Пепелышев
Андрей Николаевич

Исследование оптимальных планов эксперимента на основе функционального подхода

Оптимальные планы в аналитическом виде найдены

- Для линейных по параметрам моделей на стандартных множествах планирования

- Для нелинейных по параметрам моделей с двумя-тремя параметрами

Применяемый в диссертации функциональный подход позволяет найти оптимальные планы для более широкого класса моделей

В диссертации изучены

- Две линейные по параметрам модели на произвольном отрезке $[a,b]$
- Три нелинейные по параметрам модели с произвольным числом параметров
- Планы для оценивания точки экстремума многомерной квадратичной регрессии на гипершаре и гиперкубе

Постановка задачи

План эксперимента

$$\xi = \begin{pmatrix} x_1 & \dots & x_n \\ w_1 & \dots & w_n \end{pmatrix}$$

Оптимальный план

$$\xi^* = \arg\max_{\xi} \Phi(M(\xi)) \qquad \xi^* = \arg\min_{\xi} \Psi(M^{-1}(\xi))$$

Для линейной по параметрам регрессии $\eta(x) = \beta^T f(x)$, где $f(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))^T$ — вектор заданных базисных функций, $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_m)^T$ — вектор неизвестных параметров, информационная матрица имеет вид

$$M(\xi) = \left(\sum_{l=1}^{n} f_i(x_l) f_j(x_l) w_l \right)_{i,j=1}^{m}$$

Для нелинейной по параметрам функции регрессии $\eta(x,\beta)$ информационная матрица имеет вид

$$M(\xi) = M(\xi,\beta) = \left(\sum_{l=1}^{n} \frac{\partial\eta(x_l,\beta)}{\partial\beta_i}\frac{\partial\eta(x_l,\beta)}{\partial\beta_j} w_l\right)_{i,j=1}^{m}$$

$$\xi^* = \arg\max_{\xi} \Phi(M(\xi,\beta^o))$$

$\xi^* = \xi^*(\beta^o)$ — локально оптимальный план

Chernoff, 1953

Критерии оптимальности

D-оптимальный план

$$(\det M(\xi))^{1/m} \to \sup_{\xi}$$

E-оптимальный план

$$\lambda_{\min}(M(\xi)) \to \sup_{\xi}$$

План для оценивания индивидуального коэффициента β_i

$$e_i^T M^{-1}(\xi) e_i \to \inf_{\xi},$$

Функциональный подход

- Составление системы уравнений, решением которой является вектор-функция, составленная из точек и весов оптимального плана
- Проверка невырожденности матрицы Якоби
- Решение уравнения в некоторой точке
- Разложение в ряд Тейлора решения системы
- Исследование сходимости ряда

Примеры системы уравнений

D-критерий

$$g(\Theta, u) := \frac{\partial}{\partial \Theta} \det M(\xi_\Theta, u) = 0$$

$$\Theta = (x_1, \dots, x_n, w_2, \dots, w_n), \; w_1 = 1 - \sum_{i=2}^{n} w_i$$

E-критерий

$$g(\Theta, u) := \frac{\partial}{\partial \Theta} \frac{\sum_{i=2}^{n} (q^T f(x_i))^2 w_i + (q^T f(x_1))^2 (1 - w_2 - \dots - w_n)}{q^T q} = 0$$

$$\Theta = (x_1, \dots, x_n, w_2, \dots, w_n, q_1, \dots, q_n), \; q^T q = 1.$$

Рекуррентные формулы

$$g(\Theta, u) = 0 \qquad \Theta \in \mathbb{R}^m,\ u \in \mathbb{R}^k$$

$$g(\Theta_{[0]}, 0) = 0 \qquad \det J(\Theta_{[0]}, 0) \neq 0$$

$$\Theta(u) = \sum_{i_1,\ldots,i_k=0}^{\infty} \Theta_{[i_1,\ldots,i_k]} u_1^{i_1} \cdots u_k^{i_k}$$

