राप्त दो युग्मक विलायक और एक युग्मक से तैयार किया जाता है।

(5) तम्बाकू के मिश्रण: प्रसंस्कृत तम्बाकू, फ्लू–क्योर्ड तम्बाकू, तुर्किश सम्मिश्रण से मिश्रण प्राप्त किया जाता है।

कृषि प्रयोगों के मामले में मिश्रण प्रयोग की स्थिति, लागू इनपुट के कई स्रोत हो सकते हैं या इनपुट को अलग–अलग फसल विकास चरणों में विभाजित किया जा सकता है ताकि फसल पर लागू कुल मात्रा स्थिर रहें। उदाहरण के लिए, फलों और बागवानी प्रौद्योगिकी विभाग, भारतीय कृषि अनुसंधान संस्थान, नई दिल्ली में एक प्रयोग किया गया था विभिन्न अनुपातों में मिश्रित फलों के रस आंवला (Emblica officinalis) को मिश्रित कर ने की व्यवहार्यता का अध्ययन करने के लिए। 0:100; 5:95; 10:90; 15:85; 20:80; 25:75; 50:50; 75:25; 80:20; 85:15; 90:10; 95:5; 100:0; अनुपात लिए गए, पेय पदार्थों की सुगंध, स्वाद और पोषक तत्वों में सुधार के लिए रेडीटूसर्व (आरटीएस) पेय पदार्थों की तैयारी और मानकीकरण के लिए। एक मिश्रण प्रयोग को निरपेक्ष कहा जाता है यदि मिश्रण के गुण केवल अवयवों के अनुपात से निर्धारित होता है न कि मिश्रण के मात्रा से।

मिश्रण अभिकल्पनायें

मान लें कि एक मिश्रण q सामग्री को मिला कर प्राप्त किया गया है, और मान लें, $x = [x_1, x_2, \ldots, x_q]$ मिश्रण के क्यू अवयवों के अनुपात का वेक्टर है, और $y(x)$ प्रतिक्रिया का संगत माध्य है, यहाँ कारक स्थान को ज्यामितीय रूप से (q-1) आयामी सिंप्लेक्स Sq द्वारा दर्शाया जा सकता है (Scheffé 1958,63)।

$$S_q = \{x = [x_1, x_2, \ldots x_q]; 0 \le x_i \le 1, \sum_{i=1}^{q} x_i = 1 \forall\, i = 1,2,\ldots,q\}$$

सिम्पलेक्स का ज्यामितीय आकार सामग्री की संख्या में परिवर्तन के साथ बदल जाएगा यानी q=3 के लिए यह एक समबाहु त्रिभुज है, q=4 के लिए यह एक टेट्राहेड्रॉन है जैसा कि चित्र 1 में दर्शाया गया है।

