

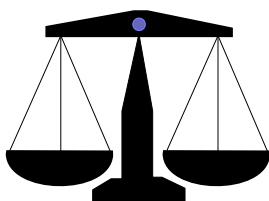
# 1. Задача оптимального планирования эксперимента. Понятие плана. Свойства информационной матрицы

Как видно из выражений для информационной и дисперсионной матриц, они зависят от выбора точек  $x_i \in \mathcal{X}$ , в которых проводятся наблюдения.

Ранее, используя соответствующий метод оценивания, получили НЛО среди всех линейных оценок. Теперь появляется дополнительная возможность для улучшения свойств оценок  $\hat{\theta}$  за счет выбора точек  $x_i, i = \overline{1, N}$ .

Определение. Под оптимальным планированием эксперимента будем понимать априорный выбор совокупности точек  $x_i, i = \overline{1, N}$ , в соответствии с теми или иными критериями оптимальности.

Пример плохо и хорошо организованного эксперимента.  
Задача взвешивания трех объектов А, В, С на аналитических весах.



Традиционно экспериментатор стал бы взвешивать эти объекты по схеме:

№ опыта	А	В	С	Результат взвешивания
1	-1	-1	-1	$y_0$
2	+1	-1	-1	$y_1$
3	-1	+1	-1	$y_2$
4	-1	-1	+1	$y_3$

(+1 означает, что объект взвешивания положен на весы).

Вначале он делает холостое взвешивание, определяя нулевую точку весов, затем по очереди взвешивает каждый объект.

Масса каждого объекта оценивается только по результатам двух опытов: того опыта, в котором на весы был положен изучаемый объект, и холостого опыта. Например, масса объекта А равна  $\hat{A} = y_1 - y_0$ .

Дисперсия результата взвешивания запишется в виде:

$$\sigma^2(\hat{A}) = \sigma^2\{y_1 - y_0\} = 2\sigma^2(y), \text{ где } \sigma^2(y) - \text{ошибка взвешивания.}$$

Проведем теперь эксперимент по другой схеме.

№ опыта	А	В	С	Результат взвешивания
1	+1	-1	-1	$y_1$
2	-1	+1	-1	$y_2$
3	-1	-1	+1	$y_3$
4	+1	+1	+1	$y_4$

В первых трех опытах последовательно взвешиваются объекты А, В, С; в последнем опыте взвешиваются все три объекта вместе.

Легко видеть, что масса каждого объекта будет задаваться формулами:

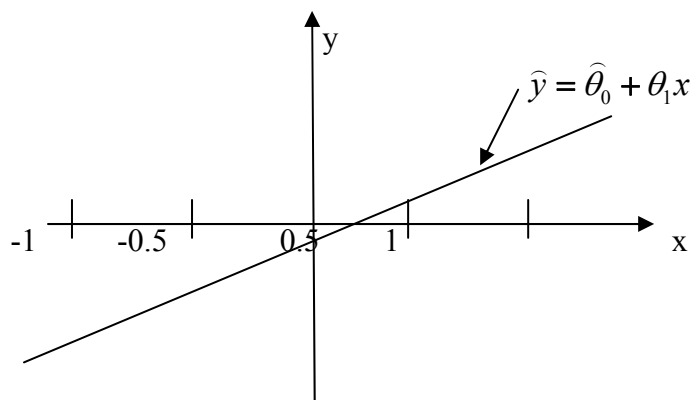
$$\hat{A} = \frac{y_1 - y_2 - y_3 + y_4}{2}; \quad \hat{B} = \frac{-y_1 + y_2 - y_3 + y_4}{2}; \quad \hat{C} = \frac{-y_1 - y_2 + y_3 + y_4}{2}.$$

Найдем теперь дисперсию определения массы объектов:

$$\sigma^2(\hat{A}) = \sigma^2 \left\{ \frac{y_1 - y_2 - y_3 + y_4}{2} \right\} = \frac{4\sigma^2(y)}{4} = \sigma^2(y) = \sigma^2(\hat{B}) = \sigma^2(\hat{C})$$

Дисперсия получается вдвое меньше.

Другой пример:



Известно, что  $E(y/x) = \theta_0 + \theta_1 x$ ,  $x \in [-1, 1]$ . Рассмотрим эксперимент двух типов:

I)

$N$	$x$
1	-1
2	+1

II)

$N$	$x$
1	-0.5
2	+0.5

$$\hat{\theta} = (X^T X)^{-1} X^T y;$$

$$I) X = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & +1 \end{pmatrix}, \quad X^T = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & +1 \end{pmatrix}, \quad X^T X = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad (X^T X)^{-1} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix},$$

$$\hat{\theta} = 1/2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2(y_1 + y_2) \\ 1/2(-y_1 + y_2) \end{pmatrix}. \quad D_1(\hat{\theta}) = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

$$II) X = \begin{pmatrix} 1 & -1/2 \\ 1 & +1/2 \end{pmatrix}, \quad X^T = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 \\ -1/2 & +1 \end{pmatrix}, \quad X^T X = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{pmatrix},$$

$$(X^T X)^{-1} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad D_2(\hat{\theta}) = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad D_2(\hat{\theta}) > D_1(\hat{\theta}), \text{ то есть схема II проигрывает!}$$

Запишем несколько определений.

**Определение 1.** Дискретным планом  $\xi_N$  называется совокупность величин

$\underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_n; r_1, r_2, \dots, r_n$ , где  $\sum_{i=1}^n r_i = N$ ,  $\underline{x}_i$  - точка, в которой проводится  $r_i$  наблюдений.

Совокупность точек  $\underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_n$  называется спектром плана  $\xi_N$ :

$$\xi_N = \left\{ \underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_n \right\}, \quad \sum_{i=1}^n r_i = N.$$

**Определение 2.**

Дискретным нормированным планом  $\varepsilon_N$  называется совокупность величин  $\underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_n; p_1, p_2, \dots, p_n$ , где  $\sum_{i=1}^n p_i = 1$ ,  $p_i = r_i/N$ :

$$\varepsilon_N = \left\{ \begin{matrix} \underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_n \\ p_1, p_2, \dots, p_n \end{matrix} \right\}, \quad \sum_{i=1}^n p_i = 1, \quad p_i = r_i/N, \quad i = \overline{1, n}.$$

Для плана  $\varepsilon_N$  можно определить нормированную информационную матрицу  $M(\varepsilon_N)$ , связанную с информационной матрицей Фишера соотношением

$$M = N \sum_{i=1}^n \sigma_i^{-2} p_i f(\underline{x}_i) f^T(\underline{x}_i) = N M(\varepsilon_N) = N \sum_{i=1}^n \sigma_i^{-2} p_i M(\underline{x}_i), \quad (1.1)$$

где  $M(\underline{x}_i)$  - информационная матрица одного наблюдения.

**Определение 3.**

Непрерывным нормированным планом  $\varepsilon$  называется совокупность величин  $\underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_n; p_1, p_2, \dots, p_n$ , где  $\sum_{i=1}^n p_i = 1$ ,  $p_i \geq 0$ ,  $i = \overline{1, n}$ .

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

$$\int_{\mathcal{X}} dP_\varepsilon(\underline{x}) = 1; \quad P_\varepsilon(\underline{x}) \geq 0, \quad \forall \underline{x} \in \mathcal{X}. \quad (1.2)$$

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

$$M(\varepsilon) = \int_{\mathcal{X}} \lambda^{-1}(\underline{x}) f(\underline{x}) f^T(\underline{x}) dP_\varepsilon(\underline{x}), \quad (1.3)$$

где  $\lambda(\underline{x}) = \sigma^2(\underline{x})$  - так называемая функция эффективности, определяющая дисперсию отклика в точке  $\underline{x}_i \in \mathcal{X}$ .

В дальнейшем, не умаляя общности, будем считать, что  $\lambda(\underline{x}) \equiv 1$ . Случай неравноточных измерений легко сводится к этому заменой  $f(\underline{x})$  на  $\sqrt{\lambda^{-1}(\underline{x})} f(\underline{x})$ .

Исследуем основные свойства информационной матрицы. Если не будет оговорено специально, мы будем рассматривать пока только непрерывные нормированные планы и предполагать модель  $\eta(\underline{x}, \underline{\theta})$  линейной по параметрам, т.е.  $\eta(\underline{x}, \underline{\theta}) = \underline{\theta}^T f(\underline{x})$ .

**Теорема 1.1.**

1. Для любого плана  $\varepsilon$  информационная матрица  $M(\varepsilon)$  симметрична и - ппо.
2. Матрица  $M(\varepsilon)$  особенная ( $M(\varepsilon) = 0$ ), если спектр плана  $\varepsilon$  содержит меньше, чем  $m$  точек ( $m$  - число неизвестных параметров).
3. Множество матриц  $M(\varepsilon)$ , соответствующее всем возможным нормированным планам, является выпуклым. Если функция  $f(\underline{x})$  и функция эффективности  $\lambda^{-1}(\underline{x})$  непрерывны и область  $\mathcal{X}$  замкнута, то множество информационных матриц замкнуто.
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  $\varepsilon$ .

Доказательство 1. Симметричность информационной матрицы следует из ее определения, а неотрицательность соответствующей квадратичной формы легко проверяется

$$z^T M(\varepsilon) z = \int_{\mathcal{X}} z^T f(\underline{x}) f^T(\underline{x}) z dP_{\varepsilon}(\underline{x}) = \int_{\mathcal{X}} [z^T f(\underline{x})]^2 dP_{\varepsilon}(\underline{x}) \geq 0.$$

Таким образом, информационная матрица – ппо.

Доказательство 2. Если число точек в плане конечно, то согласно определению:

$$M(\varepsilon) = \sum_{i=1}^n p_i f(\underline{x}_i) f^T(\underline{x}_i)$$

$$rg M(\varepsilon) \leq \sum_{i=1}^n rg [p_i \cdot f(\underline{x}_i) f^T(\underline{x}_i)] = n, \text{ при } n < m, \text{ где } M(\varepsilon) < m.$$

Доказательство 3. Пусть  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  - два произвольных нормированных плана, заданных на замкнутом множестве  $\mathcal{X}$ . И пусть они характеризуются соответственно мерой  $P_1(\underline{x})$  и  $P_2(\underline{x})$ . Тогда под линейной комбинацией этих планов

$$\varepsilon = (1 - \alpha)\varepsilon_1 + \alpha\varepsilon_2, \quad 0 \leq \alpha \leq 1,$$

подразумевается нормированный план с мерой

$$P(\underline{x}) = (1 - \alpha)P_1(\underline{x}) + \alpha P_2(\underline{x}).$$

Легко проверить, опираясь непосредственно на определение информационной матрицы, что матрица

$$M = (1 - \alpha)M(\varepsilon_1) + \alpha M(\varepsilon_2)$$

является информационной матрицей нормированного плана  $\varepsilon = (1 - \alpha)\varepsilon_1 + \alpha\varepsilon_2$ , заданного на  $\mathcal{X}$ . Отсюда следует выпуклость множества информационных матриц. Замкнутость множества информационных матриц следует из замкнутости  $\mathcal{X}$  и непрерывности  $f(\underline{x})$ .

Доказательство 4. Так как любая информационная матрица симметрична, то она полностью описывается вектором, состоящим из  $\frac{m(m+1)}{2}$  ее элементов

$$M(\varepsilon) = \sum_{i=1}^m P_i M(\underline{x}_i), \quad P_i \geq 0.$$

Из определения информационной матрицы следует, что множество векторов определяющих информационные матрицы  $M(\varepsilon)$ , является выпуклой оболочкой множества, состоящего из векторов, соответствующих матрицам  $M(\varepsilon(\underline{x}))$ , где спектр плана  $\varepsilon(\underline{x})$  состоит из единственной точки  $\underline{x}$ .

Отсюда и из теоремы Каратеодори вытекает утверждение 4.

Справка.

**Теорема Каратеодори.** Всякую точку  $s^*$  в выпуклой оболочке  $S^*$  любого подмножества  $S$   $n$ -мерного пространства можно представить в виде

$$s^* = \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i s_i, \quad , \quad \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i = 1, \quad s_i \in S.$$

## Критерии оптимальности планов эксперимента

Планирование оптимальных экспериментов опирается на критерии оптимальности планов. Выбор критерия трудно поддается формализации. В общем случае критерий должен отражать, с одной стороны, затраты на построение модели (время, материальные и финансовые ресурсы) и, с другой стороны, потери, связанные с недостаточно точной идентификацией модели изучаемой системы.

Однако затраты на построение модели трудно выразить в приемлемой количественной форме. Поэтому на практике чаще всего ограничиваются критериями оценки «доброкачественности» модели, имеющими статистический смысл.

Но даже и такое упрощение критериев максимальности не приводит к однозначным результатам. Статистические показатели модели нельзя охарактеризовать какой-то одной величиной. Их существует множество.

Многие статистические критерии оптимальности являются логическим продолжением концепции НЛЮ. Вполне логично потребовать, чтобы выбираемый нами план был «лучше» других планов в том смысле, что ему соответствовала бы «наименьшая» дисперсионная матрица.

Здесь, понятие «минимальная» дисперсионная матрица необходимо характеризовать некоторым функционалом от матрицы (например, определитель, след, максимальное собственное число и т.д.). Многие из этих статистических критериев имеют геометрическую интерпретацию в терминах эллипсоида рассеяния оценок.

Рассмотрим это понятие – эллипсоид рассеяния оценок.

Случайный несмещенный вектор оценок параметров  $\hat{\theta}$ , имеющий математическое ожидание  $E(\hat{\theta}) = \theta_{уст}$  и дисперсионную матрицу  $D(\hat{\theta})$ , может быть исчерпывающим образом охарактеризован, если известна плотность распределения этого вектора  $P(\theta_{уст}, D(\hat{\theta}))$ . Однако непосредственно пользоваться выражениями плотности распределения для сопоставления оценок параметров, не совсем удобно.

В связи с этим, Крамер разработал прием, позволяющий заменить заданное распределение другим, более простым, эквивалентным ему равномерным распределением по некоторой области в пространстве параметров.

В итоге появляется возможность сравнивать между собой не сами исходные распределения, а размеры и конфигурации областей параметрического пространства, в пределах которых действуют эквивалентные равномерные распределения.

Оказывается, кроме того, что всегда можно построить равномерное распределение по объему эллипсоида, которые имеют те же центральные моменты второго порядка, что и данное распределение, задаваемое некоторой плотностью.

Можно показать, что равномерное распределение, эквивалентное (в смысле моментов второго порядка, т.е. дисперсий и ковариаций) унимодальному распределению с плотностью  $P(\theta_{уст}, D(\hat{\theta}))$ , имеет вид

$$P_{\text{экв}}(\theta_{уст}, D(\hat{\theta})) = \begin{cases} V_{\text{элл}}^{-1} & \text{при } (\hat{\theta} - \theta_{уст})^T D^{-1}(\hat{\theta})(\hat{\theta} - \theta_{уст}) \leq m + 2, \\ 0 & \text{при } (\hat{\theta} - \theta_{уст})^T D^{-1}(\hat{\theta})(\hat{\theta} - \theta_{уст}) > m + 2 \end{cases}$$

где  $V_{\text{элл}}$  - есть объем  $m$ -мерного тела, ограниченного поверхностью эллипсоида

$$(\hat{\theta} - \theta_{уст})^T D^{-1}(\hat{\theta})(\hat{\theta} - \theta_{уст}) = m + 2. \quad (1.4)$$

Эллипсоид, уравнение которого имеет вид (1.4), принято называть эллипсоидом рассеяния оценок параметров. Геометрические характеристики эллипсоида рассеяния имеют тесную связь со статистическими характеристиками вектора  $\hat{\theta}$ .

Объем эллипсоида, ограниченного поверхностью (1.4):

$$V_{\text{элл}} = (m+2)^{\frac{m}{2}} \pi^{\frac{m}{2}} |D(\hat{\theta})|^{-\frac{1}{2}} \Gamma\left(\frac{m}{2}+1\right), \quad (1.5)$$

где  $\Gamma$  - гамма-функция.

Из приведенного выражения следует, что квадрат объема эллипсоида рассеяния пропорционален определителю дисперсионной матрицы оценок параметров. Последний также называют обобщенной дисперсией оценок параметров.

Квадрат расстояния  $\gamma_i$  от центра эллипсоида до касательной плоскости, нормаль которой параллельна  $i$ -той координатной оси, пропорционален дисперсии оценок  $i$ -того параметра:

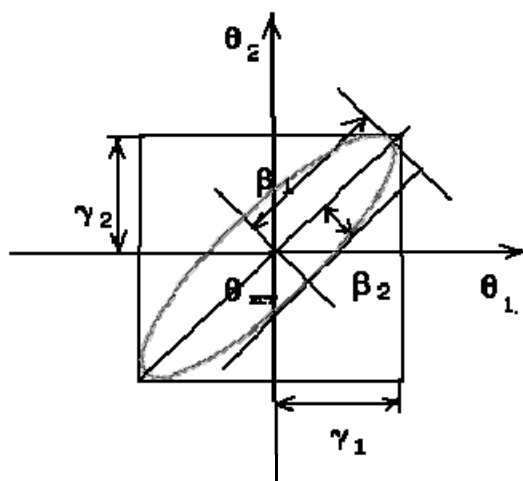
$$\gamma_i^2 = (m+2)\sigma^2\{\hat{\theta}_i\}. \quad (1.6)$$

Квадрат длины  $s$ -й главной полуоси эллипсоида  $\beta_s$  пропорционален  $s$ -му собственному числу  $\lambda_s$  дисперсионной матрицы  $D(\hat{\theta})$ :

$$\beta_s^2 = (m+2)\lambda_s. \quad (1.7)$$

Средний квадрат габаритных размеров эллипса, равный среднему квадрату длин главных полуосей, пропорционален средней дисперсии оценок:

$$\sum_{i=1}^m \frac{\gamma_i^2}{m} = \sum_{s=1}^m \frac{\beta_s^2}{m} = (m+2) \sum_{i=1}^m \frac{\sigma^2\{\hat{\theta}_i\}}{m}. \quad (1.8)$$



Критерий оптимальности экспериментов можно разделить на три группы: критерии, отражающие точность оценок параметров, критерии, связанные с точностью самой модели и критерии, связанные с задачей дискриминации нескольких моделей (распознавание лучшей).

### Критерии, отражающие точность оценок параметров

Точность оценок параметров в полном объеме может быть охарактеризована с помощью  $m(m+1)/2$  элементов нормированной дисперсионной матрицы  $M^{-1}(\varepsilon)$ . Свернуть эту информацию в какой-то один показатель точности оценок параметров можно, очевидно, по-разному. Перечислим наиболее важные характеристики дисперсионной матрицы, принимаемые за критерии оптимальности.

**Критерий  $D$  – оптимальности** (от начальной буквы слова *Determinant*).

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

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

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

**Критерий  $A$ -оптимальности.**

План  $\varepsilon^*$  называют  $A$  -оптимальным, если:

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

Планам, отвечающим критерию  $A$ -оптимальности (название происходит от выражения *Average variance*, т.е. средняя дисперсия оценок), соответствует эллипсоид рассеяния с наименьшей суммой квадратов длин осей.

**Критерий линейной оптимальности.**

План  $\varepsilon^*$  называют линейно-оптимальным, если:

$$\varepsilon^* \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} L[M^{-1}(\varepsilon)],$$

где  $L$  - некоторый функционал, ставящий в соответствие каждой матрице  $M^{-1}(\varepsilon)$  скалярную величину и удовлетворяющий свойствам линейности, т.е.

$$L(A + B) = L(A) + L(B),$$

$$L(cA) = cL(A), \quad L(A) \geq 0$$

Частным случаем критерия линейной оптимальности является критерий  $A$ -оптимальности.

**Критерий  $E$  -оптимальности**

План  $\varepsilon^*$  называется  $E$  - оптимальным, если:

$$\varepsilon^* = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} \max_i \lambda_i[M^{-1}(\varepsilon)]$$

или

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

где  $\lambda_i$  - собственные числа матрицы  $M^{-1}(\varepsilon)$  или  $M(\varepsilon)$ . Название данного критерия происходит от англ. Слова *Eigenvalue* –собственное число.

Геометрически таким планам соответствует эллипсоид рассеяния с наименьшей максимальной осью.

Интересно, что критерии  $D$ -,  $A$ -,  $E$ - оптимальности можно представить в одну общую группу в виде требования минимизации некоторого функционала, зависящего от одного параметра.

**Критерий  $\Phi_p$  - оптимальности.**

План  $\varepsilon^*$  называют  $\Phi_p$  -оптимальным, если:

$$\varepsilon^* = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} \Phi_p(\varepsilon) = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} (m^{-1} \text{tr} D^p(\varepsilon))^{1/p} = \mathop{\text{Arg min}}_{\varepsilon} (m^{-1} \sum_{i=1}^m \lambda_i^p(\varepsilon))^{1/p}, \quad 0 < p < \infty.$$

Вид функционала  $\Phi_p$  при граничных условиях  $p \rightarrow 0$  и  $p \rightarrow \infty$  определяется следующим образом:

$$\Phi_0(\varepsilon) = \lim_{p \rightarrow 0} \Phi_p(\varepsilon) = |D(\varepsilon)|^{1/m}$$

$$\Phi_\infty(\varepsilon) = \lim_{p \rightarrow \infty} \Phi_p(\varepsilon) = \max_i \lambda_i(\varepsilon),$$

где  $\lambda_i(\varepsilon)$  собственные числа матрицы  $D(\varepsilon) = M^{-1}(\varepsilon)$ .

Таким образом, функционал  $\Phi_0(\varepsilon)$  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  $\tilde{\Phi}_p(\varepsilon) = p^{-1} \text{tr} M^{-p}(\varepsilon)$ .

### Критерий $A$ - оптимальности

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

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

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

### Критерий $MV$ -оптимальности (Maximum Variation)

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

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

где  $D_{ii}(\varepsilon)$  -  $i$ -й диагональный элемент матрицы  $D(\varepsilon)$ .

К первой группе критериев можно отнести также такой критерий, как ортогональность плана.

План называется ортогональным, если ему соответствует диагональная ковариационная матрица оценок. Для ортогональных планов все оценки параметров независимы.

Этот критерий не требует минимизации какого-либо функционала, однако он не связан со свойствами эллипсоида рассеяния: для ортогональных планов эллипсоид ориентирован в пространстве параметров таким образом, что направления его главных осей совпадают с направлением координатных осей в пространстве параметров.

Для построения ортогональных планов более всего подходит критерий  $W$ -оптимальности.

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

$$\varepsilon^* = \text{Arg} \max_{\varepsilon} \frac{|M(\varepsilon)|^{1/2}}{\prod_{i=1}^m \|M_i\|},$$

где  $\|M_i\| = \left( \sum_{j=1}^m m_{ij}^2 \right)^{1/2}$ ,  $M_i = (m_{i1}, m_{i2}, \dots, m_{im})$ ,  $i = \overline{1, m}$  - вектор-строки, из которых составлена информационная матрица  $M(\varepsilon)$ .



## Критерии, отражающие точность модели

Эти критерии связаны, так или иначе, с дисперсией оценок математических ожиданий откликов:

$$\hat{y}(\underline{x}) = f^T(\underline{x})\hat{\theta}, \quad \sigma^2(\hat{y}(\underline{x})) = d(\underline{x}, \varepsilon) = f^T(\underline{x})M^{-1}(\varepsilon)f(\underline{x}).$$

Характеристики эти представляют интерес, когда исследователя беспокоит точность прогноза по модели. Однако при этом немедленно возникает вопрос: где, в какой точке или области факторного пространства?

В зависимости от уровня наших знаний об этой точке или множестве точек можно выбирать разные критерии оптимальности, отражающие точность модели.

Критерий оптимальности при экстраполяции (интерполяции) в заданную точку

Данный критерий используется в случае априори известной точки  $\underline{x}_0$ , в которой желательно иметь наиболее точное значение прогнозируемого отклика. План, отвечающий этому критерию, определяется так:

$$\varepsilon^* = \text{Arg min}_{\varepsilon} d(\underline{x}_0, \varepsilon) = \text{Arg min}_{\varepsilon} f^T(\underline{x}_0)M^{-1}(\varepsilon)f(\underline{x}_0),$$

где  $d(\underline{x}_0, \varepsilon)$  - дисперсия математического ожидания отклика в точке  $\underline{x}_0$ .

## Критерий G-оптимальности

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

$$\varepsilon^* = \text{Arg min}_{\varepsilon} \max_{\underline{x} \in \mathcal{X}_0} d(\underline{x}, \varepsilon).$$

Область  $\mathcal{X}_0$  может совпадать или не совпадать с областью планирования  $\mathcal{X}$ . В англоязычной литературе  $d(\underline{x}, \varepsilon) = f^T(\underline{x})M^{-1}(\varepsilon)f(\underline{x})$  называют **General variance** –общая дисперсия – отсюда и название данного критерия.

## Q- оптимальность

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

$$\varepsilon^* = \text{Arg min}_{\varepsilon} \int_{\mathcal{X}_0} d(\underline{x}, \varepsilon) d\underline{x}.$$

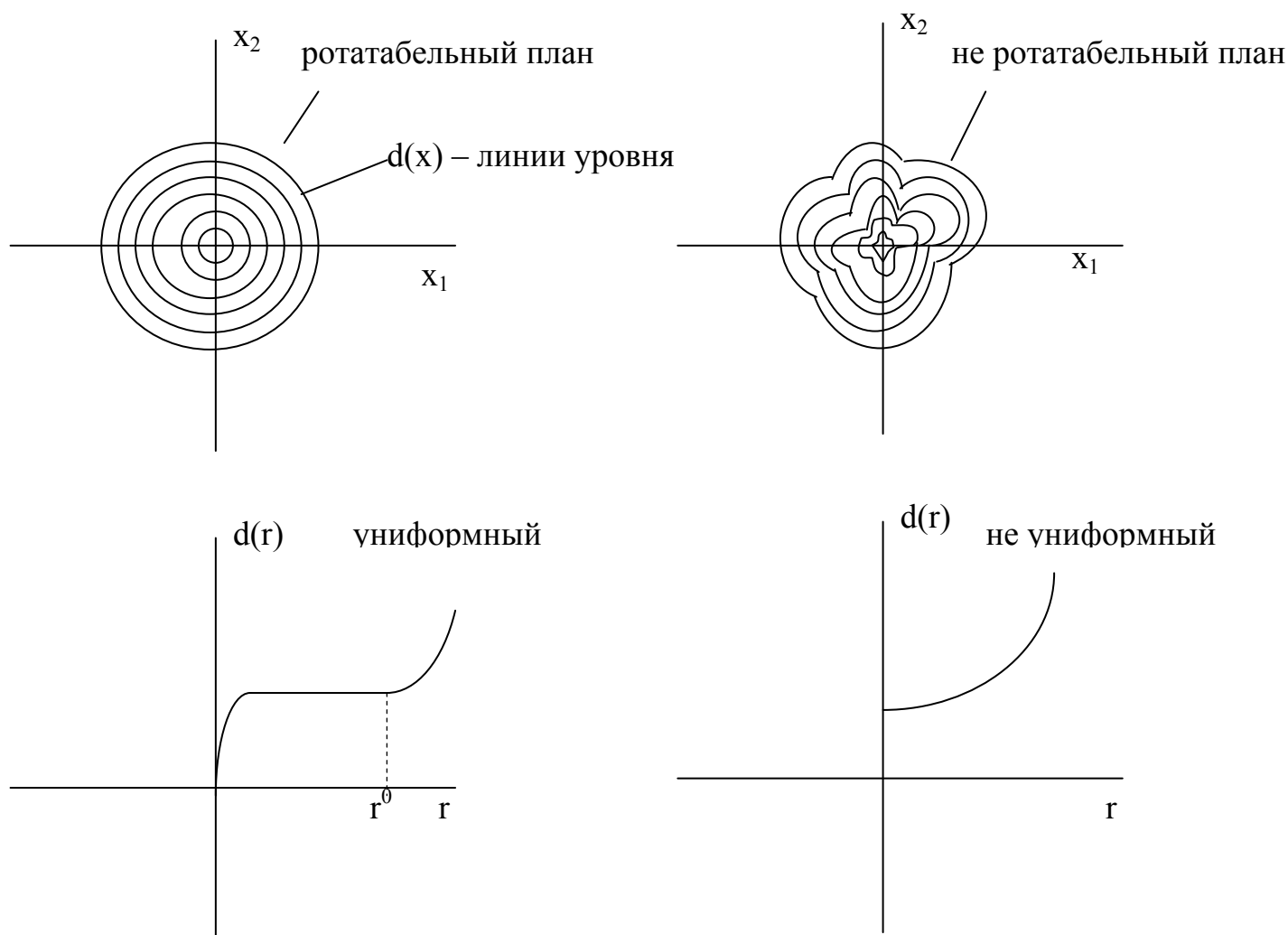
Q- оптимальные планы минимизируют среднюю по области  $\mathcal{X}_0$  дисперсию оценки поверхности отклика. В англоязычной литературе  $\int_{\mathcal{X}_0} d(\underline{x}, \varepsilon) d\underline{x}$  называют **Quadratic mean error** – среднеквадратичная ошибка – отсюда и название данного критерия.

**Ротатабельность.** План называется ротатабельным, если дисперсия оценки модели может быть представлена как функция расстояния до центра эксперимента, т.е. можно записать:

$$d(\underline{x}, \varepsilon) = d_1(r, \varepsilon), \text{ где } r = \sqrt{\sum_{i=1}^k x_i^2}.$$

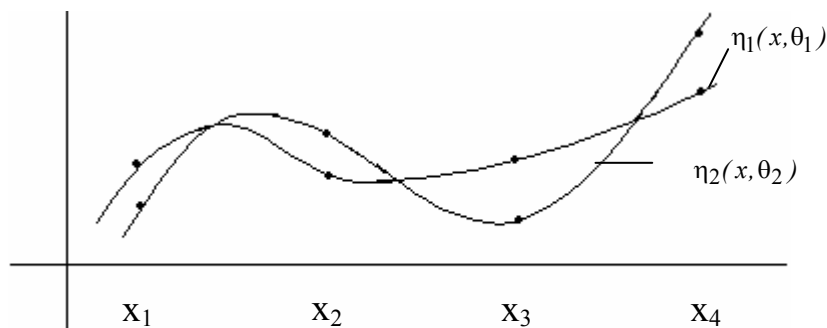
Выполнение этого условия делает любое направление от центра эксперимента равнозначным в смысле точности оценки поверхности отклика.

