

# Delineamentos para polinômios fracionários

Luzia A. Trinca <sup>1</sup>

## 1 Introdução

Polinômios de baixa ordem são amplamente utilizados para aproximar a relação entre uma resposta contínua e diversos fatores quantitativos contínuos em dados experimentais. No entanto, limitações são frequentes devido à falta de ajuste. Aumentando a ordem do modelo pode resolver esse problema, mas introduz relações implausíveis, além de dificuldade de interpretação. Muitas vezes somos apresentados a dados mostrando curvas ou superfícies assimétricas, às vezes com assíntotas, mas sem qualquer modelo mecanicista como justificativa. Royston e Altman (1994), inspirados na família de transformação Box-Tidwell (Box e Tidwell, 1962), propuseram o modelo polinomial fracionário como alternativa flexível para modelar dados observacionais. O polinômio fracionário de baixa ordem também é bastante interessante para modelar dados experimentais principalmente para estudos de superfície de resposta. No entanto, experimentos usuais, cujos fatores se apresentam com poucos níveis igualmente espaçados, não contem informação suficiente para estimar os parâmetros extras do polinômio fracionário já que, para cada grau e fator, há um parâmetro potência para se estimar, além do coeficiente de regressão.

Neste trabalho usamos um polinômio fracionário de segunda ordem mais parcimonioso (em função de apenas um parâmetro de potência) e obtemos delineamentos eficientes. Como o modelo é não linear, precisamos incorporar informações prévias para os parâmetros. Delineamentos eficientes são construídos sob diferentes formas de distribuição a priori aos parâmetros. A sensibilidade dos delineamentos é investigada sob diversos cenários.

## 2 Metodologia

Para uma variável explanatória  $x > 0$ , o FP de grau  $m$ ,  $FP_m$ , é dado por

$$\eta(x, \boldsymbol{\theta}) = \beta_0 + \varphi(x, \boldsymbol{\alpha}) = \sum_{r=0}^m \beta_r H_r(x),$$

na qual  $\eta(x, \boldsymbol{\theta})$  é uma função preditora,  $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\alpha}', \boldsymbol{\beta}')$  é o vetor de parâmetros e

$$H_r(x) = \begin{cases} 1 & r = 0 \\ x^{(\alpha_r)} & \alpha_r \neq \alpha_{r-1}; r = 1, \dots, m \\ H_{r-1} \log(x) & \alpha_r = \alpha_{r-1}; r = 1, \dots, m \end{cases}$$

para

$$x^{(\alpha_r)} = \begin{cases} x^{\alpha_r} & \alpha_r \neq 0 \\ \log(x) & \alpha_r = 0, \end{cases}$$

---

<sup>1</sup>Departamento de Bioestatística, IB, Unesp, Botucatu. e-mail: [luzia.trinca@unesp.br](mailto:luzia.trinca@unesp.br)

tal que  $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_m$ .

Nos modelos com múltiplas variáveis explanatórias, estimação de um parâmetro extra é necessária para cada termo de cada  $x$ , mas na prática espera-se que  $1 \leq m \leq 2$  seja suficiente para a maioria dos problemas. Para  $K \geq 1$  variáveis tem-se

- $m = 1 \rightarrow \text{FP1: } \eta(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) = \beta_0 + \beta_1 x_1^{(\alpha_1)} + \dots + \beta_1 x_K^{(\alpha_K)}$  com  $p = 1 + 2 \times K$  parâmetros.
- $m = 2 \rightarrow \text{FP2: } \varphi(x_j, \boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} \beta_j x_j^{(\alpha_{j1})} + \beta_{jj} x^{(\alpha_{j2})} & \alpha_{j1} \neq \alpha_{j2} \\ \beta_j x^{(\alpha_j)} + \beta_{jj} x^{(\alpha_j)} \log(x_j) & \alpha_{j1} = \alpha_{j2}, \end{cases}$   
 $j = 1, \dots, K$ , com  $p = 1 + 4 \times K$  parâmetros.

Valores de  $\alpha_j$ 's in  $S = \{-3, -2, -0.5, 0, 0.5, 1, 2, 3\}$  oferecem modelos bastante flexíveis e atrativos na prática.

