

Министерство образования Российской Федерации  
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

ПЛАНИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТА

Методические указания к выполнению лабораторных работ по курсу  
"Планирование и анализ эксперимента" для студентов ФПМИ направлений  
подготовки 01.03.02- прикладная математика и информатика, 02.03.03 -  
математическое обеспечение и администрирование информационных систем

Новосибирск  
2017

Составитель: *А.А. Попов*, д-р техн. наук, проф.

Рецензент: *С.Н. Постовалов*, д-р техн. наук, доц.

Работа подготовлена на кафедре теоретической и прикладной информатики

© Новосибирский государственный  
технический университет, 2017

## Лабораторная работа №1

### КРИТЕРИИ ОПТИМАЛЬНОСТИ ПЛАНОВ ЭКСПЕРИМЕНТА

#### 1. Цель работы

Изучить понятие оптимального плана эксперимента, критерии оптимальности планов, свойства информационной матрицы.

#### 2. Содержание работы

1. Изучить понятия непрерывного плана эксперимента и информационной матрицы, а также критерии оптимальности, связанные с точностью оценивания параметров модели и точностью оценивания математического ожидания функции отклика.

2. Разработать программное приложение по обработке различных планов эксперимента для регрессионных моделей. Программа должна иметь возможность обрабатывать несколько различных планов для одной и той же модели. Обработка заключается в вычислении различных функционалов от информационной матрицы, связанных с тем или иным критерием оптимальности.

3. Для каждого из заданных планов вычислить значения функционалов от информационной (дисперсионной) матриц, связанных с такими критериями как:  $D$ -,  $A$ -,  $E$ -,  $\Phi_2$ -,  $\Lambda$ -,  $MV$ -,  $G$ - оптимальности. Проранжировать планы, указанные в варианте, с позиций различных критериев. Выбрать план, наиболее предпочтительный по совокупности критериев. Список планов приведен в табл. 1.

4. В качестве спектра плана выбрать один из приведенных в табл. 1 для соответствующей модели. Веса точек выразить в виде зависимости от одного параметра как в примере аналитического построения оптимального плана. Для этого параметра определить допустимые интервалы значений, руководствуясь тем, что веса точек должны быть неотрицательные, а число таких точек с ненулевыми весами должно быть не меньше числа параметров в модели. Построить графики изменения критерия оптимальности плана, указанного в варианте, в зависимости от этого скалярного параметра; определить по графику оптимальные значения параметра и критерия. Сравнить полученный результат с результатами из п. 3.

5. Оформить отчет, включающий в себя постановку задачи, полученные результаты и текст программы.

6. Защитить лабораторную работу.

### 3. Методические указания

Предположим, что исследуемая модель имеет вид

$$y = f^T(x)\theta + e = \sum_{l=1}^m f_l(x)\theta_l + e,$$

где  $y$  – значение зависимой переменной;  $f^T(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))$  – заданная вектор-функция от независимой векторной переменной  $x$ , которая может изменяться в области  $\tilde{X}$ ;  $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_m)^T$  – вектор неизвестных параметров, которые необходимо определить по результатам экспериментов (измерений);  $e$  – ошибка.

Предположим также, что любое число измерений зависимой переменной можно провести при произвольных  $x_i \in \tilde{X}$ . Пусть ошибки измерений являются независимыми случайными величинами с нулевым математическим ожиданием и одинаковой дисперсией. Для нахождения оценок вектора параметров  $\theta$  используется метод наименьших квадратов.

**Определение 1.** *Планом* эксперимента называется совокупность величин вида

$$\xi_N = \left\{ \begin{matrix} x_1, & x_2, & \dots, & x_n \\ r_1, & r_2, & \dots, & r_n \end{matrix} \right\},$$

где  $\sum_{i=1}^n r_i = N$ ,  $x_i$  – точка, в которой проводится  $r_i$  наблюдений,  $N$  – общее число наблюдений. Совокупность точек  $x_1, x_2, \dots, x_n$  называется **спектром** плана  $\xi_N$ .

**Определение 2.** *Дискретным нормированным планом* называется совокупность величин вида

$$\varepsilon_N = \left\{ \begin{matrix} x_1, & x_2, & \dots, & x_n \\ p_1, & p_2, & \dots, & p_n \end{matrix} \right\},$$

где  $\sum_{i=1}^n p_i = 1$ ,  $p_i = r_i / N$ .

**Определение 3.** *Непрерывным нормированным планом* называется совокупность величин вида

$$\varepsilon = \left\{ \begin{matrix} x_1, & x_2, & \dots, & x_n \\ p_1, & p_2, & \dots, & p_n \end{matrix} \right\},$$

где  $\sum_{i=1}^n p_i = 1$ ,  $p_i \geq 0$ .

**Определение 4.** Нормированной *информационной матрицей* (Фишера) дискретного или непрерывного плана называется величина

$$M = \sum_{j=1}^n p_j f(x_j) f^T(x_j).$$

Чтобы подчеркнуть зависимость информационной матрицей от плана, используют обозначение  $M(\varepsilon_N)$  или  $M(\varepsilon)$ . Матрица, обратная к информационной, называется *дисперсионной*, т.е.

$$D(\varepsilon) = M^{-1}(\varepsilon), D(\varepsilon_N) = M^{-1}(\varepsilon_N).$$

Непрерывный нормированный план в общем случае может соответствовать *вероятностной мере*  $P_\varepsilon(x)$ , заданной на области  $\tilde{X}$  и удовлетворяющей условиям

$$\int_{\tilde{X}} dP_\varepsilon(x) = 1; P_\varepsilon(x) \geq 0; \forall x \in \tilde{X}.$$

При этом нормированная информационная матрица плана  $\varepsilon$  определяется соотношением

$$M(\varepsilon) = \int_{\tilde{X}} f(x) f^T(x) dP_\varepsilon(x).$$

Перечислим свойства информационной матрицы.

1. Для любого плана  $\varepsilon$  информационная матрица  $M(\varepsilon)$  – положительно полуопределенная.
2. Матрица  $M(\varepsilon)$  – особенная (т.е.  $|M(\varepsilon)| = 0$ ), если спектр плана  $\varepsilon$  содержит меньше чем  $m$  точек.
3. Множество матриц  $M(\varepsilon)$ , соответствующее всем возможным нормированным планам, является выпуклым.
4. Для любого плана  $\varepsilon$  всегда найдется план  $\tilde{\varepsilon}$ , спектр которого содержит не более чем  $\frac{m(m+1)}{2} + 1$  точек и информационная матрица которого  $M(\tilde{\varepsilon})$  совпадает с информационной матрицей  $M(\varepsilon)$  плана  $\varepsilon$ .

Под *оптимальным планированием эксперимента* будем понимать выбор плана эксперимента в соответствии с теми или иными критериями оптимальности. Будем оценивать качество плана  $\varepsilon$  по значению некоторого

функционала  $\Psi$  от информационной матрицы  $M(\varepsilon)$  или соответствующей ей дисперсионной матрицы  $D(\varepsilon)$ .

**Определение 5.** План  $\varepsilon^*$  называется  $\Psi$ -*оптимальным*, если

$$\varepsilon^* = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} \Psi[M(\varepsilon)].$$

Основные критерии оптимальности можно разбить на две группы: критерии, связанные с точностью оценивания параметров модели, и критерии, связанные с точностью оценивания математического ожидания функции отклика.

Рассмотрим основные наиболее известные критерии оптимальности первой группы.