**Униформность.** Этот критерий, требующий, чтобы дисперсия оценки модели в некоторой области вокруг центра эксперимента была практически постоянной.



### Критерии дискриминации моделей

Пусть имеется две конкурирующие модели:  $\eta_1(x, \theta)$ ,  $\eta_2(x, \theta)$ .



Пусть

$$\varepsilon_N = \left\{ \begin{matrix} \underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_N \\ p_1, p_2, \dots, p_N \end{matrix} \right\}, \quad \sum_{i=1}^n p_i = 1, \quad p_i = 1/N, \quad i = \overline{1, N}.$$

$\hat{\theta}_{(j)} = \text{Arg min}_{\theta_{(j)}} \sum_{i=1}^N [y_i - \eta_j(x_i, \theta_{(j)})]^2$  -МНК оценки параметров моделей 1 и 2.

В предположении, что верна 1-ая модель, т.е.  $\eta_u(x) = \eta_1(x, \theta)$ , введем в рассмотрение параметр нецентральности  $A_{12}$

$$A_{12}(\varepsilon_N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\eta_u(x_i) - \eta_2(x_i, \hat{\theta}_{(2)})]^2.$$

Обозначим через отношение правдоподобия первой и второй модели:

$$L(\varepsilon) = \exp \left\{ \frac{1}{2\sigma^2} \left[ \sum_{i=1}^N [y_i - \hat{\eta}_2(x_i, \varepsilon_N)]^2 - \sum_{i=1}^N [y_i - \hat{\eta}_1(x_i, \varepsilon_N)]^2 \right] \right\}.$$

Можно показать, что

$$2\sigma^2 E \ln L(\varepsilon) = N A_{12}(\varepsilon_N) - \sum_{i=1}^N [\eta_u(x_i) - \eta_1(x_i, \hat{\theta}_{(1)})]^2.$$

В силу состоятельности МНК оценок  $\hat{\theta}_{(1)}$  при  $N \rightarrow \infty$  второе слагаемое сходится к константе, следовательно

$$E \ln L(\varepsilon) \sim \frac{N}{2\sigma^2} A_{12}(\varepsilon_N), \quad N \rightarrow \infty,$$

т.е. выбирая

$$\varepsilon^* = \text{Arg max}_{\varepsilon} A_{12}(\varepsilon),$$

мы в среднем максимизируем логарифм правдоподобия первой модели относительно второй – другими словами повышаем мощность критерия проверки гипотезы

$$H_0: \eta_u = \eta_1(x, \theta_1)$$

против

$$H_1: \eta_u = \eta_2(x, \theta_2).$$

Если  $\theta_1, \theta_2$  неизвестны (или не известны их оценки), то рассматривается, например, задача

$$\varepsilon^* = \text{Arg max}_{\varepsilon} \min_{\substack{\theta_1, \theta_2 \\ \|\theta\| \leq \text{const}}} A_{12}(\varepsilon).$$

Существует еще ряд других критериев оптимальности, которые плохо формализуемы и носят только желательный характер (насыщенность, композиционность). План называется насыщенным, если число точек в спектре плана равно числу параметров в модели. Это самый экономичный план, однако он мало подходит для практического применения, поскольку позволяет строить только интерполяционную модель, вместо аппроксимирующей. Свойство композиционности более полезно. Идея состоит в следующем. Как правило построение модели объекта начинают с попытки использовать линейные модели от факторов, а уже потом в случае необходимости переходят к более сложным моделям, например, квадратичным.

Пример. Пусть первоначальная модель было выбрана как линейная от двух факторов:

$$E(y/x) = \theta_1 + \theta_2 x_1 + \theta_3 x_2, \quad -1 \leq x_i \leq +1, \quad i = 1, 2.$$

Оптимальный план для такой модели будет иметь вид

№	$x_1$	$x_2$
1	-1	-1
2	-1	+1
3	+1	-1
4	+1	+1

После проведения эксперимента и его обработки экспериментатор решил усложнить модель до квадратичной:

$$E(y/x) = \theta_1 + \theta_2 x_1 + \theta_3 x_2 + \theta_4 x_1^2 + \theta_5 x_2^2 + \theta_6 x_1 x_2, \quad -1 \leq x_i \leq +1, \quad i = 1, 2$$

Оптимальный план для такой модели будет следующим

№	$x_1$	$x_2$
1	-1	-1
2	-1	+1
3	+1	-1
4	+1	+1
5	-1	0
6	+1	0
7	0	-1
8	0	+1
9	0	0

Первые 4 эксперимента уже реализованы, т.е. оптимальный план для линейной модели вошел как часть плана для квадратичной модели. В этом и состоит принцип композиционности.

Круг задач, где возможно использование критериев второй группы, охватывает задачи получения математических моделей наиболее точно, описывающих поверхности откликов в той или иной области действия независимых переменных  $\underline{x}$ , доступной или недоступной для проведения экспериментов.

Ясности по использованию критериев первой группы нет. Многообразие этих критериев и отсутствие четких рецептов по их выбору в тех или иных ситуациях является большим неудобством. Построить же планы, удовлетворяющие одновременно многим критериям оптимальности, удастся только для определенных моделей.

Приведенную выше совокупность критериев оптимальности можно разделить на две группы: критерии точности оценок параметров и критерии точности оценки функции отклика. К первой группе относятся критерии  $D$ -,  $A$ -,  $E$ -,  $\Phi_p$ -,  $A$ -,  $MV$ -,  $W$ -оптимальности, ко второй - критерии  $G$ -,  $Q$ -оптимальности и экстраполяции в точку. Использование критериев второй группы возможно в задачах получения математических моделей, наиболее точно описывающих поверхности откликов в той или иной области действия независимых переменных  $\underline{x}$ , доступной или недоступной для проведения экспериментов.

Однако многообразие критериев и отсутствие четких рекомендаций по их выбору в тех или иных ситуациях осложняет использование критериев первой группы, за исключением критерия  $W$ -оптимальности. Построить же планы, удовлетворяющие одновременно многим критериям оптимальности, удастся только для определенных простых моделей. Так как построение плана, оптимального по всем критериям, невозможно, целесообразен некоторый компромиссный план, удовлетворяющий одновременно нескольким требованиям. Возможны два направления решения этой задачи:

1. конструирование обобщенного критерия оптимальности и построение оптимальных планов по этому критерию;
2. построение оптимальных планов по одним критериям оптимальности и выбор из них плана, меньше других проигрывающего по другим критериям оптимальности.

При решении задачи второго направления Кифер предложил рассматривать отношение

$$\delta(\varepsilon, p) = \Phi_p(\varepsilon) / \Phi_p(\varepsilon_p^*),$$

где  $\varepsilon_p^*$  –  $\Phi_p$ -оптимальный план;  $\varepsilon$  – оптимальный по какому-либо критерию план.

Им же введено понятие робастного плана, под которым понимались планы  $\varepsilon$ , имеющие меньшее значение  $\delta(\varepsilon, p)$  для различных  $p$ . Робастными, таким образом, следует считать те планы, которые менее всего проигрывают по характеристикам, соответствующим оптимальным планам для некоторого класса критериев.

В табл. 1.1-1.3 по столбцам даны значения  $\delta(\varepsilon, p)$  при  $p = 0, 1, \infty$  соответственно для  $D$ -,  $A$ -,  $E$ -оптимальных планов для таких распространенных случаев, как полиномиальная модель на отрезке, квадратичная модель на кубе и шаре. Для полиномиальной регрессии на отрезке, квадратичной регрессии на кубе, робастными следует считать  $A$ -оптимальные планы, а для квадратичной регрессии на шаре –  $E$ -оптимальные планы.

Сравнение оптимальных планов позволяет выделить три группы критериев: критерий  $D$ -оптимальности, или критерий объема (объема эллипсоида рассеяния); группу близких по характеристикам на полиномиальных моделях

Таблица 1.1

Сравнительная эффективность  $\delta(\varepsilon, p)$   $D$ -,  $A$ -,  $E$ -оптимальных планов для полиномиальной регрессии степени  $q = 2, 3$  на отрезке  $[-1; 1]$ .

Функ- ционал	Оптимальный план $\varepsilon$					
	$q = 2$			$q = 3$		
	$D$	$A$	$E$	$D$	$A$	$E$
$\Phi_0$	1.00	1.07	1.16	1.00	1.08	1.15
$\Phi_1$	1.12	1.00	1.04	1.17	1.00	1.03
$\Phi_\infty$	1,37	1.05	1.00	1.35	1.03	1.00

Таблица 1.2

Сравнительная эффективность  $\delta(\varepsilon, p)$   $D$ -,  $A$ -,  $E$ -оптимальных планов для квадратичной регрессии на кубе  $(-1 \leq x_i \leq 1, x_i = \overline{1, k}), k = 2, 3$

Функ- ционал	Оптимальный план $\varepsilon$					
	$k = 2$			$k = 3$		
	$D$	$A$	$E$	$D$	$A$	$E$
$\Phi_0$	1.00	1.08	1.35	1.00	1.11	1.57
$\Phi_1$	1.18	1.00	1.15	1.24	1.00	1.27
$\Phi_\infty$	2.02	1.22	1.00	2.86	1.40	1.00

Таблица 1.3

Сравнительная эффективность  $\delta(\varepsilon, p)$   $D$ -,  $A$ -,  $E$ -оптимальных планов для квадратичной регрессии на шаре ( $\sum_{i=1}^k x_i^2 \leq 1$ ),  $k = 2, 3$

Функ- ционал	Оптимальный план $\varepsilon$					
	$k = 2$			$k = 3$		
	$D$	$A$	$E$	$D$	$A$	$E$
$\Phi_0$	1.00	1.05	1.13	1.00	1.04	1.15
$\Phi_1$	1.12	1.00	1.06	1.11	1.00	1.07
$\Phi_\infty$	2.90	1.20	1.00	2.50	1.39	1.00

критериев – критерии  $E$ -,  $A$ -,  $\Phi_p$ - и  $MV$ -оптимальности, которые относятся к так называемым критериям формы; критерий  $A$ -оптимальности, занимающий промежуточное положение между ними. Для простоты численных расчетов оптимальных планов во второй группе более целесообразны критерии  $A$ - и  $\Phi_p$ -оптимальности.

Для полноты иллюстрации ниже в табл. 1.4 дадим характеристики оптимальных планов для полиномиальной степени  $q$  регрессии на отрезке.

Таблица 1.4

План	$q$	$n$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$
			$p_1$	$p_2$	$p_3$	$p_4$
$D$	2	3	-1	0	+1	-
			0,333	0,333	0,333	-
$D$	3	4	-1	-0,447	+0,447	+1
			0,25	0,25	0,25	0,25
$A$	2	3	-1	0	+1	-
			0,25	0,5	0,25	-
$A$	3	4	-1	-0,468	+0,468	+1
			0,152	0,348	0,348	0,152
$E$	2	3	-1	0	+1	-
			0,2	0,6	0,2	-
$E$	3	4	-1	-0,5	0,5	+1
			0,1273	0,3727	0,3727	0,1273

Деление критериев на три группы несколько упрощает процедуру выбора критерия оптимальности для планирования. Однако проблема эта остается, поскольку, как показало сравнение, в различных ситуациях робастными могут оказаться различные критерии.

Направление 1 можно рассматривать как многокритериальное, или компромиссное планирование. Рассмотрим кратко постановку задачи направления 1 с позиции теории векторной оптимизации.

Введем понятие *неулучшаемой точки*. Пусть  $I(x) = (I_1(x), \dots, I_l(x))^T$  - вектор критериев, каждый из которых должен минимизироваться. Тогда точка  $x^0 \in \mathcal{X}$  называется неулучшаемой в  $\mathcal{X}$  относительно  $I(x)$ , если среди всех  $x \in \mathcal{X}$  не существует такой точки  $\bar{x}$ , что имеет место  $I_\alpha(\bar{x}) \leq I_\alpha(x^0)$ ,  $\alpha = \overline{1, l}$ , причем хотя бы одно из неравенств – строгое. Неулучшаемые точки иногда еще называют эффективными, или оптимальными по Парето. Нахождение всего множества неулучшаемых точек было бы достаточно полным решением векторной задачи.

Однако задача определения всего множества оптимальных по Парето решений в силу ее сложности ставится не всегда, часто ограничиваются нахождением какой-либо одной Парето-оптимальной точки. В этом случае выдвигают некоторую аксиому – принцип компромисса, и задача векторной оптимизации сводится к оптимизации скалярного обобщенного критерия.

Схем компромиссов предложено достаточно много. Однако все они обладают тем или иным недостатком. Наиболее обоснованными в предположении равноценности критериев считаются принципы максимина, относительной уступки, меры приближения в пространстве критериев до утопической точки.

Пусть  $\Psi_i[M(\varepsilon)]$ ,  $i = \overline{1, l}$  – дифференцируемые и выпуклые функционалы от информационной матрицы. Запишем экстремальные задачи, которые необходимо решать при соответствующих принципах компромисса.

*Принцип минимакса*

$$\varepsilon^* = \operatorname{Arg} \min_{\varepsilon} \max_i \Psi_i[M(\varepsilon)].$$

*Принцип относительной уступки*

$$\varepsilon^* = \operatorname{Arg} \min_{\varepsilon} \prod_{i=1}^l \Psi_i[M(\varepsilon)].$$

*Принцип абсолютной уступки*

$$\varepsilon^* = \operatorname{Arg} \min_{\varepsilon} \sum_{i=1}^l \alpha_i \Psi_i[M(\varepsilon)], \quad \sum_{i=1}^l \alpha_i = 1, \quad \alpha_i \geq 0, \quad i = \overline{1, l}.$$

*Минимизация квадрата евклидовой нормы*

$$\varepsilon^* = \operatorname{Arg} \min_{\varepsilon} \sum_{i=1}^l (\Psi_i[M(\varepsilon)] - \Psi_i^0[M(\varepsilon_i)])^2,$$

где  $\Psi_i^0[M(\varepsilon_i)]$  – оптимальные значения  $i$ -го критерия.

Интересно интерпретировать критерии  $D-$ ,  $A-$ ,  $E-$ ,  $\Phi_p$  – оптимальности с помощью принципов векторной оптимизации. Так, например, критерий  $D-$  оптимальности представляет не что иное, как модель относительной уступки относительно критериев  $\lambda_i(M(\varepsilon))$ . Критерий  $A-$  оптимальности представляет собой модель абсолютной уступки относительно тех же критериев, критерий  $E-$  оптимальности – модель принципа максимина, критерий  $\Phi_p$  – оптимальности – модель минимизации меры приближения в пространстве критериев  $\lambda_i^{-1}(M(\varepsilon))$  до утопической точки с координатами  $(0, \dots, 0)$ . Таким образом, планируя по

$D$ -,  $A$ -,  $E$ -,  $\Phi_p$  – и другим критериям оптимальности, фактически выбираем один из принципов компромисса. Строя обобщенный критерий оптимальности  $\Phi[M(\varepsilon)]$  на основе отдельных  $\Psi_i[M(\varepsilon)]$ , реализуем как бы уже второй уровень компромисса.

Можно, например, строить  $D$ - $A$ - оптимальные планы. Если в качестве модели компромисса выбрать модель абсолютной уступки, то соответствующий обобщенный функционал имеет вид:

$$\Phi[M(\varepsilon)] = (1 - \alpha) \ln(M(\varepsilon)) / \ln(M(\varepsilon_D^*)) - \alpha SpM^{-1}(\varepsilon) / SpM^{-1}(\varepsilon_A^*),$$

где  $\varepsilon_D^*$ ,  $\varepsilon_A^*$  - соответственно  $D$ - и  $A$ -оптимальные планы.

Изменением величины  $\alpha$  можно менять степень учета критерия  $D$ - или  $A$ - оптимальности. Очевидно, что при некотором значении  $\alpha_M^*$  решение задачи по будет соответствовать решению задачи в минимаксной постановке. В рассматриваемом случае  $\alpha_M^* = 0,5$ . Этой величины  $\alpha_M^* = 0,5$  и можно рекомендовать придерживаться при построении робастных ( $D$ - $A$ -оптимальных) планов. Преимущество построенных для квадратичной регрессии непрерывных  $D$ - $A$ -оптимальных планов перед другими (неробастными) планами заключается в том, что они достаточно близки одновременно к  $D$ -,  $A$ -,  $E$ -,  $Q$ -,  $MV$ -,  $A$ - оптимальным планам.

Как мы уже говорили, нахождение всего множества неуплучшаемых точек было бы достаточно полным решением векторной задачи. Рассмотрим на примере определение множества информационных матриц и множества эффективных точек. Множество информационных матриц можно однозначно определить множеством возможных значений собственных чисел информационной матрицы.

Рассмотрим регрессию:

$$\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x^2,$$

где  $x \in \mathcal{X} = [-1, 1]$ .

Обозначим элементы информационной матрицы:

$$b = \sum_{i=1}^n p_i x_i^2, \quad a = \sum_{i=1}^n p_i x_i^4 \quad 0 < a \leq b < 1.$$

Собственные числа  $\lambda_i(M(\varepsilon))$  будут определяться следующими выражениями:

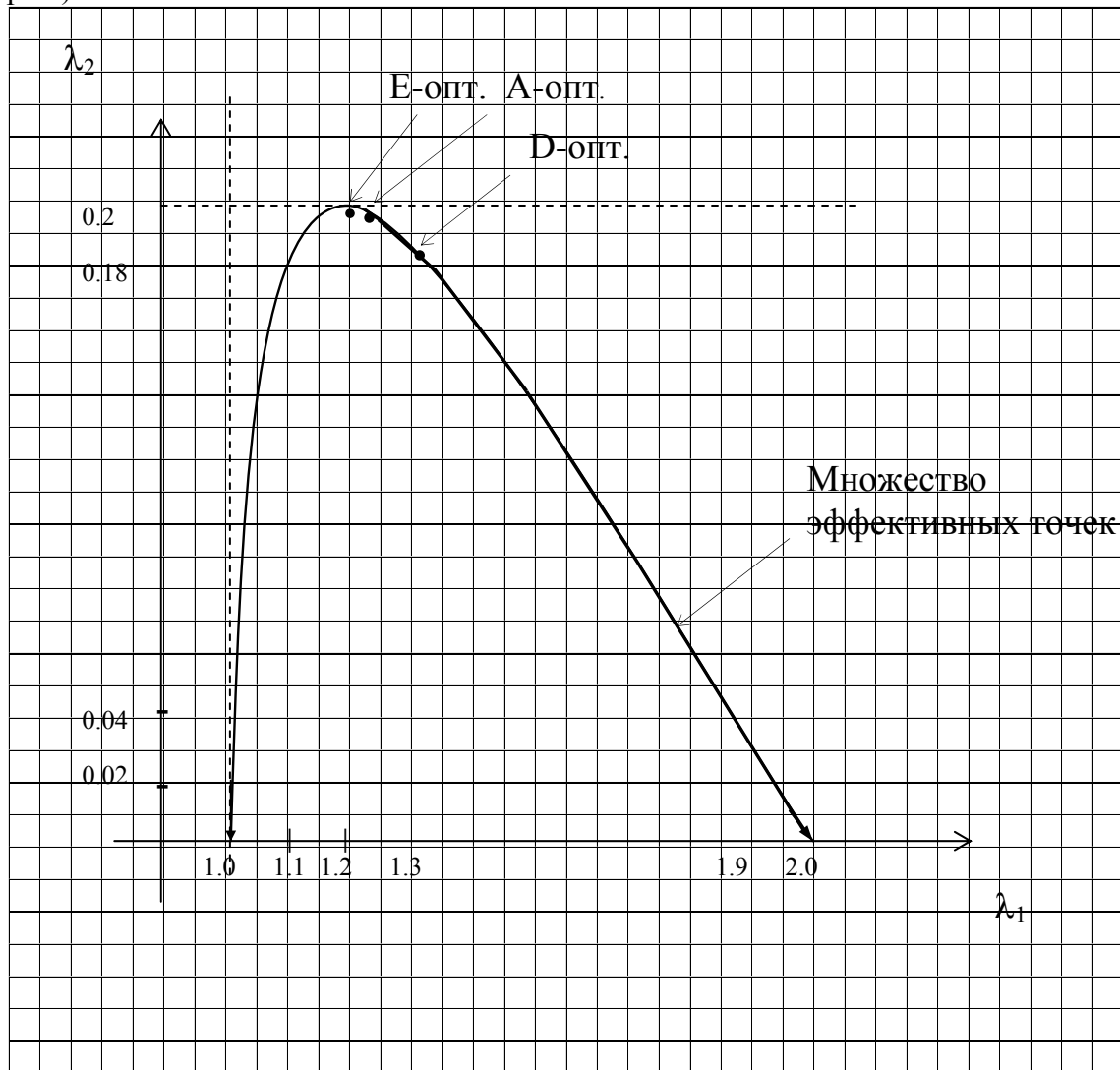
$$\lambda_1 = \frac{1+a+\sqrt{(1-a)^2+4b^2}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{1+a-\sqrt{(1-a)^2+4b^2}}{2}.$$

Для  $\lambda_1$  можно сразу определить предельные максимальные и минимальные значения – это  $\lambda_1 = 2$  и  $\lambda_1 = 1$ , которые достигаются лишь в случаях  $a = b = 1$  и  $a = b = 0$ . Однако при этом информационная матрица будет вырожденной ( $\lambda_2 = 0$ ). Для отображения всего множества информационных матриц необходимо в координатной системе  $\lambda_1, \lambda_2$  найти выпуклую оболочку возможных точек  $(\lambda_1, \lambda_2)$ . Поместим начало координат  $(0,0)$  системы  $(\lambda_1, \lambda_2)$  в точку  $(1,0)$  и найдем квадрат длины вектора-годографа  $Z$ :

$$Z^2 = (\lambda_1 - 1)^2 + (\lambda_2 - 0)^2.$$



Нам нужно получить всевозможные  $Z$  в зависимости от  $a$  и  $b$ , но максимальной длины. Найдя производную  $\partial Z/\partial a$ , мы видим, что она положительна – это значит, что для максимизации  $Z$  необходимо брать  $a = b$ . Изменяя  $b$  от 1 до 0 ( $a = b$ ) мы построим выпуклую оболочку (см. рис.).



Множество эффективных точек (Парето оптимальных) выделено жирной чертой.

Е-оптимальному плану соответствует точка  $b = 0.4$  ( $\lambda_1 = 1.2, \lambda_2 = 0.2$ ), D-оптимальному соответствует  $b = 0.5$  ( $\lambda_1 = 1.309, \lambda_2 = 0.191$ ), А – оптимальному плану соответствует  $b = 0.414$  ( $\lambda_1 = 1.214, \lambda_2 = 0.199$ ).

## 2. Условия оптимальности планов эксперимента

Большинство из рассмотренных нами критериев оптимальности являются выпуклыми относительно информационных матриц (вогнутых относительно дисперсионной матрицы). Задачу синтеза оптимального плана будем формулировать как решение экстремальной задачи:

$$\varepsilon^* = \underset{\varepsilon}{\operatorname{Argmin}} \Psi[M(\varepsilon)], \quad (2.1)$$

где  $\Psi$  – некоторый функционал от информационной матрицы. Будем предполагать, что он выпуклый:

$$\Psi[(1-\alpha)M(\varepsilon_1) + \alpha M(\varepsilon_2)] \leq (1-\alpha)\Psi[M(\varepsilon_1)] + \alpha\Psi[M(\varepsilon_2)], \quad 0 \leq \alpha \leq 1$$

и, что  $\Psi[M_1 + M_2] \geq \Psi[M_1]$ ,  $M_1 \geq 0, M_2 \geq 0$ .

### Теорема 2.1.

Необходимым и достаточным условием  $\Psi$ -оптимальности плана  $\varepsilon^*$  является выполнение равенства:

$$\min_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) = \text{tr} M(\varepsilon^*) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)}, \quad (2.2)$$

$$\text{где} \quad \varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) = f^T(\underline{x}) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)} f(\underline{x}). \quad (2.3)$$

Доказательство:

Необходимость.

Предположим, что  $\varepsilon^*$  -  $\Psi$ -оптимальный план. Рассмотрим план

$$\tilde{\varepsilon} = (1-\alpha)\varepsilon^* + \alpha\varepsilon, \quad 0 \leq \alpha \leq 1,$$

для которого  $M(\tilde{\varepsilon}) = (1-\alpha)M(\varepsilon^*) + \alpha M(\varepsilon)$ . Рассмотрим вопрос вычисления производной

$\frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial \alpha}$ . Учитывая, что  $\Psi[M(\varepsilon)]$  сложная функция от элементов

$M_{11}(\varepsilon), M_{12}(\varepsilon), \dots, M_{mm}(\varepsilon)$ , и применяя цепное правило дифференцирования можно записать

$$\frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial \alpha} = \sum_{i,j} \frac{\partial M_{ij}(\varepsilon)}{\partial \alpha} \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial M_{ij}(\varepsilon)}.$$

Обозначим матрицу  $\frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial M(\varepsilon)}$  состоящую из элементов  $\frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial M_{ij}(\varepsilon)}$ , тогда с учетом того,

что матрица  $\frac{\partial M(\varepsilon)}{\partial \alpha}$  симметричная можно записать производную в виде следа от произведения двух матриц:

$$\frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial \alpha} = \text{tr} \frac{\partial M(\varepsilon)}{\partial \alpha} \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial M(\varepsilon)},$$

где  $\frac{\partial M(\varepsilon)}{\partial \alpha}$  - матрица из элементов  $\frac{\partial M_{ij}(\varepsilon)}{\partial \alpha}$ .

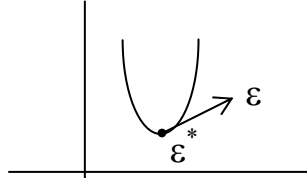
Для нашего случая:

$$\frac{\partial \Psi[M(\tilde{\varepsilon})]}{\partial \alpha} = \text{tr} [M(\varepsilon) - M(\varepsilon^*)] \frac{\partial \Psi[M(\tilde{\varepsilon})]}{\partial M(\varepsilon)}.$$

Так как по предположению план  $\varepsilon^*$  минимизирует значение функционала  $\Psi[M(\varepsilon)]$ , то для любого плана:

$$\left. \frac{\partial \Psi[M(\tilde{\varepsilon})]}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} \geq 0, \quad (2.4)$$

производная по параметру  $\alpha$  — это есть производная по направлению  $\varepsilon$ .



Выберем в качестве  $\varepsilon$  план, спектр которого состоит из единственной точки  $\underline{x}$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi[M(\tilde{\varepsilon})]}{\partial \alpha} &= \text{tr} \left[ f(\underline{x}) f^T(\underline{x}) - M(\varepsilon^*) \right] \frac{\partial \Psi[M(\tilde{\varepsilon})]}{\partial M(\varepsilon)} = \\ &= \text{tr} f(\underline{x}) f^T(\underline{x}) \frac{\partial \Psi[M(\tilde{\varepsilon})]}{\partial M(\varepsilon)} - \text{tr} M(\varepsilon^*) \frac{\partial \Psi[M(\tilde{\varepsilon})]}{\partial M(\varepsilon)} = \varphi(\underline{x}, \tilde{\varepsilon}) - \text{tr} M(\varepsilon^*) \frac{\partial \Psi[M(\tilde{\varepsilon})]}{\partial M(\varepsilon)}. \end{aligned}$$

Учитывая (2.4) и то, что при  $\alpha=0$   $M(\tilde{\varepsilon}) = M(\varepsilon^*)$ , получаем

$$\varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) - \text{tr} M(\varepsilon^*) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)} = \left. \frac{\partial \Psi[M(\tilde{\varepsilon})]}{\partial M(\varepsilon)} \right|_{\alpha=0} \geq 0$$

или  $\varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) \geq \text{tr} M(\varepsilon^*) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)}$ , где  $\underline{x}$  — любая точка из  $\mathcal{X}$ .

Отсюда с очевидностью следует, что для  $\Psi$ -оптимального плана должно иметь место равенство (2.2) (так как там берется  $\min_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \varphi(\underline{x}, \varepsilon^*)$ ).

Доказана тем самым необходимость этого условия. (Здесь учтено, что в точке плана  $\varepsilon^*$   $\varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) = \text{tr} M(\varepsilon^*) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)}$ , т.е. достигается нижняя грань (подробнее см. далее в теореме 2.2).)

Достаточность.

Предположим, что план  $\varepsilon^*$ , для которого имеет место (2.2), не является  $\Psi$ -оптимальным, т.е.

$$\Psi[M(\varepsilon^*)] > \Psi[M(\varepsilon^0)] = \min_{\varepsilon} \Psi[M(\varepsilon)].$$

Рассмотрим выпуклую линейную комбинацию планов  $\varepsilon^*$  и  $\varepsilon^0$ :

$$\tilde{\varepsilon} = (1 - \alpha) \varepsilon^* + \alpha \varepsilon^0.$$

Из выпуклости  $\Psi[M(\varepsilon)]$  и определения плана  $\varepsilon^*$  следует, что

$$\Psi[M(\tilde{\varepsilon})] \leq (1 - \alpha) \Psi[M(\varepsilon^*)] + \alpha \Psi[M(\varepsilon^0)].$$

Продифференцируем по  $\alpha$ :  $\frac{\partial \Psi[M(\tilde{\varepsilon})]}{\partial \alpha} = \Psi[M(\varepsilon^0)] - \Psi[M(\varepsilon^*)] < 0$ , т.е.

$$\left. \frac{\partial \Psi[M(\tilde{\varepsilon})]}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} < 0$$

или в более подробной записи:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \Psi[M(\tilde{\varepsilon})]}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} &= \text{tr}[M(\varepsilon^0) - M(\varepsilon^*)] \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)} = \\ &= \text{tr} \left[ \int_{\mathcal{X}} f(\underline{x}) f^T(\underline{x}) dP_{\varepsilon^0}(\underline{x}) - M(\varepsilon^*) \right] \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)}; \end{aligned}$$

или, 
$$\int_{\mathcal{X}} \varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) dP_{\varepsilon^0}(\underline{x}) < \text{tr} M(\varepsilon^*) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)}, \quad (2.5)$$

где мера  $P_{\varepsilon^0}(\underline{x})$  соответствует плану  $\varepsilon^0$ .

