

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Новосибирский государственный технический университет
Кафедра теоретической и прикладной информатики

Планирование и анализ эксперимента
Лабораторная работа №3

Факультет:	ФПМИ
Группа:	ПМ-63
Студенты:	Кожекин М.В. Майер В.А. Назарова Т.А. Утюганов Д.С.
Вариант:	9(1)

Новосибирск

2020

1. Цель работы

Изучить алгоритмы, используемые при построении дискретных оптимальных планов эксперимента.

2. Задание

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. Анализ

Задана двухфакторная модель на квадрате со сторонами $[-1, 1]$.

Дискретное множество \tilde{X} - сетки 10×10 и 20×20 . Строить D-оптимальные планы. Алгоритм Фёдорова. Повторные наблюдения допускаются.

$$y = \Theta_0 + \Theta_1 \cdot x_1 + \Theta_2 \cdot x_2 + \Theta_3 \cdot x_1 \cdot x_2 + \Theta_4 \cdot x_1^2 + \Theta_5 \cdot x_2^2$$

Этапы **алгоритма Фёдорова** синтеза непрерывного оптимального плана:

1. Выбирается невырожденный начальный план ε_N^0 и малая константа $\delta > 0$, $s = 0$.
2. Выбирается пара точек: x_j^s , принадлежащая плану ε_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

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

,

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

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

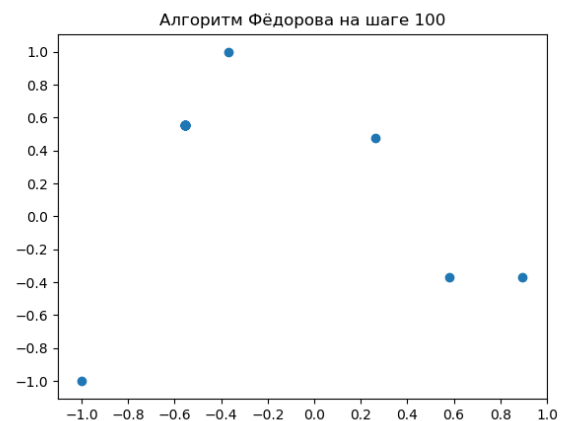
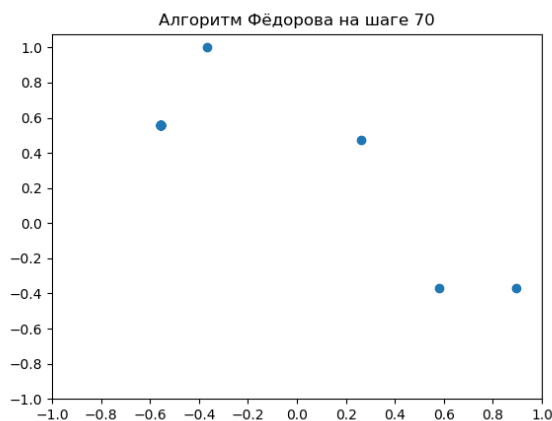
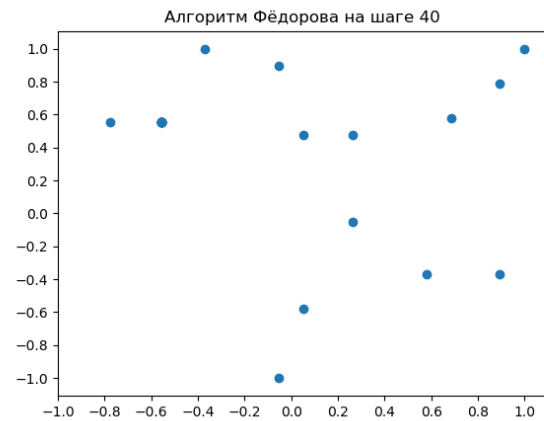
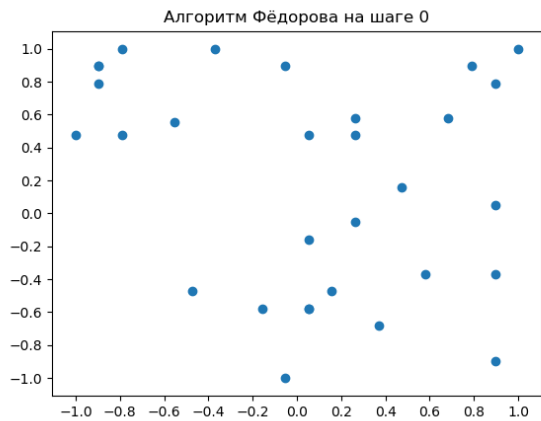
4. Точка x_j заменяется в плане на точку x . В результате получается новый план ε_N^{s+1} . Далее s заменяется $s+1$ и осуществляется переход на шаг 2.

