Исследование локально D-оптимальных планов для одной нелинейной регрессионной модели с несколькими откликами

Раевская Ксения Александровна, 522-я группа

Санкт-Петербургский Государственный Университет
Математико-механический факультет
Кафедра статистического моделирования

Научный руководитель — д.ф.-м.н. проф. **В.Б. Мелас**
Рецензент — к.ф.-м.н. **П.В. Шпилев**

Санкт-Петербург
2013г.

Постановка задачи

Рассмотрим химическую реакцию между реагентами A, B и C

$$A \xrightarrow{\theta_1} B \xrightarrow{\theta_2} C.$$

Ее можно описать системой уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{d[A]}{dt} = -\theta_1 [A]^{\lambda_1}, & [A]_{t=0} = 1, \\ \dfrac{d[B]}{dt} = \theta_1 [A]^{\lambda_1} - \theta_2 [B]^{\lambda_2}, & [B]_{t=0} = 0, \\ \dfrac{d[C]}{dt} = \theta_2 [B]^{\lambda_2}, & [C]_{t=0} = 0, \end{cases}$$

определенных на $T = [0, t_0]$.

При $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$ известно точное решение системы уравнений

$$\begin{cases} [A]\,(t) = e^{-\theta_1 t}, \\ [B](t) = \left(-\dfrac{\theta_1 e^{-\theta_1 t + \theta_2 t}}{\theta_1 - \theta_2} + \dfrac{\theta_1}{\theta_1 - \theta_2} \right) e^{-\theta_2 t}, \\ [C](t) = 1 - [A]\,(t) - [B](t). \end{cases}$$

Постановка задачи

Наблюдение состоит из трех откликов, то есть

$$y_i = \eta(t_i, \Theta) + \varepsilon_i = \begin{bmatrix} [A]\,(t_i;\Theta) \\ [B](t_i;\Theta) \\ [C](t_i;\Theta) \end{bmatrix} + \varepsilon_i,$$

где $t_i \in T,\ i = 1, \ldots, N,\ \ E\varepsilon_i = 0,\ \ E\varepsilon_i\varepsilon_j^T = \begin{cases} R & if \quad i = j, \\ 0 & if \quad i \neq j. \end{cases}$

Обозначим

$$f_1(t,\Theta) = \frac{\partial[A]}{\partial\theta_1}(t,\Theta), \quad f_2(t,\Theta) = \frac{\partial[B]}{\partial\theta_1}(t,\Theta), \quad f_3(t,\Theta) = \frac{\partial[B]}{\partial\theta_2}(t,\Theta).$$

Пусть

$$\widetilde{X}(t) = \begin{pmatrix} f_1(t) & f_2(t) & -f_1(t) - f_2(t) \\ 0 & f_3(t) & -f_3(t) \end{pmatrix},$$

Определение

Информационная матрица плана для рассматриваемой модели имеет вид

$$M(\xi,\Theta) = \sum_{i=1}^{n} \omega_i \widetilde{X}(t_i) R^{-1} \widetilde{X}^{\mathrm{T}}(t_i), \quad \xi = \begin{pmatrix} t_1 & \ldots & t_n \\ \omega_1 & \ldots & \omega_n \end{pmatrix}, \ \omega_i > 0, \ \sum_{i=1}^{n} \omega_i = 1,$$

где ξ – план эксперимента, t_i – опорные точки плана, ω_i – соответствующие веса.

Обозначения

1. Без ограничения общности предположим
$$R^{-1} = \begin{pmatrix} Q & h \\ h^{\mathrm{T}} & g \end{pmatrix},$$
где Q – матрица 2×2, h – вектор размерности 2, g – число.
Согласно [В.Б. Мелас, Л.А. Крылова, D. Uchinski, 2012][2], положим
$$W = W(R) = Q + hd^{\mathrm{T}} + dh^{\mathrm{T}} + dd^{\mathrm{T}}g, \quad d = (-1,-1)^{\mathrm{T}}.$$
Непосредственное вычисление показывает, что
$$M(\xi,\Theta) = \sum_{i=1}^{n} \omega_i \widetilde{X}(t_i) R^{-1} \widetilde{X}^{\mathrm{T}}(t_i) = \sum_{i=1}^{n} \omega_i X(t_i) W X^{\mathrm{T}}(t_i),$$
$$X(t) = \begin{pmatrix} f_1(t) & f_2(t) \\ 0 & f_3(t) \end{pmatrix}.$$
2. Заметим, что
$$\eta(t,\Theta) = \eta(ct,\Theta/c).$$
Примем
$$\frac{\theta_1+\theta_2}{2} = c = 1.$$
Тогда можно ввести новый параметр
$$\theta_1 = 1-\Delta, \quad \theta_2 = 1+\Delta.$$