План  $\varepsilon^*$  называется  $D$ -*оптимальным*, если

$$\varepsilon^* = \mathop{\text{Arg max}}_{\varepsilon} |M(\varepsilon)|$$

или

$$\varepsilon^* = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} |D(\varepsilon)|.$$

Эллипсоид рассеяния оценок параметров для  $D$ -оптимального плана имеет минимальный объем.

План  $\varepsilon^*$  называется  $A$ -*оптимальным*, если его дисперсионная матрица имеет наименьший след, т.е.

$$\varepsilon^* = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} \text{tr} D(\varepsilon).$$

$A$ -оптимальный план позволяет найти оценки неизвестных параметров с минимальной средней дисперсией. При этом эллипсоид рассеяния имеет минимальную сумму квадратов длин осей и наименьшую длину диагонали параллелепипеда, описанного около этого эллипсоида.

План  $\varepsilon^*$  называется  $E$ -*оптимальным*, если он минимизирует (максимизирует) максимальное (минимальное) собственное значение дисперсионной (информационной) матрицы, т.е. если

$$\varepsilon^* = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} \max_i \lambda_i[D(\varepsilon)]$$

или

$$\varepsilon^* = \mathop{\text{Arg max}}_{\varepsilon} \min_i \lambda_i[M(\varepsilon)],$$

где  $\lambda_i$  – собственное значение матрицы  $D(\varepsilon)$  или  $M(\varepsilon)$ .

План  $\varepsilon^*$  называется  $\Phi_p$ -**оптимальным**, если

$$\varepsilon^* = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} \Phi_p(\varepsilon) = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} (m^{-1} \text{tr} D^p(\varepsilon))^{1/p}.$$

Класс функционалов  $\Phi_p(\varepsilon)$  включает только что введенные критерии оптимальности:  $\Phi_0(\varepsilon)$  – соответствует критерию  $D$ -оптимальности,  $\Phi_1(\varepsilon)$  – критерию  $A$ -оптимальности,  $\Phi_\infty(\varepsilon)$  – критерию  $E$ -оптимальности. В практических ситуациях для  $0 < p < \infty$  можно использовать вместо  $\Phi_p(\varepsilon)$  его эквивалент  $\tilde{\Phi}_p(\varepsilon) = p^{-1} \text{tr} D^p(\varepsilon)$ .

План  $\varepsilon^*$  называется  $\Lambda$ -**оптимальным**, если

$$\varepsilon^* = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} \sum_{i=1}^m [\lambda_i(D(\varepsilon)) - \bar{\lambda}(D(\varepsilon))]^2,$$

где  $\bar{\lambda}$  – среднее значение собственных чисел.

План  $\varepsilon^*$  называется  $MV$ -**оптимальным**, если

$$\varepsilon^* = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} \max_i D_{ii}(\varepsilon),$$

где  $D_{ii}(\varepsilon)$  – диагональный элемент дисперсионной матрицы.

Среди критериев второй группы выделим критерии  $G$ -,  $Q$ -оптимальности и экстраполяции в точку.

План  $\varepsilon^*$  называется  $G$ -**оптимальным**, если

$$\varepsilon^* = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} \max_{x \in \tilde{X}} d(x, \varepsilon),$$

где  $d(x, \varepsilon) = f^T(x) M^{-1}(\varepsilon) f(x)$  – дисперсия оценки функции отклика. Использование этого критерия гарантирует отсутствие точек, имеющих слишком низкую точность оценивания функции отклика.

План  $\varepsilon^*$  называется  $Q$ -**оптимальным**, если

$$\varepsilon^* = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} \int_Z d(x, \varepsilon) dx = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} Q[M^{-1}(\varepsilon)],$$

где область  $Z$  может не совпадать с областью  $\tilde{X}$ .  $Q$ -оптимальные планы минимизируют среднее по области  $Z$  значение дисперсии оценки поверхности отклика.

План  $\varepsilon^*$  называется **оптимальным при экстраполяции в точку**  $x_0$ , если

$$\varepsilon^* = \underset{\varepsilon}{\operatorname{Arg\,min}} d(x_0, \varepsilon).$$

Эти планы минимизируют дисперсию  $d(x_0, \varepsilon)$  оценки функции отклика в точке  $x = x_0$ .

План называется **ротатабельным**, если дисперсия оценки функции отклика может быть представлена как функция расстояния от центра эксперимента.

Критерий **униформности** плана требует, чтобы дисперсия оценки функции отклика в некоторой области в центре эксперимента была практически постоянной.

#### **Аналитическое построение оптимальных планов.**

**Пример.** Пусть модель регрессии имеет вид

$$\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x^2, \quad -1 \leq x \leq 1.$$

Необходимо построить  $D$ -оптимальный план. Предположим, что оптимальный план принадлежит классу планов следующего вида:

$$\varepsilon = \left\{ \begin{array}{ccc} -1 & 0 & 1 \\ q & 1-2q & q \end{array} \right\}.$$

Найдем оптимальное значение параметра  $q$ .

$$|M(\varepsilon)| = 2q - 4q^2, \quad \frac{\partial |M(\varepsilon)|}{\partial q} = 2 - 8q = 0, \quad q^* = 1/4.$$

$$\varepsilon^* = \left\{ \begin{array}{ccc} -1 & 0 & 1 \\ 0.25 & 0.5 & 0.25 \end{array} \right\}.$$

Необходимо проверить, что полученный план действительно является  $D$ -оптимальным. Для этого проверим, что  $\max_x d(x, \varepsilon^*) = m = 2$ . Действительно

$d(x, \varepsilon^*) = 2 - 4x^2 + 4x^4$ , максимум равен 2 и достигается на границах и в точке 0.



#### 4. Варианты заданий

1. Модель квадратичная на отрезке. Планы для анализа: 1-4. Для пункта 4 задания использовать критерий  $D$ -оптимальности.

2. Модель квадратичная на отрезке. Планы для анализа: 5-8. Для пункта 4 задания использовать критерий  $D$ -оптимальности.

3. Модель квадратичная на отрезке, без линейного члена. Планы для анализа: 1-4. Для пункта 4 задания использовать критерий  $A$ -оптимальности.

4. Модель квадратичная на отрезке, без линейного члена. Планы для анализа: 5-8. Для пункта 4 задания использовать критерий  $A$ -оптимальности.

5. Модель кубическая на отрезке. Планы для анализа: 5-8. Для пункта 4 задания использовать критерий  $A$ -оптимальности.

6. Модель кубическая на отрезке. Планы для анализа: 9-12. Для пункта 4 задания использовать критерий  $\Lambda$ -оптимальности.

7. Модель четвертой степени на отрезке. Планы для анализа: 9-12. Для пункта 4 задания использовать критерий  $\Phi_2$ -оптимальности.

8. Модель четвертой степени на отрезке без квадратичного члена. Планы для анализа: 9-12. Для пункта 4 задания использовать критерий  $D$ -оптимальности.

Таблица 1

Планы эксперимента

№	$x_1 / p_1$	$x_2 / p_2$	$x_3 / p_3$	$x_4 / p_4$	$x_5 / p_5$
1	-1 0.2	0 0.6	1 0.2		
2	-1 0.25	0 0.5	1 0.25		
3	-1 0.1884	0 0.6233	1 0.1884		
4	-1 0.333	0 0.333	1 0.333		
5	-1 0.1273	-0.5 0.3727	0.5 0.3727	1 0.1273	
6	-1 0.152	-0.468 0.348	0.468 0.348	1 0.152	
7	-1 0.1799	-0.5279 0.3201	0.5279 0.3201	1 0.1799	
8	-1 0.25	-0.49 0.25	0.49 0.25	1 0.25	
9	-1 0.093	-0.707 0.248	0 0.3178	0.707 0.248	1 0.093
10	-1 0.107	-0.683 0.25	0 0.286	0.683 0.25	1 0.107
11	-1 0.1092	-0.7379 0.2513	0 0.2785	0.7379 0.2513	1 0.1092
12	-1 0.2	-0.7 0.2	0 0.2	0.7 0.2	1 0.2

#### 5. Контрольные вопросы

1. Информационная матрица и ее свойства.