Оптимизационная процедура, выполняемая на шаге 2, может оказаться слишком трудоёмкой 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.

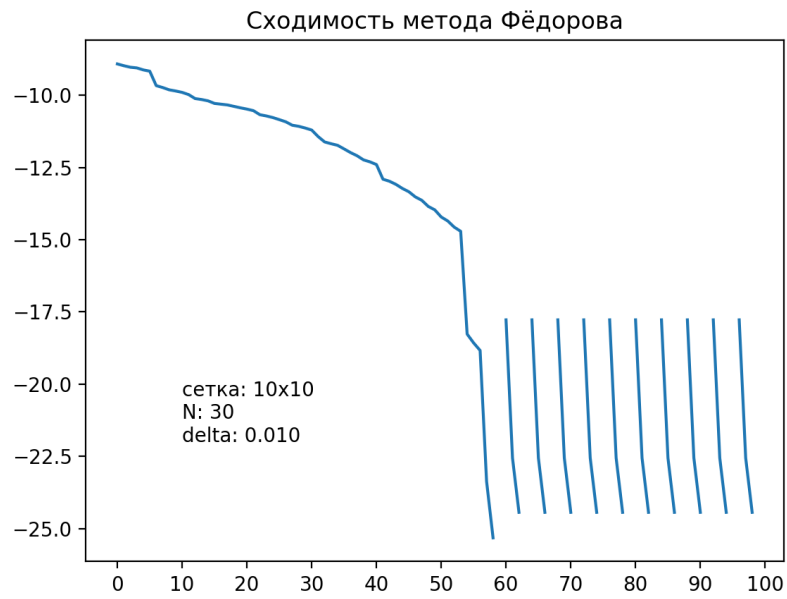
4. Исследования работы алгоритма

4.1. Визуализация сходимости метода

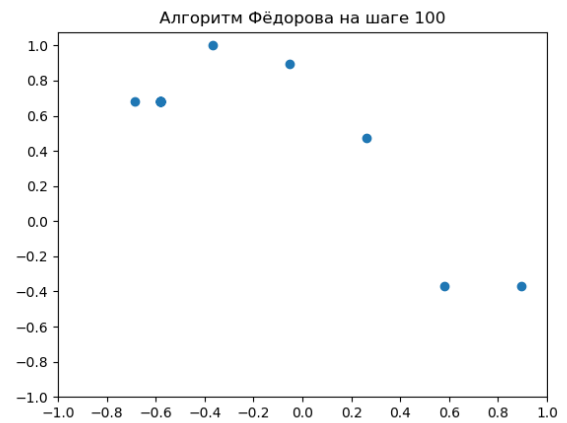
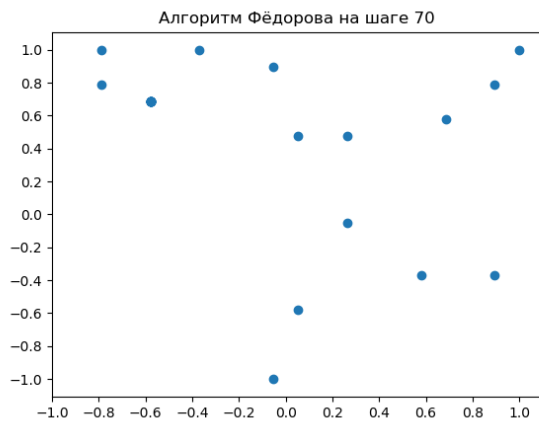
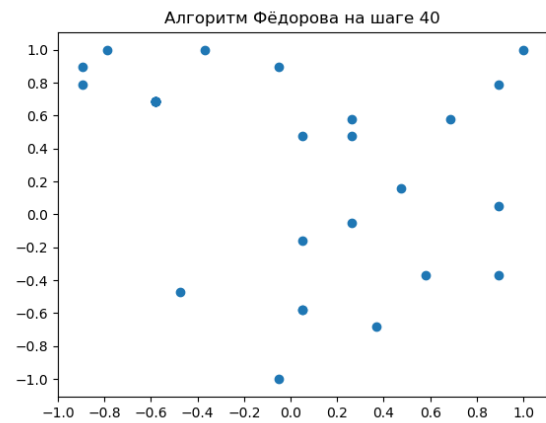
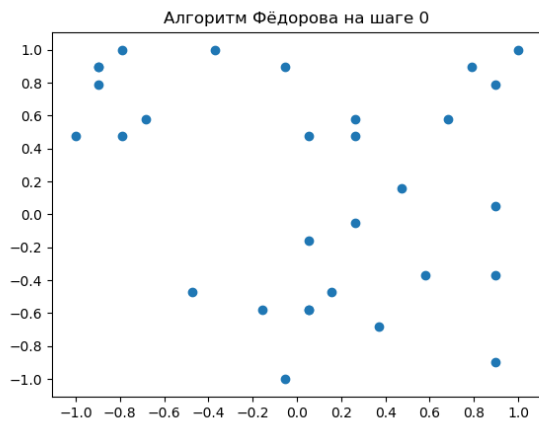
Сходимость алгоритма Фёдорова при $N = 30$, $\delta = 0.01$ на сетке 10×10



