УДК 519.6

В.П. КИРЛИЦА

D-ОПТИМАЛЬНЫЕ ПЛАНЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ, РОБАСТНЫЕ ОТНОСИТЕЛЬНО ИЗМЕНЕНИЯ ДИСПЕРСИИ НАБЛЮДЕНИЙ, ДЛЯ ЛИНИИ РЕГРЕССИИ

A class of functions describing the variance of observations is indicated for which classical *D*-optimal designs remain invariant for linear regression.

Рассмотрим линейную модель наблюдений

$$y_i = \theta_0 + \theta_i x_i + \varepsilon(x_i),\ i = 1, 2, ..., n;\ n \geq 2, \tag{1}$$

где y_i – наблюдаемые переменные; θ_0, θ_1 – неизвестные параметры; x_i – контролируемые переменные из интервала $[-1, 1]$; $\varepsilon(x_i)$ – неконтролируемые и ненаблюдаемые случайные ошибки наблюдений со средним значением, равным нулю, и ограниченной дисперсией $D\{\varepsilon(x_i)\} = d\ (x_i) > 0$ для каждой реализации $x_i \in [-1, 1]$.

Для равноточных наблюдений ($d\ (x) = d = \text{const}$) известно [1], что непрерывный *D*-оптимальный план (*n* не фиксировано) для модели наблюдений (1) имеет вид

$$\varepsilon^0 = \begin{Bmatrix} -1, & 1 \\ \frac{1}{2}, & \frac{1}{2} \end{Bmatrix}, \tag{2}$$

где $\frac{1}{2}$ – вес наблюдений в точках –1, 1. Точный *D*-оптимальный план (*n* фиксировано) определяется следующим образом [2]: для четного числа наблюдений $n = 2s$

$$\varepsilon^0_{2s} = \begin{Bmatrix} -1, & 1 \\ s, & s \end{Bmatrix}, \tag{3}$$

для нечетного числа наблюдений $n = 2s + 1$

$$\varepsilon^0_{2s+1} = \begin{Bmatrix} -1, & 1 \\ s, & s+1 \end{Bmatrix}, \varepsilon^0_{2s+1} = \begin{Bmatrix} -1, & 1 \\ s+1, & s \end{Bmatrix}. \tag{4}$$

Из (4) следует, что любой из этих планов можно принять в качестве *D*-оптимального плана экспериментов.

Планы (2) – (4) минимизируют обобщенную дисперсию наблюдений (определитель дисперсионной матрицы) в случае равноточных наблюдений, когда в каждой точке x_i наблюдения проводятся с равной дисперсией $d(x_i) = d > 0$.

Покажем, что классические планы экспериментов (2) – (4), построенные для равноточных наблюдений, будут робастными (устойчивыми) относительно определенного класса функций $d(x)$, описывающих изменение дисперсии наблюдений, т. е. структура этих планов останется неизменной и для неравноточных наблюдений, описываемых функциями $d(x)$ из построенного класса.

Класс функций $d(x)$ определим следующим образом:

$$d(x) \ge d\frac{1+x^2}{2}, x \in [-1, 1], d(-1) = d(1) = d, \tag{5}$$

где $d > 0$ – некоторая константа. Нетрудно проверить, что равноточные наблюдения ($d(x) = d =$ const) принадлежат классу (5). Класс функций (5) определяет дисперсии наблюдений $d(x)$, которые лежат не ниже минорантной параболы $d\frac{1+x^2}{2}\cdot$

Покажем вначале, что непрерывные D-оптимальные планы (2) будут робастными относительно класса функций (5). Для этого надо показать, что критерий D-оптимальности [1] $\lambda(x)d(x,\varepsilon^0) \le 2, x \in [-1, 1]$, непрерывных планов выполняется. Здесь $\lambda(x) = \dfrac{1}{d(x)}, d(x,\varepsilon^0) = (1,x)M^{-1}(\varepsilon^0)\begin{pmatrix}1\\x\end{pmatrix}, M(\varepsilon^0)$ – информационная матрица непрерывного плана ε^0. Непосредственные вычисления показывают, что $M^{-1}(\varepsilon^0) = d\begin{pmatrix}1, & 0\\ 0, & 1\end{pmatrix}$, т. е. указанный критерий D-оптимальности непрерывных планов выполняется и план (2) остается D-оптимальным и для класса функций (5).