2. Критерии оптимальности планов эксперимента, связанные с точностью оценивания параметров модели.

3. Критерии оптимальности планов эксперимента, связанные с точностью оценивания математического ожидания функции отклика.

4. Геометрия эллипсоида рассеяния и критерии оптимальности планов эксперимента.

## **Лабораторная работа №2**

### **ПОСТРОЕНИЕ НЕПРЕРЫВНЫХ ОПТИМАЛЬНЫХ ПЛАНОВ ЭКСПЕРИМЕНТА**

#### **1. Цель работы**

Изучить алгоритмы, используемые при построении непрерывных оптимальных планов эксперимента.

#### **2. Содержание работы**

1. Изучить условия оптимальности планов эксперимента и алгоритмы синтеза непрерывных оптимальных планов эксперимента.

2. Разработать программу построения непрерывных оптимальных планов эксперимента, реализующую последовательный или комбинированный алгоритм. Применить программу для построения оптимального плана для тестового примера из варианта заданий. Для отчета предусмотреть выдачу на печать протокола решения по итерациям. При большом числе итераций предусмотреть вывод протокола с некоторой дискретностью.

3. Оформить отчет, включающий в себя постановку задачи, протокол решения, а также текст программы.

4. Защитить лабораторную работу.

#### **3. Методические указания**

Построение непрерывного  $\Psi$ -оптимального плана состоит в решении экстремальной задачи вида

$$\varepsilon^* = \underset{\varepsilon}{\operatorname{Arg\,min}}(\max_{\varepsilon})\Psi[M(\varepsilon)].$$

Основная идея, используемая при построении  $\Psi$ -оптимальных планов, заключается в следующем. Строится итерационный процесс, на каждом шаге которого перераспределяется на множестве  $\tilde{X}$  вероятностная мера таким образом, чтобы получить уменьшение (увеличение) функционала. При этом для выпуклых функционалов при соблюдении условий оптимальности достигается

глобальный экстремум. Для функционалов общего вида может быть найден локальный экстремум.

Алгоритмы построения  $\Psi$ -оптимальных планов можно разбить на две группы: алгоритмы последовательного типа (двойственные алгоритмы) и алгоритмы прямого типа, т.е. использующие прямые методы.

Часто решение двойственной задачи оказывается проще решения прямой задачи. При решении задач оптимального планирования эксперимента эффективность алгоритмов последовательного типа определяется заменой в вычислительном процессе трудоемких операций, таких, как обращение матрицы, вычисление определителя и т.п., на более простые операции типа вычисления квадратичных форм.

Основная часть *последовательного алгоритма* синтеза непрерывных оптимальных планов эксперимента состоит из следующих шагов.

1. Выбирается невырожденный начальный план  $\varepsilon^0$ . Номер итерации  $s$  устанавливается в 0.

2. Отыскивается точка глобального экстремума  $x^s$ :

$$x^s = \arg \min_{x \in \tilde{X}} (\max_{x \in \tilde{X}}) \varphi(x, \varepsilon^s),$$

где  $\varphi(x, \varepsilon) = f^T(x) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial M(\varepsilon)} f(x)$ .

3. Проверяется приближенное выполнение необходимых и достаточных условий оптимальности планов

$$\left| -\min_{x \in \tilde{X}} (\max_{x \in \tilde{X}}) \varphi(x, \varepsilon^s) + \text{tr} M(\varepsilon^s) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^s)]}{\partial M(\varepsilon^s)} \right| \leq \delta.$$

Если условие выполнено, то работа алгоритма прекращается. В противном случае осуществляется переход на шаг 4.

4. Составляется план

$$\varepsilon^{s+1} = (1 - \alpha^s) \varepsilon^s + \alpha^s \varepsilon(x^s),$$

где  $0 < \alpha^s < 1$ ,  $\varepsilon(x^s)$  – план, состоящий из одной точки  $x^s$ .

Фактически, формирование плана  $\varepsilon^{s+1}$  состоит в пересчете весов плана  $\varepsilon^s$  по формуле  $p_j^{s+1} = (1 - \alpha^s) p_j^s$ ,  $j = 1, \dots, n_s$ , где  $n_s$  – количество точек в спектре плана  $\varepsilon_s$ , и добавления в его спектр точки  $x^s$  с весом  $p_{n_s+1}^{s+1} = \alpha^s$ .

5. Величина  $\Psi[M(\varepsilon^{s+1})]$  сравнивается с величиной  $\Psi[M(\varepsilon^s)]$ .

а) если  $\Psi[M(\varepsilon^{s+1})] \geq \Psi[M(\varepsilon^s)]$  (для задачи максимизации проверяется обратное неравенство), то величина  $\alpha^s$  уменьшается в  $\gamma$  раз и повторяются шаги 4–5;

б) если имеет место обратное неравенство, то  $s$  заменяется на  $s+1$  и осуществляется переход на шаг 2.

Глобальный экстремум для функции  $\varphi(x, \varepsilon^s)$  на шаге 2 может быть найден перебором ее значений на достаточно мелкой сетке. Оценка глобального экстремума может быть также проведена по схеме случайного поиска с достаточно большим числом испытаний. При этом следует учитывать, что точность решения задачи на шаге 2 является определяющим условием сходимости последовательного алгоритма. Точность выполнения необходимых и достаточных условий оптимальности на шаге 3 регулируется параметром  $\delta$ .

Его значение можно выбирать, например, как  $\delta = \left| \min_{x \in \tilde{X}} (\max_{x \in \tilde{X}}) \varphi(x, \varepsilon^s) \right| \times 0.01$ .

Начальное значение для  $\alpha^s$  на шаге 4 имеет смысл выбирать не большим величины  $1/n_s$ . Параметр  $\gamma$ , который может быть использован на шаге 5, можно взять равным 2.

Пусть в результате работы алгоритма построен план  $\varepsilon^s$ , который может быть сколь угодно близок к оптимальному плану  $\varepsilon^*$ , но все же отличаться от него. Это отличие будет заключаться в том, что

1)  $\|x_j^* - x_j^s\|^2 \leq \mu, j = 1, \dots, n_s$ , где  $\mu$  – малое положительное число,  $(\bullet)$  – евклидова норма;

2)  $|p_j^* - p_j^s| \leq \pi$ , где  $\pi$  – малое положительное число;

3) план  $\varepsilon^s$  по сравнению с планом  $\varepsilon^*$  имеет "посторонние" точки  $x_{n+1}^s, x_{n+2}^s, \dots, x_{n+v}^s$  с малыми весами  $\tau \geq p_{n+1}^s \geq p_{n+2}^s \geq \dots \geq p_{n+v}^s$ ;

4) вместо одной точки  $x_j^s$ , близкой к  $x_j^*$ , имеется набор точек  $x_{j_1}^s, x_{j_2}^s, \dots, x_{j_l}^s$ , каждая из которых близка к  $x_j^*$ :  $\|x_j^* - x_{j_k}^s\|^2 \leq \mu, k = 1, \dots, l$ , и их суммарный вес близок к  $p_j^*$ :

$$\left| p_j^* - \sum_{k=1}^l p_{j_k}^s \right| \leq \pi.$$

Так как планы с большим числом точек нежелательны, то необходимо производить процедуру "очистки" плана, которая состоит из следующих шагов.