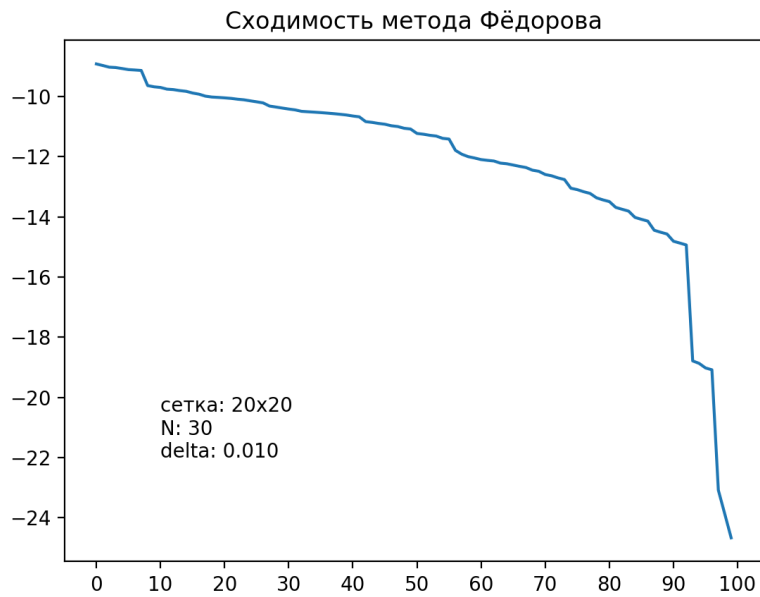
Исходя из графика можно понять, что из-за размера сетки алгоритм расходится на 55-ом шаге.



Сходимость алгоритма Фёдорова при $N = 30$, $\delta = 0.01$ на сетке 20x20

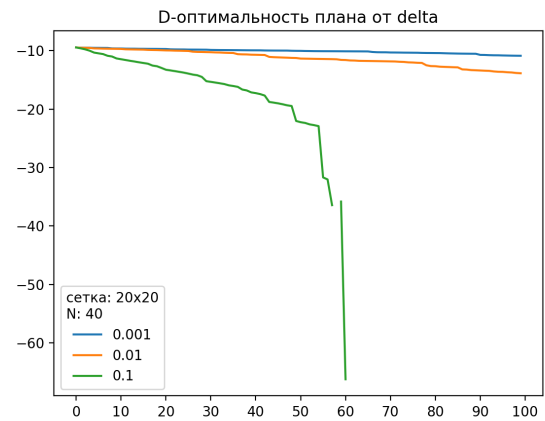
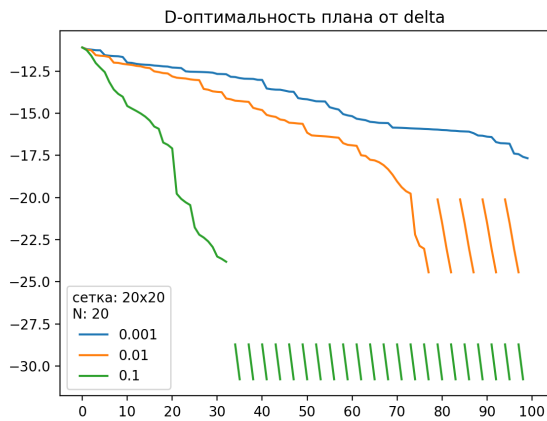