FP1 e FP2 podem englobar curvas/superfícies com assíntotas, com pontos de máximo ou mínimo, simétricas e assimétricas. Podem ser implementados em modelos lineares, lineares generalizados, mistos e de Cox, por exemplo. São muito utilizados no ajuste de modelos em dados observacionais com tamanhos amostrais grandes.

Contudo, os modelos FP tem grande potencial para estudos de superfície de resposta, principalmente o de grau dois. No entanto, devido aos tamanhos dos experimentos serem limitados, a estimação dos parâmetros potência pode ficar comprometida. Redefinindo o FP2 como

$$\varphi(x_j, \boldsymbol{\theta}) = \beta_{j1} x_j^{(\alpha_j)} + \beta_{jj} \left\{ x_j^{(\alpha_j)} \right\}^2, \quad (1)$$

de forma que a ideia é, para cada fator, encontrar  $x_j^{(\alpha_j)}$ , ou seja, a métrica apropriada de  $x_j$  que acomoda o modelo de  $2^{nd}$  ordem. Mesmo para erros aditivos e homocedásticos, um modelo cujo preditor é composto por somas dos termos em (1) é não linear. Aplicando-se a teoria (ver Atkinson et al, 2008) verifica-se que o delineamento ótimo para modelos não lineares depende dos verdadeiros valores dos parâmetros sendo então necessário a incorporação de informação a priori. Apenas para ilustrar, note que para para  $K = 1$  and  $m = 1$  (FP1), a informação (por observação, erros Normais) para  $\boldsymbol{\theta} = (\beta_0, \beta_1, \alpha)'$  é

$$\mathbf{M}_i(\boldsymbol{\theta}, x_i) = \begin{pmatrix} 1 & x_i^{(\alpha)} & \beta_1 x_i^{(\alpha)} \log(x_i) \\ \cdot & \left\{ x_i^{(\alpha)} \right\}^2 & \beta_1 \left\{ x_i^{(\alpha)} \right\}^2 \log(x_i) \\ \cdot & \cdot & \beta_1^2 \left\{ x_i^{(\alpha)} \log(x_i) \right\}^2 \end{pmatrix}.$$

A informação total, considerando  $n$  observações é

$$\mathbf{M}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \mathbf{M}_i(\boldsymbol{\theta}, x_i),$$

de forma que o delineamento  $D$ -ótimo não depende de  $\boldsymbol{\beta}$  já que

$$\det(\mathbf{M}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x})) = \beta_1^2 \times \det(\mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{x}))$$

na qual  $\mathbf{M}(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{x})$  depende apenas de  $\mathbf{x}$  e  $\boldsymbol{\alpha}$ , mesmo se  $K > 1$ . Assim, para o FP1, apenas informação para  $\boldsymbol{\alpha}$  é requerida. Porém, para FP2, apenas informação para  $\beta_0$  não é necessária. Para  $K = 2$  e FP2, incluindo o termo de interação, a matriz de informação

é  $8 \times 8$  e por restrição de espaço, não será apresentada neste resumo. A expressão do preditor é

$$\eta(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) = \beta_0 + \beta_1 x_1^{(\alpha_1)} + \beta_{11} \left\{ x_1^{(\alpha_1)} \right\}^2 + \beta_2 x_2^{(\alpha_2)} + \beta_{22} \left\{ x_2^{(\alpha_2)} \right\}^2 + \beta_{12} x_1^{(\alpha_1)} x_2^{(\alpha_2)},$$

para  $x_1, x_2 > 0$ . Com os fatores  $x$ 's na escala original fica difícil a especificação de valores a priori para os coeficientes  $\beta$ 's devido a dependência entre os parâmetros (variáveis não centradas em zero). Mas é possível reparametrizar o modelo considerando  $x_j \in [x_{j0}, 1]$ ,  $j = 1, 2$ , tal que pode-se escrever

- inclinação (ou efeito linear):

$$\begin{aligned} \gamma_k &= \beta_k (1^{(\alpha_k)} - x_{k0}^{(\alpha_k)}) + \beta_{kk} (1^{(\alpha_k)} - x_{k0}^{(\alpha_k)}) (1^{(\alpha_k)} + x_{k0}^{(\alpha_k)}) + \\ &\quad \frac{1}{2} \beta_{12} (1^{(\alpha_k)} - x_{k0}^{(\alpha_k)}) (1^{(\alpha'_k)} + x_{k'0}^{(\alpha'_k)}) \end{aligned}$$

