PLISKA

STUDIA MATHEMATICA BULGARICA

ПЛИСКА

БЪЛГАРСКИ МАТЕМАТИЧЕСКИ СТУДИИ

О НЕКОТОРЫХ ПОДХОДАХ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ ОПТИМАЛЬНОГО ПЛАНИРОВАНИЯ РЕГРЕССИОННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

ВЛАДИМИР К. КАИШЕВ, АНАТОЛИЙ А. НАУМОВ

Известно, что определенным обобщением классического подхода к задачам планирования экспериментов является подход, учитывающий наряду со случайными ошибками измерений и систематические ошибки. Эти ошибки могут быть обусловлены, например, неточной априорной информацией об истинной функции регрессии или желанием экспериментатора уменьшить общее число экспериментов.

В настоящей работе рассматриваются методы синтеза оптимальных планов, близкие к методам прямых произведений, учитывающие наличие ошибок двух видов (случайной и систематической).

1. Постановка задачи. Большой вклад в развитие методов несмещенного планирования регрессионных экспериментов внесли С. М. Ермаков, Е. В. Седунов (см [7,8]), В. В. Федоров, Ю. П. Адлер и др. Рассмотрим следующую задачу.

Пусть экспериментатору известно, что истинное уравнение регрессии имеет вид

$$\mathsf{E}(y\mid x)=f(x,a)=a^T\varphi(x)=a_0^T\varphi_0(x)+a_1^T\varphi_1(x), \tag{1}$$

где y — случайная величина, $y\sim\mathcal{N}(f(x,a),\sigma^2)$, $x=(\bar{x}_1,\bar{x}_2,\dots,\bar{x}_k)'$ — вектор независимых переменных (факторов), определенных на компактном множестве $X\subseteq\mathsf{R}^k$, $a^T=(a_0^T,a_1^T)$ — вектор неизвестных параметров.

Необходимо найти план эксперимента ξ,

$$\xi=\begin{pmatrix}x_0, x_1,\dots,x_N\\ \xi_0,\xi_1,\dots,\xi_N\end{pmatrix},\quad Z=\{\xi\mid x_i\in X,\ i=0,1,\dots,N,\ \xi_i>0,\ \sum_{i=0}^N\xi_i=1\}, \tag{2}$$

при котором оценка рабочей модели

$$g(x,\hat{a}_3)=\hat{a}_3^T\varphi_3(x)=\hat{a}_0^T\varphi_0(x)+\hat{a}_2^T\varphi_2(x) \tag{3}$$

приближала бы функцию (1) наилучшим образом в смысле среднеквадратического критерия близости:

$$B=\int_{X_0}\omega(x)[f(x,a)-\mathsf{E}\,g(x,\hat{a}_3)]^2dx, \tag{4}$$

$$X_0\subseteq\mathsf{R}^k,\ \omega(x)\geq 0,\quad x\in X_0,\ \int_{X_0}\omega(x)dx=1.$$

Будем полагать, что $\varphi^T(x)=(\varphi_0^T(x),\varphi_1^T(x))$, $\varphi_3^T(x)=(\varphi_0^T(x),\varphi_2^T(x))$ — базисные векторы двух линейных конечномерных пространств F и G, непрерывных на X и X_0 функций, причем $F=F_0\oplus F_1$, $G=F_0\oplus F_2$, $F_0=F\cap G$, $\varphi_i(x)$ — базисные векторы пространств F_i, $i=0, 1, 2$, $\dim F_i=(n_i+1)$, $i=0, 1, 2$.