Практический интерес представляют собой точные D-оптимальные планы, у которых число наблюдений n фиксировано.

Лемма. *Точки спектра точного D-оптимального плана экспериментов для модели наблюдений* (*1*), (*5*) *лежат на концах интервала* [–1,1].

Доказательство. Рассмотрим произвольный план наблюдений ε, сосредоточенный в n точках $x_1, x_2, \dots, x_n$. Покажем, что от плана ε можно перейти к плану ε_1 с точками спектра $x_i = \pm 1$, $i = \overline{1, n}$, для которого $|M(\varepsilon)| \le |M(\varepsilon_1)|$.

Действительно, точку спектра плана x_1 сделаем «плавающей», т. е. $x_1 = x \in [-1, 1]$. Остальные значения x_i, $i = \overline{2, n}$, зафиксируем. Полученный план обозначим через ε_x. Непосредственные вычисления показывают, что определитель информационной матрицы плана ε_x имеет вид

$$|M(\varepsilon_x)| = \frac{\alpha x^2 - 2\beta x + \gamma}{d(x)} + p, \tag{6}$$

где $d(x) = d(x_1)$, $\alpha = \sum_{i=2}^{n}\dfrac{1}{d(x_i)}$, $\beta = \sum_{i=2}^{n}\dfrac{x_i}{d(x\ )}$, $\gamma = \sum_{i=2}^{n}\dfrac{x_i^2}{d(x_i)}$, $p = \sum_{i=2}^{n}\dfrac{1}{d(x_i)}\sum_{i=2}^{n}\dfrac{x_i^2}{d(x_i)} - \left(\sum_{i=2}^{n}\dfrac{x_i}{d(x_i)}\right)^2$.

Используя (5), можно оценить $|M(\varepsilon_x)|$ сверху:

$$|M(\varepsilon_x)| \le \frac{2}{d} f_1(x) + p, \tag{7}$$

где $f_1(x) = \dfrac{\alpha x^2 - 2\beta x + \gamma}{1+x^2}$. В точках –1 и 1 неравенство (7) обращается в равенство.

Возьмем максимум $|M(\varepsilon_x)|$ по $x \in [-1, 1]$ и покажем, что он достигается на одном из концов данного интервала. Так как константы $\alpha, \beta, \gamma, p, d$ не зависят от x, то в силу (7) процесс максимизации сведется к максимизации $f_1(x)$ по x и выяснению того, что этот максимум будет достигаться при $x = \pm 1$.

Производная функции $f_1(x)$ равна

$$\frac{df_1(x)}{dx} = 2\frac{\beta x^2 + (\alpha - \gamma)x - \beta}{(1+x^2)^2}.$$

Если $\beta = 0$, то, учитывая, что $\alpha - \gamma \ge 0$, видим, что производная будет равна нулю на всем интервале [–1, 1] при $\alpha - \gamma = 0$. Если $\alpha - \gamma > 0$, то на интервале [–1, 0) функция $f_1(x)$ убывает, а на интервале (0,1] возрастает. В любом случае при $\beta = 0$ функция $f_1(x)$ достигает своего максимального значения при $x = -1$ либо $x = 1$.

Если $\beta < 0,$ то знак производной $f_1'(x)$ определяется знаком параболы $\beta x^2 + (\alpha - \gamma) - \beta$ на интервале [–1, 1]. Уравнение $\beta x^2 + (\alpha - \gamma) - \beta = 0$ имеет корни

$$x_1 = \frac{\alpha - \gamma - \sqrt{(\alpha - \gamma)^2 + 4\beta^2}}{-2\beta}, x_2 = \frac{\alpha - \gamma + \sqrt{(\alpha - \gamma)^2 + 4\beta^2}}{-2\beta}.$$

Можно легко показать, что $-1 \le x_1 < 0$, а $x_2 \ge 1$. Если $x_1 = -1$, то на интервале [–1, 1] производная $f_1'(x) \ge 0,$ т. е. максимум $f_1(x)$ достигается при $x = 1$. Если $-1 < x_1 < 0$, то на интервале $[-1, x_1)$ производная $f_1'(x) < 0$, а на интервале $(x_1, 1]$ производная $f_1'(x) > 0$, т. е. максимального значения функция $f_1(x)$ достигает в точках –1 либо 1.