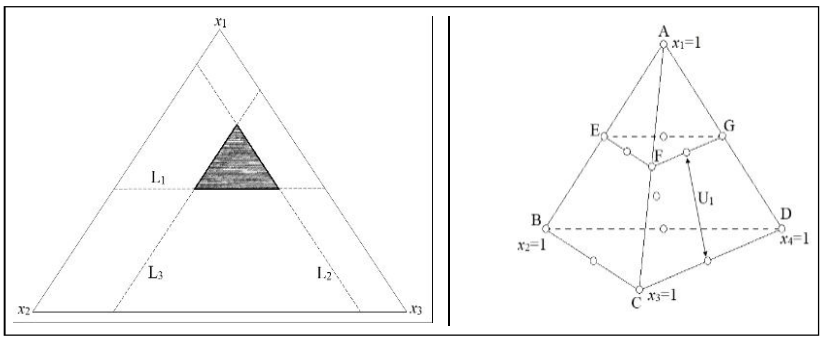
गैर–सामान्य प्रतिक्रियाएँ

मिश्रण प्रयोगों के मामले में अक्सर ऐसी स्थितियाँ होती हैं जहाँ प्राप्त प्रतिक्रिया गुणात्मक प्रकृति में होती है। उदाहरण के लिए, फ्रूट पंच के मामले में प्राप्त प्रतिक्रिया स्वाद हो सकती है जो एक गुणात्मक गुण है। इसी तरह, एक केक के लिए प्रतिक्रिया केक की बनावट हो सकती है जो एक गुणात्मक गुण भी है। गुणात्मक प्रतिक्रिया के लिए, चर आमतौर पर सामान्य वितरण का पालन नहीं करते हैं। सामान्यीकृत गैर–सामान्य प्रतिक्रिया वाले चर के मामले में जेनरलाइज्ड रैखिक मॉडल सेट अपका उपयोग किया जाता है। यहाँ, इस अध्यन में लॉजिस्टिक मॉडल का उपयोग किया गया है और लॉजिस्टिक मॉडल का उपयोग करके मिश्रण प्रयोगों के लिए अभिकल्पनायें प्राप्त किए गए हैं। लॉजिस्टिक मॉडल पर विचार किया गया है जहां स्थानीय रूप से डी–ऑप्टीमल अभिकल्पनायें तैयार करने के लिए त्रुटियों सामान्य रूप से वितरित नहीं होते हैं। प्रक्रिया अरेखीय मॉडल के समान ही रहती है, लेकिन त्रुटि वितरण धारणाओं के कारण FIM बदल जाता है।

लॉजिस्टिक मॉडल

लॉजिस्टिक मॉडल जैविक और सामाजिक विज्ञानों में सबसे व्यापक रूप से अध्ययन किए गए गैर–रैखिक मॉडल में से एक है। यह इनपुट चर और बाइनरी/ऑर्डिनल प्रतिक्रिया के बीच गैर–रैखिक संबंध स्थापित करता है।

$$P(Y=1) = \frac{e^{\gamma}}{1+e^{\gamma}} = \frac{1}{1+e^{-\gamma}},\ Y = 0,1$$



चित्र 1: q=3 एवं q=4 के लिए सिम्प्लेक्स का ज्यामितीय प्रतिनिधित्व।

जहां, γ रैखिक प्रेडिक्टर या व्याख्यात्मक चर χ का रैखिक फंक्शन है, एवं θ अज्ञात पैरामीटर है, तो लॉजिस्टिक मॉडल का रूप γ की पसंद पर निर्भर करता है। सबसे सरल मॉडल एक व्याख्यात्मक चर एवं दो मापदंडों के रूप में परिभाषित किया गया है:

$$\gamma(\chi, \theta) = \beta_0 + \beta_1\chi_1$$

परिभाषित लिनियर प्रेडिक्टर के साथ लॉजिस्टिक मॉडल के लिए एक अभिकल्पना का FIM निम्नलिखित सूत्र द्वारा दर्शाया जा सकता है:

$$M(\xi, \theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \frac{e^{-(\beta 0 + \beta 1\chi 1i)}}{(1 + e^{-(\beta 0 + \beta 1\chi 1i)})^2}\left[\frac{1}{\chi_{1i}} \frac{\chi_{1i}}{\chi^2_{1i}}\right]\theta = \theta_0$$

मिश्रण प्रयोगों में अभिकल्पना निर्माण के लिए एल्गोरिदम का उपयोग करने के कई फायदे है जैसे कि:

- अभिकल्पना के लिए रनों की संख्या चुनने में अधिक स्वतंत्रता।
- मिश्रण प्रयोगों में सामग्री के लिए अनुपात का चयन करने में अधिक स्वतंत्रता।
- विभिन्न मॉडलों की फिटिंग के लिए अभिकल्पना निर्माण में अधिक स्वतंत्रता।
- अभिकल्पना मानदंडों को पूरा करने के लिए अभिकल्पना के निर्माण में अधिक स्वतंत्रता।