Будем считать, что выполняется цепочка неравенств $n_0+n_1+2>N+1 \geqq n_0+n_2+2$. Оценка $g(x, \widehat{a_3})$ находится по результатам независимых измерений

$$y_{ji}=y(x_j)=f(x_j, a)+e_{ji},\ i=1, 2, \ldots, (Q+1)\xi_j,$$

в $(N+1)$-ой точке плана $x_i\in X$, $i=0, 1, \ldots, N$, где $(Q+1)$ — общее число экспериментов. При этом оценка вектора $\widehat{a}_3$ находится с помощью матрицы оценивания T размерности $(n_0+n_2+2)\times(N+1)$ следующим образом:

$$\widehat{a}_3=T\widehat{y}=T\operatorname{diag}(\sqrt{\xi_i})_{i=0}^{N}\cdot\bar{y}, \tag{5}$$

где $\bar{y}^{\mathrm{T}}=(\bar{y}_0, \bar{y}_1, \ldots, \bar{y}_N)$ — вектор усредненных значений результатов измерений.

2. Минимизация систематической ошибки. Параметры a_1 в функционале (4) будем называть *мешающими параметрами* [1] (или M-параметрами). Справедливо следующее утверждение.

Теорема 1. *Оптимальный в смысле критерия B и не зависящий от M-параметров (M-инвариантный) способ оценивания параметров в* (3) *удовлетворяет равенству*

$$M_{33}T\Phi=M_3. \tag{6}$$

Здесь

$$M_{33}=\int_{X_0}\omega(x)\varphi_3(x)\varphi_3^T(x)dx,$$

$$M_3=\int_{X_0}\omega(x)\varphi_3(x)\varphi^T(x)dx,$$

$$\Phi=\begin{pmatrix}\sqrt{\xi_0} & \varphi^T(x_0)\\ \vdots & \vdots\\ \sqrt{\xi_N} & \varphi^{\mathrm{T}}(x_N)\end{pmatrix}.$$

Доказательство. Продифференцировав ошибку B по $\alpha_3=\mathsf{E}\widehat{a}_3$ и приравняв полученную производную нулю, получаем

$$\frac{\partial B}{\partial\alpha_3}=2(M_{33}\alpha_3-M_3a)=0.$$

При условии, что оптимальный оцениватель T не зависит от истинных значений параметров a_0 и a_1 и учитывая, что $\alpha_3=T\Phi a$, необходимое условие оптимальности T вида (6) можно считать доказанным.

В то же время вторая производная $\partial^2B/\partial\alpha_3^2=M_{33}$, матрица M_{33} положительно определенная, что и доказывает теорему 1.

3. Метод прямых произведений. Известно, что основная идея метода прямых произведений построения оптимальных планов заключается в том, чтобы свести исходную задачу построения оптимальных планов на области X к нескольким, как правило более простым в вычислительном отношении, задачам планирования на областях $\bar{X}_i$, $i=0, 1, \ldots, m$, $X=\times_{i=0}^{m}\bar{X}_i$, [2, 3].

Итак, пусть необходимо найти Ψ-оптимальный план на множестве планов Z_k, где

$$Z_k=\{\xi\in Z \mid M_{33}(\Phi_3^T\Phi_3)^{-1}\Phi_3^T\Phi=M_3,\tag{7}$$

$$\det(\Phi_3^T\Phi_3)|_\xi\neq 0,\ \Phi_3^T\Phi_3|_\xi=\sum_{i=0}^{N}\xi_i\varphi_3(x_i)\varphi_3^T(x_i)\},$$

при использовании оценивателя $T=(\Phi_3^T\Phi_3)^{-1}\Phi_3^T$, т. е. нужно решить оптимизационную задачу:

$$\Psi[D(\xi)]=\Psi\left[\frac{\sigma^2}{Q+1}(\Phi_3^T\Phi_3)^{-1}\right]\to\inf_\xi\tag{8}$$

при ограничениях

$$\xi\in Z,\ M_{33}(\Phi_3^T\Phi_3)^{-1}\Phi_3^T\Phi=M_3,\ \det(\Phi_3^T\Phi_3)\neq 0.\tag{9}$$

Предположим, что

1) $X=\bar{X}_1\times\bar{X}_2\times\cdots\times\bar{X}_k$;