Исследование случая одноточечного оптимального плана

Пусть

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Было доказано [В.Б. Мелас, Л.А. Крылова, D. Uchinski, 2012][2], что при $\Delta = 0$ оптимальный план одноточечный и имеет вид

$$\xi^* = \begin{pmatrix} 3/2 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Результаты численных расчетов показывают, что для $\Delta \in [0, 0.863]$ оптимальным является одноточечный план.

Теорема (Эквивалентности, В.Б. Мелас, Л.А. Крылова, D. Uchinski, 2012)

План ξ^* является D-оптимальным для рассматриваемой модели тогда и только тогда, когда

$$d(t, \xi^*) = tr\left(WX^{\mathrm{T}}(t)M^{-1}(\xi)X(t)\right) \leq 2,$$

для любого $t \in T$. В точках t_i плана $d(t_i, \xi^*) = 2$.

Все найденные планы удовлетворяют теореме эквивалентности с точностью до погрешности вычислений.

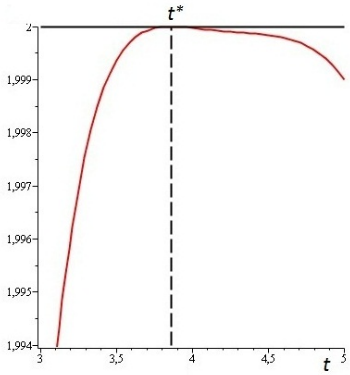

Рис. : Дисперсионная функция, $\Delta = 0.863$

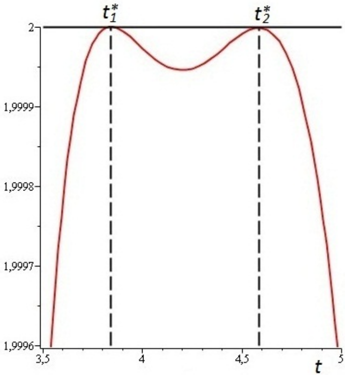

Рис. : Дисперсионная функция, $\Delta = 0.864$

Пусть

$$J(t,\Delta) = \frac{\partial^2}{\partial t^2} \det M(t,\Delta).$$

$$g(t,\Delta) = \frac{\partial}{\partial t} \det M(t,\Delta).$$

Обозначим J_0 – предел $J(t,\Delta)$ при $\Delta \to 0$.

Утверждение (В.Б. Мелас, 2006)

Пусть матрица J_0 невырождена. Тогда по рекуррентным формулам из (В.Б. Мелас, 2006)

$$t_{(s)} = -J_{(0)}^{-1}(g(t_{<s-1>}(\Delta),\Delta)_{(s)}),\ \ s = 1,2,\dots$$

где $t_{<n>} = \sum\limits_{i=1}^{n} t_{(i)}\Delta^i$, *и* $g(t(\Delta),\Delta)_{(s)}$ *- коэффициент при* Δ^s *в разложении* $g(t,\Delta)$ *в ряд Тейлора по степеням* Δ.

Применив рекуррентные формулы функционального подхода, получим

Разложение в ряд в точке $\Delta = 0$

$$t^*(\Delta) = \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\Delta + \frac{5}{12}\Delta^2 + \frac{16}{45}\Delta^3 + \frac{697}{2160}\Delta^4 + \frac{173}{567}\Delta^5 + \frac{402751}{1360800}\Delta^6 + \\ + \frac{5327}{18225}\Delta^7 + \frac{28659143}{97977600}\Delta^8 + \frac{18671222}{63149625}\Delta^9 + \dots$$

Таблица : Сравнение планов, найденных численными методами ξ^*, и планов, построенных по разложению в ряд $\xi_{<n>}$