С другой стороны, согласно (2.2) (превращая (2.2) в неравенство и интегрируя по  $dP_{\varepsilon^0}$ , нетрудно видеть):

$$\int_{\mathcal{X}} \varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) dP_{\varepsilon^0}(\underline{x}) \geq \text{tr} M(\varepsilon^*) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)}. \quad (2.6)$$

Сравнивая (2.5) и (2.6) приходим к противоречию. ■

### **Теорема 2.2.**

В точках спектра  $\Psi$ -оптимального плана имеет место равенство:

$$\varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) = \text{tr} M(\varepsilon^*) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)}. \quad (2.7)$$

Доказательство:

Для плана  $\varepsilon^*$  имеет место:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{X}} \varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) dP_{\varepsilon^*}(\underline{x}) &= \int_{\mathcal{X}} f^T(\underline{x}) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)} f(\underline{x}) dP_{\varepsilon^*}(\underline{x}) = \\ &= \text{tr} \int_{\mathcal{X}} f(\underline{x}) f^T(\underline{x}) dP_{\varepsilon^*}(\underline{x}) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)} = \text{tr} M(\varepsilon^*) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)} \end{aligned}$$

Отсюда получаем 
$$\underbrace{\int_{\mathcal{X}} \left[ \varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) - \text{tr} M(\varepsilon^*) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)} \right] dP_{\varepsilon^0}(\underline{x})}_{\geq 0} = 0.$$

Отсюда ввиду положительности меры  $P_{\varepsilon^*}(\underline{x})$  и (2.2) видно, что последнее равенство возможно, если только во всех точках плана  $\varepsilon^*$  (без учета точек с нулевым весом) выполняется (2.7). ■

Если считать, что функционал  $\Psi[M(\varepsilon)]$  - вогнутый и решается экстремальная задача

$$\varepsilon^* = \underset{\varepsilon}{\operatorname{Argmax}} \Psi[M(\varepsilon)], \quad (2.8)$$

то можно получить следующие аналогичные результаты.

### Теорема 2.3

Необходимым и достаточным условием  $\Psi$ -оптимальности в смысле (2.8) плана  $\varepsilon^*$  является выполнение равенства:

$$\max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) = \operatorname{tr} M(\varepsilon^*) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)},$$

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

До сих пор мы ограничивались рассмотрением функционалов от информационной матрицы. В то же время имеется ряд функционалов зависящих от элементов дисперсионной матрицы, т.е. вида

$$\Psi[D(\varepsilon)] = \Psi[M^{-1}(\varepsilon)].$$

Рассмотрим задачу

$$\varepsilon^* = \underset{\varepsilon}{\operatorname{Argmax}} \Psi[M^{-1}(\varepsilon)]. \quad (2.9)$$

### Теорема 2.4

Необходимым и достаточным условием  $\Psi$ -оптимальности плана  $\varepsilon^*$  в смысле (2.9) является выполнение равенства:

$$\max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) = \operatorname{tr} D(\varepsilon^*) \frac{\partial \Psi[D(\varepsilon^*)]}{\partial D(\varepsilon)},$$

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

### Интерпретация функции $\varphi(\underline{x}, \varepsilon)$ вида (2.3).

Рассмотрим план  $\varepsilon$  мера которого сосредоточена в конечном числе точек  $n$ :

$$\varepsilon = \left\{ \begin{matrix} x_1 & , \dots , & x_n \\ p_1 & , \dots , & p_n \end{matrix} \right\}, p_i \geq 0, i = \overline{1, n} \quad \sum p_i = 1.$$

Вычислим производную функционала по всем точкам плана

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial p_k} &= \sum_{i,j} \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial M_{ij}(\varepsilon)} \frac{\partial M_{ij}(\varepsilon)}{\partial p_k} = \operatorname{tr} \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial M(\varepsilon)} \frac{\partial M(\varepsilon)}{\partial p_k} = \\ &= \operatorname{tr} \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial M(\varepsilon)} M(\underline{x}_k) = \varphi(\underline{x}_k, \varepsilon), k = 1, \dots, n. \end{aligned}$$

Полученное соотношение

$$\frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial p_i} = \text{tr} \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial M(\varepsilon)} M(\underline{x}_i) \quad (2.10)$$

полезно будет при рассмотрении численных методов построения оптимальных планов. Оно полезно также в тех случаях, когда трудно непосредственно найти производную от функционала  $\Psi[M(\varepsilon)]$  по матрице  $M(\varepsilon)$ . Проще бывает вычислить производную от функционала по весу точки плана и уже исходя из (2.10) определяют вид  $\frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial M(\varepsilon)}$ .

Рассмотрим конкретное применение теорем (2.1), (2.2) для некоторых критериев оптимальности.

#### **D-оптимальные планы.**

В качестве функционала будем рассматривать  $\ln|M(\varepsilon)|$ . Поскольку  $\ln$  - монотонное преобразование, то ясно, что для функционалов  $|M(\varepsilon)|$  и  $\ln|M(\varepsilon)|$  оптимальные планы совпадают.

Прежде всего, отметим, что  $\ln|M(\varepsilon)|$  является вогнутым функционалом. Это следует из известного неравенства:

$$|(1-\alpha)A + \alpha B| \geq |A|^{1-\alpha} |B|^\alpha,$$

где A и B- п.п.о. (положительно полу определенные). И логарифмируя:

$$\ln|(1-\alpha)A + \alpha B| \geq (1-\alpha)\ln|A| + \alpha\ln|B|.$$

Нам предстоит найти производную от  $\ln|M(\varepsilon)|$  по  $M(\varepsilon)$ . Вычислим вначале производную

$\frac{\partial |A|}{\partial A}$ , где A-произвольная симметричная матрица п.п.о. Известно, что определитель матрицы можно разложить по алгебраическим дополнениям к какой-либо i-ой строке, т.е.  $|A| = \sum_k a_{ik} A_{ik}^*$ ,

где  $A_{ik}^*$  - алгебраическое дополнение к элементу  $a_{ik}$ . Оно не зависит ни от одного элемента i-ой

строки, поэтому  $\frac{\partial |A|}{\partial a_{ik}} = A_{ik}^*$ .

Хорошо известно также, что  $A^{-1} = |A|^{-1} \cdot A^*$ , где  $A^*$  - присоединенная матрица, состоящая из алгебраических дополнений  $A_{ik}^*$ . Следовательно

$$A_{ik}^* = A^{-1} \cdot |A|, \quad \frac{\partial |A|}{\partial A} = \left( \frac{\partial |A|}{\partial a_{ij}} \right)_{i,j=\overline{1,m}} = (A_{ij}^*)_{i,j=\overline{1,m}} = A^* = A^{-1} \cdot |A|$$

и  $\frac{\partial \ln|A|}{\partial A} = \frac{1}{|A|} A^{-1} \cdot |A| = A^{-1}$ . Таким образом  $\frac{\partial \ln|M(\varepsilon)|}{\partial M(\varepsilon)} = M^{-1}(\varepsilon)$ .

По определению имеем

$$\varphi(\underline{x}_i, \varepsilon) = \frac{\partial \ln |M(\varepsilon)|}{\partial p_i} = tr \frac{\partial \ln |M(\varepsilon)|}{\partial M(\varepsilon)} M(\underline{x}_i) = tr M^{-1}(\varepsilon) M(\underline{x}_i) = d(\underline{x}_i, \varepsilon).$$

Из теоремы оптимальности 2.3 следует необходимое и достаточное условие  $D$  – оптимальности:

$$\max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) = tr M(\varepsilon^*) \frac{\partial \ln |M(\varepsilon^*)|}{\partial M(\varepsilon)} = tr M(\varepsilon^*) M^{-1}(\varepsilon^*) = m.$$

В пространстве непрерывных планов существует тесная связь между понятиями  $D$  – и  $G$  – оптимальности. Покажем это.

Поскольку для любого плана  $\varepsilon$

$$\int_{\mathcal{X}} d(\underline{x}, \varepsilon) dP_{\varepsilon}(\underline{x}) = \int_{\mathcal{X}} f^T(\underline{x}) M^{-1}(\varepsilon) f(\underline{x}) dP_{\varepsilon}(\underline{x}) = tr M^{-1}(\varepsilon) \int_{\mathcal{X}} f(\underline{x}) f^T(\underline{x}) dP_{\varepsilon}(\underline{x}) = m.$$

Получаем следующее неравенство

$$\min_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d(\underline{x}, \varepsilon) \leq m \leq \max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d(\underline{x}, \varepsilon).$$

Теперь можно сформулировать известную теорему эквивалентности, связывающую  $D$ - и  $G$ -оптимальные планы (когда  $Z$  совпадает с  $\mathcal{X}$ ).

### Теорема 2.5

Следующие утверждения

1. План  $\varepsilon^*$  максимизирует  $|M(\varepsilon)|$ ;
2. План  $\varepsilon^*$  минимизирует  $\max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d(\underline{x}, \varepsilon)$ ;
3.  $\max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d(\underline{x}, \varepsilon) = m$  эквивалентны.

Для получения условий оптимальности для ряда других выпуклых функционалов от информационной матрицы могут быть полезны следующие матричные производные (справочно):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \ln |A| &= tr A^{-1} \left( \frac{\partial A}{\partial t} \right), \\ \frac{\partial}{\partial t} tr A &= tr \left( \frac{\partial A}{\partial t} \right), \\ \left( \frac{\partial A^{-1}}{\partial t} \right) &= -A^{-1} \left( \frac{\partial A}{\partial t} \right) A^{-1}. \end{aligned}$$

Например, для получения условий  $A$  – оптимальности найдем

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial p_k} tr M^{-1}(\varepsilon) &= -tr M^{-1}(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial p_k} M(\varepsilon) M^{-1}(\varepsilon) = -tr M^{-1}(\varepsilon) M(\underline{x}_k) M^{-1}(\varepsilon) = \\ &= -tr M^{-2}(\varepsilon) M(\underline{x}_k). \end{aligned}$$

С учетом того, что функция  $\varphi(\underline{x}, \varepsilon)$  имеет вид

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

Заключаем, что производная

$$\frac{\partial \text{tr} M^{-1}(\varepsilon)}{\partial M(\varepsilon)} = -M^{-2}(\varepsilon).$$

Опираясь на ее вид, мы можем выписать необходимые и достаточные условия  $A$  – оптимальности. Заметим, что вместо **минимизации**  $\text{tr} M^{-1}(\varepsilon)$  мы можем **максимизировать**  $-\text{tr} M^{-1}(\varepsilon)$ , что позволит воспользоваться условиями (2.2) из теоремы 2.1.

Сводка условий оптимальности для ряда функционалов приведена в следующей таблице.

Табл.2.1

Критерий	Функционал	Необходимые и достаточные условия оптимальности
D	$\ln  M(\varepsilon) $	$\max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} f^T(\underline{x}) M^{-1}(\varepsilon^*) f(\underline{x}) = m$ или $\max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \text{tr} M^{-1}(\varepsilon^*) M(\underline{x}) = m$
A	$-\text{tr} M^{-1}(\varepsilon)$	$\max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \text{tr} M^{-2}(\varepsilon^*) M(\underline{x}) = \text{tr} M^{-1}(\varepsilon^*)$
E	$\min_i \lambda_i(M(\varepsilon))$	$\max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \text{tr} q q^T M(\underline{x}) = \text{tr} q q^T M(\varepsilon^*) = \min_i \lambda_i(M(\varepsilon^*))$ , где $q$ - собственный вектор, соответствующий некрратному минимальному собственному числу $\min_i \lambda_i(M(\varepsilon^*))$ .
$\Phi_p$	$-p^{-1} \text{tr} M^{-p}(\varepsilon)$	$\max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \text{Sp} M^{-p-1}(\varepsilon^*) M(\underline{x}) = \text{tr} M^{-p}(\varepsilon^*)$
$\Lambda$	$\sum_{i=1}^m [\lambda_i(M^{-1}(\varepsilon))]$	$\min_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \frac{2}{m} \left\{ [\text{tr} M^{-2}(\varepsilon^*) M(\underline{x})] \text{tr} M^{-1}(\varepsilon^*) - \right.$ $\left. - m \text{tr} M^{-3}(\varepsilon^*) M(\underline{x}) \right\} = \frac{2}{m} \text{tr}^2 M^{-1}(\varepsilon^*) - 2 \text{tr} M^{-2}(\varepsilon^*)$
Q	$\int_Z d(\underline{x}, \varepsilon) d\underline{x}$	$\max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} \int_Z d^2(\underline{x}, \tilde{\underline{x}}, \varepsilon^*) d\tilde{\underline{x}} = \int_Z d(\underline{x}, \varepsilon^*) d\underline{x}$ , где $d(\underline{x}, \tilde{\underline{x}}, \varepsilon) = f^T(\underline{x}) M^{-1}(\varepsilon) f(\tilde{\underline{x}})$ .
Экстраполяци я в точку	$d(\underline{x}_0, \varepsilon)$	$\max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d^2(\underline{x}, \underline{x}_0, \varepsilon^*) = d(\underline{x}_0, \varepsilon^*)$ , где $d^2(\underline{x}, \underline{x}_0, \varepsilon) = \text{tr} M(\underline{x}_0) M^{-1}(\varepsilon) M(\underline{x}) M^{-1}(\varepsilon)$



### 3. Численные методы построения оптимальных планов

Явное решение задачи по поиску оптимального плана оказывается, как правило, возможным лишь в простейших случаях. При этом в каждой конкретной регрессионной задаче требуется специальный подход. Планы строились аналитически в основном для области экспериментирования – гиперкуб или сфера, а регрессионная зависимость представляла полином первого или второго порядков.

Как иллюстрацию аналитического подхода к построению оптимальных планов рассмотрим следующий пример.

**Пример 1:** 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. При попытке аналитического построения оптимальных планов обычно выдвигают предположения о структуре такого плана. В частности, следует предположить число точек в спектре плана, по возможности определиться с их координатами и распределением весов с точностью до параметра. Если это удастся сделать, то мы резко уменьшаем пространство поиска. Построенный при принятых предположениях план требуется в дальнейшем проверить на оптимальность по необходимым и достаточным условиям. В нашем случае будем руководствоваться следующими соображениями. Во-первых, число точек в спектре плана должно быть не меньше 2. В силу симметричности области планирования можно ожидать, что и план будет симметричным относительно 0. Если взять только 2 точки в спектре плана, то получаем, что они должны быть граничными  $x_{1,2} = \{\pm 1\}$ . После возведения в квадрат мы получим совпадение соответствующего столбца матрицы наблюдения со столбцом для свободного члена, что означает вырожденность получаемой информационной матрицы. Поэтому предположим, что оптимальный план принадлежит классу планов следующего вида:

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

Найдем оптимальное значение  $p$ .

$$M(\varepsilon) = \sum_{i=1}^n p_i f(x_i) f^T(x_i) = \begin{bmatrix} 1 & 2p \\ 2p & 2p \end{bmatrix},$$

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

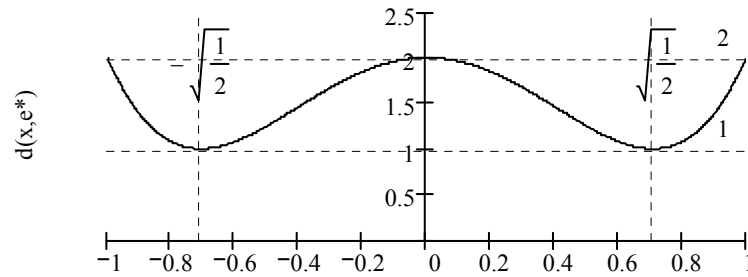
Проверим план  $\varepsilon^*$  на  $D$ -оптимальность:

$$M^{-1}(\varepsilon^*) = \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 4 \end{bmatrix},$$

$$d(x, \varepsilon^*) = f^T(x) M^{-1}(\varepsilon^*) f(x) = \begin{pmatrix} 1 & x^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 4 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ x^2 \end{pmatrix} = 2 - 4x^2 + 4x^4$$

$$\frac{\partial d(x, \varepsilon^*)}{\partial x} = -8x + 16x^3; \quad \left. \frac{\partial^2 d(x, \varepsilon^*)}{\partial^2 x} \right|_{x=0} = -8 < 0, \quad \text{т.е. } x=0 \text{ — точка максимума.}$$

Другие точки максимума на границе области  $\mathcal{X}$ , т.е. в точках  $x=\pm 1$ .  
Значит  $\varepsilon^*$  –  $D$ -оптимальный план.



**Пример 2.** Рассмотрим полную квадратичную модель второго порядка на отрезке  
 $\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2, \quad -1 \leq x \leq +1.$

Предположим, что

$$\varepsilon^* = \begin{Bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{Bmatrix}.$$

Проверим его на  $D$  – оптимальность.

$$M(\varepsilon^*) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2/3 \\ 0 & 2/3 & 0 \\ 2/3 & 0 & 2/3 \end{pmatrix}, \quad M^{-1}(\varepsilon^*) = \begin{pmatrix} 3 & 0 & -3 \\ 0 & 3/2 & 0 \\ -3 & 0 & 9/2 \end{pmatrix}.$$

$$\begin{aligned} d(x, \varepsilon^*) &= (1 \quad x \quad x^2) \begin{pmatrix} 3 & 0 & -3 \\ 0 & 3/2 & 0 \\ -3 & 0 & 9/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix} = \\ &= 3 - \frac{9}{2} x^2 (1 - x^2). \end{aligned}$$

Нетрудно понять, что максимум функции  $d(x, \varepsilon^*)$  равен 3 и достигается в точках  $\{-1, 0, +1\}$ .  
Таким образом данный план является  $D$  – оптимальным.

**Пример 3.** Вновь рассмотрим полную квадратичную модель второго порядка на отрезке  
 $\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2, \quad -1 \leq x \leq +1.$

Поставим задачу найти  $A$  – оптимальный план. Введем предположение, что спектр плана будет содержать 3 точки и что он симметричный:

$$\varepsilon = \begin{Bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ p/2 & 1-p & p/2 \end{Bmatrix}.$$

Тогда

$$M(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & p \\ 0 & p & 0 \\ p & 0 & p \end{pmatrix}, \quad M^{-1}(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1/(1-p) & 0 & -1/(1-p) \\ 0 & 1/p & 0 \\ -1/(1-p) & 0 & 1/(p(1-p)) \end{pmatrix}.$$

$$\text{tr} M^{-1}(\varepsilon) = \frac{1}{1-p} + \frac{1}{p} + \frac{1}{p(1-p)} = \frac{2}{p(1-p)}.$$

$$d \text{tr} M^{-1}(\varepsilon) / dp = 1 - 2p^* = 0, \quad p^* = 1/2.$$

$$\varepsilon^* = \begin{Bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{Bmatrix}.$$

Проверим его на  $A$  – оптимальность.

$$M(\varepsilon^*) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad M^{-1}(\varepsilon^*) = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ 0 & 2 & 0 \\ -2 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \varphi(x, \varepsilon^*) &= (1 \quad x \quad x^2) \begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ 0 & 2 & 0 \\ -2 & 0 & 4 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix} = \\ &= 8 - 20x^2(1 - x^2). \end{aligned}$$

Нетрудно понять, что  $\max_x \varphi(x, \varepsilon^*) = 8 = \text{tr} M^{-1}(\varepsilon^*)$  и достигается в точках  $\{-1, 0, +1\}$ , т.е. полученный план является  $A$  – оптимальным.

Исходя из рассмотренной общей постановки для данной модели можно найти и  $D$  – оптимальный план. Имеем

$$|M(\varepsilon)| = p^2 - p^3, \quad d|M(\varepsilon)|/dp = 2p - 3p^2 = 0, \quad p^* = 2/3.$$

и

$$\varepsilon_D^* = \begin{Bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{Bmatrix}.$$

Ранее (см. пример 2) мы показали, что данный план является  $D$  – оптимальным. Для сравнения приведем вид  $E$  – оптимального плана:

$$\varepsilon_E^* = \begin{Bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0.2 & 0.6 & 0.2 \end{Bmatrix}.$$

**Пример 4.** Рассмотрим линейную модель от двух факторов

$$\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x_1 + \theta_3 x_2, \quad -1 \leq x_{1,2} \leq +1$$

Предположим, что  $D$  – оптимальный план имеет вид

$$\varepsilon = \left\{ \begin{pmatrix} -1, -1 \\ 1/4 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -1, 1 \\ 1/4 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1, -1 \\ 1/4 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1, 1 \\ 1/4 \end{pmatrix} \right\}.$$

$$M(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad M^{-1}(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Максимум функции  $d(x, \varepsilon) = 1 + x_1^2 + x_2^2$  достигается в угловых точках и равен 3. Таким образом, данный план является  $D$  – оптимальным. Он также будет оптимальным и по другим критериям.

Аналитические методы быстро себя исчерпывают с увеличением размерности задачи, сложности функции  $\eta(x, \theta)$  и вида области  $\mathcal{X}$ . Поэтому основная нагрузка в практических задачах ложится на численные методы построения оптимальных планов.

Здесь могут использоваться различные методы нелинейного программирования. Однако их эффективность зачастую мала, поскольку здесь приходится сталкиваться с задачами очень больших размерностей. Обычно размерность соответствующей экспериментальной задачи заключена между вычислениями  $m(k+1)$  и  $\frac{m(m+1)}{2}(k+1)$ . Например, для  $m=10$ ,  $k=3$  ее диапазон  $40 \div 220$ .

Поэтому рассмотрение мы начнем с метода, который позволяет свести задачу поиска  $\psi$ -оптимального плана к последовательности экстремальных задач, каждая размерности  $k$ .

Рассмотрим следующую итерационную процедуру (последовательный алгоритм):

Решается задача  $\varepsilon^* = \underset{\varepsilon}{\operatorname{Arg\,min}} \psi[M(\varepsilon)]$

1. Задание некоторого невырожденного плана  $\varepsilon^s$ .
2. Отыскивается точка  $x^s$ :

$$x^s = \underset{x \in \mathcal{X}}{\operatorname{Arg\,min}} \varphi(x, \varepsilon^s).$$

3. Составляется план

$$\varepsilon^{s+1} = (1 - \alpha^s) \varepsilon^s + \alpha^s \varepsilon(x^s), \quad 0 < \alpha^s < 1,$$

где  $\varepsilon(x^s)$  – план, спектр которого состоит из единственной точки  $x^s$ . Другими словами в спектр плана добавляется точка  $x^s$  с весом  $\alpha^s$ , а веса других точек плана меняются по правилу  $p_j^{s+1} = p_j^s(1 - \alpha^s)$ ,  $j=1, \dots, n$ .

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

Если  $\psi[M(\varepsilon^{s+1})] \geq \psi[M(\varepsilon^s)]$ , то  $\alpha^s$  уменьшается в  $\gamma > 1$  раз, и операции 3 и 4 повторяются. Если имеет место обратное неравенство, то операции 2–4 повторяются с планом  $\varepsilon^{s+1}$  и так далее. Расчеты прекращаются, если

$$\left| -\min_{x \in \mathcal{X}} \varphi(x, \varepsilon^s) + \text{tr} M(\varepsilon^s) \frac{\partial \psi[M(\varepsilon^s)]}{\partial M(\varepsilon^s)} \right| \leq \gamma,$$

где  $\gamma$  – наперед заданная точность.

Можно показать, что последовательность планов  $\varepsilon^s, \varepsilon^{s+1}, \dots$  сходится к оптимальному плану.

В основе итерационной процедуры 1–4 заложена простая идея: «двигаться» в направлении, по которому наблюдается наибольшее уменьшение функционала  $\psi[M(\varepsilon)]$ . Покажем это.

Пусть движение определено в направлении  $\tilde{\varepsilon}$ :

$$\varepsilon^{s+1} = (1 - \alpha)\varepsilon^s + \alpha \cdot \tilde{\varepsilon}.$$

Тогда

$$\left. \frac{\partial \psi[M(\varepsilon^{s+1})]}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} = \int_{\mathcal{X}} \varphi(x, \varepsilon^s) dP_{\tilde{\varepsilon}}(x) - \text{tr} M(\varepsilon^s) \frac{\partial \psi[M(\varepsilon^s)]}{\partial M(\varepsilon)}.$$

При достаточной малости  $\alpha$  и необходимой гладкости  $\psi$  будет иметь место приближенное равенство (см. доказательство п.1 в теореме 2.1)

$$\psi[M(\varepsilon^{s+1})] \approx \psi[M(\varepsilon^s)] - \alpha \left\{ \text{tr} M(\varepsilon^s) \frac{\partial \psi[M(\varepsilon^s)]}{\partial M(\varepsilon)} - \int_{\mathcal{X}} \varphi(x, \varepsilon^s) dP_{\tilde{\varepsilon}}(x) \right\}.$$

Естественно выбрать план  $\tilde{\varepsilon}$  таким, чтобы функционал  $\int_{\mathcal{X}} \varphi(x, \varepsilon^s) dP_{\tilde{\varepsilon}}(x)$  достигал своего минимального значения. Одним из таких возможных планов является, как нетрудно видеть, план с единичной мерой  $\varepsilon(x^s)$ , приписанной точке  $x^s$ , соответствующей  $\min_{x \in \mathcal{X}} \varphi(x, \varepsilon^s)$ , т.е. как мы и делали в описанной выше процедуре.

Рассмотрим пример, иллюстрирующий работу последовательного алгоритма построения  $D$  – оптимального плана для линейной регрессионной модели

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

Начальный план

$$\varepsilon^0 = \left\{ \begin{array}{ccc} -1 & 0 & 1 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{array} \right\}, \quad \varepsilon(x^1) = \{-1\}, \quad \alpha^1 = 0.5.$$

После включения точки  $x^1 = -1$  в план  $\varepsilon^0$  получаем

$$\varepsilon^1 = \left\{ \begin{array}{cccc} -1 & 0 & 1 & -1 \\ 1/8 & 1/4 & 1/8 & 1/2 \end{array} \right\}, \quad \varepsilon(x^2) = \{+1\}, \quad \alpha^2 = 0.5.$$

После включения точки  $x^2 = +1$  в план  $\varepsilon^1$  получаем

$$\varepsilon^2 = \left\{ \begin{array}{ccccc} -1 & 0 & 1 & -1 & 1 \\ 1/16 & 1/8 & 1/16 & 1/4 & 1/2 \end{array} \right\}, \quad \varepsilon(x^3) = \{-1\}, \quad \alpha^3 = 0.5$$

Далее

$$\varepsilon^3 = \begin{Bmatrix} -1 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1/32 & 1/16 & 1/32 & 1/8 & 1/4 & 1/2 \end{Bmatrix}, \quad \varepsilon(x^4) = \{+1\}, \quad \alpha^4 = 0.5,$$

$$\varepsilon^4 = \begin{Bmatrix} -1 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1/64 & 1/32 & 1/64 & 1/16 & 1/8 & 1/4 & 1/2 \end{Bmatrix}, \quad \varepsilon(x^5) = \{-1\}, \quad \alpha^5 = 0.5$$

.....  
После группировки точек на некотором шаге  $s$  получаем

$$\varepsilon^s = \begin{Bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ \approx 1/2 & \approx 0 & \approx 1/2 \end{Bmatrix},$$

а после удаления точки с малым весом окончательно получаем оптимальный план

$$\varepsilon^* = \begin{Bmatrix} -1 & 1 \\ 1/2 & 1/2 \end{Bmatrix}.$$

Для ряда функционалов  $\psi$  можно получить более конструктивные результаты нежели рассмотренная выше общая последовательная процедура. Рассмотрим применение данной процедуры для построения  $D$ -оптимальных планов.

**Лемма 3.1**

Пусть  $M$  – невырожденная матрица  $m \times m$ , а  $F$  – матрица  $m \times k$ , тогда

$$|M + FF^T| = |M| \cdot |I_k + F^T M^{-1} F|. \quad (3.1)$$

Доказательство:

Известно, что

$$\begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix} = |A| \cdot |D - CA^{-1}B| = |A - BD^{-1}C| \cdot |D|.$$

Полагая,  $A=M$ ,  $B=F$ ,  $C=-F^T$ ,  $D=I_k$ , получим необходимый результат

$$|M + FF^T| = |M| \cdot |I_k + F^T M^{-1} F|. \quad \blacksquare$$

**Теорема 3.1**

Пусть  $M(\varepsilon^s)$  – информационная матрица невырожденного плана  $\varepsilon^s$  и он не  $D$ -оптимален и пусть  $M(x)$  – информационная матрица плана  $\varepsilon(x)$ , сосредоточенного в одной точке  $x$ .

Тогда для плана  $\varepsilon^{s+1} = (1 - \alpha)\varepsilon^s + \alpha\varepsilon(x)$  справедливо

$$|M(\varepsilon^{s+1})| = (1 - \alpha)^m \left[ 1 + \frac{\alpha}{1 - \alpha} d(x, \varepsilon^s) \right] \cdot |M(\varepsilon^s)|. \quad (3.2)$$

Доказательство:

Согласно определению

$$M(\varepsilon^{s+1}) = (1 - \alpha)M(\varepsilon^s) + \alpha \cdot f(x)f^T(x) = (1 - \alpha) \left[ M(\varepsilon^s) + \frac{\alpha}{1 - \alpha} f(x)f^T(x) \right].$$

Положив в (3.1)  $F = \left[ \frac{\alpha}{1 - \alpha} \right]^{1/2} \cdot f(x)$ , получим

$$\begin{aligned} |M(\varepsilon^{s+1})| &= (1 - \alpha)^m \left[ 1 + \frac{\alpha}{1 - \alpha} f^T(x)M^{-1}(\varepsilon^s)f(x) \right] \cdot |M(\varepsilon^s)| = \\ &= (1 - \alpha)^m \left[ 1 + \frac{\alpha}{1 - \alpha} d(x, \varepsilon^s) \right] \cdot |M(\varepsilon^s)|. \end{aligned}$$

### **Теорема 3.2**

Наиболее возможное значение определителя  $|M(\varepsilon^{s+1})|$  при заданном  $\varepsilon^s$  равно

$$\max_{x \in \mathcal{X}, 0 \leq \alpha \leq 1} |M(\varepsilon^{s+1})| = \left[ \frac{d(x^s, \varepsilon^s)}{m} \right]^m \left[ \frac{m - 1}{d(x^s, \varepsilon^s) - 1} \right]^m |M(\varepsilon^s)| > |M(\varepsilon^s)|, \quad (3.3)$$

где  $x^s = \text{Arg} \max_{x \in \mathcal{X}} d(x, \varepsilon^s)$ .