2) $\varphi_i(x)=\varphi_{i1}(\bar{x}_1)\otimes\varphi_{i2}(\bar{x}_2)\otimes\cdots\otimes\varphi_{ik}(\bar{x}_k)$, $i=0,\ 1,\ 2,$ где $\varphi_{ij}(\bar{x}_j)$ — вектор-столбец непрерывных на $\bar{X}_j$ функций одной переменной $\bar{x}_j$ и размерность вектора $\varphi_{ij}(\bar{x}_j)$ равна $n_i^{(j)}+1$, $i=0,1,2$; $j=1,2,\ldots,k$;

3) $X_0=X_0^{(1)}\times X_0^{(2)}\times\cdots\times X_0^{(k)}$;

4) $\omega(x)=(\omega_1(\bar{x}_1),\omega_2(\bar{x}_2),\ldots,\omega_k(\bar{x}_k))$, где $\omega_i(\bar{x}_i)$ — неотрицательная весовая функция, определенная на $X_0^{(i)}$, $i=1,2,\ldots,k$. Здесь „$\times$" и „$\otimes$" — символы соответственно декартова и прямого произведений.

Введем некоторые обозначения. Пусть D-оптимальный M-инвариантный план эксперимента — решение задачи

$$\det(\Phi_3^{(i)T}\Phi_3^{(i)})^{-1}\to\inf_{\xi^{(i)}}\tag{10}$$

при ограничениях

$$\xi_j^{(i)}>0,\ j=0,1,\ldots,N_i,\ \sum_{j=0}^{N_i}\xi_j^{(i)}=1,\ x_{ij}\in\bar{X}_i,\ j=0,1,\ldots,N_i,$$

$$M_{33}^{(i)}(\Phi_3^{(i)T}\Phi_3^{(i)})^{-1}\Phi_3^{(i)T}\Phi^{(i)}=M_3^{(i)},\ \det(\Phi_3^{(i)T}\Phi_3^{(i)})\neq 0.\tag{11}$$

Обозначим это решение через $\xi_D^{(i)*}$, $i=1,2,\ldots,k$, причем

$$\xi_D^{(i)*}=\begin{pmatrix}x_{i0}^*, & x_{i1}^*,\ldots, & x_{iN_i}^*\\ \xi_0^{(i)*}, & \xi_1^{(i)*},\ldots, & \xi_{N_i}^{(i)*}\end{pmatrix},\quad i=1,2,\ldots,k.$$

Здесь

$$M_{33}^{(i)}=\int_{X_0^{(i)}}\omega_i(\bar{x}_i)\begin{pmatrix}\varphi_{0i}(\bar{x}_i)\\ \varphi_{2i}(\bar{x}_i)\end{pmatrix}(\varphi_{0i}^T(\bar{x}_i),\ \varphi_{2i}^T(\bar{x}_i))d\bar{x}_i,$$

$$M_3^{(i)}=\int_{X_0^{(i)}}\omega_i(\bar{x}_i)\begin{pmatrix}\varphi_{0i}(\bar{x}_i)\\ \varphi_{2i}(\bar{x}_i)\end{pmatrix}(\varphi_{0i}^T(\bar{x}_i),\ \varphi_{1i}^T(\bar{x}_i))d\bar{x}_i,$$

$$\Phi_3^{(i)T}\Phi_3^{(i)}=\sum_{j=0}^{N_i}\xi_j^{(i)}\begin{pmatrix}\varphi_{0i}(x_{ij})\\ \varphi_{2i}(x_{ij})\end{pmatrix}(\varphi_{0i}^T(x_{ij}),\quad \varphi_{2i}^T(x_{ij})),$$

$$\Phi_3^{(i)T}\Phi^{(i)}=\sum_{j=0}^{N_i}\xi_j^{(i)}\begin{pmatrix}\varphi_{0i}(x_{ij})\\ \varphi_{2i}(x_{ij})\end{pmatrix}(\varphi_{0i}^T(x_{ij}),\quad \varphi_{1i}^T(x_{ij})),$$

$$i=1,2,\ldots,k,\ \prod_{i=1}^{k}(N_i+1)=N+1.$$

Теорема 2. *D-оптимальный M-инвариантный план эксперимента ξ_D^* имеет вид*

$$\xi_D^*=\begin{pmatrix}x_0^*, & x_1^*, & \ldots, & x_N^*\\ \xi_0^*, & \xi_1^*, & \ldots, & \xi_N^*\end{pmatrix}, \tag{12}$$

