Кафедра статистического моделирования
Дипломная работа
студентки 522-й группы Кобековой Александры Владимировны

Исследование максиминно-эффективных планов для дробно-рациональных моделей на основе функционального подхода

Научный руководитель:
д. ф. -м. н., профессор В.Б. Мелас
Рецензент:
аспирант Ю.М. Старосельский

Санкт-Петербург
2006 г.

- Пусть результаты эксперимента представляются в виде

$$y_j = \eta(x_j, \theta) + \varepsilon_j, \quad j = 1, \ldots, N.$$

Предположения относительно ошибок следующие

$$E\varepsilon_j = 0,\ E\varepsilon_j\varepsilon_i = 0 \text{ для } j \neq i \text{ и } D\varepsilon_j = \sigma^2.$$

- План эксперимента — вероятностная мера, задаваемая таблицей

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

$x_1, \ldots, x_n$ — моменты наблюдений,
$w_1, \ldots, w_n > 0$ — соответствующие весовые коэффициенты,
$\sum\limits_{j=1}^{n} w_j = 1.$

Оценка параметров

- Для оценивания вектора параметров обычно применяется МНК. Пусть
  - N — суммарное количество измерений,
  - θ^* — вектор истинных значений неизвестных параметров,
  - $\widehat{\theta_N}$ — оценка МНК для θ^*.
- Из работы (Jenrich, 1969) известно, что при определенных условиях регулярности и $N \to \infty$ вектор $\sqrt{N}(\widehat{\theta_N} - \theta^*)$ имеет асимптотически нормальное распределение с нулевым средним и дисперсионной матрицей $D = \frac{\sigma^2}{N} M^{-1}(\xi, \theta^*)$, где

$$M(\xi, \theta) = \left(\sum_{s=1}^{n} \omega_s \frac{\partial \eta(x_s, \theta)}{\partial \theta_i} \frac{\partial \eta(x_s, \theta)}{\partial \theta_j} \right)_{ij=1}^{2k}$$

есть информационная матрица Фишера.
Таким образом, информационная матрица отражает качество оценки.

Описание модели

- Рассмотрим дробно-рациональную регрессионную модель:

$$\eta(x,\theta) = \sum_{i=1}^{k} a_i \frac{1}{x+\theta_i},$$

где $a_1, \dots, a_k,\ \theta_1, \dots, \theta_k$ — оцениваемые параметры,
$a_i \neq 0,\ i = 1, \dots, k,$
$\theta_i \neq \theta_j\ (i \neq j),$
$\theta_i > 0,\ i = 1, \dots, k,$
$x \in \chi = [0, \infty).$

- План ξ^* будем называть *локально D-оптимальным* при значении параметра равном θ, если:

$$\xi^* = \arg\max_{\xi} (\det M(\xi,\theta))^{\frac{1}{m}}, \quad m = 2k.$$

Максиминно-эффективные планы

- План будем называть *максиминно-эффективным D-оптимальным (ММЭ)* планом, если он максимизирует величину

$$\min_{\theta\in\Omega}\left(\frac{\det M(\xi,\theta)}{\det M(\xi^*(\theta),\theta)}\right)^{1/m}, \quad m=2k,$$

где $\xi^*(\theta)$ — локально D-оптимальный план.

- Теорема эквивалентности. *План ξ^* является максиминно-эффективным на множестве Ω тогда и только тогда, когда существует распределение π^* на множестве*

$$N(\xi^*)=\{\widetilde{\theta}\in\Omega \mid \mathrm{eff}_D(\xi^*,\widetilde{\theta})=\min_{\theta\in\Omega}\mathrm{eff}_D(\xi^*,\theta)\}$$

такое, что неравенство

$$\int_{N(\xi^*)} f^T(x,\theta)M^{-1}(\xi^*,\theta)f(x,\theta)d\pi^*(\theta)\le m$$

верно для всех $x\in\chi$. Равенство достигается в опорных точках плана ξ^*.

Цель работы

- Реализация функционального подхода, разработанного в (Мелас, 1981) и проведение численных расчетов, позволяющих оценить эффективность ММЭ планов для следующих областей значений параметров:

  $$\Omega = \Omega(z) = \{\theta : (1 - z)c_i \le \theta_i \le (1 + z)c_i,\ i = 1, \ldots, k\},$$

  где c_i — некоторые приближения к истинным значениям параметров, z — величина относительной ошибки.
- Сравнение построенных планов с планами в равноотстоящих узлах, обычно используемых на практике.

Максиминно-эффективные планы с минимальной структурой

- ММЭ планы с минимальным числом точек ($n = m$) имеют вид

$$\xi_\tau = \begin{pmatrix} 0 & x_2 & \dots & x_m \\ 1/m & 1/m & \dots & 1/m \end{pmatrix}, \qquad \tau = (x_2, \dots, x_m).$$

- Рассмотрим функцию

$$\varphi(\tau, \theta) = \left(\frac{\det M(\xi, \theta)}{\det M(\xi_{\tau^*}(\theta), \theta)} \right)^{1/m},$$

где $\xi_{\tau^*}(\theta)$ — локально D-оптимальный план с минимальной структурой.