1. Точки, тяготеющие к одной из групп, объединяются по правилу

$$p_j^s = \sum_{k=1}^l p_{j_k}^s, \quad x_j^s = 1 / p_j^s \sum_{k=1}^l x_{j_k}^s p_{j_k}^s.$$

2. Точки с малыми весами, не тяготеющие ни к одной из групп, указанных в 4), выбрасываются. Их веса перераспределяются между оставшимися точками.

Далее, полученный в результате "очистки" план проверяется на близость к оптимальному, например, по необходимым и достаточным условиям. Если план близок к оптимальному, то вычисления прекращаются, иначе итерационный процесс необходимо продолжить.

В результате **последовательный алгоритм** синтеза непрерывных оптимальных планов эксперимента состоит из следующих шагов.

1. Выполняется основная часть алгоритма.

2. Производится очистка плана.

3. Проверяется условие оптимальности очищенного плана: если условие выполняется, то работа алгоритма прекращается, в противном случае осуществляется переход на шаг 1.

В **данной лабораторной работе** допускается проводить очистку плана в ручном режиме вне основной программы. Полученный после очистки план считается новым начальным планом для основной части алгоритма.

### **Комбинированный (прямой-двойственный) алгоритма построения непрерывных оптимальных планов**

Рассмотрим теперь метод, основанный на прямом решении задачи

$$\varepsilon^* = \underset{\varepsilon}{\operatorname{Arg\,max}} \Psi[M(\varepsilon)]. \quad (1)$$

Основное внимание уделим градиентным методам поиска. Весь алгоритм построения  $\Psi$ -оптимального плана (назовем его прямым-двойственным) в этом случае будет состоять из следующих этапов:

1. Формирование начального невырожденного плана  $\varepsilon^s$ ;
2. Градиентный подъем(спуск) по координатам  $x$  с получением плана  $\bar{\varepsilon}^s$ ;
3. Градиентный подъем(спуск) по координатам  $p$  с получением плана  $\bar{\bar{\varepsilon}}^s$ ;
4. Поиск точек  $x^s$ , доставляющих максимум  $\varphi(x, \bar{\bar{\varepsilon}}^s)$  и проверка достаточных условий оптимальности (двойственная часть оптимизационного алгоритма).  
Если достаточные условия оптимальности не выполняются, то в план  $\bar{\bar{\varepsilon}}^s$

добавляется точка  $x^s$  с нулевыми весами, получаемый план обозначаем, как  $\varepsilon^{s+1}$ , и продолжаем вычисление с пункта 2. Рассмотрим эти блоки в отдельности.

### **Градиентный спуск (подъем) по весам точек плана.**

Рассмотрим алгоритм решения следующей задачи:

$$p^* = \underset{p}{\operatorname{Arg\,max}} \psi[M(\varepsilon)] \quad (2)$$

$$p_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1. \quad (4)$$

Ограничения (3), (4) этой задачи линейные. Воспользуемся методом проекции градиента. Градиент функционала по весам точек плана определяется как

$$\nabla_p \psi[M(\varepsilon)] = \left( \frac{\partial \psi[M(\varepsilon)]}{\partial p_1}, \dots, \frac{\partial \psi[M(\varepsilon)]}{\partial p_n} \right) = (\varphi(x_1, \varepsilon), \dots, \varphi(x_n, \varepsilon)).$$

Проектировать вектор градиента будем на линейное многообразие, заданное активными ограничениями из числа (3), (4). Пусть граничная точка  $p = (p_1, \dots, p_n)^T$  принадлежит ровно  $q+1$  линейно-независимым гиперплоскостям  $H_j$  (пусть это будут первые  $q+1$  гиперплоскости

$$H_1, \dots, H_{q+1}), \text{ т.е. } p_i = 0, i = 1, \dots, q, \quad \sum_{i=1}^n p_i = 1.$$

Справедливы следующие условия оптимальности:

Точка  $p^* = (p_1^*, \dots, p_n^*)^T$  тогда и только тогда является решением задачи (2)–(4), когда (условие необходимости)

$$\left( G_p \nabla_p \psi[M(\varepsilon)] \right)_j = 0, \text{ для } j = q+1, \dots, n, \text{ либо } p_i = 0, i = 1, \dots, q \quad (5)$$

и (условие достаточности)

$$(u)_j = \left( \left( A_q A_q^T \right)^{-1} A_q \nabla_p \psi[M(\varepsilon)] \right)_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, q+1, \quad (6)$$

где  $G_p = I - A_q^T (A_q A_q^T)^{-1} A_q$  – матрица проектирования;  $A_q$  – матрица  $(q+1) \times n$  вектор-строк нормалей к ограничивающим гиперплоскостям  $H$  (ограничения (3) записываются в виде  $-p_i \leq 0, i = 1, \dots, n$ ). Учитывая, что

$$A_q = \begin{bmatrix} a_1^T \\ a_2^T \\ \dots \\ a_n^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & \dots & 0 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

можно получить следующие выражения:

$$\begin{aligned} \left( G_q \nabla_p \psi[M(\varepsilon)] \right)_j &= \frac{\partial \psi[M(\varepsilon)]}{\partial p_j} - \sum_{i=q+1}^n \frac{\partial \psi[M(\varepsilon)]}{\partial p_i} \cdot \frac{1}{n-q} \\ &= \varphi(x_j, \varepsilon) - \sum_{i=q+1}^n \varphi(x_i, \varepsilon) \cdot \frac{1}{n-q}, j = q+1, \dots, n, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\left. \begin{aligned} u_j &= \sum_{i=q+1}^n \varphi(x_i, \varepsilon) \cdot \frac{1}{n-q} - \varphi(x_j, \varepsilon), j = 1, \dots, q \\ u_{q+1} &= \sum_{i=q+1}^n \varphi(x_i, \varepsilon) \cdot \frac{1}{n-q} \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Для оптимальности весов  $p^*$  должно выполняться (5). Как следует из (7) это возможно, если все компоненты вектора градиента  $\varphi(x_i, \varepsilon)$ ,  $i = q+1, \dots, n$ , равны между собой. Это условие, однако, лишь необходимое. Достаточность определяется выполнением (6), т.е. компоненты градиента в точках, для которых  $p_j^* = 0$ , не больше средней суммы компонент градиента точек, в которых  $p_j^* \neq 0$  (см. (8)).

Схема оптимизации по  $p$  может быть следующей:

1. Для заданного спектра плана  $\varepsilon^s$  выбирается первоначальное распределение весов  $p^s$  так, чтобы план не оказался невырожденным. Пусть  $p^s$  принадлежит  $q+1$  гиперплоскостям  $H_j$ ,  $j = 1, \dots, q+1$ ;

2. Вычисляем вектор-градиент  $\nabla_p \psi \left[ M(\varepsilon^S) \right] = \left( \varphi(x_i, \varepsilon^S) \right)_{i=1}^n$ ;
3. Проверяем условия
- 4.

$$\begin{aligned} \varphi(x_i, \varepsilon^S) &= \varphi(x_j, \varepsilon^S), \quad i, j = q+1, \dots, n, \\ \sum_{i=q+1}^n \varphi(x_i, \varepsilon^S) \cdot \frac{1}{n-q} - \varphi(x_j, \varepsilon^S) &> 0, \quad j = 1, 2, \dots, q. \end{aligned} \quad (9)$$

Если они выполняются, то  $p^S$  есть решение. Если условие (9) не выполняется например для точки  $x_g$ , то ограничение  $p_g = 0$  исключается из числа активных и не участвует в построении матрицы проектирования  $G_q$ . Таких точек может быть не одна а несколько.