Δ	ξ	t_1	$\det M(\xi,\Delta)$
0.01	$\xi_{<10>}$	1.50504	0.02118
	ξ^*	1.50504	0.02118
0.1	$\xi_{<10>}$	1.55456	0.02114
	ξ^*	1.55456	0.02114
0.5	$\xi_{<20>}$	1.93755	0.01944
	ξ^*	1.93755	0.01944
0.7	$\xi_{<20>}$	2.42237	0.01637
	ξ^*	2.42334	0.01637
0.8	$\xi_{<30>}$	2.99416	0.01356
	ξ^*	2.99853	0.01356

Исследование случая двухточечного оптимального плана

Элементы матрицы W обозначим

$$W = \begin{pmatrix} a & b \\ b & 1 \end{pmatrix}.$$

Предположим, что $a = b = 0$. В рассматриваемой модели останется только одно уравнение регрессии

$$y_i = -\frac{\theta_1}{\theta_1 - \theta_2}\exp(-\theta_1 t_i) + \frac{\theta_1}{\theta_1 - \theta_2}\exp(-\theta_2 t_i) + \varepsilon_i,\ \ t_i \in T, \quad i = 1, 2, \ldots N.$$

Согласно теореме Каратеодори оптимальный план не может иметь более трех опорных точек.

Утверждение

Предельный план, локально D-оптимальный при $a = b = \Delta = 0$, является двухточечным и имеет вид

$$\xi^* = \begin{pmatrix} \frac{3-\sqrt{3}}{2} & \frac{3+\sqrt{3}}{2} \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

При $a = b = 0$, для любого Δ, для любого двухточечного оптимального плана выполнено

$$\omega_1 = \omega_2 = 1/2.$$

Поэтому разложение достаточно построить только для опорных точек плана.

1. Применив рекуррентные формулы, получим

Разложение в ряд в точке $\Delta = 0$ (при $a = b = 0$)

$$t_1^*(\Delta) = \frac{3-\sqrt{3}}{2} + \frac{\sqrt{3}}{12}\Delta + \left(\frac{7}{12} - \frac{47\sqrt{3}}{144}\right)\Delta^2 + \left(-\frac{79}{360} + \frac{583\sqrt{3}}{4320}\right)\Delta^3 + \\ + \left(-\frac{32431\sqrt{3}}{103680} + \frac{361}{720}\right)\Delta^4 + \left(-\frac{797}{2268} + \frac{834889\sqrt{3}}{4354560}\right)\Delta^5 + \ldots$$

$$t_2^*(\Delta) = \frac{3+\sqrt{3}}{2} - \frac{\sqrt{3}}{12}\Delta + \left(\frac{7}{12} + \frac{47\sqrt{3}}{144}\right)\Delta^2 + \left(-\frac{79}{360} - \frac{583\sqrt{3}}{4320}\right)\Delta^3 + \\ + \left(\frac{32431\sqrt{3}}{103680} + \frac{361}{720}\right)\Delta^4 + \left(-\frac{797}{2268} - \frac{834889\sqrt{3}}{4354560}\right)\Delta^5 + \ldots$$

2. Оптимальные планы также были вычислены численными методами пакета Maple в сочетании с теоремой эквивалентности.

При $a \neq 0,\ b \neq 0$:

1. В пакете Maple была реализована процедура, в которой по заданному значению Δ вычисляются коэффициенты разложения в ряд до n-ой степени a и b.
2. Процедура была применена для $\Delta = 0.05, \Delta = 0.1$ и $\Delta = 0.2$ для $n = 4$ (всего 14 коэффициентов).
3. Для тех же значений Δ оптимальные планы были вычислены численными методами пакета Maple в сочетании с теоремой эквивалентности.
4. Проведено сравнение численных планов и планов, построенных функциональным подходом.

Пусть

$$W = \begin{pmatrix} a & b \\ b & 1 \end{pmatrix}.$$

Теорема (В.Б. Мелас, Л.А. Крылова, D. Uchinski, 2012)

При $\Delta = 0$ оптимальный план будет одноточечным тогда и только тогда, когда

$$\frac{ac + c^2 - 2bc}{ac - b^2} = \frac{a + 1 - 2b}{a - b^2} \leq \frac{3}{2}\left(\frac{7}{4} - \sqrt{\frac{3}{2}}\right)^{-1}.$$

Возьмем Δ от 0.05 до 0.5, а a и b от 0 до 1. Сколько опорных точек имеет оптимальный план при различных a, b и Δ?

- Согласно следствию из теоремы Каратеодори оптимальный план в данном случае не может иметь более трех опорных точек.
- Областью допустимых значений будет множество $a > b^2$.
- Вычисления проводились в пакете Maple по сетке с шагом 0.05 для параметра a и 0.01 для b.