### **Доказательство:**

Легко видеть, что  $|M(\varepsilon^{s+1})|$  является возрастающей функцией от  $d(x, \varepsilon^s)$ . Отсюда с очевидностью следует, что план  $\varepsilon^s$  должен быть сосредоточен в точке  $x^s = \text{Arg} \max_{x \in \mathcal{X}} d(x, \varepsilon^s)$ .

Найдем теперь оптимальное  $\alpha$ .

$$\frac{\partial \ln |M(\varepsilon^{s+1})|}{\partial \alpha} = \frac{d(x^s, \varepsilon^s) - 1}{1 - \alpha + \alpha \cdot d(x^s, \varepsilon^s)} - \frac{m - 1}{1 - \alpha} = 0. \quad (3.4)$$

$$\text{Решением (3.4) является: } \alpha^s = \frac{d(x^s, \varepsilon^s) - m}{[d(x^s, \varepsilon^s) - 1] \cdot m}. \quad (3.5)$$

Т.к. план  $\varepsilon^s$  по предположению не  $D$ -оптимален, то ясно, что  $\alpha^s > 0$ . С другой стороны, непосредственным дифференцированием легко проверить, что

$$\left. \frac{\partial^2 \ln |M(\varepsilon^{s+1})|}{\partial^2 \alpha} \right|_{\substack{\alpha = \alpha^s \\ x = x^s}} < 0 \text{ и } \alpha^s \text{ таким образом, соответствует максимуму } \ln |M(\varepsilon^{s+1})|. \text{ Подставив}$$

$\alpha^s$  из (3.5) в (3.2) получим (3.3). ■

Теорема 3.2 дает, таким образом, ответ на вопрос, как выбирать величины  $\alpha^s$  в рассматриваемом выше последовательном алгоритме.

Аналогичные результаты можно получить и для некоторых других критериев оптимальности.

Наиболее трудоемкими операциями в последовательном алгоритме является обращение информационной матрицы и поиск  $\max_{x \in X} d(x, \varepsilon^s)$ .

Оказывается, что операцию обращения можно заменить значительно более простыми операциями.

**Лемма 3.2**

$$(I_p + AB)^{-1} = I_p - A(I_q + BA)^{-1} \cdot B, \quad (3.6)$$

где  $A - p \times q, B - q \times p$  – матрицы.

Доказательство:

Умножив обе части (3.6) справа на матрицу  $I_p + AB$ , получим:

$$\begin{aligned} I_p &= I_p(I_p + AB) - A(I_q + BA)^{-1}B(I_p + AB) = \\ &= I_p + AB - A(I_q + BA)^{-1}(B + BAB) = \\ &= I_p + AB - A(I_q + BA)^{-1}(I_q + BA)B = I_p + AB - AB = I_p. \end{aligned} \quad \blacksquare$$

**Теорема 3.3**

Пусть  $\varepsilon^{s+1} = (1 - \alpha)\varepsilon^s + \alpha\varepsilon(x)$ , где  $\varepsilon(x)$  – план в точке  $x^s$ , тогда

$$1. \quad D(\varepsilon^{s+1}) = (1 - \alpha)^{-1} \left[ I_m - \frac{D(\varepsilon^s)f(x^s)f^T(x^s)}{1 - \alpha + \alpha \cdot d(x^s, \varepsilon^s)} \right] \cdot D(\varepsilon^s), \quad (3.7)$$

$$2. \quad d(x, \varepsilon^{s+1}) = (1 - \alpha)^{-1} \left[ d(x, \varepsilon^s) - \frac{\alpha \cdot d^2(x^s, x, \varepsilon^s)}{1 - \alpha + \alpha \cdot d(x, \varepsilon^s)} \right], \forall x \in \mathcal{X}. \quad (3.8)$$

Доказательство пункта 1: Согласно определению

$$\begin{aligned} M^{-1}(\varepsilon^{s+1}) &= \left[ (1 - \alpha)M(\varepsilon^s) + \alpha \cdot M(x^s) \right]^{-1} = \\ &= (1 - \alpha)^{-1} \left[ I_m + \frac{\alpha}{1 - \alpha} M^{-1}(\varepsilon^s)M(x^s) \right]^{-1} M^{-1}(\varepsilon^s). \end{aligned}$$

Положим  $\frac{\alpha}{1 - \alpha} D(\varepsilon^s)f(x^s) = A$ ,  $f^T(x^s) = B$  и, воспользовавшись леммой 3.2, получим

$$\begin{aligned} \left[ I_n + \frac{\alpha \cdot D(\varepsilon^s)f(x^s)f^T(x^s)}{1 - \alpha} \right]^{-1} &= \\ &= I_m - \frac{\alpha}{1 - \alpha} D(\varepsilon^s)f(x^s) \left[ 1 + f^T(x^s) \frac{\alpha}{1 - \alpha} D(\varepsilon^s)f(x^s) \right]^{-1} f^T(x^s). \end{aligned}$$

Получаем таким образом (3.7).  $\blacksquare$

Доказательство пункта 2:

Умножим (3.7) соответственно слева и справа на  $f^T(x)$  и  $f(x)$ :



$$f^T(x)D(\varepsilon^{s+1})f(x) = (1-\alpha)^{-1} \left[ d(x, \varepsilon^s) - \frac{\alpha \cdot f(x)D(\varepsilon^s)f(x^s)f^T(x^s)D(\varepsilon^s)f(x)}{1-\alpha + \alpha \cdot d(x^s, \varepsilon^s)} \right] =$$

$$= (1-\alpha)^{-1} \left[ d(x, \varepsilon^s) - \frac{\alpha \cdot d^2(x, x^s, \varepsilon^s)}{1-\alpha + \alpha \cdot d(x^s, \varepsilon^s)} \right],$$

где  $d(x, x^s, \varepsilon^s) = f^T(x)D(\varepsilon^s)f(x)$ . ■

Формулы (3.7), (3.8) позволяют избежать обращения информационных матриц  $M(\varepsilon^s)$ , за исключением нулевой итерации.

Для полного описания оптимального плана нужна его дисперсионная (или информационная) матрица и непосредственно сам план:

$$\varepsilon^* = \begin{Bmatrix} x_1^* & \dots & x_n^* \\ p_1^* & \dots & p_n^* \end{Bmatrix}.$$

При численном построении  $\varepsilon^*$  получим, вообще говоря, план  $\varepsilon^s$ , который может быть сколь угодно близок к  $\varepsilon^*$ , но все же отличается от него. Это отличие будет заключаться в следующем:

- 1)  $\|x_i^* - x_i^s\|^2 \leq \delta_i, i = 1, \dots, n$ , где  $\delta_i$  – малые положительные числа;
- 2)  $|p_i^* - p_i^s| \leq \pi_i$ ,  $\pi_i$  – малые положительные числа;
- 3) План  $\varepsilon^s$  по сравнению с планом  $\varepsilon^*$  имеет «посторонние» точки  $x_{n+1}^s, x_{n+2}^s, \dots, x_{n+j}^s$  с малыми весами  $\gamma \geq p_{n+1}^s \geq p_{n+2}^s \geq \dots \geq p_{n+j}^s$ ;
- 4) Вместо одной точки  $x_i^s$  близкой к  $x_i^*$ , план  $\varepsilon^s$  имеет набор точек  $x_{i1}^s, \dots, x_{il}^s$ , каждая из которых близка к  $x_i^*$ :

$$\|x_i^* - x_{ik}^s\|^2 \leq \delta_i, k = 1, \dots, l \text{ и их суммарный вес близок к } p_i^*: \left| \sum_{k=1}^l p_{ik}^s - p_i^* \right| \leq \pi_i.$$

Т.к. планы с большим числом точек нежелательны, то в алгоритмах необходимо предусмотреть периодическую «очистку» текущего плана  $\varepsilon^s$ :

- 1) точки с малыми весами, не тяготеющие ни к одной из групп (см. предыдущий пункт 4) выбрасываются;
- 2) точки, тяготеющие к одной из групп, объединяются по правилу центра масс

$$x_i^s = \frac{1}{p_i^s} \sum_{k=1}^l x_{ik}^s p_{ik}^s, \quad p_i^s = \sum_{k=1}^l p_{ik}^s.$$

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

Рассмотрим теперь методы, основанные на прямом решении задачи

$$\varepsilon^* = \underset{\varepsilon}{\operatorname{Arg\,max}} \psi[M(\varepsilon)] \quad (3.9)$$

путем выбора оптимального плана в пространстве координат точек и весов плана. Основное внимание уделим градиентным методам поиска. Удобнее решение задачи (3.9) рассматривать пока как некоторую процедуру, в которой в качестве промежуточных шагов включен блок

оптимизации по всем весам точек плана и блок оптимизации по всем координатам точек плана. Рассмотрим эти блоки в отдельности.

### **Блоки прямого алгоритма.**

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

Рассмотрим алгоритм решения следующей задачи:

$$p^* = \underset{p}{\operatorname{Arg\,max}} \psi[M(\varepsilon)] \quad (3.10)$$

$$p_{i \geq 0, i=1, \dots, n} \quad (3.11)$$

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1. \quad (3.12)$$

Ограничения (3.11), (3.12) 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 (3.11), (3.12).

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

Справедливы следующие условия оптимальности:

Точка  $p^* = (p_1^*, \dots, p_n^*)^T$  тогда и только тогда является решением задачи (3.10)–(3.12), когда (условие необходимости)

$$(G_p \nabla_p \psi[M(\varepsilon)])_j = 0, \text{ для } j=q+1, \dots, n, \text{ либо } p_i=0, i=1, \dots, q \quad (3.13)$$

и (условие достаточности)

$$(u)_j = \left( (A_q A_q^T)^{-1} A_q \nabla_p \psi[M(\varepsilon)] \right)_j \geq 0, j=1, \dots, q+1, \quad (3.14)$$

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 (3.11) записываются в виде  $-p_i \leq 0, i=1, \dots, n$ ).

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

Можно получить следующие выражения:

$$\begin{aligned} (G_p \nabla_p \psi[M(\varepsilon)])_j &= \frac{\partial \psi[M(\varepsilon)]}{\partial p_j} - \sum_{i=q+1}^n \frac{\partial \psi[M(\varepsilon)]}{\partial p_i} \cdot \frac{1}{n-q} \\ &= \varphi(x_j, \varepsilon) - \sum_{i=q+1}^n \varphi(x_i, \varepsilon) \cdot \frac{1}{n-q}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\left. \begin{aligned} u_j &= \sum_{i=q+1}^n \varphi(x_i, \varepsilon) \cdot \frac{1}{n-q} - \varphi(x_j, \varepsilon), j = 1, \dots, q \\ u_{q+1} &= \sum_{i=q+1}^n \varphi(x_i, \varepsilon) \cdot \frac{1}{n-q} \end{aligned} \right\} \quad (3.16)$$

Для оптимальности весов  $p^*$  должно выполняться (3.13). Как следует из (3.15) 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 (3.14), 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. (3.16)).

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  $\nabla_p \psi[M(\varepsilon^s)] = (\varphi(x_i, \varepsilon^s))_{i=1}^n$ ;
3. Проверяем условия

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

Если они выполняются, то  $p^s$  есть решение;

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

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

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

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

$$\nabla_x \psi[M(\varepsilon)] = \left( \text{tr} \frac{\partial \psi[M(\varepsilon)]}{\partial M(\varepsilon)} f(x_i) \frac{\partial f(x_i)}{\partial x_j} \right)_{\substack{i=1, \dots, n \\ j=1, \dots, k}}, \quad (3.17)$$

где  $\frac{\partial f(x_i)}{\partial x_j}$  – частная производная вектора функции  $f(x)$  в точке  $x=x_i$  по  $j$ -й переменной. Вектор-градиент в (3.17) можно записать также в виде

$$\nabla_x \psi[M(\varepsilon)] = \left( \frac{\partial \varphi(x_i, \varepsilon)}{\partial x_j} \right)_{j=1, \dots, k}^{i=1, \dots, n}. \quad (3.18)$$

Итерационная схема градиентного спуска (подъема) может быть следующей:

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

Градиентный поиск  $\max_{x \in X} \varphi(x, \varepsilon)$ .

При проверке достаточных условий оптимальности приходится решать задачу поиска глобального экстремума функции  $\varphi(x, \varepsilon)$ . Для градиентных методов можно вычислить вектор-градиент:

$$\nabla_x \varphi(x, \varepsilon) = \left( \frac{\partial \varphi(x, \varepsilon)}{\partial x_j} \right)_{j=2, \dots, k} = \left( f^T(x) \frac{\partial \psi[M(\varepsilon)]}{\partial M(\varepsilon)} \frac{df(x)}{dx_j} \right)_{j=1, \dots, k}.$$

Поскольку градиентные методы приводят лишь к локальному экстремуму, то эту задачу решают несколько раз из различных начальных приближений. После чего получают оценку глобального экстремума в виде лучшего результата.

Весь алгоритм построения  $\psi$ -оптимального плана (назовем его прямым-двойственным) будет состоять из следующих этапов:

1. Формирование начального невырожденного плана  $\varepsilon^s$ ;
2. Градиентный спуск по координатам  $x$  с получением плана  $\bar{\varepsilon}^s$ ;
3. Градиентный спуск по координатам  $p$  с получением плана  $\bar{\bar{\varepsilon}}^s$ ;
4. Поиск точек  $x^s$ , доставляющих максимум  $\varphi(x, \bar{\varepsilon}^s)$  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.

#### 4. Дискретные оптимальные планы

Под дискретными оптимальными планами понимаются планы, оптимальные при заданном  $N$ . Они имеют следующий вид

$$\varepsilon_N^* = \left\{ \begin{array}{ccc} x_1^* & \dots & x_N^* \\ 1/N & \dots & 1/N \end{array} \right\}.$$

В общем случае в плане могут быть точки с одинаковыми координатами, тогда дискретный план обозначают как

$$\varepsilon^* = \left\{ \begin{array}{ccc} x_1^* & \dots & x_n^* \\ p_1^* & \dots & p_n^* \end{array} \right\}, \quad \sum_{i=1}^n p_i = 1, \quad p_i = r_i/N, \quad i = \overline{1, n}.$$

Непрерывный оптимальный план имеет в большей степени теоретическое значение – он показывает те предельные характеристики оптимальности, которые могут быть достигнуты при построении дискретных оптимальных планов. Наконец, если соответствующим образом округлять веса непрерывного плана, то всегда из любого непрерывного плана можно получить близкий по какой-либо мере к нему дискретный план.

Проследим связь между непрерывным и дискретным планами. Предварительно введем линейный функционал, позволяющий сравнивать два нормированных плана.

$$\varepsilon_1 \succ \varepsilon_2,$$

если  $L[M(\varepsilon_1)] > L[M(\varepsilon_2)]$ ,

где  $L$  – функционал, удовлетворяющий условиям

$$L(A+B) \geq L(A), \quad L(kA) = kL(A), \quad A \text{ и } B \text{ – п.п.о. матрицы.}$$

Пусть  $\varepsilon^* = \text{Arg}(\max_{\varepsilon} L[M(\varepsilon)])$ ,  $\varepsilon_N^* = \text{Arg}(\max_{\varepsilon_N} L[M(\varepsilon_N)])$ .

Т.к. максимум во втором случае ищется на более узком множестве планов, то, очевидно, что  $\max_{\varepsilon_N} L[M(\varepsilon_N)] \leq \max_{\varepsilon} L[M(\varepsilon)]$ .

**Теорема 4.1.** Справедливо неравенство

$$\frac{N-n}{N} L[M(\varepsilon^*)] < L[M(\varepsilon_N^*)] < L[M(\varepsilon^*)],$$

где  $n$  – число точек в спектре плана,  $N$  – общее число наблюдений,  $\varepsilon^*$  – оптимальная в классе непрерывных планов (имеет спектр из  $n$  точек).

**Доказательство:** Правое неравенство – это только что записанное до этого неравенство.

Обозначим  $[C]^+$  наименьшее целое, удовлетворяющее неравенству  $[C]^+ \geq C$ .

Тогда за счет округления в большую сторону, справедливо  $\sum_{i=1}^n [Np_i^*]^+ \leq N + n$ , где  $n$  прибавляется за счет округления в  $n$  точках.

Далее, пусть  $N_1 > N_2$ .  $\varepsilon_{N_1}^*$  – план, в котором  $N_2$  измерений проводятся по плану  $\varepsilon_{N_2}^*$ , а  $(N_1 - N_2)$  – по любому плану  $\varepsilon_{N_1-N_2}$ . Тогда, согласно свойствам функционала  $L$ , имеем

$$L[N_2 M(\varepsilon_{N_2}^*) + (N_1 - N_2) M(\varepsilon_{N_1-N_2})] \geq L[N_2 M(\varepsilon_{N_2}^*)],$$

$$\text{а так как } N_2 M(\varepsilon_{N_2}^*) + (N_1 - N_2) M(\varepsilon_{N_1-N_2}) = N_1 M(\varepsilon_{N_1}^*),$$

$$\text{то } L[N_1 M(\varepsilon_{N_1}^*)] \geq L[N_2 M(\varepsilon_{N_2}^*)].$$

$$\text{Имеем далее } (N + n) L[M(\varepsilon_{N+n}^*)] \geq L\left[\sum_{i=1}^n [NP_i^*]^+ M(x_i^*)\right] \geq L\left[\sum_{i=1}^n Np_i^* M(x_i^*)\right] = NL[M(\varepsilon^*)].$$

$$L[M(\varepsilon_{N+n}^*)] \geq \frac{N}{(N + n)} L[M(\varepsilon^*)].$$

Переобозначая  $\tilde{N} = N + n$ ,  $N = \tilde{N} - n$ , получим доказательство Теоремы.

Задача построения дискретных планов – значительно более сложная, чем задача построения непрерывного плана. Для каждого  $N$  необходимо, вообще говоря, строить свой  $\varepsilon_N^*$ .

В тех случаях, когда известен непрерывный план, дискретный план можно получить, если воспользоваться процедурой округления.

Процедура округления. Строится план  $\tilde{\varepsilon}_N$  с весами  $P_i = [(N - n)p_i]^+$ ,  $i = \overline{1, n}$ ,  $N \geq n$ ,  $[C]^+$  – наименьшее целое, удовлетворяющее неравенству  $[C]^+ \geq C$ .

Для этого плана  $\sum_{i=1}^n [(N - n)p_i^*]^+ \leq N$ . Оставшиеся  $N - \sum_{i=1}^n [(N - n)p_i^*]^+$  наблюдения можно разместить между точками с большим весом любых других точек  $x \in \mathcal{X}$ .

Можно показать, что для полученного таким образом плана  $\tilde{\varepsilon}_N$  справедливо неравенство

$$L[M(\varepsilon_N^*)] - L[M(\tilde{\varepsilon}_N)] \leq \frac{n}{N} L[M(\varepsilon^*)].$$

**Пример:**

$$\varepsilon^* = \begin{Bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ 0.20 & 0.5 & 0.3 \end{Bmatrix}, \quad N = 10, \quad \varepsilon_{10} = \begin{Bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ 2/10 & 5/10 & 3/10 \end{Bmatrix},$$

$$N = 6, \quad \varepsilon_6 = \begin{Bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ 1/6 & 3/6 & 2/6 \end{Bmatrix}, \quad N = 7, \quad \varepsilon_7 = \begin{Bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ 1/7 & 4/7 & 2/7 \end{Bmatrix}.$$

Рассмотрим, опираясь на теорему 4.1, теперь связь непрерывного и дискретного планов для конкретных критериев оптимальности.

### **D – критерий**

Согласно определению

$$\varepsilon_1 \succ \varepsilon_2 \Rightarrow |M(\varepsilon_1)| > |M(\varepsilon_2)|.$$

В таком виде данный функционал не удовлетворяет свойствам функционала  $L$ . Заменяем его на  $|M(\varepsilon_1)|^{1/m} > |M(\varepsilon_2)|^{1/m}$ , где  $m$  – число параметров в модели. Для того, чтобы выполнялось второе условие линейности  $|KM(\varepsilon)|^{1/m} = K |M(\varepsilon)|^{1/m}$ .

На основании Теоремы 4.1:

$$\frac{N-n}{N} |M(\varepsilon^*)|^{1/m} \leq |M(\varepsilon_N^*)|^{1/m} \leq |M(\varepsilon^*)|^{1/m} \text{ или}$$

$$\left(\frac{N-n}{N}\right)^m |M(\varepsilon^*)| \leq |M(\varepsilon_N^*)| \leq |M(\varepsilon^*)|.$$

Известно также более точное неравенство:

$$\frac{|M(\varepsilon^*)|}{|M(\varepsilon_N^*)|} \leq N^m / N(N-1) \cdots (N+1-m).$$

### **G – критерий**

Согласно определению

$$\varepsilon_1 \succ \varepsilon_2 \Rightarrow \max_{x \in \mathcal{X}} d(x, \varepsilon_1) < \max_{x \in \mathcal{X}} d(x, \varepsilon_2).$$

Заменяем на эквивалентное неравенство:

$$\min_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d^{-1}(\underline{x}, \varepsilon_1) > \min_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d^{-1}(\underline{x}, \varepsilon_2).$$

Функционал  $d^{-1}(\underline{x}, \varepsilon)$  будет обладать свойствами функционала  $L$ . Действительно, известно, что если  $A, B$  – п.п.о, то  $(A+B)^{-1} \leq A^{-1}$ , тогда

$$\min_{\underline{x} \in \mathcal{X}} [f^T(\underline{x})(A+B)^{-1} f(\underline{x})]^{-1} \geq \min_{\underline{x} \in \mathcal{X}} [f^T(\underline{x})A^{-1} f(\underline{x})]^{-1}.$$

Второе свойство также легко можно установить, поскольку:

$$f^T(\underline{x})(kA)^{-1} f(\underline{x}) = k^{-1} f^T(\underline{x})A^{-1} f(\underline{x}),$$

$$\text{то } \min_{\underline{x} \in \mathcal{X}} [f^T(\underline{x})(kA)^{-1} f(\underline{x})]^{-1} \geq \min_{\underline{x} \in \mathcal{X}} [f^T(\underline{x})A^{-1} f(\underline{x})]^{-1} \cdot k.$$

Из Теоремы 4.1:

$$\frac{N-n}{N} \min_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d^{-1}(\underline{x}, \varepsilon^*) \leq \min_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d^{-1}(\underline{x}, \varepsilon_N) \leq \min_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d^{-1}(\underline{x}, \varepsilon^*)$$

$$\text{или } \max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d(\underline{x}, \varepsilon^*) \leq \max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d(\underline{x}, \varepsilon_N) \leq \frac{N}{N-n} \max_{\underline{x} \in \mathcal{X}} d(\underline{x}, \varepsilon^*).$$

Эти неравенства дают некоторую возможность произвести оценку качества того или иного дискретного оптимального плана, если известен непрерывный оптимальный план.

## Алгоритмы построения дискретных оптимальных планов

Ясно, что изложенная выше эвристическая процедура получения дискретного плана путем округления непрерывного плана не есть точное решение задачи

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

Особенно неудовлетворительные результаты получаются при малом  $N$ , а при  $N < n$  вообще не возможно применить процедуру округления.

Все алгоритмы построения дискретных  $\Psi$  – оптимальных планов можно разбить на три группы:

1. Алгоритмы, основанные на методах нелинейного программирования.
2. Алгоритмы замены точек в спектре плана.
3. Алгоритмы последовательного достраивания плана.

В первую группу методов можно включить методы нулевого порядка и градиентные методы. Примером может служить процедура градиентного спуска по координатам точек плана, рассмотренные выше при изложении комбинированного алгоритма построения непрерывных  $\Psi$  – оптимальных планов. При ее применении необходимо веса точек плана закрепить равными  $1/N$ . На алгоритмах 1-й группы в дальнейшем мы не будем останавливаться.

Алгоритмы 2-й и 3-й групп базируются на некоторых свойствах решаемой задачи. Рассмотрим их более подробно.

### Последовательный алгоритм замены построения дискретных

#### D – оптимальных планов. (Федоров В.В.)

Пусть имеется план  $\varepsilon_N$ . Заменяем некоторую точку  $x_j \in \varepsilon_N$  на точку  $x \in X$ . Тогда изменения в информационной матрице можно записать как

$$\begin{aligned} M(\tilde{\varepsilon}_N) &= M(\varepsilon_N) - \frac{1}{N} f(x_j) f^T(x_j) + \frac{1}{N} f(x) f^T(x) = \\ &= M(\varepsilon_N) + FF^T, \end{aligned}$$

где  $F = \left\| \sqrt{1/N} \cdot i \cdot f(x_j), \sqrt{1/N} f(x) \right\|$ ,  $i = \sqrt{-1}$ .

Изменения в величине определителя информационной матрицы можно записать как

$$\begin{aligned} |M(\tilde{\varepsilon}_N)| &= |M(\varepsilon_N)| \cdot |I + F^T M^{-1}(\varepsilon_N) F|, \\ I + F^T M^{-1}(\varepsilon_N) F &= \begin{bmatrix} 1 - \frac{1}{N} d(x_j, \varepsilon_N) & \frac{1}{N} id(x, x_j, \varepsilon) \\ \frac{1}{N} id(x, x_j, \varepsilon) & 1 + \frac{1}{N} d(x, \varepsilon_N) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

И окончательно

$$|M(\tilde{\varepsilon}_N)| = |M(\varepsilon_N)| \cdot [1 + \Delta(x_j, x)],$$

где

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

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



Прирост определителя будет максимальным, если пара точек  $x_j$  и  $x$  будут соответствовать  $\max_j \max_{x \in \mathcal{X}} \Delta(x_j, x)$ .

В окончательном виде алгоритм будет состоять в следующем:

1. Построение начального невырожденного плана  $\mathcal{E}_N^S$ .
2. Поиск пары точек  $x_j^S, x^S$ , соответствующей

$$(x_j^S, x^S) = \text{Arg} \max_{x_j \in \mathcal{E}_N^S} \max_{x \in \mathcal{X}} \Delta(x_j, x).$$

3. Если  $\Delta(x_j^S, x^S) < \delta$ , то останов. В противном случае точка  $x_j^S$  заменяется на  $x^S$  и процедура повторяется с пункта 2 с планом  $\mathcal{E}_N^{S+1}$ .

От дополнительной оптимизации по  $x_j \in \mathcal{E}_N^S$  можно отказаться, останавливаясь на первой же удачной паре точек  $(x_j^S, x^S)$ .

#### **Последовательный алгоритм замены построения дискретных D – оптимальных планов Митчелла**

Пусть имеется план  $\mathcal{E}_N$ . Добавим к плану  $\mathcal{E}_N$  еще одну точку (обозначим ее  $x_{N+1}$ ). Тогда

$$|M(\mathcal{E}_{N+1})| = \left( \frac{N}{N+1} \right)^m |M(\mathcal{E}_N)| \cdot \left[ 1 + \frac{1}{N} d(x_{N+1}, \mathcal{E}_N) \right].$$

Это следует из выражения (3.2) при  $\alpha = 1/(N+1)$ .

Максимальное приращение определителя будет при  $x_{N+1}$ , соответствующей  $\max_{x \in \mathcal{X}} d(x, \mathcal{E}_N)$ . Если же теперь из плана  $\mathcal{E}_{N+1}$  исключить какую-то точку  $x_j$ , то определитель изменится следующим образом:

$$|M(\tilde{\mathcal{E}}_N)| = \left( \frac{N+1}{N} \right)^m |M(\mathcal{E}_{N+1})| \cdot \left[ 1 - \frac{1}{N+1} d(x_j, \mathcal{E}_{N+1}) \right].$$

Это следует из выражения (3.2) при  $\alpha = -1/N$ .

Минимальное уменьшение определителя будет достигаться, если  $x_j$  будет соответствовать  $\min_{x_j \in \mathcal{E}_{N+1}} d(x_j, \mathcal{E}_{N+1})$ . Поскольку при добавлении точки в план мы максимально увеличивали определитель информационной матрицы результирующего плана, а при удалении минимизировали его уменьшение, то ясно, что  $|M(\tilde{\mathcal{E}}_N)| \geq |M(\mathcal{E}_N)|$ . Равенство будет, например, тогда, когда исключается та точка, которая была включена на предыдущем шаге.

1. Построение начального невырожденного плана  $\mathcal{E}_N^S$ .
2. Поиск точки  $x^S$ :  $x^S = \text{Arg} \max_{x \in \mathcal{X}} d(x, \mathcal{E}_N^S)$ .
3. Добавление точки  $x^S$  в план  $\mathcal{E}_N^S$  с получением промежуточного  $N+1$ -точечного плана  $\mathcal{E}_{N+1}^S$ .

4. Поиск среди точек плана  $\varepsilon_{N+1}^S$  точки  $x_j^S$ :

$$x_j^S = \underset{x_j \in \varepsilon_{N+1}^S}{\text{Arg min}} d(x_j, \varepsilon_{N+1}^S)$$

и исключение ее из плана  $\varepsilon_{N+1}^S$  с получением плана  $\tilde{\varepsilon}_N^S$ .

Повторять с пункта 2, пока не получится что  $x_j^S = x^S$ .

### Градиентный алгоритм замены

Пусть область действия факторов представляет собой дискретное множество точек  $\tilde{X}$ ,  $\text{card}(\tilde{X}) = n$ , где  $\text{card}(\tilde{X})$  – число элементов в множестве  $\tilde{X}$ . Сформулируем задачу построения  $\Psi$  – оптимального плана  $\varepsilon_N^*$  с  $N$  наблюдениями:

$$\varepsilon_N^* = \underset{\varepsilon_N}{\text{Arg max}} \Psi[M(\varepsilon_N)], \quad (4.1)$$

Поскольку область планирования представляет собой дискретное множество точек, то задачу (4.1) можно заменить на эквивалентную:

$$\varepsilon_N^* = \underset{p}{\text{Arg max}} \Psi[M(\varepsilon_N)], \quad (4.2)$$

с ограничениями  $\sum_{i=1}^n p_i = 1$ , где  $p_i$ ,  $i = \overline{1, n}$  могут принимать только два значения 0 и  $1/N$ .