Введем множества мультииндексов

$$S_t = \{s = (s_1, \ldots, s_k)) \,:\, s_i \geq 0,\ s_1 + \ldots + s_k = t\},\ I_n = \bigcup_{t=0}^{n} S_t.$$

Справедлива рекуррентная формула

$$\Theta_{[s]} = -J_{[0]}^{-1} \left(g(\Theta_{<I>}(u), u)\right)_{[s]},\ s \in S_t,\ I = I_{t-1},\ t = 1, 2, \ldots.$$

$$\Theta_{<I>}(u) = \sum_{i \in I} \Theta_{[i]} u_1^{i_1} \ldots u_k^{i_k}.$$

Полиномиальная модель

$$\eta(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \ldots + \beta_m x^m$$

■ планы для оценивания индивидуальных коэффициентов на произвольном отрезке $[a, b]$

Studden, 1968

Sahm, 2000

Оптимальный план имеет четыре типа

$$(1, m-1, 1),\ (0, m-1, 1),\ (1, m-1, 0) \text{ и } (1, m-2, 1).$$

$$s = \frac{a+b}{b-a}$$

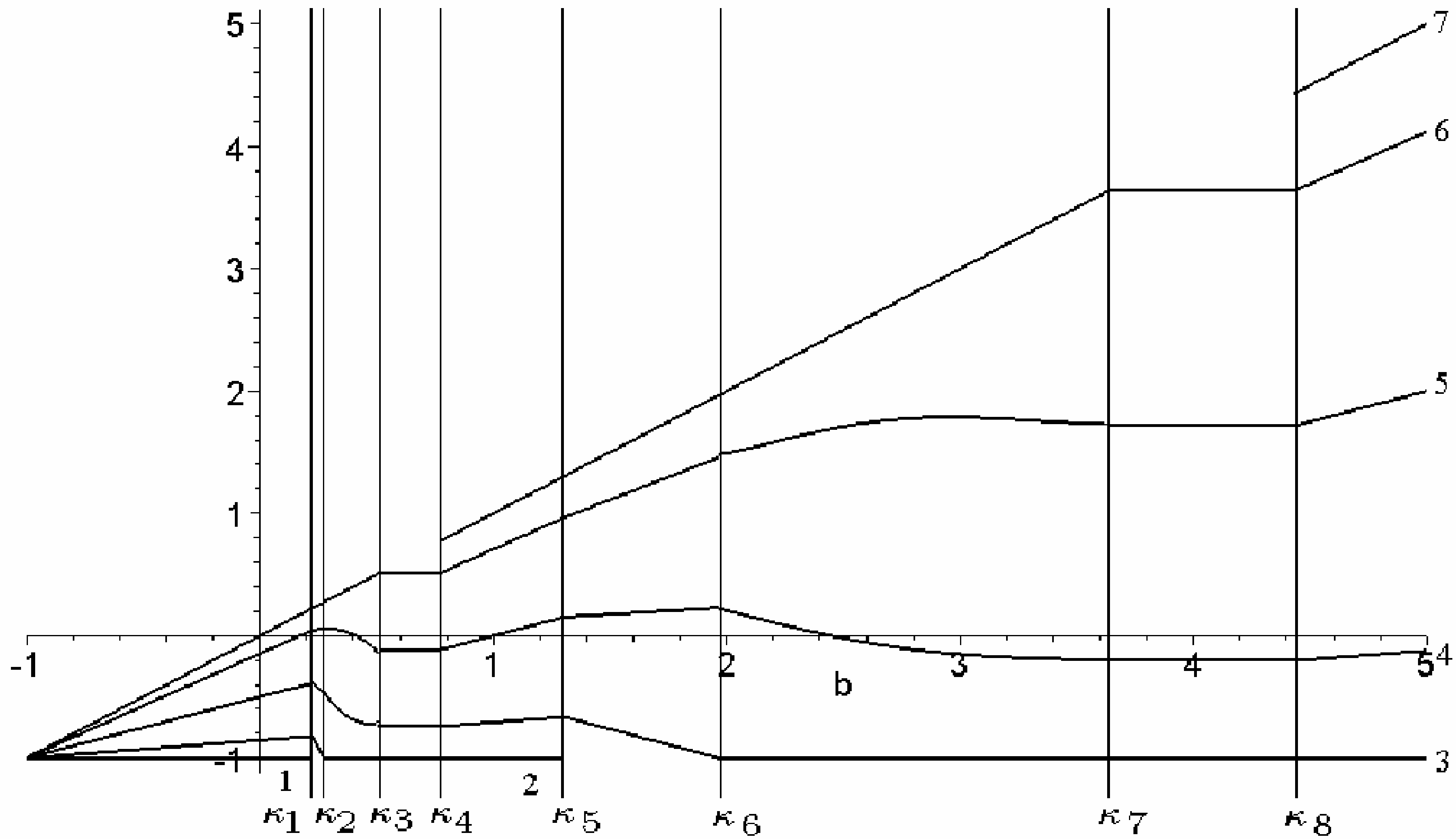

Рис. 1: Точки оптимального плана для оценивания β_2 для модели $\eta(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \beta_3 x^3 + \beta_4 x^4$, $a = -1$, b меняется. При $b \in (\kappa_2, \kappa_3) \cup (\kappa_6, \kappa_7)$ решение получено с помощью степенных рядов.

Тригонометрическая модель

$$\eta(x) = \beta_0 + \beta_1 \sin(x) + \beta_2 \cos(x) + \ldots + \beta_{2k} \cos(x)$$

■ D-оптимальные планы на $[-a, a]$

Теорема 2.2. *1) Если $a \geq a^* = \pi(1 - \frac{1}{2k+1})$, то план эксперимента, сосредоточенный с равными весами в $2k+1$ точке*

$$x_i^* = 2\pi \frac{i-1-k}{2k+1},\ i = 1, \ldots, 2k+1$$

является D-оптимальным планом на $[-a, a]$;

2) Если $a < a^*$, то D-оптимальный план существует, единственен и сосредоточен с равными весами в точках