- curvatura (ou efeito quadrático):

$$\gamma_{kk} = \frac{1}{4} \beta_{kk} (1^{(\alpha_k)} - x_{k0}^{(\alpha_k)})^2$$

- interação:

$$\gamma_{12} = \frac{1}{2} \beta_{12} (1^{(\alpha_1)} - x_{10}^{(\alpha_1)}) (1^{(\alpha_2)} - x_{20}^{(\alpha_2)}).$$

Re-escrevendo o modelo em termos dos parâmetros  $\gamma_j$ ,  $\gamma_{jj}$  e  $\gamma_{12}$  obtém-se a matriz de informação  $\mathbf{M}$  para os parâmetros do FP2, que depende de todos os parâmetros exceto  $\beta_0$ .

Para construir delineamentos eficientes para estimação de FP's, neste trabalho investiga-se as seguintes estratégias:

1. Métodos para delineamentos localmente ótimos: usando valores pontuais como informação aos parâmetros.
2. Métodos para delineamentos Pseudo-Bayesianos:
  - 2.1 usando distribuições discretas para as potências e Normais para os  $\gamma$ 's.
  - 2.2 usando distribuições discretas para as potências e valores pontuais para os  $\gamma$ 's.

O critério de otimização ilustrado é o  $D$  (maximiza o determinante da matriz de informação). Para o caso pseudo-Bayesiano a função otimizada é dada por

$$\Phi(\mathbf{M}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\gamma})) = \sum_{\alpha_1, \alpha_2 \in S} \int_{\boldsymbol{\gamma}} \log\{\det[\mathbf{M}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\gamma})]\} f(\boldsymbol{\gamma}) d\boldsymbol{\gamma} f(\boldsymbol{\alpha}) d\boldsymbol{\alpha},$$

cujas integrais foram aproximadas utilizando quadratura de Gaussiana. Para construir os delineamentos exatos ( $n = 20$  fixo) foi utilizado o algoritmo *exchange* implementado em R (R Core Team, 2018). Apenas os resultados para  $K = 2$  e FP2 são apresentados na Seção 3.

### 3 Resultados

#### 3.1 Delineamentos localmente ótimos

Nessa Subseção são apresentados os resultados sob informação pontual para todos os parâmetros. O tamanho do experimento foi fixado em  $n = 20$ . Variou-se as potências de -1 a +1, porém em cada caso considerou-se  $\alpha_1 = \alpha_2$ . Os valores dos coeficientes de regressão foram mantidos os mesmos e dados por  $\gamma_1 = \beta_2 = \gamma_{12} = 1.0$ ;  $\gamma_{11} = \gamma_{22} = -2.5$ . Os delineamentos localmente  $D$ -ótimos são apresentados na Figura 1 e suas eficiências na Tabela 1. O último delineamento da Figura 1 representa o delineamento usual com quatro níveis igualmente espaçados para cada fator. Observa-se que quanto mais negativas as potências maior a concentração de tratamentos no canto inferior esquerdo da região experimental. Para potência igual a 1 o delineamento é bastante similar ao usual. Os valores das eficiências na Tabela 1 indicam bastante sensibilidade dos delineamentos ao valor de  $\alpha$ 's, sendo que as menores perdas se dão com a especificação de  $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$ .

Tabela 1: Eficiências para os delineamentos localmente  $D$ -ótimos para o FP2 (informação pontual para os parâmetros).