Вектор-градиент функционала  $\Psi[M(\varepsilon_N)]$  по весам точек плана будет иметь вид

$$\nabla \Psi[M(\varepsilon_N)] = \left\| \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon_N)]}{\partial p_i} \right\|_{i=1}^n = \left\| \text{tr} \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon_N)]}{\partial M(\varepsilon_N)} \right\|_{i=1}^n = \left\| \varphi(x_i, \varepsilon_N) \right\|_{i=1}^n.$$

Спроектируем вектор-градиент на гиперплоскость, заданную ограничением  $\sum_{i=1}^n p_i = 1$ :

$$P_g \nabla \Psi[M(\varepsilon_N)] = \left\| \varphi(x_j, \varepsilon_N) - \sum_{i=1}^n \varphi(x_i, \varepsilon_N) / n \right\|_{j=1}^n. \quad (4.3)$$

Если не все компоненты в (4.3) равны нулю, что может быть только для неоптимального плана  $\varepsilon_N$ , то среди ненулевых обязательно должна присутствовать хотя бы одна пара положительной и отрицательной компонент.

Пусть задан равномерный начальный план  $\varepsilon_N^S$  с весами  $p_i = 1/N$ ,  $i = \overline{1, N}$  в некоторых точках  $x_i^S \in \bar{X}$ ,  $i = 1, \dots, N$ ,  $\bar{X} \subset \tilde{X}$  и нулевыми весами в точках не принадлежащих  $\bar{X}$ .

Очевидно, что для  $\varepsilon_N^S$  будет выполняться ограничение  $\sum_{i=1}^n p_i = 1$ . Зададимся целью, сохраняя равномерность весов в плане  $\varepsilon_N^S$  (так же как и их неотрицательность) провести оптимизацию по весам по направлению проекции градиента (4.3):

$$p^{s+1} = p^s + \alpha P_g \nabla \Psi[M(\varepsilon_N^s)]. \quad (4.4)$$

Равномерность плана  $\mathcal{E}_N^{s+1}$  как и все ограничения, накладываемые на координаты будут сохранены, если мы какую-то точку исключим из плана, а новую точку включим. Первая точка  $x_{j^*}$  кандидат для включения в план  $\mathcal{E}_N^{s+1}$  в соответствии с (4.4) будет та, для которой выполняется

$$\varphi(x_{j^*}, \mathcal{E}_N^s) = \max_j \varphi(x_j, \mathcal{E}_N^s), j = 1, \dots, n.$$

Т.е. это та точка, для которой соответствующая компонента проекции вектора градиента имеет максимальное положительное значение.

Первая точка  $x_{j^{**}}$  кандидат на исключение из плана в соответствии с (4.3) будет та, для которой выполняется

$$\varphi(x_{j^{**}}, \mathcal{E}_N^s) = \min_j \varphi(x_j, \mathcal{E}_N^s), x_j \in \bar{X}.$$

Операцию включения точки  $x_{j^*}$  в план и одновременного исключения точки  $x_{j^{**}}$  из плана назовем операцией замены точек. Величина шага в (4.4), необходимая для замены точек, определяется как  $\alpha = 1/(N \cdot \min_{j^*, j^{**}} \|Pg \nabla \Psi[M(\mathcal{E}_N^s)]\|_{j^*, j^{**}})$ , но вычислять  $\alpha$  нам необязательно.

Далее, очевидно, делая шаг большей длины, мы можем заменить более чем одну точку в плане. Окончательно алгоритм представим следующим образом:

1. Формирование начального плана  $\mathcal{E}_N^s$ .

2. Вычисление матрицы  $\partial \Psi[M(\mathcal{E}_N)] / \partial M(\mathcal{E}_N)$  для плана  $\mathcal{E}_N^s$ , и формирование планов  $\mathcal{E}_{N,i}^s, \mathcal{E}_N^s, i = 0$ .

3. Поиск на множестве  $\tilde{X}$  точки  $x_{j^*}$ :

$$x_{j^*} = \text{Arg max}_{x \in \tilde{X}} \varphi(x, \mathcal{E}_N^s).$$

4. Поиск среди точек плана точки  $x_{j^{**}}$ :

$$x_{j^{**}} = \text{Arg min}_{x_j \in \mathcal{E}_N^s} \varphi(x_j, \mathcal{E}_N^s).$$

5. Получение плана  $\mathcal{E}_{N,i+1}^s$  заменой точки  $x_{j^{**}}$  на точку  $x_{j^*}$ :

а) если  $\Psi[M(\mathcal{E}_{N,i+1}^s)] > \Psi[M(\mathcal{E}_{N,i}^s)]$ , то  $i = i + 1$  и переход к этапу 3, при этом точки  $x_{j^{**}}$  и  $x_{j^*}$  исключаются из рассмотрения;

б) если  $\Psi[M(\mathcal{E}_{N,i+1}^s)] \leq \Psi[M(\mathcal{E}_{N,i}^s)]$  и  $i = 0$ , то происходит останов, иначе –  $s = s + 1$  и переход к этапу 2.

Предложенный алгоритм позволяет на каждом шаге (в благоприятном случае) производить по несколько замен точек одновременно, что значительно повышает его быстродействие.

**Градиентный алгоритм замены построения дискретных оптимальных планов на непрерывном множестве точек.** Рассмотренный выше алгоритм взят за основу при построении алгоритма поиска дискретных оптимальных планов на произвольном множестве  $\tilde{X}$ .

Этапы алгоритма.

1. Формирование начального плана  $\varepsilon_N^s$ .
2. Формирование множества  $\tilde{X}_k$  точек кандидатов:

$$\tilde{X}_k = \left\{ x \in \tilde{X} \mid x = \operatorname{Arg} \max_{x \in \tilde{X}} \varphi(x, \varepsilon_N^s) \right\}.$$

3. Вычисление оптимального плана по предыдущему алгоритму на множестве точек кандидатов  $\tilde{X}_k$  и плана  $\varepsilon_N^s$ .
4. При улучшении значения функционала после этапа 3 выполняется переход к этапу 2 с новым планом  $\varepsilon_N^{s+1}$ , в противном случае – останов.

Следует отметить универсальность предлагаемых алгоритмов с точки зрения возможности строить планы по различным критериям оптимальности и на различных по сложности областях планирования  $\tilde{X}$ .

При разработке градиентного алгоритма замены построения дискретных оптимальных планов предполагалось, что он должен обладать лучшими свойствами алгоритмов прямых и последовательных типов, достаточно хорошей сходимостью (по времени решения) и хорошим качеством получаемых планов. Для проверки предположений было проведено сравнение его с другими известными.

*Сравнение алгоритмов построения оптимальных планов на фиксированном множестве точек.* С градиентным алгоритмом замены построения дискретных оптимальных планов на фиксированном множестве точек сравнивались алгоритмы Федорова и Митчелла. В качестве функционала бал выбран критерий  $D$ - оптимальности, поскольку алгоритм Митчелла рассчитан именно на него. Предварительные расчеты показали, что алгоритм Федорова мало пригоден для выбранной области планирования, так как он требует в 3-4 раза больше времени, чем два других алгоритма. Объясняется это тем, что для поиска пары заменяемых точек в алгоритме последовательного типа требуются большие затраты в случае одинакового эффекта от каждой произведенной замены точек. Результаты алгоритма Митчелла и градиентного алгоритма замены близки, поэтому было проведено более детальное их сравнение. Проведенные исследования подтвердили предположение об эффективности решения задач градиентным алгоритмом замены, особенно при больших размерностях решаемых задач, где временные затраты на решение в 1,5–2 раза меньше, чем по алгоритму Митчелла. Необходимо отметить также, что градиентный алгоритм замены в отличие от алгоритма Митчелла применим для различных критериев оптимальности.

Проведенные исследования показали одновременно и существование проблемы преждевременного останова алгоритма градиентной замены в ряде тестовых просчетах. Объясняется это тем, что движение в направлении градиента (4.4) осуществляется с поправкой на то, что веса точек могут принимать только одно из двух возможных значений: 0 или  $1/N$ . По существу мы имеем дело с задачей целочисленного нелинейного программирования. Дискретность весов особенно сильно может сказываться на сходимости алгоритма при относительно малом числе точек в плане. Для устранения этих недостатков алгоритма предлагается его модификация.

### Комби-градиентный алгоритм замены. Основные блоки этого алгоритма.

1. Формирование начального плана  $\varepsilon_N^s$ .

2. Вычисление матрицы  $\partial\Psi[M(\varepsilon_N)]/\partial M(\varepsilon_N)$  для плана  $\varepsilon_N^s$ , и формирование планов  $\varepsilon_{N,i}^s$ ,  $\varepsilon_N^s$ ,  $i = 0$ .

3. Формирование из точек множества  $\tilde{X}$  упорядоченного по возрастанию значения функции  $\varphi(x, \varepsilon_N^s)$  множества

$$\tilde{X}_k = \left\{ x \in \tilde{X} \mid x = \underset{x \in \tilde{X}}{\text{Arg max}} \varphi(x, \varepsilon_N^s) \right\}.$$

Выбор в этом множестве первой точки. Обозначим ее  $x_{j^*}$ .

4. Формирование из точек плана упорядоченного по убыванию значения функции  $\varphi(x, \varepsilon_N^s)$  множества  $\tilde{\tilde{X}}_k = \left\{ x \in \varepsilon_N^s \mid x = \underset{x_j \in \varepsilon_N^s}{\text{Arg min}} \varphi(x_j, \varepsilon_N^s) \right\}$ .

Выбор в этом множестве первой точки. Обозначим ее  $x_{j^{**}}$ .

5. Получение плана  $\varepsilon_{N,i+1}^s$  заменой точки  $x_{j^{**}}$  на точку  $x_{j^*}$ : а) если

$\Psi[M(\varepsilon_{N,i+1}^s)] > \Psi[M(\varepsilon_{N,i}^s)]$ , то  $i = i + 1$  и переход к этапу 3, при этом точки  $x_{j^{**}}$  и  $x_{j^*}$  ис-

ключаются из рассмотрения, что обеспечивает выбор очередных точек в множествах  $\tilde{X}$  и

$\tilde{\tilde{X}}$ ; б) если  $\Psi[M(\varepsilon_{N,i+1}^s)] \leq \Psi[M(\varepsilon_{N,i}^s)]$  и  $i = 0$ , то осуществляется полный перебор возможных замен точек множества  $\tilde{\tilde{X}}$  на точки множества  $\tilde{X}$ . Если в результате перебора не получена ни одна удачная замена, то происходит останов, иначе –  $s = s + 1$  и переход к этапу 2.

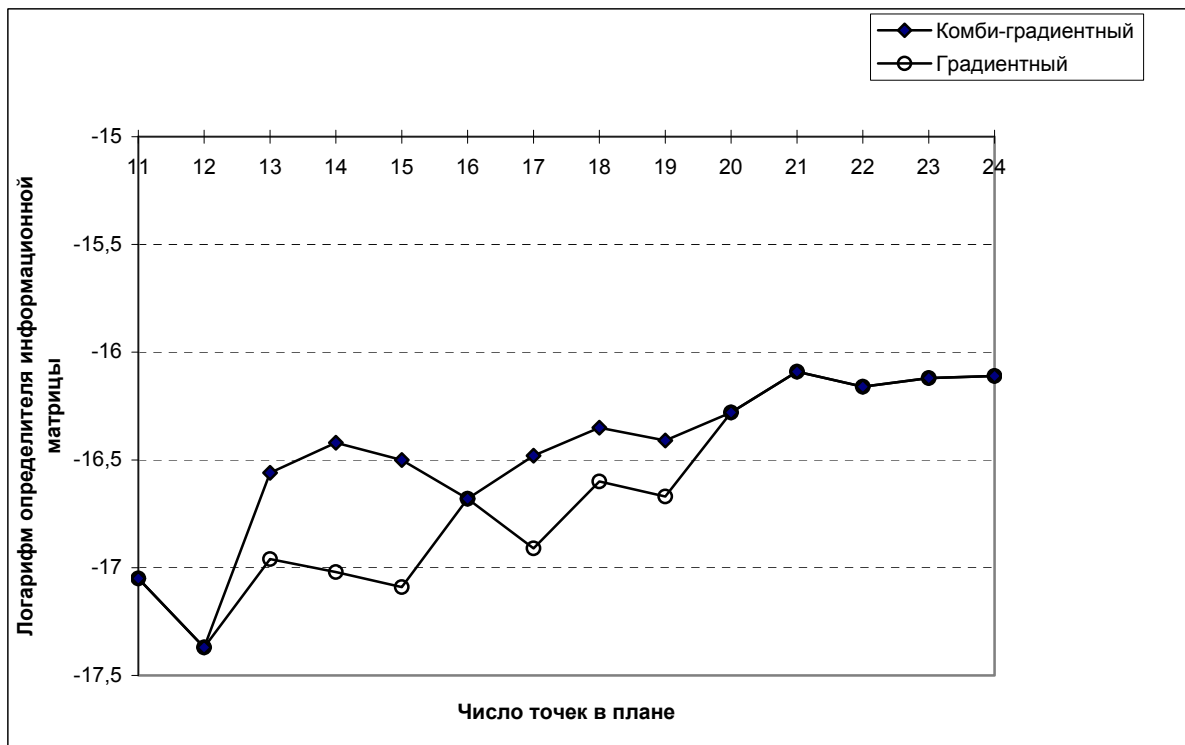


Рис.4.1. Сравнение комби-градиентного и градиентного алгоритмов

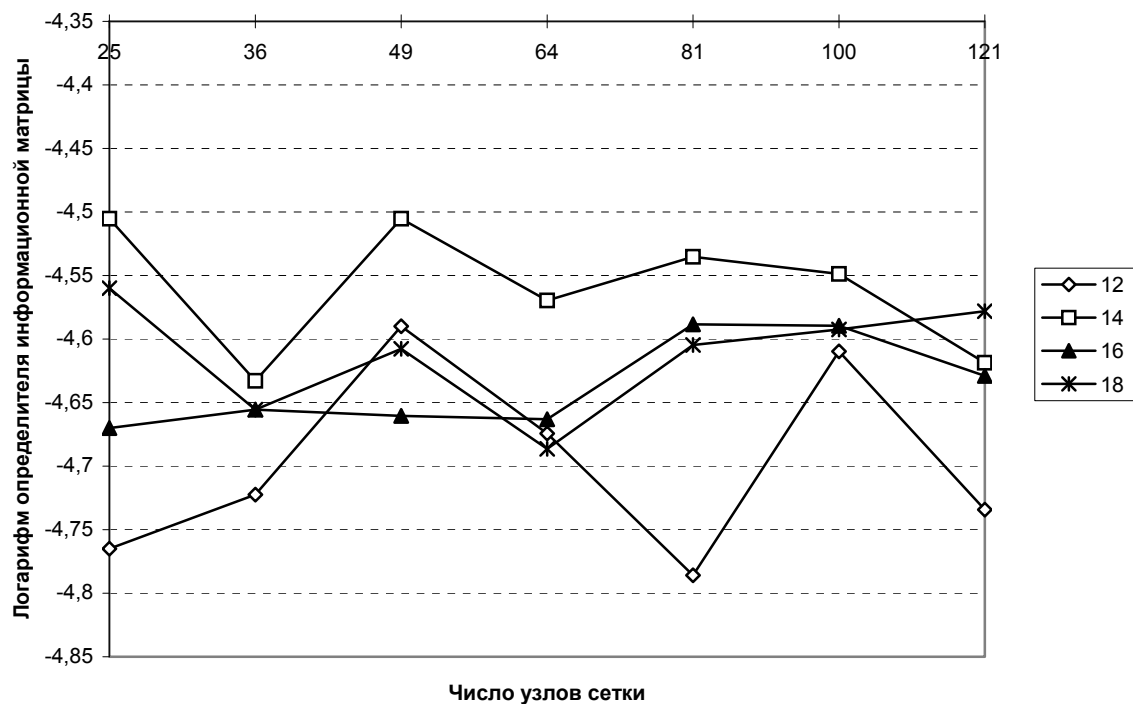


Рис. 4.2. Зависимость логарифма определителя информационной матрицы результирующих  $D$ - оптимальных планов от числа узлов сетки для квадратичной модели, полученных по градиентному алгоритму замены.

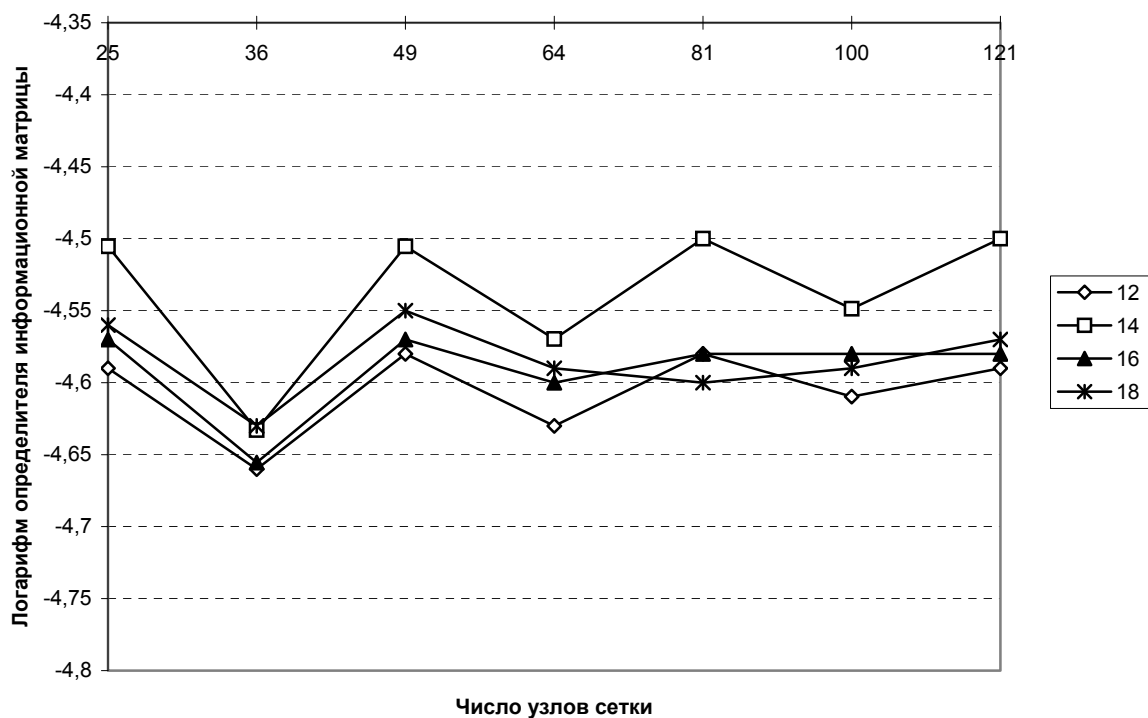


Рис. 4.3. Зависимость логарифма определителя информационной матрицы результирующих  $D$ - оптимальных планов от числа узлов сетки для квадратичной модели, полученных по комби-градиентному алгоритму замены.

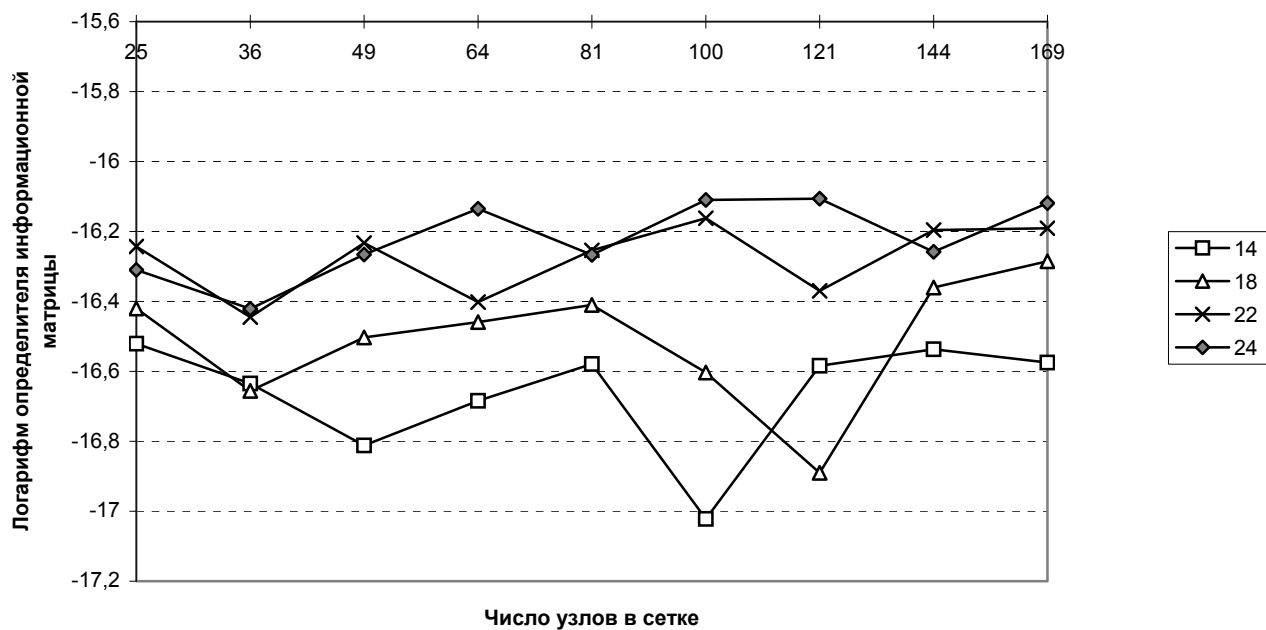


Рис. 4.4. Зависимость логарифма определителя информационной матрицы результирующих  $D$ - оптимальных планов от числа узлов сетки для кубической модели, полученных по градиентному алгоритму замены.

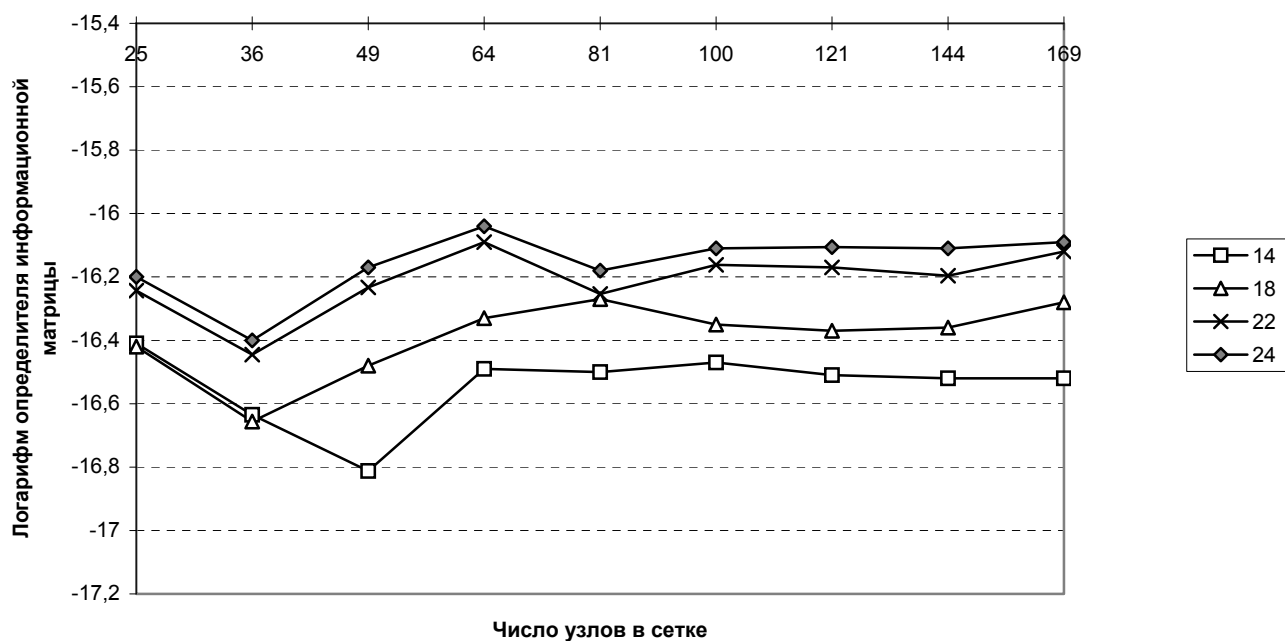


Рис. 4.5. Зависимость логарифма определителя информационной матрицы результирующих  $D$ - оптимальных планов от числа узлов сетки для кубической модели, полученных по комбинированному алгоритму замены.

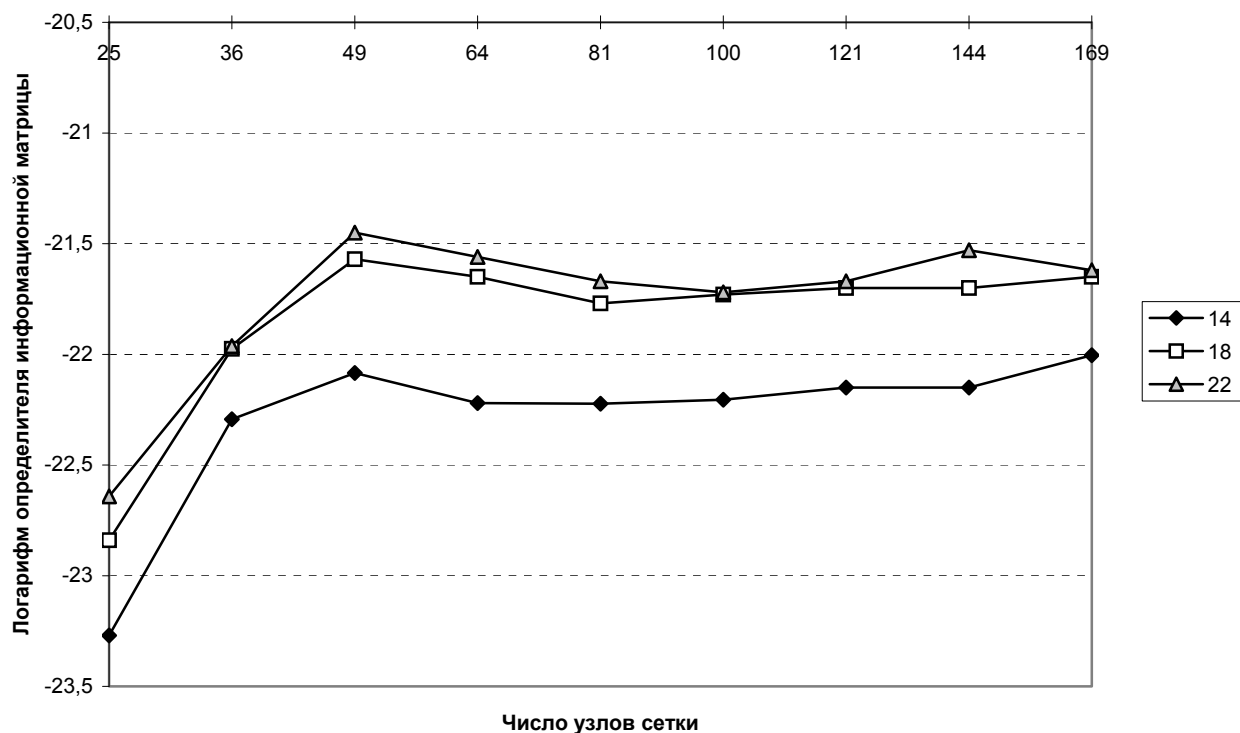


Рис. 4.6. Зависимость логарифма определителя информационной матрицы результирующих  $D$ - оптимальных планов от числа узлов сетки для модели с полиномиальными членами четвертого порядка для комби-градиентного алгоритма замены

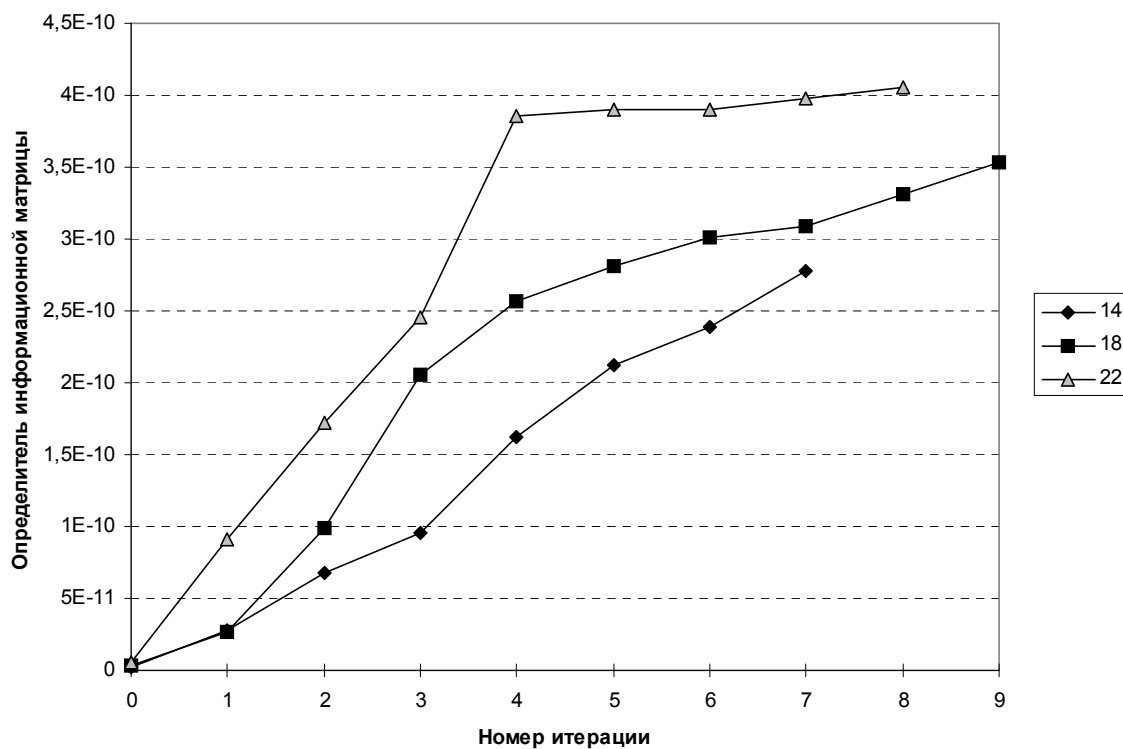


Рис. 4.7. Зависимость определителя информационной матрицы планов по шагам итерационного процесса для модели с полиномиальными членами четвертого порядка



На рис. 4.1 дается сравнение градиентного и комби-градиентного алгоритмов для задачи  $D$ - оптимального планирования для кубической модели от двух переменных на дискретном множестве из 100 точек. Видно, что эффективность комби-градиентного алгоритма значительно выше в диапазоне планов с малым числом точек в плане.