- План $\xi_{\hat{\tau}}$ определим как *максиминно-эффективный с минимальной структурой (ММЭМС), если он максимизирует величину*

$$\min_{0 \le \alpha \le 1} \alpha \varphi(\tau, (1 - z)C) + (1 - \alpha)\varphi(\tau, (1 + z)C)$$

на множестве всех векторов τ с положительными координатами.

Функциональный подход

- Введем обозначения:

$$u = (\tau, \alpha) = (\tau_1, \ldots, \tau_{m-1}, \alpha)$$

$$\Psi(u, z) = \alpha\varphi(\tau, (1-z)C) + (1-\alpha)\varphi(\tau, (1+z)C).$$

- Рекуррентные формулы (Dette, Melas, Pepelyshev, 2004):

$$J_0 = J(u_0, z_0), \;\; g(u, z) = \frac{\partial}{\partial u}\Psi(u, z),$$

где J — матрица Якоби системы уравнений $g(u, z) = 0$,

$$u_{<s-1>}(z) = \sum_{t=0}^{s-1} u_{(t)}(z - z_0)^t, \;\; s = 1, 2...$$

$$\hat{u}(z) = \sum_{s=0}^{\infty} u_{(s)}(z - z_0)^s, \;\; u_{(s)} = -J_0^{-1}(g(u_{<s-1>}(z), z))_{(s)}.$$

Алгоритм

- Численное нахождение ММЭМС плана при некотором $z = z_0$.
- Вычисление коэффициентов разложения в ряд Тейлора по степеням $(z - z_0)$ опорных точек ММЭМС плана при помощи рекуррентных формул (Dette, Melas, Pepelyshev, 2004).
- Проверка оптимальности построенных планов при различных значениях z при помощи теоремы эквивалентности.
- Расчет минимальной эффективности ММЭМС плана по формуле

$$\min \mathrm{eff}(\xi, \Theta) = \Psi(\hat{u}(z)) = \hat{\alpha}\varphi(\hat{\tau}, (1-z)C) + (1-\hat{\alpha})\varphi(\hat{\tau}, (1+z)C).$$

- Вычисление минимальной эффективности равномерного плана ζ.
- Вычисление эффективности равномерного плана ζ при разных значениях параметров по формуле

$$\mathrm{eff}(\zeta, \theta) = \sqrt[m]{\frac{\det M(\zeta, \theta)}{\det M(\xi_{\tau^*(\theta),\theta})}}.$$

Модель в виде суммы двух дробей

- Модель

$$\eta(x,\theta) = \frac{a_1}{x+\theta_1} + \frac{a_2}{x+\theta_2}.$$

- Область значений параметров

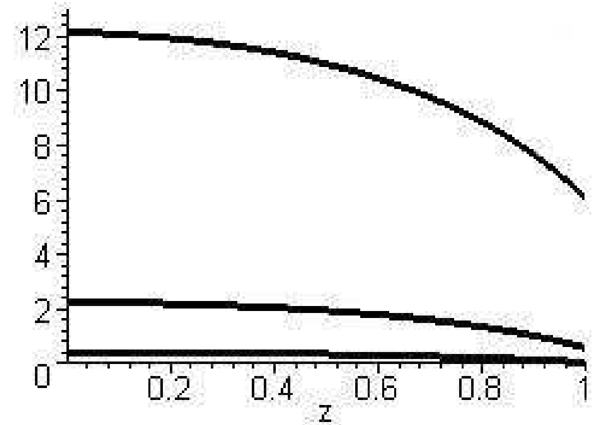
$$\Omega = \Omega(z) = \{\theta : (1-z)c_i \le \theta_i \le (1+z)c_i,\ i = 1,2\}.$$

- $C = (c_1, c_2) = (1, 5)$, $z_0 = 0.5$. Значение минимальной эффективности плана составляет 0.7459. При $z < z^*$, где $z^* \approx 0.4$, ММЭМС план является ММЭ планом.

Таблица 1: Минимальная эффективность ММЭМС плана по сравнению с равномерным планом

θ_1	θ_2	eff
0.8	0.55	0.39
0.9	0.65	0.44
1	0.75	0.48
1.1	0.85	0.51
1.2	0.95	0.54

Точки ММЭМС плана. Случай $k = 2$.