5. Если  $p^S$  не решение, то задается величина шага  $\lambda$  и рассматривается новая точка

$$p^{S+1} = p^S + \lambda \cdot G_q \nabla_p \psi \left[ M(\varepsilon^S) \right].$$

### **Градиентный спуск (подъем) по координатам точек плана.**

Будем предполагать, что функционал  $\psi \left[ M(\varepsilon) \right]$  является дифференцируемым по переменным  $x$ . Размерность задачи равна  $n \times k$ . Вектор-градиент функционала определяется следующим образом

$$\nabla_x \psi \left[ M(\varepsilon) \right] = \left( \operatorname{tr} \frac{\partial \psi \left[ M(\varepsilon) \right]}{\partial M(\varepsilon)} f(x_i) \frac{\partial f(x_i)}{\partial x_j} \right)_{\substack{i=1, \dots, n \\ j=1, \dots, k}},$$

где  $\frac{\partial f(x_i)}{\partial x_j}$  – частная производная вектора функции  $f(x)$  в точке  $x = x_i$  по  $j$ -й переменной.

Итерационная схема градиентного спуска (подъема) может быть следующей:

1. Задается невырожденный план  $\varepsilon^S$ ;
2. Вычисляется вектор градиента  $\nabla_x \psi \left[ M(\varepsilon^S) \right]$ ;
3. Задаем величину  $t$  и рассматриваем новый план  $\varepsilon^{S+1}$ , точки которого изменяются:  $x^{S+1} = x^S + t \cdot \nabla_x \psi \left[ M(\varepsilon^S) \right]$ ;
4. В качестве критерия останова – любой из применяемых в нелинейном программировании.



В данной лабораторной работе требуется реализовать только блок оптимизации по весам точек плана (этап 3) и проверить точность выполнения необходимых и достаточных условий оптимальности для полученного плана (этап 4).

Вид необходимых и достаточных условий оптимальности планов для ряда критериев указан в табл. 2. При этом использованы следующие обозначения:  $q$  – собственный вектор, соответствующий некрратному

минимальному собственному числу  $\min_i \lambda_i(M(\varepsilon^*));$

$d(x, \tilde{x}, \varepsilon) = f^T(x)M^{-1}(\varepsilon)f(\tilde{x})$ . Заметим, что эта таблица также позволяет уточнить вид экстремальной задачи, решаемой на шаге 2.

Таблица 2

Необходимые и достаточные условия оптимальности планов эксперимента

Критерий	Функционал	Необходимые и достаточные условия оптимальности
$D$	$\ln(M(\varepsilon))$	$\max_{x \in \tilde{X}} \text{tr} M(x)M^{-1}(\varepsilon^*) = m$
$A$	$-\text{tr} M^{-1}(\varepsilon) \rightarrow \max$	$\max_{x \in \tilde{X}} \text{tr} M^{-2}(\varepsilon^*)M(x) = \text{tr} M^{-1}(\varepsilon^*)$
$E$	$\min_i \lambda_i(M(\varepsilon))$	$\max_{x \in \tilde{X}} \text{tr} q q^T M(x) = \text{tr} q q^T M(\varepsilon^*)$
$\Phi_p$	$-p^{-1} \text{tr} M^{-p}(\varepsilon) \rightarrow \max$	$\max_{x \in \tilde{X}} \text{tr} M^{-p-1}(\varepsilon^*)M(x) = \text{tr} M^{-p}(\varepsilon^*)$
$\Lambda$	$\sum_{i=1}^m [\lambda_i(D(\varepsilon)) - \bar{\lambda}(D(\varepsilon))]^2$	$\min_{x \in \tilde{X}} \{[\text{tr} M^{-2}(\varepsilon^*)M(x)]\text{tr} M^{-1}(\varepsilon^*) - m \text{tr} M^{-3}(\varepsilon^*)M(x)\} \frac{2}{m} =$ $= \frac{2}{m} \text{tr}^2 M^{-1}(\varepsilon^*) - 2 \text{tr} M^{-2}(\varepsilon^*)$
$Q$	$\int_Z d(x, \varepsilon) dx$	$\max_{x \in \tilde{X}} \int_Z d^2(x, \tilde{x}, \varepsilon^*) d\tilde{x} = \int_Z d(x, \varepsilon^*) dx,$
экстраполяции в точку	$d(x_0, \varepsilon)$	$\max_{x \in \tilde{X}} d^2(x, x_0, \varepsilon^*) = d(x_0, \varepsilon^*)$

#### 4. Варианты заданий

1. Двухфакторная квадратичная модель на квадрате  $[-1, +1]$ . Начальный план – полный факторный эксперимент из 25 точек, на уровнях  $-1, -0.5, 0, +0.5$ ,

+1, веса равны  $1/25$ . Строить  $D$ -оптимальные планы. Последовательный алгоритм.

2. Двухфакторная квадратичная модель на квадрате  $[-1, +1]$ . Начальный план – полный факторный эксперимент из 25 точек, на уровнях  $-1, -0.5, 0, +0.5, +1$ , веса равны  $1/25$ . Строить  $D$ -оптимальные планы. Комбинированный алгоритм (неполный его вариант).

3. Двухфакторная квадратичная модель на квадрате  $[-1, +1]$ . Начальный план – полный факторный эксперимент из 49 точек, на уровнях  $-1, -0.75, -0.25, 0, +0.25, +0.75, +1$ , веса равны  $1/49$ . Строить  $A$ -оптимальные планы. Последовательный алгоритм.

4. Двухфакторная квадратичная модель на квадрате  $[-1, +1]$ . Начальный план – сетка с шагом 0.25 по каждой координате. Веса равные. Строить  $A$ -оптимальные планы. Комбинированный алгоритм (неполный его вариант).

5. Двухфакторная квадратичная модель на квадрате  $[-1, +1]$ . Начальный план – полный факторный эксперимент из 25 точек, на уровнях  $-1, -0.5, 0, +0.5, +1$ , веса равны  $1/25$ . Строить  $\Phi_2$ -оптимальные планы. Последовательный алгоритм.

6. Двухфакторная квадратичная модель на квадрате  $[-1, +1]$ . Начальный план – полный факторный эксперимент из 25 точек, на уровнях  $-1, -0.5, 0, +0.5, +1$ , веса равны  $1/25$ . Строить  $\Phi_2$ -оптимальные планы. Комбинированный алгоритм (неполный его вариант).

7. Двухфакторная кубическая модель на квадрате  $[-1, +1]$ . Начальный план – полный факторный эксперимент из 49 точек, на уровнях  $-1, -0.75, -0.5, 0, +0.5, +0.75, +1$ , веса равны  $1/49$ . Строить  $D$ -оптимальные планы. Последовательный алгоритм.

8. Двухфакторная кубическая модель на квадрате  $[-1, +1]$ . Начальный план – сетка с шагом 0.25 по каждой координате. Веса равные. Строить  $D$ -оптимальные планы. Комбинированный алгоритм (неполный его вариант).