Градиентный (или комби-градиентный) алгоритм замены на дискретном множестве точек может быть использован для построения планов на непрерывном множестве точек, если предварительно эту область подвергнуть дискретизации. Эффективность градиентных алгоритмов замены в этом случае будет зависеть от сетки разбиения. Рассмотрим влияние сетки разбиения на эффективность решения задачи построения  $D$ - оптимальных планов эксперимента для полиномиальных моделей от двух факторов на квадрате со сторонами  $[-1, +1]$ . На рис. 4.2, 4.3 приведены графики зависимостей логарифма определителя информационной матрицы нормированных дискретных планов с 12, 14, 16, 18 точками в плане для квадратичной модели соответственно для градиентного и комби-градиентного алгоритмов замены. На рис. 4.4, 4.5 – аналогичные результаты для кубической модели; на рис. 4.6 – для модели с полиномиальными членами четвертого порядка для комби-градиентного алгоритма.

Анализ рис. 4.2-4.6 позволяет сделать вывод, что решения, получаемые по градиентному алгоритму замены, не обладают выраженной тенденции к сходимости при увеличении числа узлов сетки. Комби-градиентный алгоритм в этом смысле дает значительно лучшие результаты. Таким образом можно рекомендовать к использованию комби-градиентный алгоритм замены для построения дискретных оптимальных планов на дискретизированной области планирования. На рис. 4.7 представлены траектории сходимости комби-градиентного алгоритма замены при построении  $D$ - оптимальных планов для модели с полиномиальными членами четвертого порядка. Каждый итерационный шаг соответствует этапу вычисления нового направления спуска (подъема). Из рис. 4.7 видно, что скорость сходимости итерационного процесса близка к квадратичной.

#### **Алгоритм последовательного достраивания дискретного плана**

Обозначим план эксперимента, состоящий из  $s$  точек через  $\varepsilon_s$ . Будем строить дискретный  $D$  – оптимальный план с равными весами по последовательной схеме, добавляя точки в план, начиная от  $s = 1$  до  $s = N$ .

Информационная матрица “неполного” плана, т.е. при  $s < m$ , как известно, будет вырожденной. Применим регуляризацию по единичной матрице, вводя в рассмотрение матрицу:

$$\tilde{M}(\varepsilon_s) = M(\varepsilon_s) + \gamma I_m, \quad (4.5)$$

где  $\gamma$  – некоторый малый положительный параметр регуляризации. Определитель такой матрицы, выраженный через произведение собственных чисел  $\lambda_i(\tilde{M}(\varepsilon_s))$ , будет определяться следующим выражением:

$$|\tilde{M}(\varepsilon_s)| = |M(\varepsilon_s) + \gamma I_m| = \left\{ \prod_{i=1}^s (\lambda_i + \gamma) \right\} \cdot \gamma^{m-s}, \quad (4.6)$$

где  $\lambda_i$ ,  $i = 1, \dots, s$  – отличные от нуля собственные числа матрицы  $M(\varepsilon_s)$  (в предположении, что они расположены на первых  $s$  позициях),  $s \leq m$ ,  $s = \text{rg} M(\varepsilon_s)$ . Добавим к плану

$\varepsilon_s$  новое  $s+1$  наблюдение. Тогда собственные значения матрицы  $\tilde{M}(\varepsilon_{s+1})$  будут не меньше собственных значений матрицы  $M(\varepsilon_s)$ , т.е.

$$\lambda_i(\varepsilon_{s+1}) = \lambda_i(\varepsilon_s) + \delta_i \rho, \quad i = 1, \dots, s+1, \quad (4.7)$$

где  $\rho$  – собственное значение матрицы однократного наблюдения  $M(x_{s+1}) = f(x_{s+1})f^T(x_{s+1})$ ,  $\rho = f^T(x_{s+1})f(x_{s+1})$ ;  $\sum_{i=1}^{s+1} \delta_i = 1$ ,  $0 \leq \delta_i \leq 1$ .

Определитель матрицы  $M(\varepsilon_{s+1})$  будет определяться следующим выражением:

$$|\tilde{M}(\varepsilon_{s+1})| = \left\{ \prod_{i=1}^s (\lambda_i(\varepsilon_s) + \gamma + \delta_i \rho) \right\} \cdot \delta_{s+1} \rho \gamma^{m-s-1}. \quad (4.8)$$

Величина определителя  $|\tilde{M}(\varepsilon_{s+1})|$  будет зависеть от распределения добавок  $\delta_i$  между собственными числами  $\lambda_i(\varepsilon_s)$ , что в конечном счете зависит от взаимных свойств матриц  $\tilde{M}(\varepsilon_s)$  и  $M(x_{s+1})$ . Представление (4.8) не позволяет конструктивно определить алгоритм, в соответствии с которым следует добавлять очередную точку в план. Запишем определитель матрицы  $\tilde{M}(\varepsilon_{s+1})$  в другом известном виде:

$$|\tilde{M}(\varepsilon_s) + f(x_{s+1})f^T(x_{s+1})| = \left( \frac{s}{s+1} \right)^m \left[ 1 + \frac{1}{s} f^T(x_{s+1}) \tilde{M}^{-1}(\varepsilon_s) f(x_{s+1}) \right] |\tilde{M}(\varepsilon_s)|.$$

Здесь и далее для обеспечения нормировки веса точек на шаге  $s$  выбираются равными  $1/s$ . Максимальное увеличение определителя достигается при

$$x_{s+1} = \underset{x \in \mathcal{X}}{\text{Arg max}} f^T(x) \tilde{M}^{-1}(\varepsilon_s) f(x). \quad (4.9)$$

По существу, данной процедурой мы планируем квазimaxимальное значение определителя главного минора ранга  $s+1$ , отличного от нуля, в условиях уже известного главного минора ранга  $s$  с предыдущего шага. Ссылка на квазиоптимальность идет по причине использования регуляризованной матрицы  $\tilde{M}(\varepsilon_s)$ . На  $m$  – шаге мы получим окончательно невырожденный главный минор ранга  $m$ , т.е. невырожденную информационную матрицу  $M(\varepsilon_m)$ . Теоретически возможна ситуация, когда после добавления  $s+1$  – ой точки  $x_{s+1}$  в план  $\varepsilon_s$ , ранг матрицы  $M(\varepsilon_{s+1})$  остается равным  $s = \text{rg} M(\varepsilon_s)$ . Для исключения подобной ситуации необходимо потребовать, чтобы для каждой включаемой на  $s$ -м шаге точки  $x_s$  выполнялось  $f(x_s) \notin R(M(\varepsilon_{s-1}))$ , где  $R(M(\varepsilon_{s-1}))$  – пространство образов, порождаемое столбцами  $M(\varepsilon_{s-1})$ . В этом случае существование последовательности планов  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_s, \dots, \varepsilon_m$ , приводящей к невырожденному плану  $\varepsilon_m$ , вытекает из самого факта существования невырожденного насыщенного плана.

Процедура построения плана с заданным числом наблюдений  $N$  будет начинаться с поиска первой точки для включения в план. В этом случае  $\tilde{M}(\varepsilon_0)^{-1} = \gamma^{-1} I_m$  и отыскивается точка  $x_1$ , доставляющая максимум евклидовой нормы вектора  $f(x)$ . Это равносильно тому, что отыскивается матрица  $M(x_1) = f^T(x_1)f(x_1)$  с максимальным ненулевым собственным числом, поскольку оно равно  $\rho = f^T(x_1)f(x_1)$  – сумме диагональных элементов этой матрицы. После  $m$  - го шага процедуры необходимость в регуляризации матрицы  $M(\varepsilon)$  отпадает. При реализации метода на ЭВМ параметр регуляризации необходимо выбирать по воз-

возможности малым – на границе вычислительной устойчивости процедуры обращения матрицы.

Описанная последовательная схема может быть использована в общем случае для построения  $\Psi$  – оптимальных планов:

$$\varepsilon_n^* = \underset{\varepsilon_n}{\operatorname{Argmax}} \Psi[M(\varepsilon_s)], \quad (4.10)$$

где  $\Psi$  – некоторый выпуклый вверх дифференцируемый по  $M(\varepsilon)$  функционал. Точка  $x_{s+1}$ , включаемая на очередном шаге, находится в этом случае как решение экстремальной задачи

$$x_{s+1} = \underset{x \in \tilde{X}}{\operatorname{Argmax}} f^T(x) \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon_s)]}{\partial M(\varepsilon_s)} f(x). \quad (4.11)$$

Если в задаче (4.10) для функционала  $\Psi[M(\varepsilon_s)]$  можно выписать формулы пересчета его для плана  $\varepsilon_{s+1}$ , то вместо соотношений общей задачи (4.11) можно получить более точные соотношения.

Рассмотрим в качестве примера задачу построения  $A$ - оптимальных планов. Известно, что

$$M^{-1}(\varepsilon_{s+1}) = \frac{s+1}{s} [I_m - \frac{M^{-1}(\varepsilon_s) f(x_{s+1}) f^T(x_{s+1})}{s + d(x_{s+1}, \varepsilon_s)}] M^{-1}(\varepsilon_s),$$

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

$$\begin{aligned} \operatorname{tr} M^{-1}(\varepsilon_{s+1}) &= \frac{s+1}{s} \operatorname{tr} M^{-1}(\varepsilon_s) - \frac{s+1}{s} \operatorname{tr} \frac{M^{-1}(\varepsilon_s) f(x_{s+1}) f^T(x_{s+1}) M^{-1}(\varepsilon_s)}{s + d(x_{s+1}, \varepsilon_s)} = \\ &= \frac{s+1}{s} \operatorname{tr} M^{-1}(\varepsilon_s) - \frac{s+1}{s} \frac{\varphi(x_{s+1}, \varepsilon_s)}{s + d(x_{s+1}, \varepsilon_s)}. \end{aligned}$$

где  $\varphi(x, \varepsilon) = f^T(x) M^{-1}(\varepsilon) f(x)$ . Таким образом, точка  $x_{s+1}$ , доставляющая минимум  $\operatorname{tr} M^{-1}(\varepsilon_{s+1})$  должна соответствовать

$$x_{s+1} = \underset{x \in \tilde{X}}{\operatorname{Argmax}} \frac{\varphi(x_{s+1}, \varepsilon_s)}{s + d(x_{s+1}, \varepsilon_s)}, \quad (4.12)$$

где  $\varphi(x, \varepsilon_s)$ ,  $d(x, \varepsilon_s)$  при  $s < m$  вычисляются с использованием регуляризованной матрицы  $\tilde{M}(\varepsilon)$ . Итерационный процесс (4.12) – уточненный вариант процесса (4.11) применительно к задаче построения  $A$ - оптимальных планов.

Рассмотрим эффективность процедуры последовательного достраивания планов на примере синтеза  $D$ - оптимальных планов. На рис. 4.8 – 4.10 приведены траектории изменения значений определителя ненормированной информационной матрицы Фишера в зависимости от числа точек в плане. Для различных моделей сравниваются одновременно три плана: план, построенный последовательным алгоритмом достраивания (обозначен как "Последовательный"), план, построенный для заданного числа наблюдений градиентным алгоритмом замены (обозначен как "Замены") и план в виде случайной выборки из точек дискретизированной области планирования. Все сравниваемые планы выбирались с учетом отсутствия в них повторяющихся точек.

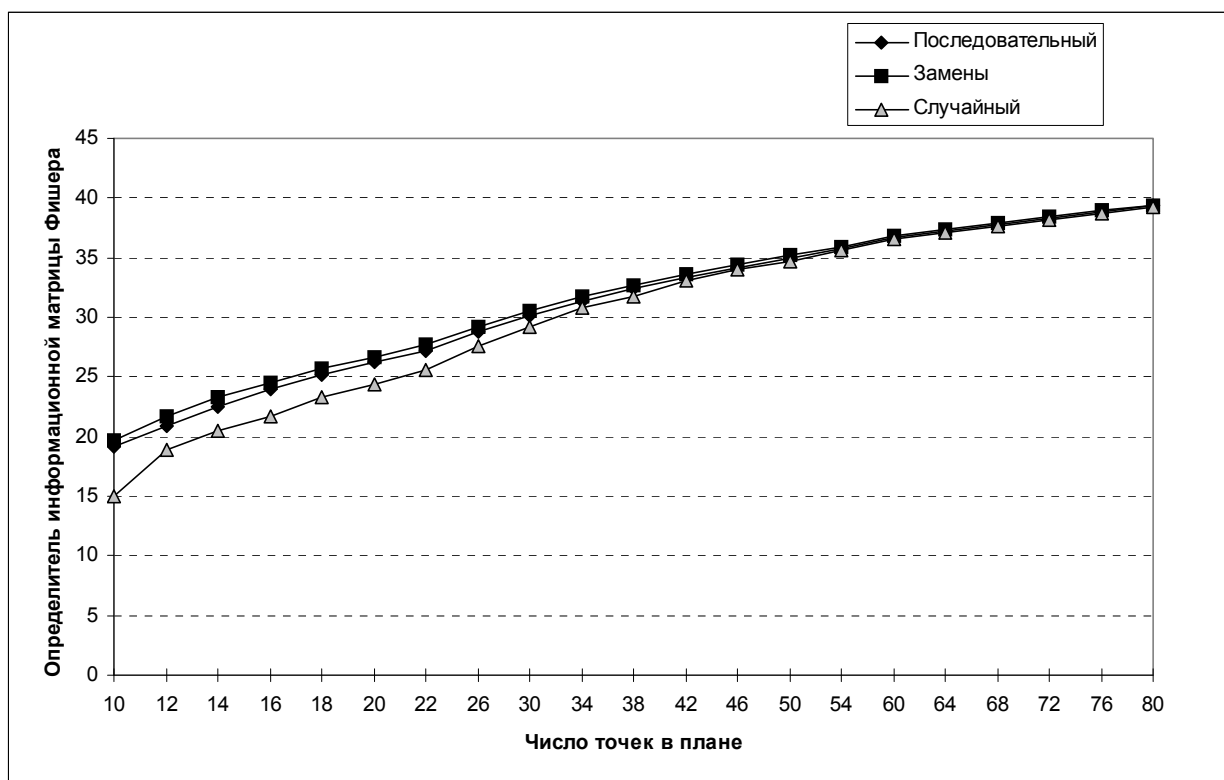


Рис. 4.8. Эффективность последовательного алгоритма при построении  $D$ - оптимальных планов для линейной модели с 8 факторами на двух уровнях с числом точек в области планирования 256.

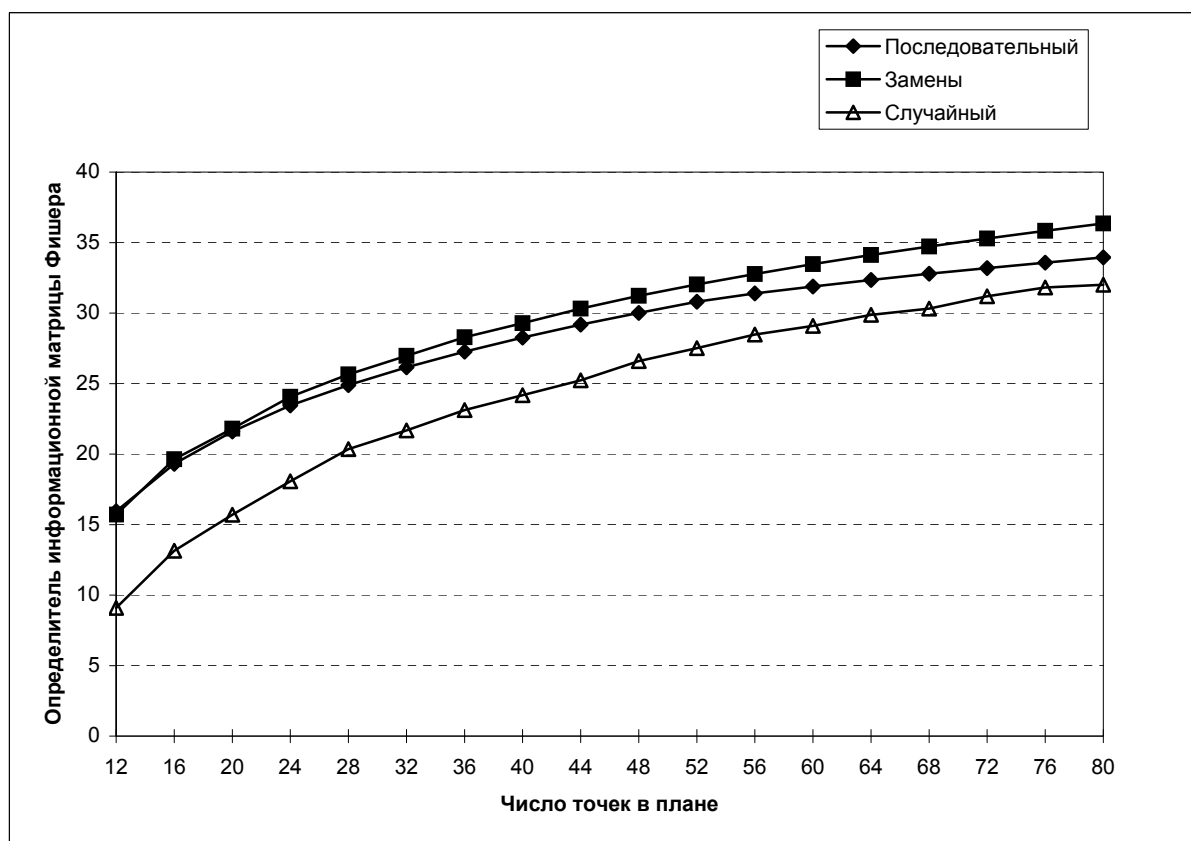


Рис. 4.9. Эффективность последовательного алгоритма при построении  $D$ - оптимальных планов для квадратичной модели с 3 факторами на пяти уровнях с числом точек в области планирования 125.

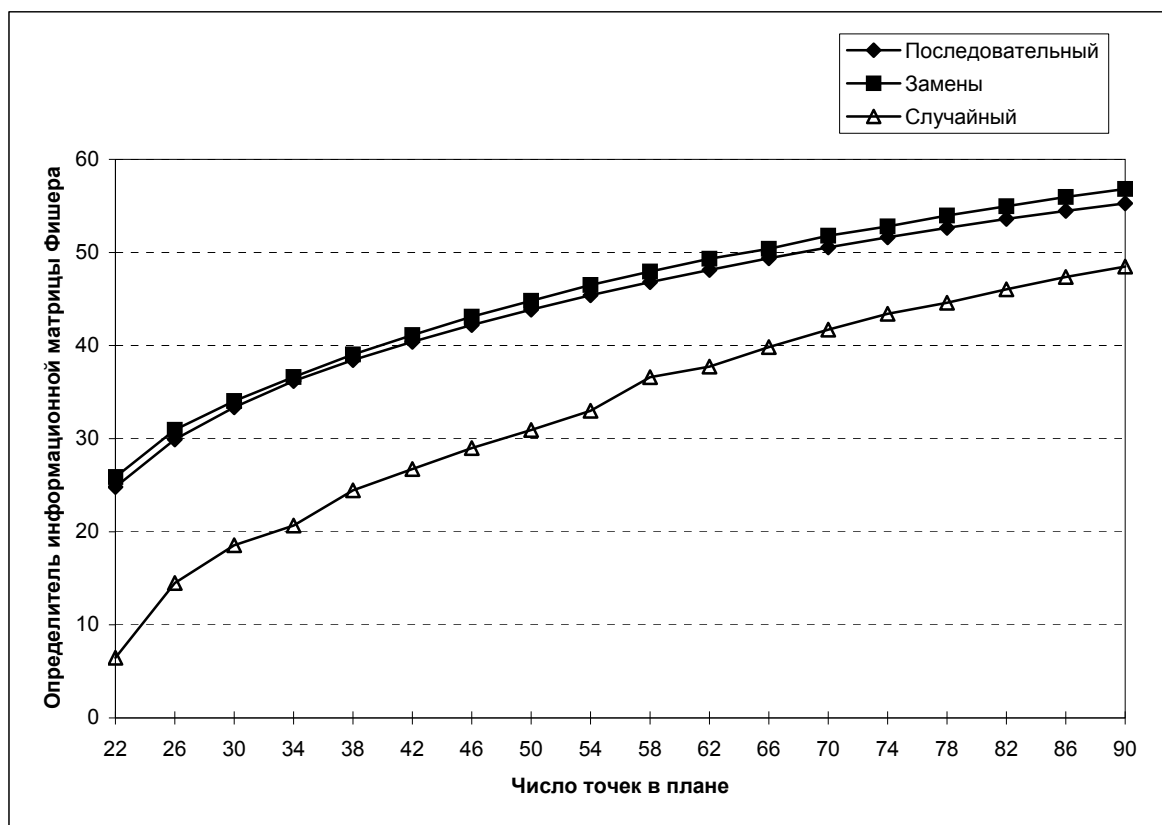


Рис. 4.10. Эффективность последовательного алгоритма при построении  $D$ -оптимальных планов для кубической модели с 3 факторами на шести уровнях с числом точек в области планирования 256.

Из рис. 4.8 – 4.10 видно, что качество последовательных планов лишь незначительно уступает качеству планов, построенных для заданного числа наблюдений и значительно лучше случайных планов. Эффективность оптимальной последовательной стратегии особенно заметна для относительно сложных моделей регрессии.

Заметим, что при реализации последовательной схемы (4.9) регуляризация информационной матрицы проводилась лишь до построения насыщенного плана. Однако этот этап в значительной мере определяет качество получаемых последовательных планов. Насколько чувствительна задача последовательного построения насыщенного плана к выбору параметра регуляризации и можно ли вообще обойтись без регуляризации? Попытаемся ответить на эти вопросы.

Нормированная информационная матрица  $M(\varepsilon_n)$  может быть представлена в виде  $nM(\varepsilon_n) = X^T X$ , где матрица  $X^T$  состоит из векторов  $f(x_j)$ ,  $j = \overline{1, n}$ :

$X^T = (f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_n))$ ,  $f^T(x_j) = (f_1(x_j), f_2(x_j), \dots, f_m(x_j))$ ,  $j = \overline{1, n}$ . Известно, что ненулевые собственные числа матриц  $X^T X$  и  $XX^T$  совпадают. Данный факт можно использовать для конструирования итерационной процедуры построения планов эксперимента при числе наблюдений  $s < m$ . Обозначим через  $G_s$  матрицу  $XX^T$  размерности  $s \times s$ . При  $s \leq m$  соответствующим выбором наблюдений можно обеспечить выполнение условия  $rg G_s = s$ . Элементы матрицы  $(G_s)_{ij} = f^T(x_i) f(x_j)$  представляют собой скалярное произведение векторов  $f(x_i)$ ,  $f(x_j)$ . Матрицу Грама  $G_{s+1}$  размерности  $(s+1) \times (s+1)$  можно записать в виде

$$G_{s+1} = \begin{pmatrix} G_s & F_s(x_{s+1}) \\ F_s^T(x_{s+1}) & f^T(x_{s+1})f(x_{s+1}) \end{pmatrix}, \quad (4.13)$$

где  $F_s^T = (f^T(x_{s+1})f(x_1), f^T(x_{s+1})f(x_2), \dots, f^T(x_{s+1})f(x_s))$ .

Применяя известную формулу вычисления определителя матрицы блочного типа можно записать что

$$|G_{s+1}| = |G_s| \cdot \Delta(x_{s+1}), \quad (4.14)$$

где  $\Delta(x_{s+1}) = [f^T(x_{s+1})f(x_{s+1}) - F_s^T(x_{s+1})G_s^{-1}F_s(x_{s+1})]$ .

Отсюда понятно, что для максимизации на  $S+1$  шаге определителя матрицы  $G_{s+1}$  необходимо выбирать точку  $x_{s+1}$  как решение экстремальной задачи

$$x_{s+1} = \underset{x \in X}{\operatorname{Arg\,max}} \Delta(x). \quad (4.15)$$

Выбор первой включаемой в план точки определяется как и ранее исходя из максимизации евклидовой нормы вектора  $f(x)$ , которая и есть сама матрица  $G_1$ . Важным достоинством данной схемы в отличие от предыдущей является отсутствие необходимости в регуляризации поскольку при  $s \leq m$  матрицы  $G_s$  остаются положительно определенными. Здесь мы не рассматриваем вырождение  $G_s$  в случае совпадающих наблюдений или наблюдений с векторами  $f(x)$  нулевой длины. Так как при  $s > m$  матрица  $G_s$  имеет только  $m$  ненулевых собственных чисел и является вырожденной, то данную последовательную схему следует применять до получения насыщенного плана. Для дальнейшего наращивания числа наблюдений следует применять схему (4.9) уже без регуляризации.

На каждом шаге итерационного процесса (4.15) фактически максимизируется произведение ненулевых собственных чисел матрицы  $G_{s+1}$ , что соответствует концепции  $D$ -оптимального планирования эксперимента. Аналогично этому можно сконструировать итерационный процесс, отвечающий концепции  $A$ -оптимального планирования. Для матрицы вида (4.13) ее след от обратной матрицы вычислять как

$$\operatorname{tr} G_{s+1}^{-1} = \operatorname{tr} G_s^{-1} + \Delta^{-1}(x_{s+1}) F_s^T(x_{s+1}) G_s^{-2} F_s(x_{s+1}) + \Delta^{-1}(x_{s+1}). \quad (4.16)$$

Для минимизации  $\operatorname{tr} G_{s+1}^{-1}$  на каждом шаге необходимо выбирать точку  $x_{s+1}$  как решение экстремальной задачи

$$x_{s+1} = \underset{x \in X}{\operatorname{Arg\,min}} [\Delta^{-1}(x_{s+1}) (F_s^T(x_{s+1}) G_s^{-2} F_s(x_{s+1}) + 1)]. \quad (4.17)$$

На первом шаге решается задача минимизации  $1/f^T(x)f(x)$ , что эквивалентно максимизации  $f^T(x)f(x)$  как и в случае схемы построения  $D$ -оптимального плана.

Решения, полученные с регуляризацией информационной матрицы по схемам (4.9), (4.12) могут отличаться от решений, полученных по схемам (4.15), (4.17), где регуляризация не требуется. Регуляризация вносит определенные искажения в структуру матрицы  $M(\mathcal{E}_n)$ , что сказывается на ее пространстве образов и тем самым изменяет свойства задачи (4.9). В общем случае следует подбирать параметр регуляризации для получения лучшего решения. Для схем (4.15), (4.17) эта проблема не возникает. Сравним решения, получаемые по схемам (4.9), (4.12), при построении насыщенных последовательных оптимальных планов. Обозначим алгоритмы (4.15) и (4.17) построения  $D$ - и  $A$ -оптимальных планов как  $SD$  и  $SA$  алгоритмы, а алгоритмы (4.9), (4.12) соответственно как  $SD_{reg}$ ,  $SA_{reg}$ . Характеристики полученных с применением данных алгоритмов насыщенных планов для различных моделей приведены в табл. 4.1. Анализ показывает, что при достаточно малом параметре регуляризации решения,

полученные алгоритмами  $SD_{reg}$ ,  $SA_{reg}$  практически совпадают с решениями, полученными алгоритмами  $SD$  и  $SA$ .

Таблица 4.1

Модель	Алгоритм	Параметр регуляризации	n	$trM^{-1}(\varepsilon)$	$ M^{-1}(\varepsilon) $
Кубическая на отрезке	$SD_{reg}$	0.0001	4	97.78	$0.43 \cdot 10^3$
	$SD_{reg}$	0.001	4	104.4	$0.45 \cdot 10^3$
	$SD_{reg}$	0.05	4	1712	$0.74 \cdot 10^4$
	$SA_{reg}$	0.0001	4	95.50	$0.43 \cdot 10^3$
	$SD$	—	4	97.78	$0.43 \cdot 10^3$
	$SA$	—	4	95.50	$0.43 \cdot 10^3$
Четвертой степени на отрезке	$SD_{reg}$	0.0001	5	256.83	$0.249 \cdot 10^4$
	$SD_{reg}$	0.001	5	309.8	$0.298 \cdot 10^5$
	$SD_{reg}$	0.05	5	32216.3	$0.248 \cdot 10^7$
	$SA_{reg}$	0.0001	5	220.46	$0.238 \cdot 10^5$
	$SD$	—	5	240.83	$0.241 \cdot 10^5$
	$SA$	—	5	220.46	$0.238 \cdot 10^5$
Пятой степени на отрезке	$SD_{reg}$	0.0001	6	3323.6	$0.308 \cdot 10^8$
	$SD_{reg}$	0.001	6	8712	$0.116 \cdot 10^9$
	$SD_{reg}$	0.05	6	48891	$0.474 \cdot 10^9$
	$SA_{reg}$	0.0001	6	3106.8	$0.182 \cdot 10^8$
	$SD$	—	6	3323.6	$0.308 \cdot 10^8$
	$SA$	—	6	3106.8	$0.182 \cdot 10^8$
Квадратичная на квадрате	$SD_{reg}$	0.0001	6	26.84	$0.182 \cdot 10^3$
	$SD_{reg}$	0.001	6	26.84	$0.182 \cdot 10^3$
	$SD_{reg}$	0.05	6	26.84	$0.182 \cdot 10^3$
	$SA$	—	6	20.93	$0.182 \cdot 10^3$
	$SD$	—	6	26.84	$0.182 \cdot 10^3$
	$SA$	—	6	20.93	$0.182 \cdot 10^3$
Кубическая на квадрате	$SD_{reg}$	0.0001	10	289.45	$0.308 \cdot 10^8$
	$SD_{reg}$	0.001	10	289.45	$0.308 \cdot 10^8$
	$SD_{reg}$	0.05	10	1447	$0.809 \cdot 10^9$
	$SA_{reg}$	0.0001	10	289.45	$0.308 \cdot 10^8$
	$SD$	—	10	289.45	$0.308 \cdot 10^8$
	$SA$	—	10	289.45	$0.308 \cdot 10^8$
Четвертой степени на квадрате	$SD_{reg}$	0.0001	15	4362.4	$0.132 \cdot 10^{19}$
	$SD_{reg}$	0.001	15	7509.8	$0.273 \cdot 10^{19}$
	$SD_{reg}$	0.05	15	103068	$0.170 \cdot 10^{23}$
	$SA_{reg}$	0.0001	15	1936.1	$0.547 \cdot 10^{18}$
	$SD$	—	15	2405.8	$0.722 \cdot 10^{18}$
	$SA$	—	15	1936.1	$0.547 \cdot 10^{18}$

Рассмотрим теперь задачу построения двухуровневых планов для линейных многофакторных моделей. Для таких моделей полные факторные эксперименты (ПФЭ) как правило на практике не применяются по причине избыточности числа наблюдений, а применяются дробные факторные эксперименты в виде тех или иных реплик от ПФЭ или планы Плакетта – Бермана. Оптимальность таких планов определяется их ортогональной структурой. Для последовательного построения оптимальных планов для линейных многофакторных моделей были рассмотрены схемы  $SD$ ,  $SA$ ,  $SD_{reg}$  и  $SA_{reg}$ . Все они показали примерно равные результа-

ты. В табл. 4.2 приведены результаты применения одной из них – схемы *SD*. Минимально возможное значение определителя нормированной дисперсионной матрицы достигнуто на построенных ортогональных планах (выделено в табл. 4.2 жирным шрифтом).