Зависимость точек плана от z. Случай $k = 2$

$$x_2(z) = 0.34 - 0.31(z - 0.5) - 0.39(z - 0.5)^2 - 0.22(z - 0.5)^3 - 0.27(z - 0.5)^4 + \dots$$
$$x_3(z) = 1.94 - 1.29(z - 0.5) - 1.72(z - 0.5)^2 - 1.15(z - 0.5)^3 - 1.53(z - 0.5)^4 + \dots$$
$$x_4(z) = 10.99 - 4.72(z - 0.5) - 6.23(z - 0.5)^2 - 4.01(z - 0.5)^3 - 5.25(z - 0.5)^4 + \dots$$

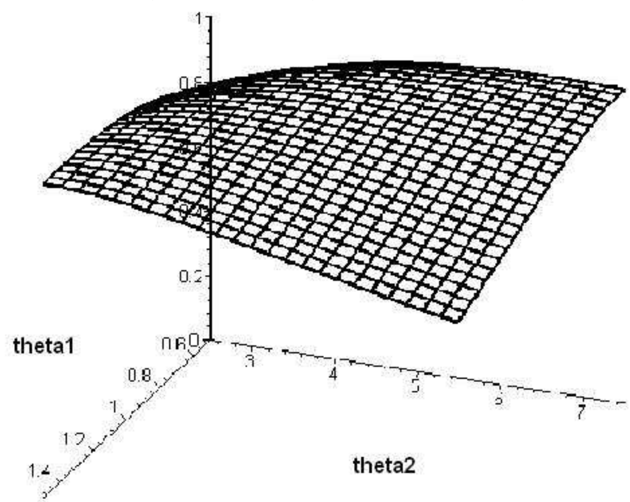


График поверхности эффективности функции $\varphi(\xi^*, \theta),\ \theta \in [0.5, 1.5] \times [2.5, 7.5]$

Модель в виде суммы трех дробей

- Модель

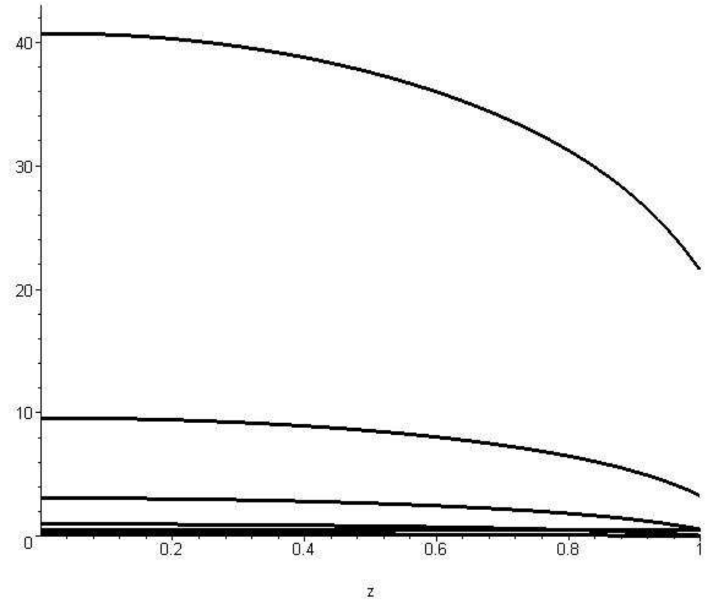
$$\eta(x,\theta) = \frac{a_1}{x+\theta_1} + \frac{a_2}{x+\theta_2} + \frac{a_3}{x+\theta_3}.$$

- Область значений параметров

$$\Omega = \Omega(z) = \{\theta : (1-z)c_i \le \theta_i \le (1+z)c_i,\ i = 1,2,3\}.$$

- $C = (c_1, c_2, c_3) = (1, 3, 10),\ z_0 = 0.5.$
  Значение минимальной эффективности ММЭ плана составляет 0.527. При $z < z^*$, где $z^* \approx 0.25$, ММЭМС план является ММЭ планом.
- Минимум эффективности равномерного плана равен 0.327 при $z = 0.5$.

Точки ММЭМС плана. Случай $k = 3$



Зависимость точек плана от z. Случай $k = 3$

$$x_2(z) = 0.19 - 0.19(z-0.5) - 0.23(z-0.5)^2 - 0.11(z-0.5)^3 - 0.13(z-0.5)^4 + \ldots$$

$$x_3(z) = 0.84 - 0.69(z-0.5) - 0.9(z-0.5)^2 - 0.55(z-0.5)^3 - 0.7(z-0.5)^4 + \ldots$$

$$x_4(z) = 2.69 - 1.79(z-0.5) - 2.38(z-0.5)^2 - 1.59(z-0.5)^3 - 2.1(z-0.5)^4 + \ldots$$

$$x_5(z) = 8.55 - 4.45(z-0.5) - 5.93(z-0.5)^2 - 3.95(z-0.5)^3 - 5.19(z-0.5)^4 + \ldots$$

$$x_6(z) = 37.55 - 13.78(z-0.5) - 18.24(z-0.5)^2 - 11.84(z-0.5)^3 - 15.32(z-0.5)^4 + \ldots$$

Заключение

- Построены разложения максиминно-эффективных планов с минимальным числом точек для дробно-рациональной модели в виде суммы двух и трех дробей.
- Найденные ММЭМС планы при достаточно больших относительных ошибках задания параметров ($\approx 50\%$) являются весьма эффективными. Их минимальная эффективность в 1.5 - 2 раза больше минимальной эффективности планов в равноотстоящих узлах.
- Исследованы границы области, в пределах которой планы с минимальным числом точек являются оптимальными в классе планов с произвольным числом точек.