Valor real ( $\alpha_1, \alpha_2$ )	Delineamentos ( $\alpha_1 = \alpha_2$ )				
	-1.0	-0.5	0.0	+0.5	+1.0
(-1.0, -1.0)	100.0	98.5	90.9	80.2	50.0
(-0.5, -0.5)	99.4	100.0	97.3	87.1	64.9
( 0.0, 0.0)	92.8	96.7	100.0	94.4	81.2
(+0.5, +0.5)	81.9	89.6	97.4	100.0	97.0
(+1.0, +1.0)	62.9	72.4	82.4	93.6	100.0
(-1.0, -0.5)	99.8	99.2	94.1	83.3	57.5
(-1.0, 0.0)	96.7	97.2	95.4	86.3	64.2
(-1.0, +0.5)	91.3	92.8	94.7	88.7	70.3
(-1.0, +1.0)	80.5	82.9	87.5	84.9	71.4
(-0.5, 0.0)	96.4	98.4	99.0	90.8	72.8
(-0.5, +0.5)	90.5	93.9	97.8	92.9	79.5
(-0.5, +1.0)	79.7	84.1	90.3	89.2	80.7
( 0.0, +0.5)	87.2	92.9	98.8	96.9	88.7
( 0.0, +1.0)	76.6	83.3	91.1	93.3	90.1
(+0.5, +1.0)	72.0	80.7	89.9	96.9	98.8
perda média	12.8	9.2	6.2	9.4	22.1
perda máxima	37.1	27.6	17.6	19.8	49.1

Tabela 2: Distribuições a priori para  $\alpha$

Tipo	$\alpha$				
	-1.0	-0.5	0.0	0.5	1
$U_i$	.20	.20	.20	.20	.20
$S_i$	.10	.20	.40	.20	.10
$R_i$	.45	.30	.15	.07	.03
$L_i$	.03	.07	.15	.30	.45

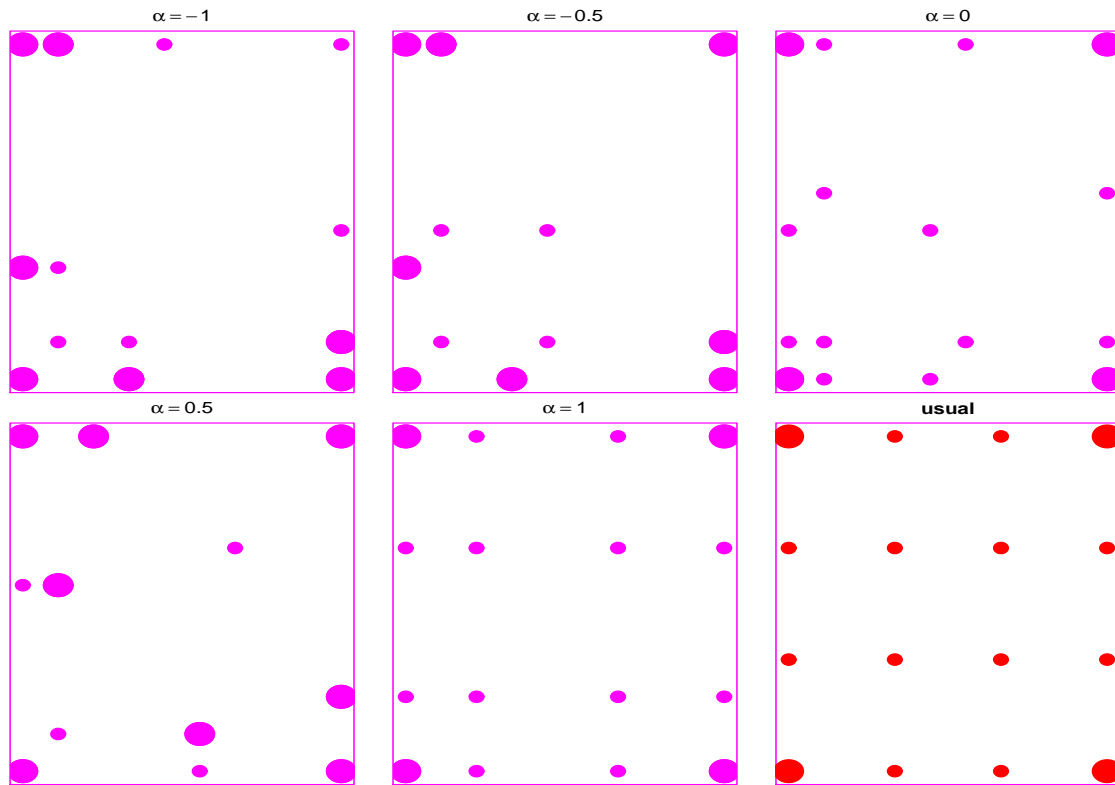


Figura 1: Delineamentos localmente  $D$ -ótimos para o FP2 (tamanhos dos círculos proporcionais ao número de repetições).