где $\xi_i^*=\xi_l^{(1)*}\xi_m^{(2)*}\cdots\xi_n^{(k)*}$, $x_i^*=(x_{1l}^*, x_{2m}^*, \ldots, x_{kn}^*)$, $i=0,1,\ldots N$; $l=0,1,\ldots,N_1$; $m=0,1,\ldots,N_2$; $\ldots$; $n=0,1,\ldots,N_k$.

Доказательство. 1. Покажем, что план (12) является планом, удовлетворяющим условиям

$$M_{33}(\Phi_3^T\Phi_3)^{-1}\Phi_3^T\Phi=M_3,\ \det(\Phi_3^T\Phi_3)\neq 0. \tag{13}$$

С этой целью запишем равенства

$$\Phi=\Phi^{(1)}\otimes\Phi^{(2)}\otimes\cdots\otimes\Phi^{(k)},\quad \Phi_3=\Phi_3^{(1)}\otimes\Phi_3^{(2)}\otimes\cdots\otimes\Phi_3^{(k)},$$

$$\Phi_3^T\Phi_3=(\Phi_3^{(1)T}\Phi_3^{(1)})\otimes(\Phi_3^{(2)T}\Phi_3^{(2)})\otimes\cdots\otimes(\Phi_3^{(k)T}\Phi_3^{(k)}),$$

$$\Phi_3^T\Phi=(\Phi_3^{(1)T}\Phi^{(1)})\otimes(\Phi_3^{(2)T}\Phi^{(2)})\otimes\cdots\otimes(\Phi_3^{(k)T}\Phi^{(k)}),$$

$$M_{33}=M_{33}^{(1)}\otimes M_{33}^{(2)}\otimes\cdots\otimes M_{33}^{(k)},\quad M_3=M_3^{(1)}\otimes M_3^{(2)}\otimes\cdots\otimes M_3^{(k)},$$

$$M_{33}(\Phi_3^T\Phi_3)^{-1}\Phi_3^T\Phi=\bigotimes_{i=1}^{k}M_{33}^{(i)}(\Phi_3^{(i)T}\Phi_3^{(i)})^{-1}\Phi_3^{(i)T}\Phi^{(i)}.$$

Учитывая, что для планов $\xi_D^{(i)*}$, $i=1,2,\ldots,k$, выполняются условия (11), план ξ_D^* удовлетворяет условиям (13).

2 Покажем, что ξ_D^* — D-оптимальный план эксперимента. Для этого запишем следующую последовательность равенств:

$$\varphi_3^T(x)(\Phi_3^T\Phi_3)^{-1}\varphi_3(x)=\left[\begin{pmatrix}\varphi_{01}(\bar{x}_1)\\ \varphi_{21}(\bar{x}_1)\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}\varphi_{02}(\bar{x}_2)\\ \varphi_{22}(\bar{x}_2)\end{pmatrix}\otimes\cdots\otimes\begin{pmatrix}\varphi_{0k}(\bar{x}_k)\\ \varphi_{2k}(\bar{x}_k)\end{pmatrix}\right]^T$$

$$\times[(\Phi_3^{(1)T}\Phi_3^{(1)})\otimes(\Phi_3^{(2)T}\Phi_3^{(2)})\otimes\cdots\otimes(\Phi_3^{(k)T}\Phi_3^{(k)})]^{-1}\left[\begin{pmatrix}\varphi_{01}(\bar{x}_1)\\ \varphi_{21}(\bar{x}_1)\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}\varphi_{02}(\bar{x}_2)\\ \varphi_{22}(\bar{x}_2)\end{pmatrix}\right.$$

$$\left.\otimes\cdots\otimes\begin{pmatrix}\varphi_{0k}(\bar{x}_k)\\ \varphi_{2k}(\bar{x}_k)\end{pmatrix}\right]=\prod_{i=1}^{k}\begin{pmatrix}\varphi_{0i}(\bar{x}_i)\\ \varphi_{2i}(\bar{x}_i)\end{pmatrix}^T\cdot(\Phi_3^{(i)T}\Phi_3^{(i)})^{-1}\begin{pmatrix}\varphi_{0i}(\bar{x}_i)\\ \varphi_{2i}(\bar{x}_i)\end{pmatrix}.$$