Таблица 4.2. Значения определителя дисперсионной матрица нормированного плана с числом наблюдений от 8 до 64

ПФЭ	Число наблюдений						
	8	12	16	24	32	48	64
$2^5=32$	<b>1.000</b>	<b>1.000</b>	1.137	1.058	–	–	–
$2^6=64$	<b>1.000</b>	1.423	<b>1.000</b>	<b>1.000</b>	1.032	–	–
$2^7=128$	<b>1.000</b>	1.601	<b>1.000</b>	1.088	<b>1.000</b>	1.020	–
$2^8=256$	–	1.949	1.333	1.146	1.066	1.028	1.019
$2^9=512$	–	2.306	1.770	1.190	1.100	1.044	1.019
$2^{11}=2048$	–	<b>1.000</b>	1.970	1.297	<b>1.000</b>	1.042	1.046

Особо показательны случаи построения насыщенных планов из 8 и 12 наблюдений для линейных моделей с 7 и 11 факторами, которые совпадают с аналитически построенными планами Плакетта-Бермана. В нашем случае они были получены применением последовательной процедуры *SD*. Данному факту можно дать следующее объяснение. Найдем косинус угла  $R_{s+1}$ , который составляет вектор  $f(x_{s+1})$  с подпространством  $S$ , натянутым на вектора  $f(x_1), \dots, f(x_s)$ . Величина  $\Delta(x_{s+1})$  представляет собой ничто иное как квадрат длины проекции вектора  $f(x_{s+1})$  на ортогональное дополнение к подпространству  $S$ . По формуле  $\sin^2(\alpha) = 1 - \cos^2(\alpha)$  имеем  $1 - R_{s+1}^2 = \Delta(x_{s+1}) / \|f(x_{s+1})\|^2$  или  $\Delta(x_{s+1}) = (1 - R_{s+1}^2) \|f(x_{s+1})\|^2$ . Отсюда видно, что следуя (4.15) выбирается компромиссное решение между уменьшением  $R_{s+1}$  и увеличением нормы вектора  $f(x_{s+1})$ . В случае линейных моделей и двухуровневых планов эксперимента все вектора  $f(x)$  из ПФЭ имеют равную норму и в этом смысле равнозначны. Поэтому в схеме (4.15) на очередном шаге выбирается вектор  $f(x_{s+1})$  минимально сопряженный с подпространством  $S$ . Таким образом ортогональные планы, представленные в табл. 2 являются ожидаемым событием при использовании последовательных схем.

Таким образом для построения дискретных оптимальных планов эксперимента предлагаются на выбор эффективные последовательные схемы с регуляризацией информационной матрицы на начальном этапе и без таковой. Особая практичность последовательных схем состоит в том, что можно один раз решить задачу синтеза плана с заведомо большим числом наблюдений и в дальнейшем на практике использовать полученный план как каталог планов с произвольным числом наблюдений.

## 5. Планирование эксперимента для моделей дисперсионного анализа

Планирование эксперимента для моделей дисперсионного анализа развивалось традиционно в отрыве от идей и методов планирования эксперимента для регрессионных моделей. Типичными являются требования сбалансированности планов – равенство частот встречаемости уровней факторов.

Основная проблема – невозможность исследования полного факторного эксперимента (ПФЭ) в полном объеме. Обычно ПФЭ реализуют для двух факторов  $N = S_1 \cdot S_2$ , где  $S_1, S_2$  – число уровней 1-го и 2-го фактора. Для  $k > 3$  применяют различные дробные факторные эксперименты (ДФЭ).



### Латинские квадраты

Латинским квадратом называется квадратная таблица из  $n$  элементов (букв или чисел) такая, что каждый из них встречается в точности один раз в каждой строке и каждом столбце.

Пример.  $n = 3, \{A, B, C\}$

A	B	C
B	C	A
C	A	B

$n = 4, \{A, B, C, D\}$

A	B	C	D
B	D	A	C
C	A	D	B
D	C	B	A

Простейший способ построения латинского квадрата – одношаговая циклическая перестановка букв, при которой первая буква передвигается на крайнее положение справа:  
 $abcd \rightarrow bcda \rightarrow cdab \rightarrow dabc$ .

a	b	c	d
b	c	d	a
c	d	a	b
d	a	b	c

Стандартными латинскими квадратами называются такие квадраты, у которых первые строки и столбцы построены в стандартном порядке (т.е. в алфавитном порядке) – каноническая форма латинского квадрата.

Латинские квадраты используют для построения ДФЭ для 3-х факторов.

<u>A</u>	<u>B</u>		
	$b_1$	$b_2$	$b_3$
$a_1$	$c_1$	$c_2$	$c_3$
$a_2$	$c_2$	$c_3$	$c_1$
$a_3$	$c_3$	$c_1$	$c_2$

Факторы  $A$  и  $B$  образуют ПФЭ типа  $n^2$ . На табличную форму записи такого плана накладывается  $n \times n$  латинский квадрат. Латинский квадрат является частью плана. Однако в ПФЭ весь план принято называть латинским квадратом.

Если реализовывать ПФЭ для 3-х факторов на  $n$  уровнях, то потребуется  $n^3$  опытов вместо  $n^2$  для латинского квадрата.

$n$	2	3	4	5	6
ПФЭ	8	27	64	125	216
Лат. квадрат	4	9	16	25	36

Однако недостатки: только для 3-х факторов, и только имеющих одинаковое число уровней.

### Греко – латинские квадраты

Два латинских квадрата называются ортогональными, если при наложении одного квадрата на другой каждая пара одинаковых букв встречается один и только один раз.

Комбинация двух ортогональных квадратов носит название латинского квадрата второго порядка.

Если элементы первого квадрата обозначить латинскими буквами, а второго – греческими, то такой квадрат называется греко – латинским. Таким образом получается, что каждая греческая буква появляется в строке и столбце один раз и один раз в сочетании с каждой латинской буквой.

I	II			Совместно		
<i>A B C</i>	<i>α β γ</i>			<i>Aα Bβ Cγ</i>		
<i>B C A</i>	<i>γ α β</i>			<i>Bγ Cα Aβ</i>		
<i>C A B</i>	<i>β γ α</i>			<i>Cβ Aγ Bα</i>		

Не всегда существуют ортогональные латинские квадраты. Для данного  $n$  ( $n < 10$ ) ортогональный квадрат существует тогда, когда  $n$  есть целая положительная степень простого числа:

$$3 = 3^1, \quad 4 = 2^2, \quad 5 = 5^1, \quad 7 = 7^1, \quad 8 = 2^3, \quad 9 = 3^2.$$

Т.е. для  $n = 6$  ортогональный квадрат не существует.

Греко – латинский квадрат очень экономичный план:

$n$	3	4	5
ПФЭ ( $n^4$ )	81	256	625
Греко - лат. квадрат ( $n^2$ )	9	16	25

Греко – латинский квадрат плана для 4-х факторов:

<u>A</u>	B		
	$b_1$	$b_2$	$b_3$
$a_1$	$c_1d_1$	$c_2d_2$	$c_3d_3$
$a_2$	$c_2d_3$	$c_3d_1$	$c_1d_2$
$a_3$	$c_3d_2$	$c_1d_3$	$c_2d_3$

Три и более ортогональных квадратов образуют [гипер]– греко – латинские квадраты. Их можно применять, например, для 5-ти факторного планирования.

Полные ряды ортогональных квадратов опубликованы Фишером и Йетсом.

$3 \times 3$

I	II		
1 2 3	1 2 3		
2 3 1	3 1 2		
3 1 2	2 3 1		

$4 \times 4$

I	II				III			
1 2 3 4	1 2 3 4					1 2 3 4		
2 1 4 3	3 4 1 2					4 3 2 1		
3 4 1 2	4 3 2 1					2 1 4 3		
4 3 2 1	2 1 4 3					3 4 1 2		

5 × 5																			
I					II					III					IV				
1	2	3	4	5	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5
2	3	4	5	1	3	4	5	1	2	4	5	1	2	3	5	1	2	3	4
3	4	5	1	2	5	1	2	3	4	2	3	4	5	1	4	5	1	2	3
4	5	1	2	3	2	3	4	5	1	5	1	2	3	4	3	4	5	1	2
5	1	2	3	4	4	5	1	2	3	3	4	5	1	2	2	3	4	5	1

### Планирование эксперимента с использованием редуцированной модели

Как мы видим, рассмотренные выше планы представляют собой определенные выборки точек из ПФЭ. Имеются попытки доказать оптимальность таких планов с точки зрения  $D$ -,  $A$ -,  $E$ -критериев оптимальности, обычно применяемых в планировании регрессионного эксперимента. В то же время планам дисперсионного анализа, построенным с помощью комбинаторных методов, присущи определенные недостатки. Во-первых, не для любого числа наблюдений существует тот или иной тип плана, во-вторых, такой план жестко регламентирует условия (точки в факторном пространстве) при проведении экспериментов и выпадение хотя бы одного эксперимента нарушает оптимальность плана.

Поставим задачу планирования эксперимента следующим образом. Пусть у исследователя имеется принципиальная возможность провести эксперимент в  $N$  точках факторного пространства. Однако из-за различных причин ему необходимо сократить число опытов до  $n < N$ . Необходимо оптимальным в некотором смысле образом выбрать эти  $n$  точек из  $N$  возможных.

Для определенности будем вначале рассматривать задачу анализа и планирования эксперимента для известной модели дисперсионного анализа. Определенную трудность при решении поставленной задачи планирования эксперимента вызывает тот факт, что матрица наблюдений для этой модели будет неполного ранга. Задачи такого рода в регрессионном анализе получили название сингулярного или вырожденного планирования эксперимента. Разработанная теория оптимального сингулярного планирования мало эффективна, поскольку рассчитана на общий случай. Предпринимались определенные попытки применить теорию сингулярного планирования для построения планов для дисперсионных моделей. Ключом решения проблемы является использование редуцированной модели полного ранга, записанной в терминах ФДО:

$$y = X\theta + \varepsilon = X_1 A\theta + \varepsilon = X_1 \bar{\theta} + \varepsilon.$$

Устранив внутренний дефект ранга модели мы избавляемся от необходимости использовать псевдообратные матрицы, функционалы от которых относятся к классу не дифференцируемых.

Если в качестве плана эксперимента для редуцированной модели рассматривается ПФЭ, то для него базис ФДО в точности совпадает с соответствующим базисом ФДО.

В отличие от ПФЭ произвольный план может увеличить дефект ранга модели. Возникает вопрос: существуют ли планы в виде выборки из ПФЭ, не привносящие в модель внешний дефект ранга и оставляя тем самым неизменным вид базиса ФДО? Ответ на это вопрос дает следующее утверждение.

**Утверждение 5.1.** Существует насыщенный план с числом наблюдений  $n = rgX$ , составленный из точек ПФЭ для которого базис ФДО совпадает с базисом ФДО для ПФЭ.

Доказательство. Пусть  $X$  соответствует ПФЭ. Проведем факторизацию  $X = X_1 A$ , где  $X_1$  составлена из линейно независимых столбцов  $X$ ,  $rg X_1 = r = rg X$ . Поскольку раз-

мерность пространства столбцов любой матрицы совпадает с размерностью пространства строк, то отсюда следует, что существует  $r$  линейно независимых строк матрицы  $X_1$ , или другими словами, насыщенный невырожденный план в виде подмножества ПФЭ. Обозначим через  $X_1^0$  подматрицу  $X_1$ , соответствующую этому насыщенному невырожденному плану. Поскольку пространство строк  $L(B)$  любой матрицы  $B$  совпадает с пространством ее столбцов, т.е.  $L(B)=L(B^T)$ , то отсюда следует, что пространства столбцов  $X_1^0$  и  $X_1$  совпадают. Поскольку  $L(A) \in L(X_1)$ , по причине того, что  $A$  является базисом ФДО для  $X$ , то из факта  $L(X_1^0)=L(X_1)$  следует, что  $L(A) \in L(X_1^0)$ , т.е.  $A$  является базисом ФДО для насыщенного плана, составленного из линейно независимых строк  $X_1$ .

Становится возможным рассматривать задачу планирования для моделей с качественными и разнотипными переменными с позиций общей теории оптимального планирования эксперимента, развитой для моделей регрессионного типа.

Проведем формальную постановку задачи построения оптимальных планов для моделей дисперсионного и ковариационного анализа. Запишем модель наблюдения в виде

$$y = X_1 A \theta + Z \beta. \quad (5.1)$$

Несмотря на то, что в модель (5.1) “дисперсионная” и “ковариационная” части входят аддитивно будем предполагать, что в модели (5.1) могут присутствовать и различные их взаимодействия, тем самым определяя общую модель с переключениями.

Если обозначить множество точек, доступных для выбора плана для всей модели (5.1) через  $\Xi_N$ , множество допустимых точек для качественных факторов – через  $X_1$ , множество допустимых точек для количественных факторов при заданном множестве  $X_1$  – через  $\Xi_{Z/X_1}$ , то имеет место соотношение  $\Xi_N = X_1 \cdot \Xi_{Z/X_1}$ , т.е.  $\Xi_N$  есть прямое произведение множеств  $X_1$  и  $\Xi_{Z/X_1}$ . Обозначим через  $f^T(x_i)$  –  $i$ -тую строку матрицы  $(X_1 : Z)$ , где через  $x$  обозначен вектор, составленный из независимых переменных, соответствующих столбцам матрицы и количественных факторов, ответственных за  $Z$ .

План эксперимента, состоящий из  $n$  точек, обозначим  $\xi_n$ . Информационная матрица, соответствующая этому плану, будет вычисляться по известной формуле

$$M(\xi_n) = \sum_{i=1}^n p_i f(x_i) f^T(x_i),$$

где  $p_i$  – нормированные веса точек, которые в данном случае могут выбираться равными  $p_i = 1/n$ ,  $i = \overline{1, n}$ .

Оптимальный план  $\xi_n^*$  относительно некоторого функционала  $\Psi$  от  $M(\xi_n)$  будет находиться как решение экстремальной задачи

$$\xi_n^* = \underset{\xi \in \Xi_N}{\text{Arg max}} \Psi[M(\xi_n)]. \quad (5.2)$$

Для решения задачи (5.2) могут использоваться различные критерии оптимальности, например, такие, как  $D$ ,  $A$ ,  $E$ . Для рассматриваемой задачи критерий  $D$  – оптимальности имеет дополнительное преимущество, поскольку он инвариантен к невырожденному линейному преобразованию исходной системы функций. Таким образом, планируя по критерию  $D$  – оптимальности, мы тем самым обеспечиваем выбор плана, оптимального не только для заданной системы базисных ФДО, но и для любой другой системы линейно-независимых ФДО.

Количественные факторы, входящие в  $Z$ , могут варьироваться в непрерывной шкале, однако при решении задачи отыскания оптимального плана  $\xi_n^*$ , удобнее область изменения

количественных факторов дискретизировать. Для решения задачи (5.2) в этом случае необходимо воспользоваться одним из алгоритмов построения дискретных оптимальных планов на дискретной области планирования.

Для моделей с разнотипными переменными область планирования  $\Xi_N$ , как правило, определяется конкретной постановкой задачи. Для моделей дисперсионного анализа число точек в множестве  $\Xi_N$  определяется числом точек в соответствующем ПФЭ. Выбор плана при этом ведется в пространстве столбцов матрицы  $X_1$ . Становится возможным в этом случае априори составлять каталоги оптимальных планов. Эффективным способом построения таких каталогов является ранжирование всех точек ПФЭ по порядку их включения в оптимальный план. Для проведения такого ранжирования можно воспользоваться алгоритмом последовательного достраивания планов.

## 6. Оптимальное сингулярное планирование эксперимента в регрессионных задачах.

Пусть изучается процесс, регрессионная модель которого предполагается линейной по параметрам:

$$E(y | x) = \eta(x, \underline{\theta}) = \underline{\theta}^T \underline{f}(x), \quad (6.1)$$

где  $\underline{\theta}^T = (\theta_1, \dots, \theta_m)$  - вектор неизвестных параметров,  $\underline{f}(x)$  - известные линейно – независимые действительные функции, определенные на области действия  $\mathcal{X}$ ,  $x$  – вектор независимых переменных,  $x \in \mathcal{X}$ . При выполнении основных предпосылок регрессионного анализа по методу наименьших квадратов оценки  $\hat{\underline{\theta}}$  и их дисперсионная матрица вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned} \hat{\underline{\theta}} &= (X^T X)^{-1} X^T \underline{y}, \\ D(\hat{\underline{\theta}}) &= \sigma^2 (X^T X)^{-1}, \end{aligned}$$

где  $X^T = (\underline{f}(x_1), \dots, \underline{f}(x_n))$  - расширенная матрица плана,  $\underline{y}$  - вектор наблюдений,  $\sigma^2$  - дисперсия наблюдений. В случае вырожденной информационной матрицы  $X^T X$  наилучшая линейная оценка для  $\underline{\theta}$  неединственная и вычисляется по формуле:

$$\hat{\underline{\theta}} = (X^T X)^- X^T \underline{y} + (H - I)z, \quad (6.2)$$

где  $(X^T X)^-$  - какая-либо обобщенная обратная матрица,  $H = (X^T X)^- X^T X$ ,  $z$  – произвольный вектор размерности  $m$ . В (6.2)  $(X^T X)^-$  можно заменить на  $(X^T X)^+$  - псевдообратную в смысле Мура-Пенроуза. Оценки  $\hat{\underline{\theta}}$  в (6.2) являются смещенными. Однако, используя теорию функций допускающих оценку, мы можем получить наилучшие линейные несмещенные оценки некоторых линейных комбинаций параметров  $\underline{c}^T \underline{\theta}$ . Функция допускает оценку тогда и только тогда, когда  $R(\underline{c}) \in R(X^T X)$ , где  $R$  обозначает множество всех образов.

Пусть  $\underline{c}^T \underline{\theta}$  - функция, допускающая оценку (ф.д.о) для заданной  $X^T$ , тогда наилучшая линейная оценка  $\underline{c}^T \hat{\underline{\theta}}$  и её дисперсия вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned} \underline{c}^T \hat{\underline{\theta}} &= \underline{c}^T \hat{\underline{\theta}} = \underline{c}^T (X^T X)^- X^T \underline{y}, \\ D(\underline{c}^T \hat{\underline{\theta}}) &= \sigma^2 \underline{c}^T (X^T X)^- \underline{c}. \end{aligned}$$

Пусть задан вектор параметрических функций  $\psi = \|\psi_1, \dots, \psi_q\|$ , где  $\psi_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} \theta_j$ , или

в матричном виде  $\underline{\Psi} = A^T \underline{\theta}$ . Тогда его оценка  $\hat{\underline{\psi}}$  определяется как

$$\hat{\underline{\Psi}} = A^T \hat{\underline{\theta}} = A^T (X^T X)^- X^T \underline{y},$$

а дисперсионная матрица вектора  $\hat{\underline{\psi}}$  вычисляется как

$$D(\hat{\underline{\psi}}) = \sigma^2 A^T (X^T X)^- A. \quad (6.3)$$

Во всех случаях матрицу  $(X^T X)^-$  можно заменить на  $(X^T X)^+$ .

В дальнейшем мы в основном будем работать с дисперсионной матрицей вида (6.3), полагая  $\sigma^2 \equiv 1$  и обозначая  $X^T X = M(\varepsilon)$ , где

$$M(\varepsilon) = \sum_{i=1}^n p_i f(x_i) f^T(x_i),$$

$p_i$  - веса точек плана, в общем случае будем считать план  $\varepsilon$  непрерывным с

$$p_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^n p_i = 1, \quad n - \text{число точек в спектре плана.}$$

Здесь мы придерживаемся обычной терминологии, принятой в теории оптимального планирования эксперимента. Будем также вместо  $M(\varepsilon)^-$  употреблять  $M(\varepsilon)^+$ .

В случае, когда матрица  $A$  не имеет линейно зависимых столбцов, матрица  $A^T (X^T X)^+ A$  невырожденная и к ней применимы многие критерии, использующиеся при оптимальном планировании в невырожденном случае.

### **Оптимальность сингулярных планов.**

Обозначим через  $\mathfrak{I}_A$  множество планов  $\varepsilon$ , допускающих оценку для параметрических функций  $A^T \underline{\theta}$ , т.е.

$$\mathfrak{I}_A = \{\varepsilon \mid R(A) \subseteq R(M(\varepsilon))\}.$$

Пусть в качестве критерия оптимальности выбран определитель  $|A^T M^+(\varepsilon) A|$ , тогда экстремальную задачу можно сформулировать как

$$\varepsilon^* = \text{Arg max}_{\varepsilon \in \mathfrak{I}_A} (-|A^T M^+(\varepsilon) A|). \quad (6.4)$$

Оптимальный план  $\varepsilon^*$  из (6.4) будем называть  $\psi$ -оптимальным планом.

Функционалы  $\Phi[M(\varepsilon)]$ , зависящие от  $M^+(\varepsilon)$ , следует отнести к классу недифференцируемых, ввиду разрывного характера операции псевдообращения. "Обычная" формулировка теоремы оптимальности в таких случаях становится непригодной. Используя понятие производной по направлению, можно сформулировать необходимые и достаточные условия  $\psi$ -оптимальности плана  $\varepsilon^* \in \mathfrak{I}_A$ . В силу их сложности они мало пригодны для конструирования алгоритмов их построения. Рассмотрим концепцию  $\psi$ -субоптимального планирования, позволяющую конструировать эффективные алгоритмы построения  $\psi$ -субоптимальных планов.

Введем в рассмотрение следующее множество планов  $\mathfrak{I}'_A$ :

$$\mathfrak{I}'_A = \{\varepsilon \in \mathfrak{I}_A \mid \varepsilon = (1 - \alpha)\varepsilon^* + \alpha\tilde{\varepsilon}, \quad \alpha \in [0, 1)\},$$

где  $\varepsilon^* \in \mathfrak{I}_A$ ,  $\tilde{\varepsilon}$  - произвольный план такой, что  $R(M(\tilde{\varepsilon})) \subseteq R(M(\varepsilon^*))$ . В частном случае план  $\tilde{\varepsilon}$  может состоять из одной точки. Можно показать, что множество  $\mathfrak{I}'_A$  является выпуклым. План  $\varepsilon^*$ , оптимальный на  $\mathfrak{I}'_A$ , будем называть  $\Phi$  - субоптимальным. Поскольку функционал  $\Phi[M(\varepsilon)]$  на  $\mathfrak{I}'_A$  дифференцируем, то для него можно применить "стандартную" формулировку теоремы оптимальности. Необходимые нам выражения для производной

$$\frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial p_i} = \text{tr} \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial M(\varepsilon)} \cdot f(x_i) f^T(x_i),$$

где  $p_i$  - вес  $i$ -той точки плана можно легко найти, используя производную по направлению. Можно утверждать, что условия  $\Phi$  - субоптимальности сингулярных планов  $\varepsilon^*$  будут совпадать с условием  $\Psi$  - оптимальности планов  $\varepsilon^*$  в предположении их невырожденности с заменой только в выражениях обратной матрицы  $M^{-1}(\varepsilon)$  на  $M^+(\varepsilon)$ .

Для функционала (6.4) справедлива следующая теорема:

**Теорема 6.1.** План  $\varepsilon^* \in \mathfrak{I}_A$  является  $\Phi$  - субоптимальным тогда и только тогда, когда

$$\max_{\substack{\underline{x} \in X \\ f(\underline{x}) \in R(M(\varepsilon^*))}} \varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) = q, \quad (6.5)$$

где  $\varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) = \underline{f}^T(\underline{x}) M^+(\varepsilon^*) A (A^T M^+(\varepsilon^*) A)^{-1} A^T M^+(\varepsilon^*) \underline{f}(\underline{x})$ ,  $q$  - число параметрических функций,  $q = \text{rg}[A]$ .

Теоремы оптимальности, подобные теореме 6.1, могут быть сформулированы и для других критериев оптимальности.

Пусть функционал  $\Phi[M(\varepsilon)]$  имеет вид

$$\Phi[M(\varepsilon)] = -\text{tr} A^T M^+(\varepsilon) A. \quad (6.6)$$

Справедлива

**Теорема 6.2.**  $\varepsilon^* \in \mathfrak{I}_A$  является  $\Phi$  - субоптимальным тогда и только тогда, когда

$$\max_{\substack{\underline{x} \in X \\ f(\underline{x}) \in R(M(\varepsilon^*))}} \varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) = \text{tr} A^T M^+(\varepsilon^*) A, \quad (6.7)$$

где  $\varphi(\underline{x}, \varepsilon^*) = \underline{f}^T(\underline{x}) M^+(\varepsilon^*) A A^T M^+(\varepsilon^*) \underline{f}(\underline{x})$ .

### Алгоритм построения сингулярных $\Phi$ - субоптимальных планов.

При построении невырожденных  $\Psi$  - оптимальных планов хорошо себя зарекомендовал комбинированный алгоритм. С некоторыми модификациями его можно использовать для построения  $\Psi$  - субоптимальных планов. Приведем его здесь:

1. задание произвольного плана  $\varepsilon^s \in \mathfrak{I}_A$ ,  $s = 0$ ;
2. градиентный спуск по весам точек плана с соблюдением условия  $\varepsilon^s \in \mathfrak{I}_A$ ;
3. Поиск точек  $\underline{x}^s$  таких, что

$$\underline{x}^s = \text{Arg} \left( \max_{\substack{\underline{x} \in X \\ f(\underline{x}) \in R(M(\varepsilon^s))}} \varphi(\underline{x}, \varepsilon^s) \right) \quad (6.8)$$

и проверка достаточных условий оптимальности плана  $\varepsilon^s$ ;

4. если условия оптимальности не выполняются для ряда точек из (6.8), то добавление их в план с нулевыми весами и переход на пункт 2. В противном случае – останов.

Сходимость алгоритма к какому-либо субоптимальному плану обеспечивается выполнением для искомого плана достаточных условий.

Вполне понятно, что  $\Psi$  - субоптимальных планов может быть несколько. Если  $\varepsilon_1^*$  и  $\varepsilon_2^*$  - два  $\Psi$  - субоптимальных плана, то  $\Psi(\varepsilon_1^*)$  и  $\Psi(\varepsilon_2^*)$  равны друг другу, если  $R(M(\varepsilon_1^*)) \subseteq R(M(\varepsilon_2^*))$ .

Следствием этого утверждения является тот факт, что если существует невырожденный  $\Psi$  - оптимальный план, то все  $\Psi$  - субоптимальные планы будут иметь одно и то же значение критерия и будут также  $\Psi$  - оптимальными.

Проиллюстрируем использование теоремы 6.1 при доказательстве  $\Psi$  - субоптимальности плана на конкретных примерах.

Пусть для модели  $\eta(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2$ ,  $-1 \leq x_i \leq 1$ ,  $i = 1, 2$  решается задача оптимальной экстраполяции в точку  $x_0 = (-1, 2)$ , функционал

$$\Psi(\varepsilon) = -f^T(x_0)M^+(\varepsilon)f(x_0) \rightarrow \max.$$

Можно предположить два плана  $\varepsilon_1^*$  и  $\varepsilon_2^*$ :

$$\varepsilon_1^* = \begin{pmatrix} (-1, -1) & (-1, 1) \\ 1/4 & 3/4 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon_2^* = \begin{pmatrix} (0.5, -1) & (-0.5, 1) \\ 1/4 & 3/4 \end{pmatrix}.$$

Оба плана  $\varepsilon_1^*$  и  $\varepsilon_2^*$  являются вырожденными и принадлежат классу  $\mathfrak{Z}_A$  планов, допускающих оценку.

Для проверки принадлежности к  $\mathfrak{Z}_A$  достаточно проверить выполнение соотношения  $c^T H = c^T$ , где  $H = M^+(\varepsilon^*)M(\varepsilon^*)$ ,  $c^T = f^T(x_0)$ . Для планов  $\varepsilon_1^*$  и  $\varepsilon_2^*$  матрицы  $H_1$  и  $H_2$  соответственно имеют вид

$$H_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{21}{105} & -\frac{42}{105} \\ 0 & -\frac{42}{105} & \frac{84}{105} \end{bmatrix}.$$

Для планов  $\varepsilon_1^*$  и  $\varepsilon_2^*$  имеет место  $-\Phi(\varepsilon_1^*) = -\Phi(\varepsilon_2^*) = 4$ . Проверим их субоптимальность по условиям теоремы 6.1. Имеем:

$$\varphi(x, \varepsilon_1^*) = 4x_2^2, \quad \max_{\substack{x \in \mathcal{X} \\ f(x) \in R(M(\varepsilon_1^*))}} \varphi(x, \varepsilon_1^*) = 4,$$

$$\varphi(x, \varepsilon_2^*) = \left[ -\frac{3 \cdot 28}{105} x_1 + \frac{6 \cdot 28}{105} x_2 \right]^2, \quad \max_{\substack{x \in \mathcal{X} \\ f(x) \in R(M(\varepsilon_2^*))}} \varphi(x, \varepsilon_2^*) = 4.$$

Таким образом, планы  $\varepsilon_1^*$  и  $\varepsilon_2^*$  суть субоптимальные планы. Отметим также, что планы  $\varepsilon_1^*$  и  $\varepsilon_2^*$  имеют непересекающиеся множества образов  $R(M(\varepsilon_1^*))$  и  $R(M(\varepsilon_2^*))$ .