Исследование количества опорных точек оптимального плана

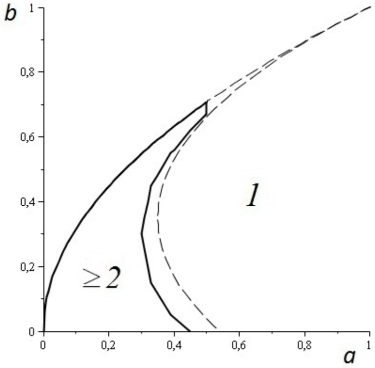

Рис. : $\Delta = 0.05$

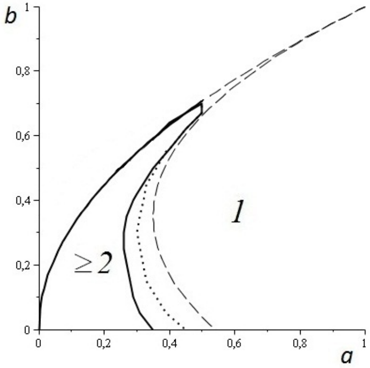

Рис. : $\Delta = 0.1$

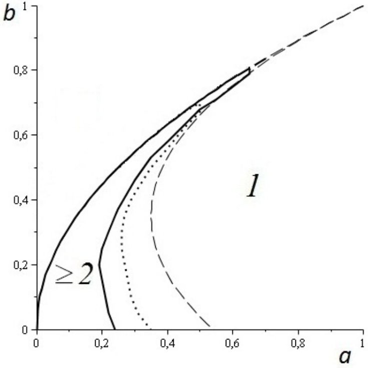

Рис. : $\Delta = 0.2$

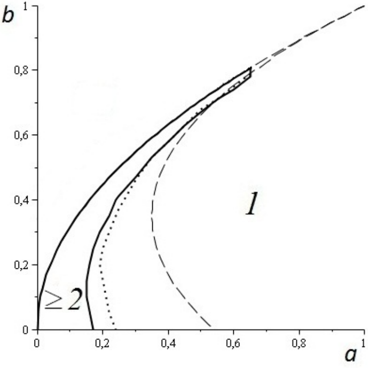

Рис. : $\Delta = 0.3$

Исследование количества опорных точек оптимального плана

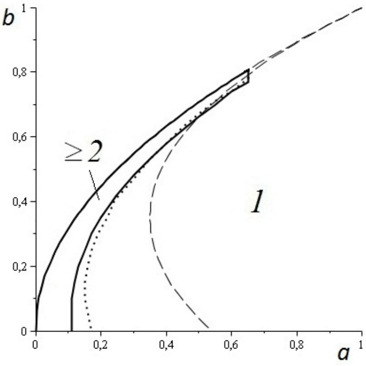

Рис. : $\Delta = 0.4$

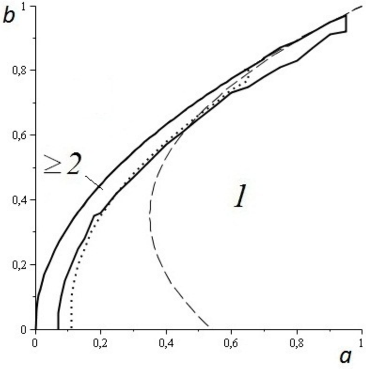

Рис. : $\Delta = 0.5$

Итоги

1. Локально D-оптимальные планы были исследованы в случае, когда матрица корреляций R единична.
2. В случае, когда $a = b = 0$, $c = 1$, где a, b и c – элементы матрицы W, в предельном случае $(\Delta = 0)$ D-оптимальный план был найден в явном виде.
3. При $a = b = 0$, $c = 1$ и при $\Delta > 0$ D-оптимальные планы были найдены двумя способами: численными методами пакета Maple в сочетании с теоремой эквивалентности и при помощи функционального подхода.
4. В пакете Maple была реализована процедура, в которой по заданному Δ вычисляются коэффициенты разложения точек и весов оптимального плана в ряд по степеням параметров a и b.
5. Для a и b от 0 до 1, $c = 1$ и Δ от 0.05 до 0.5 численно была построена граница области, в которой D-оптимальный план имеет одну опорную точку, и области, в которой оптимальный план не может быть одноточечным.