Поскольку выполняются соотношения

$$\max_{x\in X_1}\varphi(x,\xi_D^*)=\max_{x\in X_1}\varphi_3^T(x)(\Phi_3^T\Phi_3)^{-1}|_{\xi_D^*}\varphi_3(x)$$

$$=\prod_{i=1}^{k}\max_{x\in X_1^{(i)}}\begin{pmatrix}\varphi_{0i}(\bar{x}_i)\\ \varphi_{2i}(\bar{x}_i)\end{pmatrix}^T(\Phi_3^{(i)T}\Phi_3^{(i)})^{-1}|_{\xi_D^{(i)*}}\begin{pmatrix}\varphi_{0i}(\bar{x}_i)\\ \varphi_{2i}(\bar{x}_i)\end{pmatrix}$$

$$=\prod_{i=1}^{k}(n_0^{(i)}+n_2^{(i)}+2)=n_0+n_2+2,$$

где $X_1^{(i)}, i=1,2,\ldots,k$ — подмножества точек областей $\bar{X}_i, i=1,2,\ldots,k$, для которых имеет место (11), $X_1=\times_{i=1}^{k}X_1^{(i)}$, то теорема доказана.

Теорема 3 [4]. *Необходимым и достаточным условием применимости метода прямых произведений к решению задачи* (8) — (9) *построения Ψ-оптимальных M-инвариантных планов является равенство*

$$\frac{\partial\Psi[D(\xi)]}{\partial D(\xi)}=\bigotimes_{i=1}^{k}\frac{\partial\Psi[D^{(i)}(\xi)]}{\partial D^{(i)}(\xi)},\tag{14}$$

где $D(\xi)=\otimes_{i=1}^{k}D^{(i)}(\xi)$, $D^{(i)}(\xi)=(\Phi_3^{(i)T}\Phi_3^{(i)})^{-1}$.

Таким образом, построение D- и L-оптимальных, усеченных D-, L-, A Q-оптимальных M-инвариантных планов может быть проведено с использованием метода прямых произведений.

4. Примеры. Для построения оптимальных планов по методу прямых произведений при наличии случайной и систематической ошибок были разработаны алгоритмы и программы для ЭВМ [5, 6].

Пример 1. Рассмотрим двухфакторную задачу [6]:

$$\bar{x}_i\in X=\{x\,|-1\le\bar{x}_i\le 1,\ i=1,2\},$$

$$\omega(x)=1-\bar{x}_1-\bar{x}_2+\bar{x}_1\bar{x}_2,\quad \varphi^T(x)=(1,\bar{x}_1,\bar{x}_2,\bar{x}_1\bar{x}_2,\bar{x}_1^2,$$

$$\bar{x}_2^2,\bar{x}_1^2\bar{x}_2,\bar{x}_1^2\bar{x}_2^2,\bar{x}_1\bar{x}_2^2,\bar{x}_1^3,\bar{x}_1^3\bar{x}_2,\bar{x}_1^3\bar{x}_2^2,\bar{x}_2^3,\bar{x}_1\bar{x}_2^3,$$

$$\bar{x}_1^4,\bar{x}_1^4\bar{x}_2^2,\bar{x}_1^4\bar{x}_2,\bar{x}_1^2\bar{x}_2^3,\bar{x}_1^3\bar{x}_2^3,\bar{x}_1^4\bar{x}_2^3)=(\varphi_3^T(x),$$

$$\bar{x}_2^3,\bar{x}_1\bar{x}_2^3,\bar{x}_1^4,\bar{x}_1^4\bar{x}_2^2,\bar{x}_1^4\bar{x}_2,\bar{x}_1^2\bar{x}_2^3,\bar{x}_1^3\bar{x}_2^3,\bar{x}_1^4\bar{x}_2^3),$$