## 5. Контрольные вопросы

1. Условия оптимальности планов эксперимента. Общая теорема.
2. Условия  $D$ -оптимальности. Теорема эквивалентности.
3. Условия  $A$ -,  $E$ - оптимальности, экстраполяции в точку.
4. Последовательный алгоритм синтеза непрерывных оптимальных планов эксперимента.
5. Комбинированный алгоритм синтеза непрерывных оптимальных планов эксперимента.

## Лабораторная работа №3

# ПОСТРОЕНИЕ ДИСКРЕТНЫХ ОПТИМАЛЬНЫХ ПЛАНОВ ЭКСПЕРИМЕНТА

### 1. Цель работы

Изучить алгоритмы, используемые при построении дискретных оптимальных планов.

### 2. Содержание работы

1. Изучить алгоритмы построения дискретных оптимальных планов.
2. Разработать программу построения дискретных оптимальных планов эксперимента, реализующую заданный алгоритм.
3. Для числа наблюдений 20, 25, 30, 35, 40 построить оптимальные планы на каждой из сеток, указанных в варианте задания. Выбрать лучшие дискретные планы для заданного числа наблюдений.
4. Оформить отчет, включающий в себя постановку задачи, результаты проведенных в п. 3 исследований, текст программы.
5. Защитить лабораторную работу.

### 3. Методические указания

С понятием дискретного оптимального плана  $\varepsilon_N^*$  связывают план с заданным числом  $N$  наблюдений. Необходимость построения дискретных оптимальных планов обуславливается тем, что непрерывные оптимальные планы в общем случае при реализации могут потребовать значительного числа наблюдений. Непрерывные оптимальные планы с произвольными весами  $p_i \geq 0$  имеют в большей степени теоретическое значение, на практике же в основном рассматриваются дискретные планы.

Выделяют следующие **типы алгоритмов синтеза дискретных планов**: прямые алгоритмы, основанные на применении нелинейной оптимизации, алгоритмы замены и алгоритмы последовательного типа.

Пусть область действия факторов представляет собой дискретное множество точек  $\tilde{X}$ . Задача построения  $\Psi$ -оптимального плана  $\varepsilon_N^*$  с  $N$  наблюдениями имеет вид

$$\varepsilon_N^* = \underset{\varepsilon_N}{\operatorname{Arg\,max}} \Psi[M(\varepsilon_N)]$$

с  $p_i = 1 / N$ ,  $i = \overline{1, N}$ .

Рассмотрим алгоритмы замены точек, предназначенные для синтеза  $D$ -оптимальных дискретных планов. Далее везде  $s$  – это номер итерации.

### **Алгоритм Федорова.**

1. Выбирается невырожденный начальный план  $\varepsilon_N^0$  и малая константа  $\delta > 0$ ,  $s = 0$ .

2. Выбирается пара точек:  $x_j^s$ , принадлежащая плану  $\varepsilon_N^s$ , и  $x^s$ , не принадлежащая плану, по правилу

$$(x_j^s, x^s) = \arg \left( \max_{x_j \in \varepsilon_N^s} \max_{x \in \tilde{X}} \Delta(x_j, x) \right),$$

где

$$\Delta(x_j, x) = \frac{1}{N} [d(x, \varepsilon_N) - d(x_j, \varepsilon_N)] - \frac{1}{N^2} [d(x, \varepsilon_N) d(x_j, \varepsilon_N) - d^2(x, x_j, \varepsilon_N)],$$

$$d(x, \varepsilon) = f^T(x) M^{-1}(\varepsilon) f(x), \quad d(x, x_j, \varepsilon) = f^T(x) M^{-1}(\varepsilon) f(x_j).$$

3. Величина  $\Delta(x_j, x)$  сравнивается с  $\delta$ . Если  $\Delta(x_j, x) < \delta$ , то вычисления прекращаются, в противном случае осуществляется переход на шаг 4.

4. Точка  $x_j$  заменяется в плане на точку  $x$ . В результате получается новый план  $\varepsilon_N^{s+1}$ . Далее,  $s$  заменяется на  $s + 1$  и осуществляется переход на шаг 2.

Оптимизационная процедура, выполняемая на шаге 2, может оказаться слишком трудоемкой в вычислительном плане, поэтому на практике ограничиваются поиском первой пары точек  $(x_j^s, x^s)$ , для которой выполняется условие  $\Delta(x_j^s, x^s) \geq \delta$ . После чего выполняется шаг 4.

### **Алгоритм Митчела.**

1. Выбирается невырожденный начальный план  $\varepsilon_N^0$ ,  $s = 0$ .

2. Выбирается точка  $x^s$ , не принадлежащая плану  $\varepsilon_N^s$ , по правилу

$$x^s = \arg \max_x d(x, \varepsilon_N^s),$$

где  $d(x, \varepsilon) = f^T(x)M^{-1}(\varepsilon)f(x)$ .

3. Точка  $x^s$  добавляется в план  $\varepsilon_N^s$ . В результате формируется план  $\varepsilon_{N+1}^s$ , состоящий из  $N+1$  точек.

4. Выбирается точка  $x_j^s$ , принадлежащая плану  $\varepsilon_{N+1}^s$ , по правилу

$$x_j^s = \arg \min_{x \in \varepsilon_{N+1}^s} d(x, \varepsilon_{N+1}^s).$$

5. Точка  $x_j^s$  исключается из плана  $\varepsilon_{N+1}^s$ . В итоге формируется план  $\varepsilon_N^{s+1}$ .

6. Если точка  $x^s$ , выбранная на шаге 2, совпадает с точкой  $x_j^s$ , выбранной на шаге 4, то вычисления прекращаются, в противном случае  $s$  заменяется на  $s+1$  и осуществляется переход на шаг 2.

**Градиентный алгоритм замены** не ориентирован на какой-либо определенный критерий оптимальности.

1. Выбирается невырожденный начальный план  $\varepsilon_N^0$ ,  $s = 0$ .

2. Вычисляются элементы вектора градиента

$$\varphi(x_j, \varepsilon_N^s) = f^T(x_j) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon_N^s)]}{\partial M(\varepsilon_N)} f(x_j), \quad j = 1, \dots, n,$$

для плана  $\varepsilon_N^s$ ,  $\varepsilon_{N,i}^s = \varepsilon_N^s$ . Счетчик числа проведенных замен точек при движении по вычисленному направлению градиента устанавливается в 0 ( $i = 0$ ).

3. Выбирается точка  $x^*$  на множестве  $\tilde{X}$  по правилу

$$x^* = \operatorname{Arg} \max_x \varphi(x, \varepsilon_N^s).$$

Если требуется, что бы в плане не было повторных наблюдений, то данный поиск осуществляется на множестве  $\tilde{X} \setminus \varepsilon_{N,i}^s$ .

4. Среди точек плана  $\varepsilon_{N,i}^s$  выбирается точка  $x^{**}$  по правилу

$$x^{**} = \operatorname{Arg} \min_{x_j \in \varepsilon_{N,i}^s} \varphi(x_j, \varepsilon_N^s).$$

5. Точка  $x^{**}$  заменяется в плане  $\varepsilon_{N,i}^s$  на точку  $x^*$ . В результате формируется план  $\varepsilon_{N,i+1}^s$ .