$$-a, -a\tau_{k-1}^*(a), \ldots, -a\tau_1^*(a), 0, a\tau_1^*(a), \ldots, a\tau_{k-1}^*(a), a,$$

где $\tau^*(a) = (\tau_1^*(a), \ldots, \tau_{k-1}^*(a))$ — аналитическая вектор-функция.

Экспоненциальная модель

$$\eta(x, a, \lambda) = \sum_{i=1}^{k} a_i e^{-\lambda_i x}, \;\; x \in \mathcal{X} = [b, +\infty)$$

$\beta = (a_1, \lambda_1, \ldots, a_k, \lambda_k)^T$ — параметры

- локально E-оптимальные планы
- планы для оценивания индивидуальных коэффициентов

Обозначим

$$\bar{\Omega} = \{\lambda \,:\, 0 < \lambda_1 < \ldots < \lambda_k\}.$$

Будем называть план ξ невырожденным, если $\det M(\xi) \neq 0$.

Лемма 3.1. *1) Существует окрестность Ω_γ любой точки вида $\gamma(1,\ldots,1)$, $(\gamma>0)$ такая, что при $\lambda\in\Omega_\gamma\cap\bar{\Omega}$ кратность минимального собственного числа информационной матрицы любого невырожденного плана равна 1.*

2) Пусть $\lambda_i=\gamma+\delta_i$, $\delta_i=r_i\delta$, $i=1,\ldots,k$, где r_i — фиксированные числа, не равные между собой. При $\delta\to 0$ E- и e_j-оптимальные планы для экспоненциальной модели стремятся к e_m-оптимальному плану для регрессии $(\tilde\beta_1+\tilde\beta_2x+\ldots+\tilde\beta_mx^{m-1})e^{-\gamma x}$, $m=2k$.

Пусть γ фиксировано, $\Omega=\Omega_\gamma$. Легко проверить, что $\Omega=\mathbb{R}_+$ при $k=1$. При $k=2,3$ численные эксперименты позволяют утверждать, что $\Omega=\mathbb{R}_+^k$, хотя формальное доказательство этого факта получить не удается.