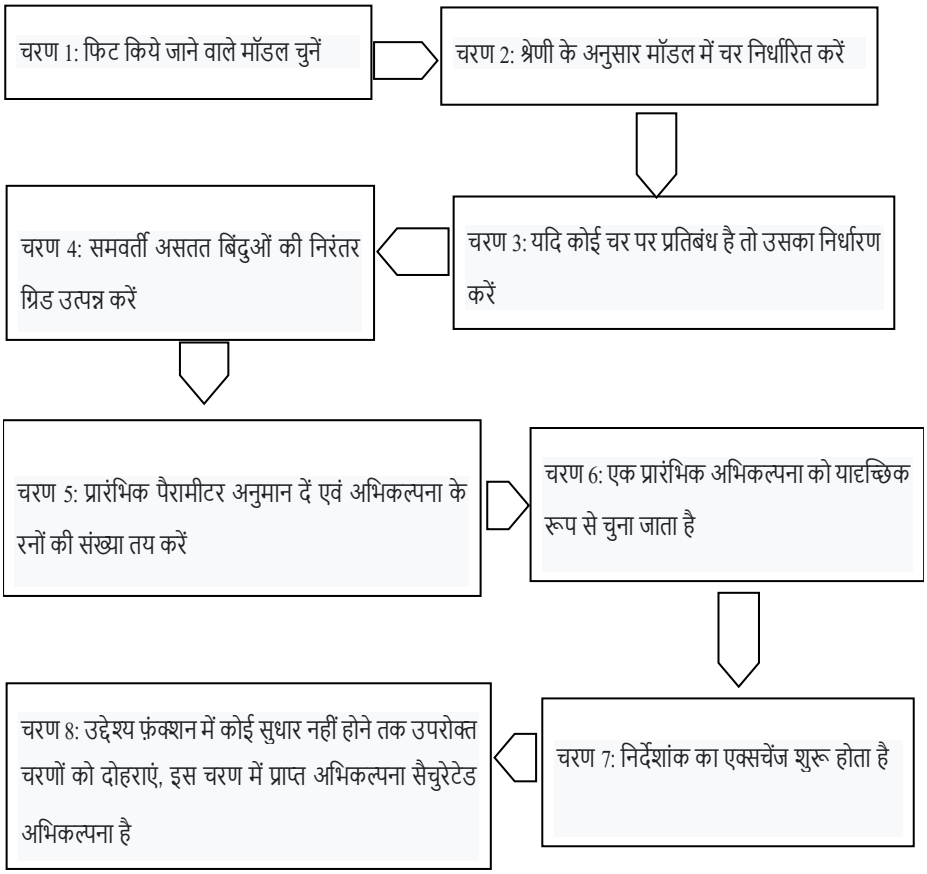
साहित्य में पहले से ही कुछ एल्गोरिदम उपलब्ध हैं जिनका उपयोग पहले डिजाइन निर्माण के लिए किया गया है। डेटमैक्स एल्गोरिथम (मिशेल, 1974), के एल–एक्सचेंज एल्गोरिथम (एटकिंसन और डोनेव, 1989), XVERT एल्गोरिथम (स्नी एंड मार्क्वाड, 1974), XVERT 1.0 एल्गोरिथम (निगम, 1983)। गैर–रैखिक मॉडल में ऑप्टीमल अभिकल्पना सिद्धांत के लिए उपलब्ध अधिकांश साहित्य केवल एक व्याख्यात्मक चर पर केंद्रित है। यद्यपि सैद्धांतिक परिणाम और बीजगणितीय समाधान खोजना चुनौतीपूर्ण हो सकता है, कई व्याख्यात्मक चर वाले मॉडल के मामले में इनका विस्तार करना मुश्किल है। इस मामले में एल्गोरिदम और ह्यूरिस्टिक्स का उपयोग करना अधिक उपयोगी है।

पद्धति

एक सैचुरेटेड अभिकल्पना का अर्थ है कि मॉडल में अनुमानित पैरामीटर की संख्या के बराबर अभिकल्पना का रन होता है। विकसित एल्गोरिथ्मका वर्णन सरल फ्लोवचार्ट (चित्र 2) में कुछ इस प्रकार है।

$$\phi_i = \theta_1 x_{i1} + \theta_2 x_{2i} + \theta_3 x_{i1} x_{2i}$$

ऊपर उल्लिखित लॉजिस्टिक समीकरण दो मिश्रण घटकों के साथ एक इंटरेक्शन मॉडल का प्रतिनिधित्व करता है।