Исходя из графика можно понять, что критерий D-оптимальности уменьшается, значит, наш алгоритм всё ещё сходится.



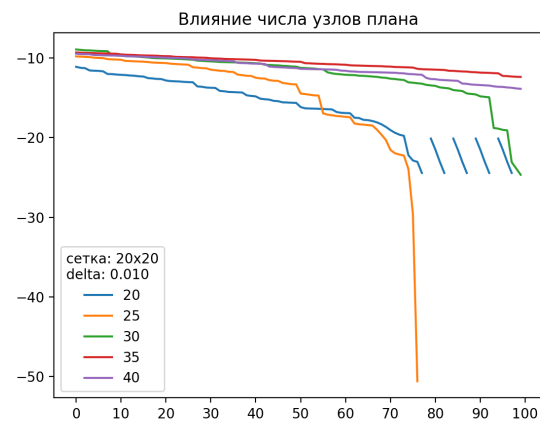
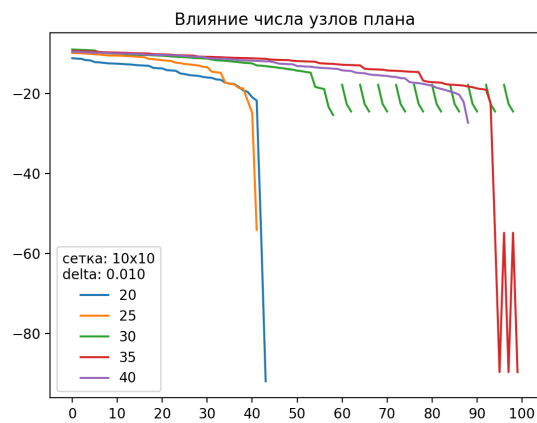
4.2. Влияние шага метода

Как видно из графиков при уменьшении δ метод сходится медленнее. При увеличении данного параметра метод может разойтись.



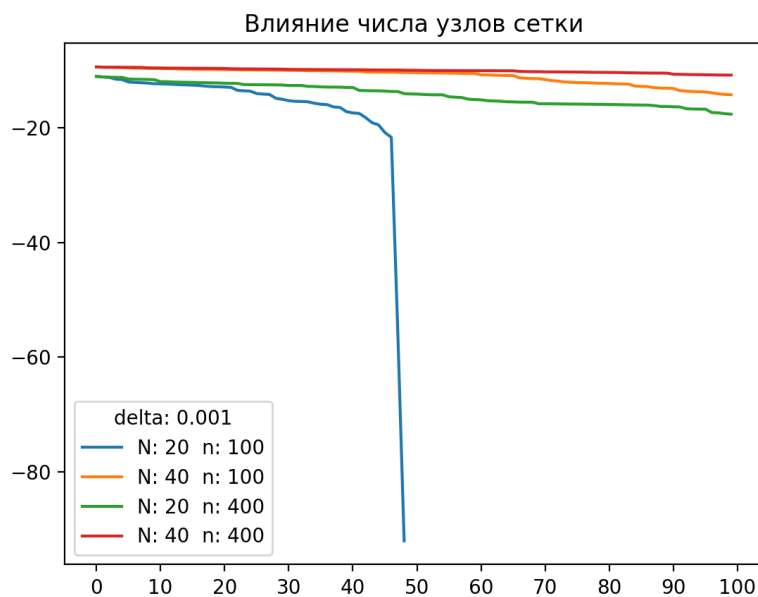
4.3. Влияние числа узлов плана

При малом числе точек плана метод становится неустойчивым. Особенно это заметно если множество \tilde{X} также имеет малое число точек



4.4. Влияние числа узлов сетки

При увеличении числа точек сетки метод становится стабильнее, но медленнее сходится. При малых N и n метод расходится.