Лемма 3.2. *При $\lambda \in \Omega$ локально E-оптимальный план сосредоточен ровно в $2k$ точках, одна из которых совпадает с левой границей, причем эти точки не зависят от a,*

$$x^*_{i;b}(\lambda) = x^*_{i;0}(\lambda) + b,\ i = 1, \ldots, 2k.$$

$$x^*_{i,0}(\gamma\lambda) = x^*_{i;0}(\lambda)/\gamma,\ i = 1, \ldots, 2k.$$

Теорема 3.1. *При $\lambda \in \Omega$ точки и веса E-оптимального плана определены однозначно и являются вещественными аналитическими функциями вектора λ.*

Построено разложение точек и весов E-оптимального плана при $k = 2$.

Дробно-рациональная модель

$$\eta(x, a, \lambda) = \sum_{i=1}^{k} \frac{a_i}{x - \lambda_i}$$

- локально E-оптимальные планы
- планы для оценивания индивидуальных коэффициентов

получены результаты аналогичные результатам для экспоненциальной модели

Модель Моно

Функция регрессии $\eta(t) = \eta(t, \beta)$ является решением дифференциального уравнения

$$\eta'(t) = \mu(t)\eta(t),$$

где $\mu(t)$ имеет вид

$$\mu(t) = \beta_1 \frac{s(t)}{s(t) + \beta_2},$$

$$s(t) = s_0 + (\eta_0 - \eta(t))/\beta_3,$$

$\beta = (\beta_1, \beta_2, \beta_3)^T$ — оцениваемые параметры, $s_0 = s(0)$, $\eta_0 = \eta(0)$ — заданные начальные условия, $t \geq 0$.

■ локально D- и E-оптимальные планы и планы, локально оптимальные для оценивания индивидуальных коэффициентов.

Для модели Моно

- Показано, что как асимптотические, так и выборочные дисперсии для стандартных планов в равноотстоящих точках в 2-3 раза больше, чем для локально оптимальных.
- Показано, что локально E-оптимальные планы в этом смысле эффективнее локально D-оптимальных приблизительно в 1.2 раза.
- Построены разложения точек локально D-оптимальных планов, рассматриваемых как функции некоторых параметров, в ряды Тейлора
- Исследована чувствительность локально D-оптимальных планов к выбору начальных приближений.

Многомерная квадратичная модель

$$\eta(x) = \eta(x, u, A, \gamma) = x^T A x + u^T x + \gamma$$

γ, u и A — неизвестные параметры, $A > 0$. Требуется построить оптимальный план для оценивания точки минимума

$$b = -\frac{1}{2} A^{-1} u$$

$$\eta(x) = \eta(x, b, A, c) = (x - b)^T A (x - b) + c$$

- усеченный D-оптимальный план

Fedorov, Mueller, 1997

Оптимальные планы на круге

$$\xi^* = \xi^*(b) = \begin{cases} \xi_1, & r > \sqrt{2}/2, \qquad \xi_1 = (\xi_{(1)} + \xi_{(3)})/2 \\ \xi_2, & 1/2 < r \le \sqrt{2}/2, \quad \xi_2 = (\xi_{(1)} + \xi_{(4)})/2 \\ \xi_3, & 0 \le r \le 1/2, \qquad \xi_3 = (\xi_{(2)} + \xi_{(4)})/2 \end{cases}$$

$$\xi_{(1)} = \{(-1,0),(0,0),(1,0); \frac{1}{4} - \nu, \frac{1}{2}, \frac{1}{4} + \nu\},\ \nu = \frac{1}{8r},\ \mu = \frac{\sqrt{2}}{8r}$$

$$\xi_{(2)} = \{(2r-1,0),(1,0); 1/2, 1/2\},$$

$$\xi_{(3)} = \{(-\frac{\sqrt{2}}{2}, \pm\frac{\sqrt{2}}{2}, (\frac{\sqrt{2}}{2}, \pm\frac{\sqrt{2}}{2}); \frac{1}{4} - \mu, \frac{1}{4} - \mu, \frac{1}{4} + \mu, \frac{1}{4} + \mu\}$$

$$\xi_{(4)} = \{(r, -\sqrt{1-r^2}),(r, \sqrt{1-r^2}); 1/2, 1/2\}.$$

Теорема 4.2. *Для задачи на единичном круге при $b = re_1$ план $\xi^*(b)$ является усеченным локально D-оптимальным планом.*