Если $\beta > 0$, то корни уравнения $\beta x^2 + (\alpha - \gamma)x - \beta = 0$ следующие:

$$x_1 = \frac{-(\alpha - \gamma) - \sqrt{(\alpha - \gamma)^2 + 4\beta^2}}{2\beta}, x_2 = \frac{-(\alpha - \gamma) + \sqrt{(\alpha - \gamma)^2 + 4\beta^2}}{2\beta}.$$

Также можно показать, что $x_1 \le -1, 0 < x_2 \le 1.$ Если $x_2 = 1$, то на интервале [–1, 1] производная $f_1'(x) \le 0,$ т. е. функция достигает своего максимального значения в точке $x = -1$. Если $0 < x_2 < 1$, то на интервале $[-1, x_2)$ производная $f_1'(x) \ge 0,$ а на интервале $(x_2, 1]$ она положительна. Следовательно, максимального значения на интервале [–1, 1] функция $f_1(x)$ будет достигать в точках –1 либо 1.

Процесс максимизации определителя информационной матрицы плана эксперимента по первой точке $x_1 = x$, при фиксированных остальных значениях $x_2, \ldots, x_n$, показал, что своего максимального значения определитель информационной матрицы достигает на одном из концов интервала [–1, 1]. Зафиксируем значение x_1, в котором определитель информационной матрицы достиг своего максимального значения. Аналогичным образом повторим процесс максимизации определителя информационной матрицы последовательно по переменным $x_2, \ldots, x_n$. В итоге придем к заключению, что своего максимального значения определитель информационной матрицы достигает в точках $x_i \pm 1, i = 1, \ldots, n,$ т. е. на концах интервала [–1, 1]. Лемма доказана.

Опираясь на лемму, докажем следующую теорему.

Теорема 1. *Точный D-оптимальный план экспериментов для модели неравноточных наблюдений* (*1*), (*5*) *определяется соотношениями* (*3*), (*4*).

Доказательство. Согласно доказанной лемме, точный *D*-оптимальный план должен иметь следующую структуру:

$$\varepsilon_n = \begin{Bmatrix} -1, & 1 \\ m, & n - m \end{Bmatrix},$$

где m – число наблюдений в точке –1, $0 < m < n$. Чтобы построить *D*-оптимальный план экспериментов, надо определить оптимальное значение m^0. Непосредственные вычисления показывают, что определитель информационной матрицы плана ε_n равен

$$|M(\varepsilon_n)| = \frac{4(n - m)m}{d^2}.$$

Максимального значения этот определитель достигает в точке $m^0 = n/2$. Если $n = 2s$, т. е. четно, то $m^0 = s$, т. е. наблюдения в точках –1, 1 надо проводить пополам. Если $n = 2s + 1$, т. е. нечетно, то $m^0 = s + 1$ либо $m^0 = s$, т. е. наблюдения в точках –1, 1 надо проводить почти пополам. Теорема 1 доказана.

Обозначим через M множество точек из интервала [–1, 1], в которых функция $d(x)$, $d(-1) = d(1) = d$, описывающая дисперсию наблюдения в точке x, совпадает с минорантной функцией $d\frac{1 + x^2}{2}$, т. е.

$$M = \left\{ x : x \in [-1, 1], d(x) = d\frac{1 + x^2}{2} \right\}.$$

Если множество M, кроме точек –1, 1, содержит и другие точки из интервала [–1, 1], то в этом случае точный *D*-оптимальный план экспериментов для нечетного числа наблюдений $n = 2s + 1$ может отличаться от классического плана (4).