6. Сравниваются величины  $\Psi[M(\varepsilon_{N,i+1}^s)]$  и  $\Psi[M(\varepsilon_{N,i}^s)]$ :

а) если  $\Psi[M(\varepsilon_{N,i+1}^s)] > \Psi[M(\varepsilon_{N,i}^s)]$ , то счетчик  $i$  проведенных удачных замен точек увеличивается на единицу и осуществляется переход на шаг 3, при этом точки  $x^{**}$  и  $x^*$  исключаются из рассмотрения;

б) в противном случае: если  $i = 0$ , то вычисления прекращаются, иначе –  $s$  заменяется на  $s + 1$  и осуществляется переход на шаг 2.

**Алгоритм достраивания** относится к алгоритмам последовательного типа. В данном алгоритме план эксперимента строится последовательным добавлением точек в соответствии с выбранным критерием оптимальности, начиная с выбора первой точки.

Рассмотри вариант алгоритма достраивания, ориентированный на синтез  $D$ -оптимальных дискретных планов.

Обозначим план эксперимента, состоящий из  $s$  точек, через  $\varepsilon_s$ . Информационная матрица плана  $\varepsilon_s$  при  $s < m$  ( $m$  – число неизвестных параметров) будет вырожденной. Применим регуляризацию по единичной матрице, введя в рассмотрение матрицу

$$\tilde{M}(\varepsilon_s) = \begin{cases} M(\varepsilon_s) + \gamma I, & s < m \\ M(\varepsilon_s), & s \geq m \end{cases},$$

где  $\gamma$  – некоторый малый положительный параметр регуляризации. При  $s = 0$ , когда план не содержит ни одной точки, получаем  $\tilde{M}(\varepsilon_0) = \gamma I$ .

На очередном шаге алгоритма в план включается точка  $x_{s+1}$ , которая находится как решение оптимизационной задачи

$$x_{s+1} = \underset{x \in \tilde{X}}{\operatorname{Argmax}} f^T(x) \tilde{M}^{-1}(\varepsilon_s) f(x),$$

где  $\tilde{X}$  – область действия факторов  $x$ .

Для того, чтобы на  $m$ -м шаге мы получили невырожденную информационную матрицу  $M(\varepsilon_m)$ , необходимо на каждом шаге обеспечивать возрастание ранга матрицы  $\tilde{M}(\varepsilon_s)$ . Обычно для этого достаточно, чтобы все  $s = m$  включенных точек были различны.

Если область действия факторов  $\tilde{X}$ , как мы уже говорили, представляет собой дискретное множество точек, то возможен вариант алгоритма

дистраивания, не требующий регуляризации информационной матрицы. Пусть  $n = \text{card}(\tilde{X})$  – число точек в этой области. Начальный план  $\varepsilon_s$ ,  $s = n$  определим в виде всего этого множества точек. Для получения плана  $\varepsilon_N$  с заданным числом наблюдений  $N < n$  будем поочередно удалять из начального плана по одной точки, соответствующей

$$x_s = \underset{x}{\text{Argmin}} f^T(x) M^{-1}(\varepsilon_s) f(x).$$

После очередного удаления  $s$  уменьшается на единицу. Информационная матрица пересчитывается. Процедура продолжается до достижения  $s = N$ . Будем называть подобный алгоритм **алгоритмом дистраивания реверсного типа**.

#### 4. Варианты заданий

1. Двухфакторная квадратичная модель на квадрате со сторонами  $[-1, +1]$ . Дискретное множество  $\tilde{X}$  – сетки  $10 \times 10$  и  $20 \times 20$ . Строить  $D$ - оптимальные планы. Алгоритм Федорова. Повторные наблюдения допускаются.

2. Двухфакторная квадратичная модель на квадрате со сторонами  $[-1, +1]$ . Дискретное множество  $\tilde{X}$  – сетки  $10 \times 10$  и  $20 \times 20$ . Строить  $A$ - оптимальные планы. Градиентный алгоритм замены. Повторные наблюдения допускаются.

3. Двухфакторная квадратичная модель на квадрате со сторонами  $[-1, +1]$ . Дискретное множество  $\tilde{X}$  – сетки  $20 \times 20$  и  $30 \times 30$ . Строить  $D$ - оптимальные планы. Алгоритм Митчелла. Повторные наблюдения допускаются.

4. Двухфакторная квадратичная модель на квадрате со сторонами  $[-1, +1]$ . Дискретное множество  $\tilde{X}$  – сетки  $20 \times 20$  и  $30 \times 30$ . Строить  $D$ - оптимальные планы. Последовательный алгоритм дистраивания. Повторные наблюдения допускаются.

5. Двухфакторная кубическая модель на квадрате со сторонами  $[-1, +1]$ . Дискретное множество  $\tilde{X}$  – сетки  $30 \times 30$  и  $40 \times 40$ . Строить  $A$ - оптимальные планы. Градиентный алгоритм замены. Повторные наблюдения не допускаются.

6. Двухфакторная кубическая модель на квадрате со сторонами  $[-1, +1]$ . Дискретное множество  $\tilde{X}$  – сетки  $30 \times 30$  и  $40 \times 40$ . Строить  $D$ - оптимальные планы. Алгоритм Митчелла. Повторные наблюдения не допускаются.

7. Двухфакторная кубическая модель на квадрате со сторонами  $[-1, +1]$ . Дискретное множество  $\tilde{X}$  – сетки  $30 \times 30$  и  $40 \times 40$ . Строить  $D$ - оптимальные планы. Алгоритм Федорова. Повторные наблюдения не допускаются.

8. Двухфакторная кубическая модель на квадрате со сторонами  $[-1, +1]$ . Дискретное множество  $\tilde{X}$  – сетки  $30 \times 30$  и  $40 \times 40$ . Строить  $D$ -оптимальные планы. Последовательный алгоритм достраивания. Реверсный вариант. Повторные наблюдения не допускаются.

## 5. Контрольные вопросы

1. Построение дискретных планов путем "округления" непрерывных оптимальных планов.
2. Алгоритм Федорова синтеза дискретных  $D$ -оптимальных планов.
3. Алгоритм Митчелла синтеза дискретных  $D$ -оптимальных планов.
4. Градиентный алгоритм замены для построения дискретных оптимальных планов.
5. Алгоритм достраивания для построения дискретных оптимальных планов.

## Лабораторная работа №4

### ОПТИМАЛЬНОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА ДЛЯ НЕЛИНЕЙНЫХ РЕГРЕССИОННЫХ МОДЕЛЕЙ

#### 1. Цель работы

Изучить методы оптимального планирования эксперимента при нелинейной параметризации функции отклика.

#### 2. Содержание работы

1. Изучить понятия локально-оптимального планирования и информационной матрицы при нелинейной параметризации функции отклика, ознакомиться с видом производственной функции Кобба-Дугласа\*.

---

\* Модель Кобба-Дугласа имеет вид  $Y = \theta_0 \prod_{i=1}^k X_i^{\theta_i}$ , где  $Y$  – выход продукта,  $X_i$  – входные ресурсы,  $k$  – число входных ресурсов, при постоянной отдаче от масштаба параметры удовлетворяют ограничению  $\sum_{i=1}^k \theta_i = 1$ , при возрастающей отдаче от масштаба –

ограничению  $\sum_{i=1}^k \theta_i > 1$ , при убывающей отдаче от масштаба – ограничению  $\sum_{i=1}^k \theta_i < 1$ .



2. По заданному типу технологии сформировать имитационную модель в виде производственной функции Кобба-Дугласа. При этом задать истинные значения для параметров, нелинейно входящих в модель. Выход модели зашумить, уровень шума установить в пределах 15%–20% от мощности полезного сигнала.

3. Выбрать план для затравочного эксперимента, состоящий из небольшого числа наблюдений, и смоделировать на его основе экспериментальные данные.