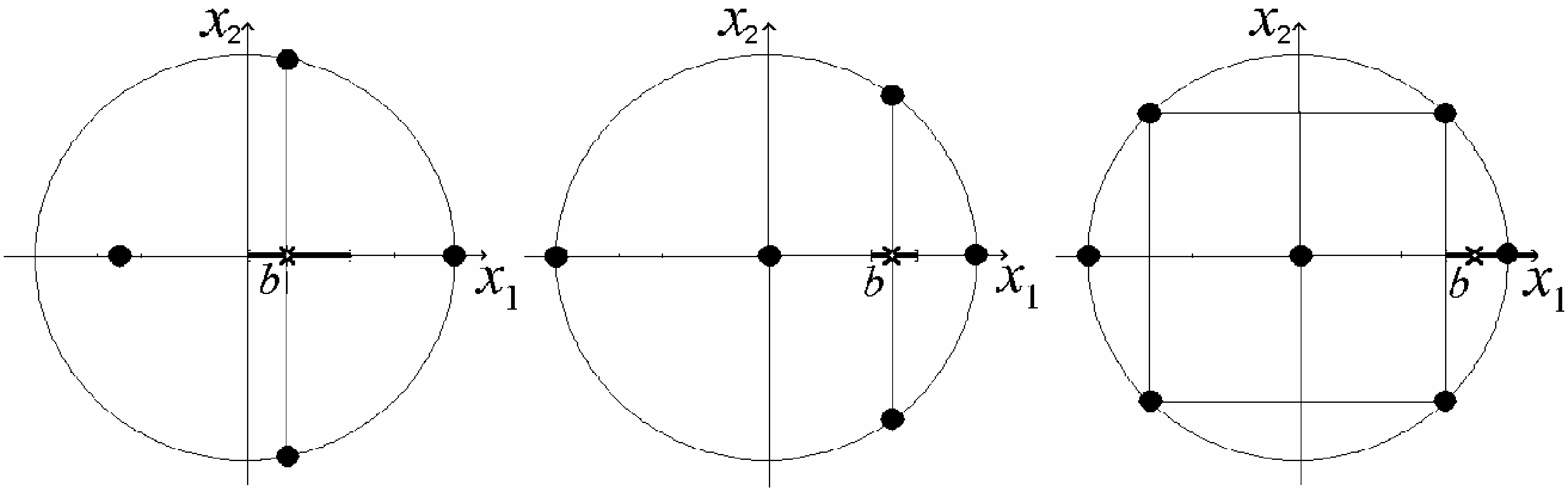

Рис. 2: Точки локально оптимального плана на круге.

Оптимальные планы на гиперкубе $[-1,1]^k$

Теорема 4.4. *Пусть* $b \in (-1,1)^k$. *План* ξ^*, *сосредоточенный в вершинах вписанного (в гиперкуб* $[-1,1]^k$*) гиперпараллелепипеда с центром в точке* $b = (b_1, \ldots, b_k)$ *с равными весами, является локально оптимальным планом тогда и только тогда, когда* $b \in [-1/2, 1/2]^k$.

Теорема 4.5. *Пусть* $k > 3$ *и* $b \in [-1/2, 1/2]^k$. *Тогда для любого* ν *такого, что* $k \le 2^{\nu-1}$ *и* $\nu \le k$, *существует локально оптимальный план, сосредоточенный в* 2^ν *вершинах вписанного гиперпараллелепипеда с равными весами.*