चित्र 2: विकसित एल्गोरिथ्म का सरल फ्लोचार्ट द्वारा वर्णन मान लेते हैं।

तालिका 1: इंटरेक्शन के साथ दो मिश्रण घटकों के साथ लॉजिस्टिक मॉडल के तहत मिश्रण प्रयोग के लिए डी–ऑप्टीमल संतृप्त अभिकल्पना।

मॉडल	$\phi_i = \theta_1 x_{1i} + \theta_2 x_{2i} + \theta_3 x_{1i} x_{2i}$		
इन्क्रीमेंट	कैंडिडेट सेट का आकार	डी–ऑप्टीमल अभिकल्पना	
0.01	101	x_1	x_2
		0.00	1.00
		0.52	0.48
		1.00	0.00
0.02	51	x_1	x_2
		0.52	0.48
		1.00	0.00
		0.00	1.00
0.03	34	x_1	x_2
		0.52	0.48
		1.00	0.00
		0.00	1.00
0.04	26	x_1	x_2
		0.52	0.48
		1.00	0.00
		0.00	1.00
0.05	21	x_1	x_2
		0.50	0.50
		1.00	0.00
		0.00	1.00

x_1 और x_2 इंटरेक्शन टर्म के साथ जहां, θ_1, θ_2 और θ_3 मिश्रण से जुड़े तीन पैरामीटर हैं। इस प्रकार, इस स्थिति में प्राप्त संतृप्त डी–ऑप्टीमल अभिकल्पना तीन रन में एक अभिकल्पना है। प्रारंभिक पैरामीटर अनुमानों के साथ विभिन्न वेतन वृद्धि के लिए एल्गोरिथम के माध्यम से उत्पन्न अभिकल्पना निम्न तालिका 1 में सूचीबद्ध हैं।

उपरोक्त दर्शाई गई तालिका में, यह दिखाया गया है कि एल्गोरिथ्म को विभिन्न इन्क्रीमेंट वृद्धि के लिए चलाया गया है, जैसाकि 0.01, 0.02, 0.03, 0.04 और डी–ऑप्टीमल अभिकल्पना समान रहता है। क्रमशः बाइनरी ब्लेंड और शुद्ध मिश्रण सेयुक्त इन्क्रीमेंट वृद्धि 0.05 के लिए अभिकल्पना बिंदु थोड़ा बदल जाता है। इसी प्रकार विकसित एल्गोरिथ्म का उपयोग करके दूसरे मॉडल के लिए भी अभिकल्पनायें निर्माण कर सकते हैं।

निष्कर्ष

गुणात्मक प्रतिक्रिया परिवर्तनशील स्थिति के मामले में, चर आमतौर पर सामान्य वितरण का पालन नहीं करते हैं। यहाँ, इस अध्यन में लॉजिस्टिक मॉडल का उपयोग किया गया है और लॉजिस्टिक मॉडल का उपयोग करके मिश्रण प्रयोगों के लिए अभिकल्पनायें प्राप्त किए गए हैं। विकसित डी–ऑप्टीमल अभिकल्पनाओं की सूचना दी गई है। उपरोक्त स्थिति में, प्रस्तावित संशोधित फेडोरोव एल्गोरिथ्म सलूशन स्पेस के रूप में कैंडिडेट सेट पर बेहतर काम करता है। यह कैंडिडेट सेट मिश्रण प्रयोगों के लिए निरंतर अभिकल्पना स्थान का प्रतिनिधित्व करता है। सभी संगणनाएँ R सॉफ्टवेयर का उपयोग करके की गईं हैं।

REFERENCES

Atkinson, A.C. and Donev, A.N. (1989). The construction of exact d-optimum experimental designs with application to blocking response surface designs. Biometrika. 76(3): 515-526.

Cornell, J.A. (2002). Experiments with Mixtures. Third Edition. Wiley, New York.

Scheffé, H. (1958). Experiments with mixtures. Journal of Royal Statistical Society. Series B. 20: 344-360.

Scheffé, H. (1963). Simplex-centroid designs for experiments with mixtures. Journal of Royal Statistical Society. Series B. 20: 344-360.