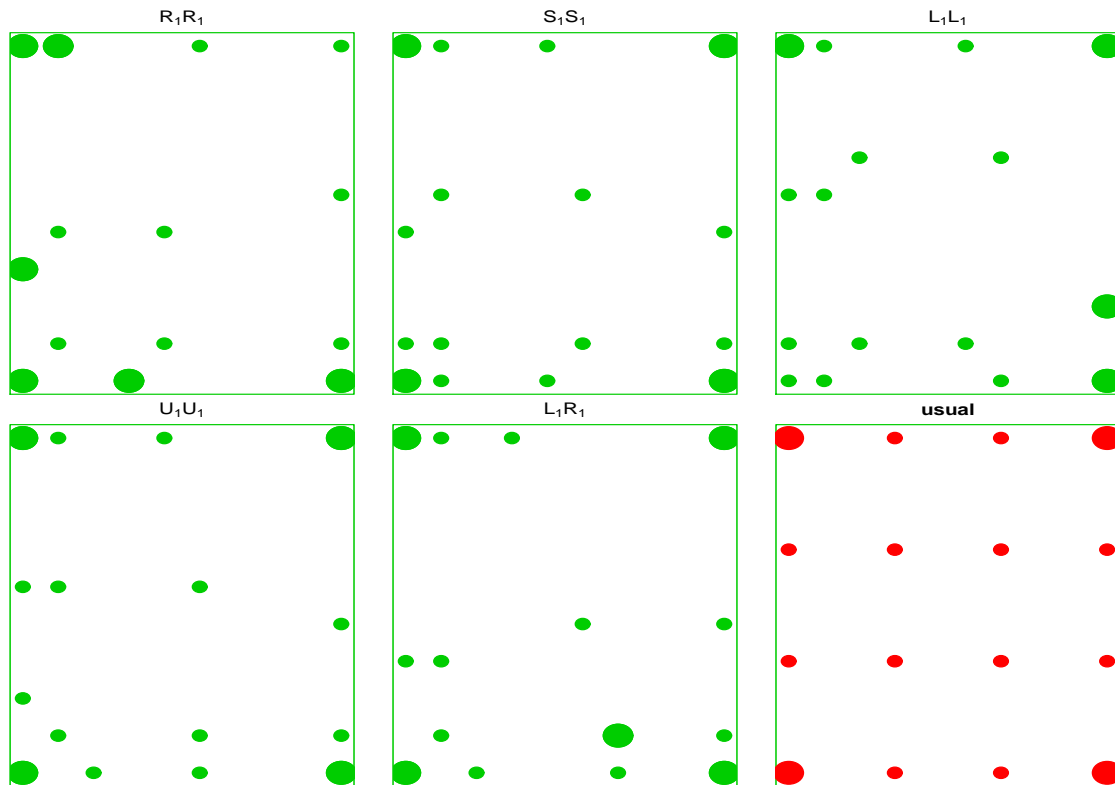


Figura 2: Delineamentos pseudo-Bayesianos para o FP2 (tamanhos dos círculos proporcionais ao número de repetições).

### 3.2 Delineamentos pseudo-Bayesianos

Para a construção de delineamentos pseudo-Bayesianos considerou-se  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_{12} \sim N(1.0, 0.2)$ ;  $\gamma_{11}, \gamma_{22} \sim N(-2.5, 0.5)$ , todos independentes. As distribuições discretas para  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  foram combinações dos padrões na Tabela 2.

Alguns dos delineamentos obtidos, rotulados pelo tipo de distribuições para as potências, são apresentados na Figura 2. A Tabela 3 apresenta as eficiências dos delineamentos indicando maior robustez dos mesmos quando avaliados sob condições diferentes daquelas utilizadas para sua construção. Em geral, os tratamentos são mais dispersos na região experimental do que os delineamentos da Figura 1. O uso de distribuições para  $\alpha$ 's simétricas em 0 também conduz a delineamentos menos sensíveis às demais prioris.

Tabela 3: Eficiências para os delineamentos pseudo-Bayesianos para o FP2.