5. Исходный код программы

lab3.py

```
1 import matplotlib.pyplot as plt
2 import matplotlib.ticker as ticker
3 import numpy as np
4 from numpy.linalg import det, inv, norm
5
6 k = 2          # число переменных 2: (x,y)
7 m = 6          # число параметров a + b*x + c*y + d*x*y + e*x^2 + f*y^2
8 MAX_ITER = 100
9
```

```

10 def f(theta, x):
11     return theta[0] + \
12            theta[1]*x[0] + \
13            theta[2]*x[1] + \
14            theta[3]*x[0]*x[1] + \
15            theta[4]*x[0]**2 + \
16            theta[5]*x[1]**2
17
18 def f_vector(x):
19     return np.array([
20         1,
21         x[0],
22         x[1],
23         x[0]*x[1],
24         x[0]**2,
25         x[1]**2
26     ])
27
28 def f_vector_T(x):
29     return np.array([
30         1,
31         x[0],
32         x[1],
33         x[0]*x[1],
34         x[0]**2,
35         x[1]**2
36     ])
37
38
39 #
40 #
41 #
42 class Lab3():
43     '''
44     Класс для 3 лабораторной работы
45     Для стандартизации все критерии ищут минимальное значение
46     '''
47     def __init__(self, N, width, delta):
48         ''' Выделение памяти под массивы '''
49         n = width**2
50         self.x_grid = np.ndarray((n, k))
51         self.x_plan = np.ndarray((N, k))
52         self.p = np.full(N, 1/N)
53         self.M = np.ndarray((m, m))
54         self.D = np.ndarray((m, m))
55         self.width = width
56         self.n = n
57         self.delta = delta
58         self.max_iter = MAX_ITER
59         self.N = N
60
61     def Fedorov_algorithm(self, do_visualisation = False):
62         '''
63         Алгоритм Фёдорова синтеза дискретного
64         оптимального плана эксперимента
65         '''
66         self.generate_initial_guess()
67         do_calc = True
68         s = 0
69         result = np.zeros(self.max_iter)

```

```

70
71     while do_calc == True and s < self.max_iter:
72
73         self.build_matrix_M()
74         self.build_matrix_D()
75
76         max_delta, i, j = self.replace_two_points()
77         do_calc = not (max_delta < self.delta)
78         result[s] = self.calc_D()
79
80         if s % 10 == 0 and do_visualisation:
81             self.draw_plan_on_iteration(s)
82
83         s += 1
84         print(s, i, j, max_delta, self.calc_D())
85
86     if do_visualisation:
87         self.draw_plan_on_iteration(s)
88     return result
89
90     def draw_plan_on_iteration(self, s):
91         t = np.linspace(-1, 1, 11)
92         plt.title('Алгоритм Фёдорова на шаге ' + str(s))
93         plt.scatter([self.x_plan[i][0] for i in range(len(self.x_plan))], [self.
94 x_plan[i][1] for i in range(len(self.x_plan))], )
95         plt.xticks(t)
96         plt.yticks(t)
97         plt.savefig('pics/plan_Fedorov_{:}_{:}_{:.3f}_{:}.png'.format(self.N, self.
98 width, self.delta, s))
99         plt.clf()
100
101     def replace_two_points(self):
102         ''' Замена точки из плана на внешнюю '''
103         # для начала:
104         max_delta = -9000
105         # перебираем все точки плана и все точки сетки
106         for i, int_point in enumerate(self.x_plan):
107             for j, ext_point in enumerate(self.x_grid):
108                 delta = self.Delta(int_point, ext_point)[0]
109                 # delta = abs(self.Delta(int_point, ext_point))
110                 # выбрали пару точек получше
111                 if delta > self.delta:
112                     max_delta = delta
113                     self.x_plan[i] = self.x_grid[j]
114                     return max_delta, i, j
115         return max_delta, -1, -1
116
117     def generate_initial_guess(self):
118         ''' Задаём начальное приближение '''
119         # создаём сетку
120         self.t = np.linspace(-1, 1, self.width)
121         i = 0
122         for x1 in self.t:
123             for x2 in self.t:
124                 self.x_grid[i] = np.array([x1, x2])
125                 i+=1
126
127         # случайно выбираем точки плана и сохраняем
128         # for i in range(self.N):
129         #     self.x_plan[i] = self.x_grid[np.random.choice(n)]