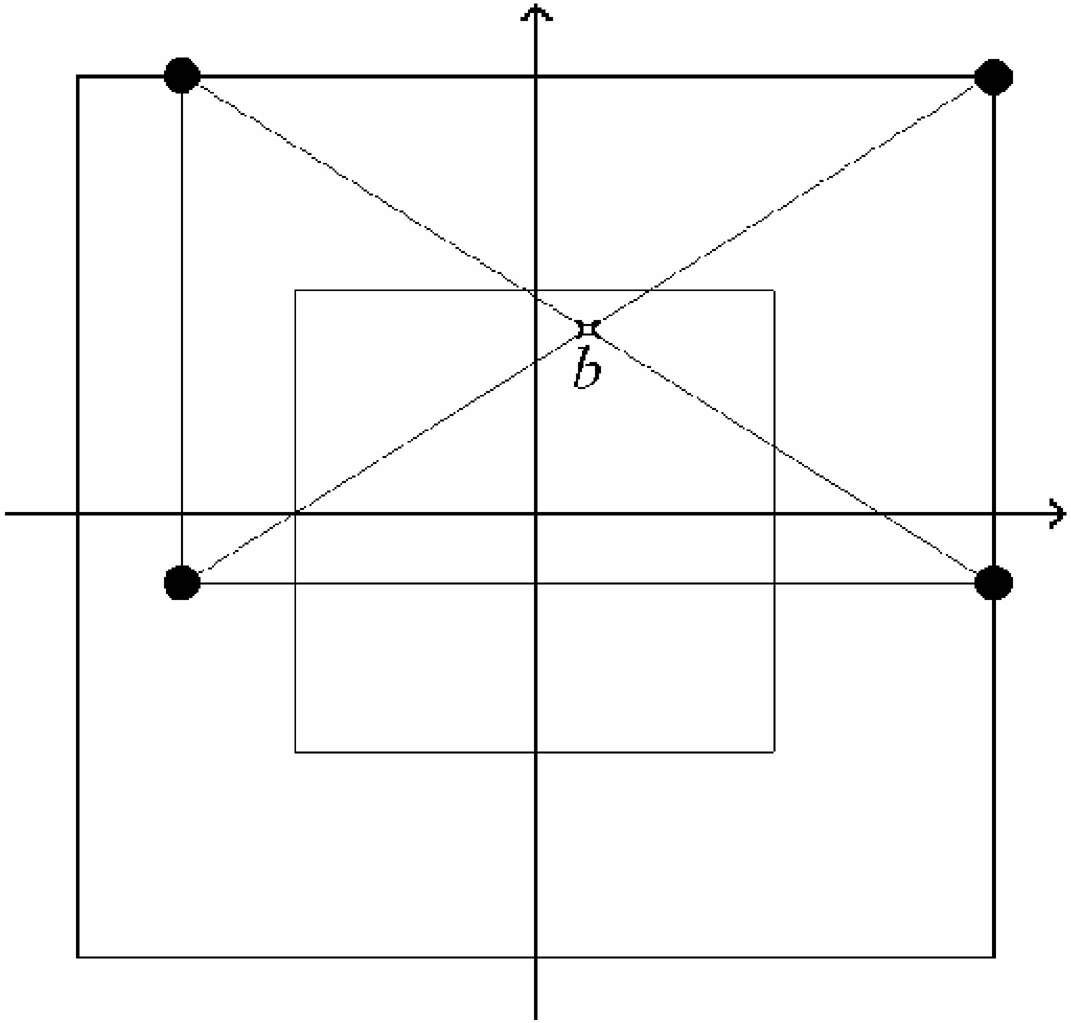

Рис. 3: Точки локально оптимального плана на квадрате.

При $k = 2$, $b \notin [-1/2, 1/2]^2$ точки и веса локально оптимального плана представлены в виде степенных рядов.

Основные результаты диссертации

- Построены рекуррентные формулы для вычисления коэффициентов разложения в степенные ряды точек и весов оптимальных планов

- Построены и исследованы разложения точек и весов оптимальных планов для ряда критериев оптимальности и ряда линейных и нелинейных по параметрам функций регрессии

- Исследованы аналитические свойства точек и весов оптимальных планов

- Получены в явном виде локально оптимальные планы для оценивания точки экстремума квадратичной функции регрессии на гипершаре и гиперкубе.