Priori (real)	Delineamentos							
	$U_1U_2$ (1)	$U_1S_2$ (2)	$U_1R_2$ (3)	$U_1L_2$ (4)	$S_1S_2$ (5)	$R_1R_2$ (6)	$L_1L_2$ (7)	$L_1R_2$ (8)
$U_1U_2$	100.00	99.7	98.6	97.8	99.5	97.1	95.8	96.8
$U_1S_2$	99.8	100.00	98.7	97.2	99.7	97.2	95.6	97.1
$U_1R_2$	98.4	98.7	100.00	93.7	98.3	98.5	90.8	99.1
$U_1L_2$	99.2	98.0	94.6	100.00	98.0	93.1	98.7	91.9
$S_1S_2$	99.7	99.9	98.6	96.9	100.00	97.4	95.1	96.4
$R_1R_2$	97.0	97.1	98.5	92.5	97.1	100.00	87.1	96.2
$L_1L_2$	98.3	97.1	93.6	99.3	96.4	89.1	100.00	92.9
$L_1R_2$	97.4	97.8	99.1	92.5	96.7	94.5	92.6	100.00
perda média	1.3	1.5	2.3	3.8	1.8	4.2	5.6	3.7
perda máxima	3.0	2.9	6.4	7.5	3.6	10.9	12.9	8.1

Todos os delineamentos obtidos considerando informação pontual para os  $\gamma$ 's (e usando distribuição de probabilidade só para as potências) foram equivalentes aos pseudo-Bayesianos, indicando certa falta de sensibilidade dos delineamentos (ou do critério  $D$ ) a esses parâmetros. No entanto, os valores pontuais considerados foram iguais às médias das distribuições Normais no caso pseudo-Bayesiano. Investigação mais detalhada nesse aspecto é necessária para se ter um resultado mais conclusivo.

Por fim, as performances dos delineamentos localmente ótimos foram avaliadas comparando-os com os pseudo-Bayesianos. As eficiências são apresentadas na Tabela 4 e mostram que perdas consideráveis podem ocorrer com o uso de valores pontuais, embora, novamente o uso do valor  $\alpha = 0$  se mostre bastante robusto.

## 4 Conclusões

Resumidamente, as conclusões desse estudo são:

1. Frequentemente, para fatores contínuos, apenas 3 ou 4 níveis igualmente espaçados são utilizados tornando os experimentos ineficientes para estimar os parâmetros  $\alpha$ 's caso necessário.
2. Esse estudo preliminar mostrou que delineamentos  $D$ -ótimos não são muito sensíveis aos parâmetros de regressão ( $\gamma$ 's).

Tabela 4: Eficiências dos delineamentos localmente ótimos em relação aos pseudo-Bayesianos

p-Bayesiano	Localmente ( $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ )				
	$\alpha = -1$	$\alpha = -.5$	$\alpha = 0$	$\alpha = .5$	$\alpha = 1$
$R_1R_2$	99.0	99.7	97.1	88.0	64.7
$S_1S_2$	92.6	96.6	100.0	95.6	81.5
$L_1L_2$	79.9	87.6	95.7	99.6	96.4
$U_1U_2$	91.8	95.9	99.3	95.8	81.2
$U_1S_2$	92.2	96.2	99.6	95.6	81.3
$U_1R_2$	95.4	97.6	98.3	91.7	72.4
$U_1L_2$	85.8	91.6	97.6	97.6	88.5
$L_1R_2$	89.3	92.8	96.7	93.1	78.9
perda média	9.3	5.3	2.0	5.4	19.4
perda máxima	20.1	12.4	4.3	12.0	35.3

3. Distribuições a priori simétricas em zero para os  $\alpha$ 's resultaram em delineamentos com as menores perdas de eficiências quando avaliados sob outras situações.
4. O procedimento para construção de delineamentos apresenta demanda computacional alta o que pode afetar as situações com mais fatores.

## Referências Bibliográficas

Atkinson, A. C.; Donev, A. N.; Tobias, R. D. *Optimum experimental designs, with SAS*. Oxford: Oxford University Press, 2007. 511p.

Royston, P. and Altman, D. G. Regression using fractional polynomials of continuous covariates: parsimonious parametric modelling. *Applied Statistics*, v. 43, p.429-467, 1994.

Box, G. E. P.; P. W. Tidwell. Transformation of the independent variables. *Technometrics*, v. 4, p.531-550, 1962.

R CORE TEAM. *R: A language and environment for statistical computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. 2018. ISBN 3-900051-07-0, URL <http://www.R-project.org/>.