```



```

128         # np.savetxt('report/plan'+str(self.N)+'.txt', self.x_plan)
129
130         # или же загружаем
131         self.x_plan = np.loadtxt('report/plan'+str(self.N)+'.txt', dtype=np.
float)
132
133     def build_matrix_M(self):
134         ''' Построение информационной матрицы M '''
135         self.M = np.zeros((m, m))
136         for i in range(self.N):
137             self.M += self.p[i] * f_vector(self.x_plan[i]) * f_vector_T(self.
x_plan[i])
138
139     def build_matrix_D(self):
140         ''' Построение дисперсионной матрицы D '''
141         self.D = inv(self.M)
142
143     def calc_D(self):
144         '''
145         Критерий D — оптимальности. (D — determinant)
146         Эллипсоид рассеивания имеет минимальный объём
147         '''
148         return np.log(det(self.M))
149
150     def Delta(self, x, x_j):
151         N = float(self.N)
152         return (self.d(x) - self.d(x_j)) / N - (self.d(x) * self.d(x_j) - self.
d_2(x,x_j)**2) / N**2
153
154     def d(self, x):
155         return f_vector_T(x) @ self.D @ f_vector(x)
156
157     def d_2(self, x, x_j):
158         return f_vector_T(x) @ self.D @ f_vector(x_j)
159
160 #
161 #
162 #
163 t = np.linspace(0, MAX_ITER, 11)
164
165 def perform_experiment(N, width, delta):
166     l3 = Lab3(N, width, delta)
167     return l3.Fedorov_algorithm()
168
169 def research_delta():
170     ''' Исследование скорости сходимости и устойчивости от delta '''
171     width = 20
172     for N in [20, 40]:
173         for delta in [0.001, 0.01, 0.1]:
174             y = perform_experiment(N, width, delta)
175             plt.plot(y, label=str(delta))
176
177             plt.title('Оптимальность — плана от delta')
178             plt.legend(title='сетка: {}x{}\nN: {}'.format(width, width, N))
179             plt.xticks(t)
180             plt.savefig('pics/research_delta_{}x{}_{}.png'.format(width, width, N),
dpi=200)
181             plt.clf()
182
183 def research_N():

```

```

184     ''' Исследование скорости сходимости и устойчивости от N '''
185     delta = 0.01
186     for width in [10, 20]:
187         for N in [20, 25, 30, 35, 40]:
188             y = perform_experiment(N, width, delta)
189             plt.plot(y, label=str(N))
190             plt.title('Влияние числа узлов плана')
191             plt.legend(title='сетка: {}x{}\ndelta: {:.3f}'.format(width, width, delta
192 ))
193             plt.xticks(t)
194             plt.savefig('pics/research_N_{}x{}.png'.format(width, width), dpi=200)
195             plt.clf()
196
197 def research_width():
198     ''' Исследование скорости сходимости и устойчивости от числа узлов сетки '''
199     delta = 0.001
200     for width in [10, 20]:
201         for N in [20, 40]:
202             y = perform_experiment(N, width, delta)
203             plt.plot(y, label='N: {} n: {}'.format(N, width**2))
204
205             plt.title('Влияние числа узлов сетки')
206             plt.legend(title='delta: {:.3f}'.format(delta))
207             plt.xticks(t)
208             plt.savefig('pics/research_width.png', dpi=200)
209             plt.clf()
210
211 def show_convergence(N, width, delta):
212     l3 = Lab3(N, width, delta)
213     y = l3.Fedorov_algorithm(True)
214     plt.plot(y)
215     plt.title('Сходимость метода Фёдорова')
216     plt.text(10, -22, 'сетка: {}x{}\nN: {}\ndelta: {:.3f}'.format(width, width, N
217 , delta))
218     plt.xticks(t)
219     plt.savefig('pics/convergence_Fedorov_{}_{}_ {:.3f}.png'.format(N, width,
220 delta), dpi=200)
221     plt.clf()
222
223 #
224 #
225 #
226 research_delta()
227 research_N()
228 research_width()
229 show_convergence(30, 10, 0.01)
230 show_convergence(30, 20, 0.01)

```