Теорема 2. *Если множество $M \setminus \{-1,1\}$ пусто, то все точки спектра точного D-оптимального плана экспериментов для модели неравноточных наблюдений* (*1*), (*5*) *лежат на концах интервала* [–1, 1] *и только в них, т. е. оптимальный план имеет вид* (*3*) *или* (*4*). *Если множество $M \setminus \{-1,1\}$ не пусто, то для нечетного числа наблюдений n* = 2*s* + 1 *D-оптимальный план имеет вид*

$$\varepsilon_{2s+1}^{0}=\begin{Bmatrix}-1, & 1, x\\ s, & s, 1\end{Bmatrix}, x\in M. \qquad (8)$$

Доказательство. Пусть вначале число наблюдений нечетно $n = 2s + 1$. Для классических D-оптимальных планов экспериментов (4) определитель информационной матрицы равен $|M(\varepsilon_{2s+1}^{0})| = 4s(s+1)d^{-2}$. Если множество $M \setminus \{-1,1\}$ не пусто, информационная матрица плана (8) равна

$$M(\varepsilon_{2s+1}^{0})=\frac{2}{d(1+x^{2})}\begin{pmatrix}1+s(1+x), & x\\ x, & x^{2}+s(1+x^{2})\end{pmatrix}.$$

Определитель этой матрицы $|M(\varepsilon_{2s+1}^{0})| = 4s(s+1)d^{-2}$, т. е. план (8) D-оптимален.

Если множество $M \setminus \{-1,1\}$ пусто, то все точки спектра точного D-оптимального плана ε_{2s+1}^{0} должны быть сосредоточены в точках –1, 1. Предположим противное, что некоторая точка x, $-1 < x < 1$, спектра точного D-оптимального плана ε_{2s+1}^{0} не лежит на концах интервала [–1, 1] и

$$d(x) > d\,\frac{1+x^{2}}{2}. \qquad (9)$$

Тогда информационная матрица такого плана равна

$$M(\varepsilon_{2s+1}^{0})=\begin{pmatrix}\dfrac{2s}{d}+\dfrac{1}{d(x)}, & \dfrac{x}{d(x)}\\[2ex] \dfrac{x}{d(x)}, & \dfrac{2s}{d}+\dfrac{x^{2}}{d(x)}\end{pmatrix}.$$

Определитель этой матрицы

$$|M(\varepsilon_{2s+1}^{0})|=\frac{4s^{2}}{d^{2}}+\frac{2s(1+x^{2})}{d\cdot d(x)}.$$

Используя неравенство (9), имеем $|M(\varepsilon_{2s+1}^{0})| < 4s(s+1)d^{-2}$, что противоречит тому, что ε_{2s+1}^{0} D-оптимальный план с точкой спектра x, не лежащей на концах интервала [–1, 1].

Аналогично доказывается, что для четного числа наблюдений $n = 2s$ все точки спектра D-оптимального плана лежат на концах интервала [–1, 1]. Теорема доказана.

Теорема 3. *Оценка $\widehat{\theta}=(\widehat{\theta}_0,\widehat{\theta}_1)'$ точных D-оптимальных планов* (*3*), (*4*) *для модели наблюдений* (*1*), (*5*) *не зависит от дисперсий наблюдений и имеет вид $\widehat{\theta} = M^{-1}Y$, где*

$$M=\begin{pmatrix}n, & \sum_{i=1}^{n}x_i\\ \sum_{i=1}^{n}x_i, & \sum_{i=1}^{n}x_i^{2}\end{pmatrix}, \quad Y=\begin{pmatrix}\sum_{i=1}^{n}y_i\\ \sum_{i=1}^{n}y_ix_i\end{pmatrix},$$

где x_i – точки спектра D-оптимальных планов, а y_i – наблюдения в точках x_i.

Доказательство. Поскольку в точках спектра D-оптимальных планов $d(x_i) = d$, $i = \overline{1, n}$, то

$$\hat{\theta}=\left(\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{d}\begin{pmatrix}1\\ x_i\end{pmatrix}(1,x_i)\right)^{-1}\left(\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{d}y_i\begin{pmatrix}1\\ x_i\end{pmatrix}\right)=\left(\sum_{i=1}^{n}\begin{pmatrix}1\\ x_i\end{pmatrix}(1,x_i)\right)^{-1}\left(\sum_{i=1}^{n}y_i\begin{pmatrix}1\\ x_i\end{pmatrix}\right)=M^{-1}Y.$$

Теорема 3 доказана.

1. Федоров В.В. Теория оптимального эксперимента. М., 1971.
2. Moyssiadis C., Kounias S. // Math. Operationsforsh. u. Statist. 1983. № 3. P. 367.

Поступила в редакцию 28.04.08.

Валерий Петрович Кирлица – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования и анализа данных.