4. Оценить параметры модели по полученным экспериментальным данным. Для этого необходимо перейти к линейной модели, воспользовавшись логарифмическим представлением уравнения модели наблюдения. Параметры преобразованной модели тогда можно оценить обычным "линейным" МНК.

5. Построить локально-оптимальный план эксперимента для исходной нелинейной модели, воспользовавшись разработанной ранее программой синтеза дискретных оптимальных планов и полученными оценками параметров модели. Число наблюдений должно в 4-5 раз превышать число параметров модели.

6. По сформированной ранее (п.2) имитационной модели провести имитационный эксперимент в точках полученного локально-оптимального плана. Провести оценку параметров и вычислить норму отклонения оценок от их истинных значений. Вычислительный эксперимент повторить не менее 100 раз, каждый раз с новой реализацией помехи. Вычислить среднее значение нормы отклонения оценок. Процедуру повторить, используя в качестве плана эксперимента случайно расположенные точки в факторном пространстве. В серии вычислительных экспериментов случайный план фиксируется (выбирается один раз). Сделайте вывод об эффективности оптимального планирования эксперимента для идентификации заданной нелинейной модели.

7. Оформить отчет, включающий в себя постановку задачи, оценки параметров по затравочному эксперименту, полученный локально-оптимальный план, результаты проведенного в п. 6 исследования и текст программы.

8. Защитить лабораторную работу.

### **3. Методические указания**

Нелинейная параметризация функции отклика приводит к значительному усложнению методов регрессионного анализа и планирования эксперимента по сравнению с линейным случаем.

Пусть модель наблюдения описывается уравнением

$$y = \eta(x, \theta) + e,$$

где  $y$  – значение зависимой переменной;  $x$  – вектор независимых переменных;  $\eta(x, \theta)$  – нелинейная функция вектора параметров  $\theta$ ;  $\theta$  – вектор неизвестных параметров;  $e$  – ошибка наблюдения. Предположим, что ошибки измерений являются независимыми нормально распределенными случайными величинами, имеющими нулевое математическое ожидание и дисперсию  $\sigma^2$ .

Для нахождения оценок вектора параметров  $\theta$  используется метод наименьших квадратов, который требует минимизации по  $\theta$  суммы квадратов отклонений вычисленных и измеренных значений вида

$$S(\theta) = \sum_{j=1}^N [y_j - \eta(x_j, \theta)]^2,$$

где  $y_j, x_j$  – значения зависимой и независимой переменных в  $j$ -м наблюдении,  $N$  – число наблюдений.

**Информационная матрица Фишера** для нелинейной модели, в отличие от линейной, зависит от значения оценки вектора параметров  $\hat{\theta}$ . Приближенное значение нормированной информационной матрицы дискретного плана можно вычислить по формуле

$$M(\varepsilon_N, \hat{\theta}) \approx M(\varepsilon_N, \theta_{true}) = \sum_{j=1}^n p_j f(x_j, \theta_{true}) f^T(x_j, \theta_{true}),$$

где  $f(x, \hat{\theta}) = \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\hat{\theta}}$ ,  $\theta_{true}$  – истинное значение вектора параметров.

**Дисперсионная матрица** определяется как обратная к информационной, т.е.  $D(\varepsilon_N, \hat{\theta}) = M^{-1}(\varepsilon_N, \hat{\theta})$ .

План  $\varepsilon_N^*$  называется **локально  $\Psi$ -оптимальным**, если

$$\varepsilon_N^* = \underset{\varepsilon_N}{\operatorname{Arg\,min}} \Psi[M(\varepsilon_N, \theta_{true})].$$

Явное построение этих планов оказывается возможным только в простейших случаях.

В практическом смысле более важен случай, когда априорно известна некоторая область, которой заведомо принадлежит точка  $\theta_{true}$ . Если в этой области значения производных  $f(x, \theta)$  меняются мало, то задача планирования становится эквивалентной задаче планирования при линейной параметризации поверхности отклика.

Может быть известна оценка вектора параметров  $\tilde{\theta}$ , которая достаточно близка к  $\theta_{true}$ . Если в окрестности  $\theta_{true}$  характеристики оптимального плана эксперимента мало чувствительны к изменениям параметров, то исходную задачу локально оптимального планирования можно заменить задачей

$$\varepsilon_N^* = \underset{\varepsilon_N}{\operatorname{Arg\,min}} \Psi[M(\varepsilon_N, \tilde{\theta})].$$

#### 4. Варианты заданий

1. Технология Кобба-Дугласа. Число входных ресурсов 2. Постоянная отдача от масштаба. Ресурсы изменяются в пределах  $[0, 10]$ . Локально- $D$ -оптимальное планирование.
2. Технология Кобба-Дугласа. Число входных ресурсов 2. Постоянная отдача от масштаба. Ресурсы изменяются в пределах  $[0, 10]$ . Локально- $A$ -оптимальное планирование.
3. Технология Кобба-Дугласа. Число входных ресурсов 2. Возрастающая отдача от масштаба. Ресурсы изменяются в пределах  $[0, 5]$ . Локально- $D$ -оптимальное планирование.
4. Технология Кобба-Дугласа. Число входных ресурсов 2. Убывающая отдача от масштаба. Ресурсы изменяются в пределах  $[0, 20]$ . Локально- $D$ -оптимальное планирование.
5. Технология Кобба-Дугласа. Число входных ресурсов 2. Убывающая отдача от масштаба. Ресурсы изменяются в пределах  $[0, 20]$ . Локально- $A$ -оптимальное планирование.
6. Технология Кобба-Дугласа. Число входных ресурсов 3. Постоянная отдача от масштаба. Ресурсы изменяются в пределах  $[0, 10]$ . Локально- $D$ -оптимальное планирование.
7. Технология Кобба-Дугласа. Число входных ресурсов 3. Возрастающая отдача от масштаба. Ресурсы изменяются в пределах  $[0, 5]$ . Локально- $D$ -оптимальное планирование.
8. Технология Кобба-Дугласа. Число входных ресурсов 3. Убывающая отдача от масштаба. Ресурсы изменяются в пределах  $[0, 20]$ . Локально- $D$ -оптимальное планирование.

#### 5. Контрольные вопросы

1. Последовательная стратегия планирования эксперимента для нелинейных регрессионных моделей.
2. Локально-оптимальное планирование.
3. Минимаксное планирование.
4. Байесовское планирование.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Бард Й. Нелинейное оценивание параметров. – М.: Статистика, 1979.
2. Демиденко Е.З. Линейная и нелинейная регрессии. – М.: Финансы и статистика, 1981.
3. Денисов В.И. Математическое обеспечение системы ЭВМ–экспериментатор. – М.: Наука, 1977.
4. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ: В 2-х кн. – М.: Финансы и статистика, 1986.
5. Ермаков С.М., Жиглявский А.А. Математическая теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1987.
6. Попов А.А. Конструирование линейных регрессионных моделей с разнотипными переменными. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 1999.
7. Федоров В.В. Теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1971.
8. Денисов В. И. Попов А.А. Пакет программ оптимального планирования эксперимента: [монография] / В. И. Денисов, А. А. Попов. – М. : Финансы и статистика, 1986. – 158 с.
9. Попов А. А. Оптимальное планирование эксперимента в задачах структурной и параметрической идентификации моделей многофакторных систем = Optimal experiment design in problems of structural and parametrical identification of multifactor system models : монография / А. А. Попов. - Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2013. - 296 с. - ("Монографии НГТУ").