$$N+1=12.$$

Тогда D-оптимальный план имеет вид

$$\xi_D^*=\begin{pmatrix}(\alpha,\delta), & (\alpha,-\lambda), & (\alpha,\mu), & (\alpha,-\nu), & (\beta,\delta), & (\beta,-\lambda), & (\beta,\mu), & (\beta,-\nu), & (\gamma,\delta), & (\gamma,-\lambda)\\ \xi_0 & \xi_1 & \xi_2 & \xi_3 & \xi_4 & \xi_5 & \xi_6 & \xi_7 & \xi_8 & \xi_9\end{pmatrix.}$$

$$\begin{matrix}(\gamma,\mu), & (\gamma,-\nu)\\ \xi_{10} & \xi_{11}\end{matrix}\Bigg),$$

$$\alpha=-0,181,\ \beta=0{,}575,$$

$$\gamma=-0{,}823,\ \delta=0{,}167,\ \lambda=0{,}446,\ \mu=0{,}72,\ \nu=0{,}886,\ \xi_i=0{,}0833.$$

Пример 2. Критерий ортогональности, $\bar{x}_i \in X = \{x \mid -1 \leq \bar{x}_i \leq 1,\ i=1\}$, $\omega(x) = 1/2$, $x \in X$, $\sigma^2 = \sigma^2(x) = 1 - x$, $x \in X$, $N+1=3$,

$$\varphi^T(x) = (1,\ \bar{x}_1,\ \bar{x}_1^2,\ \bar{x}_1^3),\ \varphi_3^T(x) = (1,\ \bar{x}_1,\ \bar{x}_1^2),$$

$$\xi_\perp^* = \begin{pmatrix} \alpha, & \beta, & \gamma \\ 0{,}402 & 0{,}222 & 0{,}376 \end{pmatrix},$$

где α, β и γ совпадают с соответствующими значениями из примера 1.

5. Заключение. Приведенные в настоящей работе результаты позволяют относительно легко строить D-, L-оптимальные планы для многофакторной регрессии при наличии случайной и систематической ошибок, опираясь на соответствующие оптимальные планы для каждого из факторов

ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Федоров. Теория оптимального эксперимента. Москва, 1971.
2. И. Ф. Петерсен, Я. П. Кукс. Метод прямых произведений для построения планов регрессионных экспериментов. *Заводская лаборатория*, **37**, 1971, 57—60.
3. Г. К. Круг, В. К. Каишев. D-оптимальный план для одного класса регрессионных функций. *Заводская лаборатория*, **43**, 1977, 858—860.
4. А. А. Наумов. О численных методах синтеза оптимальных несмещенных планов регрессионных экспериментов. I. Метод прямых произведений. Новосибирск, 1978 (Деп. в ВИНИТИ, № 2, 41—79).
5. В. И. Денисов, Г. Р. Колонин, А. А. Наумов. Программы по оптимальному планированию экспериментов и статистическому анализу данных при наличии систематической ошибки для ЕС ЭВМ. — В: Алгоритмы и программы. Москва, 1980.
6. А. А. Наумов. О некоторых вопросах построения математического обеспечения оптимального M-инвариантного планирования регрессионных экспериментов. — В: Применение ЭВМ в оптимальном планировании и управлении. Вып. 3, Новосибирск, 1978, 63—65.
7. С. М. Ермаков. Об оптимальных несмещенных планах регрессионных экспериментов. *Труды Мат. инст. АН СССР*, **111**, 1970, 252—257.
8. Е. В. Седунов. Несмещенное планирование и анализ регрессионных экспериментов в конечномерных пространствах функций. — В: Математические методы планирования эксперимента. Новосибирск, 1981, 102—140.

Единый центр математики и механики
1090 София П. Я. 373

Кафедра математики
Новосибирского электротехнического института, Новосибирск, СССР

Поступила 24. 3. 1982