Вывод теоремы 6.1 в основном базируется на тех или иных свойствах процедуры псевдообращения и никак не связан прямым образом с ограничением на допустимость оценивания. Теорема останется в силе, если мы заменим класс планов  $\mathfrak{Z}_A$  на  $\mathcal{E}$ , определяющий любой допустимый план на  $\mathcal{X}$ . Таким образом, если в теореме 6.1 снять ограничение  $\varepsilon^* \in \mathfrak{Z}_A$ , то можно предположить, что существует также  $s$  – субоптимальный план, недопускающий оценивания функции  $c^T \theta$ .

Для рассматриваемого нами примера такой план действительно существует.

Этот план, назовем его  $\varepsilon_3^*$ , состоит из одной точки  $x = (-1, 1)$ . Для него значение функционала  $-\Psi(\varepsilon_3^*) = 16/9 < 4$ , хотя, вероятно, оно могло быть и больше 4, т.е. быть любым. Имеем далее

$$\varphi(x, \varepsilon_3^*) = \left[ \frac{4}{9} - \frac{4}{9}x_1 + \frac{4}{9}x_2 \right]^2, \quad \max_{\substack{x \in \mathcal{X} \\ f(x) \in R(M(\varepsilon_3^*))}} \varphi(x, \varepsilon_3^*) = 16/9.$$

Следовательно, план  $\varepsilon_3^*$  --  $\Psi$  - субоптимальный на классе  $\mathcal{E}$ .

Таким образом, рассмотренный пример показывает возможность распространить подход, связанный с понятием субоптимального плана, на другие критерии оптимальности, оперирующие с псевдообратными матрицами и не требующими, чтобы оптимальный план допускал оценку какой-либо функции.

В таблице 6.1 выписаны условия субоптимальности планов для некоторых функционалов от  $M^+(\varepsilon)$ .

Таблица 6.1

**Условия субоптимальности сингулярных планов.**

Функционал	Условия субоптимальности
$c^T M^+(\varepsilon) c$	$\max_{\substack{x \in \mathcal{X} \\ f(x) \in R(M(\varepsilon^*))}} c^T M^+(\varepsilon^*) f(x) f^T(x) M^+(\varepsilon^*) c = c^T M^+(\varepsilon^*) c$
$-\ln  A^T M^+(\varepsilon) A $	$\max_{\substack{x \in \mathcal{X} \\ f(x) \in R(M(\varepsilon^*))}} f^T(x) M^+(\varepsilon^*) A (A^T M^+(\varepsilon^*) A)^{-1} A^T M^+(\varepsilon^*) f(x) A = q$
$tr A^T M^+(\varepsilon) A$	$\max_{\substack{x \in \mathcal{X} \\ f(x) \in R(M(\varepsilon^*))}} f^T(x) M^+(\varepsilon^*) A A^T(x) M^+(\varepsilon^*) f(x) = tr A^T M^+(\varepsilon^*) A$

## 7. Оптимальное планирование эксперимента для нелинейных по параметрам регрессионных моделей

Если в модели наблюдения

$$y = \eta(X, \theta) + e, \quad x \in X, \quad \theta \in \Omega \quad (7.1)$$

$\eta(X, \theta)$  нелинейно зависит от векторного параметра  $\theta \in \Omega$ , то схема регрессионного эксперимента (7.1) называется нелинейной регрессионной моделью.

Как правило, нелинейные модели выводятся на основании глубокого изучения механизма процесса в объекте, в то время как линейные модели носят оттенок аппроксимационного подхода.

Нелинейные модели позволяют адекватно представить поведение объекта в широком диапазоне изменения входных переменных. Каждый параметр такой модели имеет определённый физический смысл и, следовательно, нужно не просто аппроксимировать некоторой кривой экспериментальные данные, а с максимальной эффективностью (точностью) оценить её параметры.

Примеры.

$$\eta(X, \theta) = \sum_{i=1}^m \theta_i e^{-\theta_{i+m} x} \quad \text{— часто возникает при решении СЛДУ}$$

(химическая кинетика);

$$\eta(X, \theta) = \sum_{i=1}^m \frac{\theta_i}{(x - \theta_{i+m})^2 + \theta_{i+2m}} \quad \text{— при обработке результатов спектрального анализа;}$$

$$\eta(X, \theta) = \arctg \frac{(x_1 - \theta_1)}{(x_2 - \theta_2)} \quad \text{— в задачах слежения за движущимися}$$

объектами.

Нелинейные модели более гибки, чем линейные и даже при небольшом числе параметров зачастую позволяют достичь хорошего согласия экспериментальных и расчётных данных. Однако за эти преимущества приходится расплачиваться дорогой ценой. Прежде всего, резко усложняются алгоритмы анализа, расширяется список априорных требований и предположений.

Пусть модель  $\eta(X, \theta)$  в (7.1) нелинейная по параметрам. Необходимо по результатам  $N$  независимых наблюдений оценить неизвестные параметры  $\theta$  и функцию  $\eta(X, \theta)$ .

Для нахождения оценок параметров могут использоваться такие известные методы, как метод наименьших квадратов (МНК), метод максимального правдоподобия (ММП) и байесовский метод оценивания. Байесовский метод оценивания требует для реализации наибольший уровень априорной статистической информации. Метод максимального правдоподобия опирается на знание плотности функции распределения  $\rho(y|x)$ . Его обычно используют при негауссовых случайных ошибках наблюдения. Наибольшее распространение в практических исследованиях получил МНК оценивания параметров. Для его использования не требуется знание закона распределения ошибок наблюдения. Обоснованию его применения посвящено множество работ. Известно, что в случае нормального закона распределения ошибок наблюдения оценки по МНК совпадают с оценками ММП.

В качестве оценок МНК рассматриваются такие значения  $\hat{\theta}_N$ , которые доставляют минимум функции.

$$\hat{\theta}_N = \text{Arg} \min_{\theta \in \Omega} (s(\theta)) = \min_{\theta \in \Omega} \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i^{-2} [y_i - \eta(x_i, \theta)]^2 \right), \quad (7.2)$$

где  $x_i$  — точки плана  $\varepsilon_N$ .

Введем следующие предположения:

- а) ошибки  $e_i$ ,  $i = \overline{1, N}$  — независимые случайные величины с нулевым математическим ожиданием и дисперсией  $E(e_i^2) = \sigma^2$ ,  $i = \overline{1, N}$ ;
- б) функция  $\eta(X, \theta)$  — непрерывна на  $X \times \Omega$ ,  $X$  — компакт из  $R^k$ ,  $\Omega$  — компакт из  $R^m$ ;
- в) при увеличении  $N$  последовательность планов  $\varepsilon_N$  сходится к некоторому плану  $\tilde{\varepsilon}$ ;
- г) функция  $s(\theta, \tilde{\varepsilon}) = \int_X [\eta(x, \theta) - \eta(x, \theta_n)]^2 dP_{\tilde{\varepsilon}}(x)$  имеет единственный минимум при  $\theta = \theta_H$  ( $\theta_H$  — истинное значение параметров,  $P_{\tilde{\varepsilon}}(x)$  — вероятностная мера на  $X$ );
- д) производные  $\frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta_\alpha}$ ,  $\frac{\partial^2 \eta(x, \theta)}{\partial \theta_\alpha \partial \theta_\beta}$  существуют и непрерывны, производные  $\frac{\partial^3 \eta(x, \theta)}{\partial \theta_\alpha \partial \theta_\beta \partial \theta_\gamma}$  ограничены при  $x \in X$ ,  $\theta \in \Omega$ ;
- е)  $\theta_H$  — внутренняя точка  $\Omega$ , матрица  $M(\theta_n, \tilde{\varepsilon}) = \int_X f(\theta_n, x) f^T(\theta_n, x) dP_{\tilde{\varepsilon}}(x)$  неособенная,  $f^T(\theta, x) = (\frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta_1}, \dots, \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta_m})$ .

При выполнении предположений а)-г) МНК оценки  $\hat{\theta}_N$ , соответствующие решению экстремальной задачи (7.2), являются сильно состоятельными, т.е. сходятся почти наверное к  $\theta_H$  при  $N \rightarrow \infty$ . При выполнении условий а)-е) МНК оценки  $\hat{\theta}_N$  асимптотически нормально распределены:

$$\sqrt{N}(\hat{\theta}_N - \theta_n) \xrightarrow{\sim} N(0, \sigma^2 M^{-1}(\theta_H, \tilde{\varepsilon})).$$

В случае конечных выборок небольшого объёма отмеченные асимптотические свойства уже не будут выполняться. К этому следует добавить, что задача отыскания минимума функции  $s(\theta)$  является часто многоэкстремальной. Всё это характеризует сложность решения задачи отыскания оценок параметров в нелинейной регрессии, предъявляет повышенные требования к выбору стратегии проведения эксперимента, к выбору процедур оценивания, интерпретации получаемых результатов.

Будем в дальнейшем рассматривать только МНК, для нахождения оценок параметров в моделях типа 7.1. При выполнении условий а)-е) матрица

$$M(\hat{\theta}_N, \varepsilon_N) = \sum_{i=1}^n P_i f(\hat{\theta}_N, x_i) f^T(\hat{\theta}_N, x_i), \quad (7.3)$$

где  $f(\hat{\theta}_N, x) = \left. \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta = \hat{\theta}_N}$ ,

является сильно состоятельной оценкой для  $M(\theta_H, \tilde{\varepsilon})$ , а  $M^{-1}(\hat{\theta}_N, \varepsilon_N)$  — соответственно для  $D(\theta_H, \tilde{\varepsilon})$ .

Как видно из (7.3) информационная матрица, в отличие от случая линейной параметризации, зависит от истинных значений параметров  $\theta$ .

Это накладывает существенные особенности на процедуры планирования экспериментов. При нелинейной параметризации априорное решение задачи планирования, вообще говоря, невозможно, так как оптимальный план  $\varepsilon^*$  зависит от вектора  $\theta_H$ , который при

планировании неизвестен. Планирование эксперимента при нелинейной параметризации заключается в отыскании оптимальных условий для уточнения оценок параметров, начальные значения которых заданы. Априорные сведения могут быть заданы не только в виде предварительных оценок параметров, но и в виде возможных областей изменения.

В зависимости от уровня априорной информации исследователь может выбрать ту или иную стратегию проведения эксперимента и выбора оптимального плана.

Последовательное планирование. Суть стратегии последовательного планирования заключается в том, что отведённые затраты делятся на небольшие «порции», состоящие как минимум из одного наблюдения. Зная оценки  $\hat{\theta}_N$  после проведения  $N$  наблюдений, планируют  $(N+1)$ -й эксперимент, оптимизирующий свойства  $M(\hat{\theta}_N, \varepsilon_N)$ , а затем результаты этого эксперимента  $x_{N+1}, y_{N+1}$  используются для уточнения  $\hat{\theta}_N$ , т.е. для получения оценок  $\hat{\theta}_{N+1}$  и т.д. Для реализации стратегии последовательного планирования необходимо иметь априорные сведения о значении, хотя бы приблизительно, вектора оценок  $\hat{\theta}_0$ .

Построенный таким образом план будет при достаточно большом  $N$  близок к оптимальному при  $\theta = \theta_u$ . На каждом этапе планирования можно в общем случае проводить по несколько измерений. При этом рассматривается сразу группа точек  $x_{N+1}, x_{N+2}, x_{N+3}, \dots$ , что позволяет уменьшить число обращений к ЭВМ.

В этом случае, когда исследователь существенно ограничен в числе допустимых наблюдений, целесообразно оптимальные планы строить априори. Здесь возможны следующие процедуры оптимального планирования экспериментов.

Локально-оптимальное планирование. В этом случае предполагается, что экспериментатору известны значения оценок  $\hat{\theta}$  достаточно близкие к  $\theta_u$ . Предполагается также, что в окрестности  $\theta_u$  характеристики оптимального плана мало чувствительны к изменениям значений параметров  $\theta$ . Таким образом задача построения локально-оптимальных планов ничем принципиально не отличается от обычной задачи планирования эксперимента для линейных по параметрам моделей.

Минимаксное планирование. Пусть об искомых параметрах  $\theta$  имеются априорные сведения, а именно, известна область  $\Omega$  локализации  $\theta_u$ . План  $\varepsilon^*$  называется минимаксным, если он минимизирует максимум  $\Psi[D(\theta, \varepsilon)]$  относительно  $\theta$ , т.е.

$$\max_{\theta \in \Omega} \Psi[D(\theta, \varepsilon^*)] \leq \max_{\theta \in \Omega} \Psi[D(\theta, \varepsilon)]$$

для всех  $\varepsilon$ . рассматриваемую задачу построения плана следует отнести к так называемой непрерывной минимаксной задаче. Решить её в таком виде чрезвычайно сложно. Однако можно свести исходную непрерывную минимаксную задачу к дискретной минимаксной вида

$$\varepsilon^* = \text{Arg} \min_{\varepsilon} \max_{i \in [1:r]} \Psi[D(\theta_i, \varepsilon)],$$

где  $\theta_i \in \Omega_r$ ,  $i = \overline{1, r}$ ,  $\Omega_r \subset \Omega$ . Решать её уже значительно проще. Применяя принцип минимакса экспериментатор как бы стремится минимизировать максимально возможные потери.

Байесовское планирование. Предположим теперь, что информация о параметрах модели задана в виде распределения  $W(\theta)$  на  $\Omega$ . Тогда в качестве оптимального плана можно рассматривать план  $\varepsilon^*$ , который минимизирует средние потери

$$S(W, \varepsilon) = \int_{\Omega} \Psi[D(\theta, \varepsilon)] dW(\theta).$$

В этом случае также можно непрерывное априорное распределение  $W(\theta)$  на  $\Omega$  аппроксимировать дискретной вероятностной мерой  $\omega(\theta^{(i)})$  на  $\Omega_r$  и решать задачу

$$\varepsilon^* = \text{Arg} \min_{\varepsilon} \sum_{i=1}^r \omega(\theta_i) \Psi[D(\theta_i, \varepsilon)].$$

Решение её ничем принципиально не будет отличаться от решения, скажем, задачи многокритериального планирования по обобщённому критерию оптимальности.

В качестве критериев оптимальности в рассмотренных выше задачах можно в принципе использовать многие из критериев, введенных в 1. Однако здесь к опросу выбора того или иного критерия нужно относиться очень осторожно. Так, например, анализ характеристик оптимальных планов, что при использовании критерия D-оптимальности объём эллипсоида рассеяния уменьшается в основном за счёт сжатия его по малым полуосям, т.е. происходит его вытягивание. В то же время, например, критерий E-оптимальности стремится приблизить доверительную область к сфере.

### Условия оптимальности при минимаксном планировании

Назовём план  $\varepsilon^*$   $\Phi$  - оптимальным, если

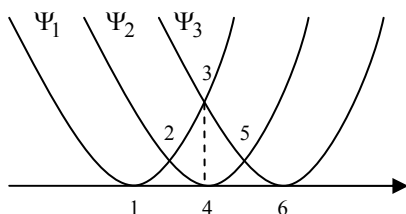
$$\varepsilon^* = \text{Arg} \min_{\varepsilon} \Phi(\varepsilon) = \text{Arg} \min_{\varepsilon} \max_{1 \leq i \leq l} \Psi_i[M(\varepsilon)],$$

где  $\Psi_i[M(\varepsilon)]$ ,  $i = \overline{1, l}$  — выпуклые по координатам  $p = (p_1, \dots, p_n)^T$ , непрерывно дифференцируемые функции, зависящие от информационной матрицы  $M(\varepsilon)$ . Для  $MV$ -оптимального планирования  $\Psi_i[M(\varepsilon)] = D_{ii}(\varepsilon)$ , а для задачи минимаксного планирования при нелинейной параметризации  $\Psi_i[M(\varepsilon)] = \Psi[M(\theta_i, \varepsilon)]$ ,  $\theta_i \in \Omega_i$ ,  $i = \overline{1, l}$ .

Теорема 7.1. План  $\varepsilon^*$  —  $\Phi$  - оптимален тогда и только тогда, когда существуют такие  $\lambda_i^* \geq 0$ ,  $\sum \lambda_i^* = 1$ ,  $i \in I(M(\varepsilon^*))$ , что

$$\min_{x \in X} \sum_{i \in I(M(\varepsilon^*))} \lambda_i^* \varphi_i(x, \varepsilon^*) = \sum_{i \in I(M(\varepsilon^*))} \lambda_i^* \text{Sp} \frac{\partial \Psi_i[M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)} M(\varepsilon^*),$$

здесь множество  $I(M(\varepsilon^*)) = \{i \in [1; l] \mid \Psi_i[M(\varepsilon^*)] = \Phi(\varepsilon^*)\}$ ,  $\varphi_i(x, \varepsilon) = \text{Sp} \frac{\partial \Psi_i[M(\varepsilon)]}{\partial M(\varepsilon)} M(x)$ .



Точка под номером 3 соответствует оптимальному плану.

Прямой-двойственный алгоритм построения минимаксных планов  $\Phi$ -оптимальных планов можно представить в виде следующей процедуры

1. Выбор произвольного начального невырожденного плана  $\varepsilon^s$ .
2. Производится наискорейший спуск по координатам  $x$  с получением плана  $\bar{\varepsilon}^s$ .
3. Производится наискорейший спуск по координатам  $p$  с получением некоторого плана  $\varepsilon^s$  в стационарной точке, и определяются величины  $\lambda_i^s$ ,  $i = \overline{1, m}$  из решения задачи поиска направления наискорейшего спуска для плана  $\tilde{\varepsilon}^s$ .

4. Отыскивается некоторое число точек, соответствующих  $\min_{x \in X} \sum_i \lambda_i^s \varphi_i(x, \bar{\varepsilon}^s)$  (обозначим эти точки через  $\varepsilon_x$ ).

5. Составляется план

$$\varepsilon^{s+1} = 1 \cdot \bar{\varepsilon}^s + 0 \cdot \varepsilon_x.$$

6. Производится переход на пункт 2. расчёты прекращаются, если

$$-\min_{x \in X} \sum_i \lambda_i^s \varphi_i(x, \bar{\varepsilon}^s) + \sum_i \lambda_i^s Sp \frac{\partial \Psi_i \left[ M(\bar{\varepsilon}^s) \right]}{\partial M(\varepsilon)} M(\bar{\varepsilon}^s) \leq \gamma,$$

где  $\gamma$  — наперёд заданная точность.

Данный алгоритм можно использовать для построения байесовских планов при нелинейной параметризации функции отклика, а также в общем случае, когда некоторые  $m$  функционалов  $\Psi_i[M(\varepsilon)]$  свёртываются в один  $\Phi(\varepsilon) = \sum_{i=1}^m \alpha_i \Psi_i[M(\varepsilon)]$ .

Наряду с дискретной минимаксной задачей может ставиться и непрерывная минимаксная задача планирования эксперимента вида

$$\varepsilon^* = Arg \min_{\varepsilon} \tilde{\Phi}(\varepsilon) = Arg \min_{\varepsilon} \max_{y \in Z} \Psi[y, M(\varepsilon)],$$

где  $\Psi[y, M(\varepsilon)]$  — выпуклый при любом  $y \in Z$ ,  $Z$  — компакт.

Теорема 7.2. План  $\varepsilon^*$  —  $\tilde{\Phi}$ -оптимален тогда и только тогда, когда найдутся такие  $\lambda_i^* \geq 0$ ,  $i = \overline{1, r}$ ,  $1 \leq r \leq n+1$ ,  $\sum \lambda_i^* = 1$  и точки  $y_i^0$ ,  $i = \overline{1, r}$  из  $I(\varepsilon^*)$ , что

$$\min_{x \in X} \sum_{i=1}^r \lambda_i^* \varphi_i(x, \varepsilon^*) = \sum_{i=1}^r \lambda_i^* Sp \frac{\partial \Psi_i[y_i^0, M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)} M(\varepsilon^*),$$

где  $I(\varepsilon^*) = \left\{ y^0 \in Z \mid \Psi[y^0, M(\varepsilon^*)] = \max_{y \in Z} \Psi[y, M(\varepsilon^*)] \right\}$ ,

$$\varphi_i(x, \varepsilon^*) = Sp \quad f(x) f^T(x) \frac{\partial \Psi[y_i^0, M(\varepsilon^*)]}{\partial M(\varepsilon)},$$

$n$  — число точек в плане  $\varepsilon^*$ .

За основу алгоритма решения непрерывной минимаксной задачи по типу той, что рассматривалась в теореме 7.2, можно взять алгоритм экстремального базиса. Применительно к задаче построения оптимального плана он будет состоять в следующем.

1. Выбор произвольного невырожденного  $n$ -точечного плана  $\varepsilon^s$  и произвольного  $(n+2)$ -точечного базиса

$$\sigma^s = \{y_1, \dots, y_{n+2}\}$$

2. Решение дискретной минимаксной задачи

$$\varepsilon^{s+1} = \min_{\varepsilon} \max_{i \in \overline{1, n+2}} \Psi[y_i, M(\varepsilon^s)].$$

3. Если  $\tilde{\Phi}(\varepsilon^{s+1}) = \Phi(\varepsilon^{s+1})$ , то  $\varepsilon^{s+1}$  — точка минимума функции  $\tilde{\Phi}(\varepsilon)$ . В противном случае строим базис  $\sigma^{s+1}$ , включая в него некоторую точку  $y^s \in Z$ , такую, что  $\Psi[y^s, M(\varepsilon^{s+1})] = \tilde{\Phi}(\varepsilon^{s+1}) = \max_{y \in Z} \Psi[y, M(\varepsilon^{s+1})]$  и исключая из него некоторую точку с индексом  $i_s$ , или не входящую в  $I(\varepsilon^s)$ , или если начало координат (точку

$0 \in L_s$ ) можно сформировать без вектора  $\frac{\partial \Psi[y_i, M(\varepsilon^{s+1})]}{\partial p}$ . Здесь  $L_s$  — линейная оболочка векторов  $H_s$ :

$$L_s = \text{Co}H_s, H_s = \left\{ \frac{\partial \Psi[y_i, M(\varepsilon^{s+1})]}{\partial p} \middle| i \in I(\varepsilon^s) \right\}.$$

Решение продолжается с пункта 2 исходя из плана  $\varepsilon^{s+1}$  и базиса  $\sigma^{s+1}$ .

Центральным моментом в изложенном алгоритме экстремального базиса является решение последовательности дискретных минимаксных задач из пункта 2. для её решения очевидно можно использовать рассмотренный выше прямой-двойственный алгоритм построения  $\bar{\Phi}$ -оптимальных минимаксных планов.

Пример аналитического решения задачи построения D-оптимального плана:

Модель имеет вид  $\eta(x, \theta) = e^{-\theta x}$ .

$$|M(\varepsilon)| = M(\varepsilon) = x^2 e^{-2\theta x}, M'(\varepsilon) = 2xe^{-2\theta x} - 2\theta x^2 e^{-2\theta x} = 0, x = \frac{1}{\theta}.$$

$$\varepsilon^* = \left\{ \frac{1/\theta}{1} \right\} - \text{предположительно оптимальный план, } D(\varepsilon^*) = \theta^2 e^2.$$

Проверка на оптимальность:

$$d(x, \varepsilon) = f^T(x) D(\varepsilon) f(x) = x^2 e^{-2\theta x} \theta^2 e^2,$$

$$d'(x, \varepsilon) = 2xe^{-2\theta x} \theta^2 e^2 - 2\theta x^2 e^{-2\theta x} \theta^2 e^2 = 2x(1 - \theta x) \theta^2 e^2 e^{-2\theta x} = 0$$

$$x = \frac{1}{\theta}, d(x, \varepsilon) = f^T(x) D(\varepsilon) f(x) = x^2 e^{-2\theta x} \theta^2 e^2 = 1.$$

$$d''(x, \varepsilon) = 2e^{-2\theta x} \theta^2 e^2 - 4\theta x e^{-2\theta x} \theta^2 e^2 - 4\theta x e^{-2\theta x} \theta^2 e^2 + 4\theta^2 x^2 e^{-2\theta x} \theta^2 e^2$$

$$d''(x, \varepsilon)|_{x=1/\theta} = 2\theta^2 - 4\theta^2 - 4\theta^2 = -6\theta^2 < 0, \text{ т.е. это точка максимума}$$

## **8. Численные методы вычисления МНК оценок в нелинейных моделях регрессии**

Пусть необходимо оценить  $m$  параметров  $\theta$  нелинейной регрессионной модели

$$y_i = \eta(\underline{x}_i, \underline{\theta}) + e_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (8.1)$$

где  $\underline{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_m)^T$ ,  $\underline{\theta} \in R^m$ ,  $\underline{x}_i$  —  $k$ -мерный вектор-столбец независимых переменных в  $i$ -м эксперименте  $\underline{x}_i^T = (x_{i1}, \dots, x_{ik})$ ,  $y_i$  — измеренное значение отклика в  $i$ -м эксперименте,  $\eta(\underline{x}_i, \underline{\theta})$  — значение функции отклика в  $i$ -м эксперименте,  $e_i$  — случайные ошибки, имеющие совместное нормальное распределение  $N(0, \Sigma)$ , где  $\Sigma$  — матрица  $N \times N$  дисперсий и ковариаций ошибок в  $N$  точках:

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{11}^2 & \sigma_{12}^2 & \dots & \sigma_{1N}^2 \\ \sigma_{21}^2 & \sigma_{22}^2 & \dots & \sigma_{2N}^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{N1}^2 & \sigma_{N2}^2 & \dots & \sigma_{NN}^2 \end{pmatrix}. \quad (8.2)$$

Оценки  $\hat{\underline{\theta}}$  находить как решение задачи (обобщенный МНК):

$$\hat{\underline{\theta}} = \underset{\underline{\theta}}{\operatorname{Arg\,min}} S^2(\underline{\theta}) = \underset{\underline{\theta}}{\operatorname{Arg\,min}} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^N \tilde{\sigma}_{il} [y_i - \eta(x_i, \theta)] * [y_l - \eta(x_l, \theta)], \quad (8.3)$$

где  $\tilde{\sigma}_{il}$  –  $il$ -ый элемент матрицы  $\Sigma^{-1}$ .

В случае, когда матрица  $\Sigma$  диагональная, т.е. ошибки в разных точках  $x$  некоррелированные, выражение (8.3) запишется в виде:

$$\hat{\underline{\theta}} = \underset{\underline{\theta}}{\operatorname{Arg\,min}} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_{ii}^2} [y_i - \eta(x_i, \theta)]^2. \quad (8.4)$$

Для случая  $\underline{\theta} \in R^m$  точка минимума в (8.3), (8.4) находится как одно из решений системы

$$\frac{\partial S^2(\underline{\theta})}{\partial \theta_j} = -2 \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^N [y_l - \eta(x_l, \theta)] * \tilde{\sigma}_{il} \frac{\partial \eta(x_i, \theta)}{\partial \theta_j} \bigg|_{\underline{\theta}=\hat{\underline{\theta}}} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, m. \quad (8.5)$$

Выражение (8.5) представляет собой систему нормальных уравнений. Очевидно, когда функция  $\eta(\underline{x}_i, \underline{\theta})$  нелинейная по параметрам, система (8.5) представляет собой систему нелинейных уравнений, разрешимую относительно  $\theta$ , как правило, лишь численными методами.

Существует большое разнообразие численных процедур метода наименьших квадратов (МНК), основанных как на линеаризации функции  $\eta(\underline{x}_i, \underline{\theta})$  по параметрам, так и на линеаризации или приближенном представлении функции  $S^2(\underline{\theta})$  в виде квадратичного полинома по параметрам  $\theta_j, j = \overline{1, m}$ .

Эти методы связаны с вычислением частных производных функций  $\eta(\underline{x}_i, \underline{\theta})$  или  $S^2(\underline{\theta})$  по параметрам. Это так называемая группа методов с вычислением производных.

Существует также ряд методов непосредственного поиска минимума функции  $S^2(\underline{\theta})$  – сюда можно отнести, такие методы как метод Пауэла, Розенброка, симплекс-метод и др. Это так называемые методы без вычисления производных. В дальнейшем мы остановимся лишь на методах с вычислением производных.

Функция  $S^2(\underline{\theta})$  в случае нелинейной  $\eta(\underline{x}_i, \underline{\theta})$ , часто оказывается многоэкстремальной. Поэтому, если начальные значения оценок, используемые в поисковых процедурах, находятся вдали от точки минимума  $S^2(\underline{\theta})$ , процесс поиска может сойтись лишь к ее локальному минимуму. Для нахождения глобального минимума  $S^2(\underline{\theta})$  процесс поиска следует повторять, используя различные начальные значения вектора  $\underline{\theta}$ . Кроме того, существуют специальные методы глобального поиска. Методы, которые мы рассмотрим, позволяют в общем случае находить лишь локальный минимум  $S^2(\underline{\theta})$ .

### Численные процедуры МНК, основанные на линеаризации функции регрессии $\eta(\underline{x}_i, \underline{\theta})$

#### Алгоритм Гаусса-Ньютона.

Зададимся некоторым начальным приближением вектора параметров  $\hat{\underline{\theta}}_0$  и разложим функцию  $\eta(\underline{x}_i, \underline{\theta})$  в ряд Тейлора в окрестности  $\hat{\underline{\theta}}_0$ , ограничившись лишь линейными членами.

$$\eta(\underline{x}, \underline{\theta}) \approx \eta(\underline{x}, \hat{\underline{\theta}}_0) + \sum_{j=1}^m \frac{\partial \eta(\underline{x}, \theta)}{\partial \theta_j} \bigg|_{\hat{\underline{\theta}}_0} * (\theta_j - \hat{\theta}_{0j}). \quad (8.6)$$

Подставив выражение для  $\eta(\underline{x}_i, \hat{\underline{\theta}})$  в (8.5), получим, опустив постоянный множитель:



$$\sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^N \left[ y_l - \eta(\underline{x}_l, \hat{\underline{\theta}}_0) - \sum_{j=1}^m \frac{\partial \eta(\underline{x}_l, \underline{\theta})}{\partial \theta_j} \bigg|_{\hat{\underline{\theta}}_0} (\theta_j - \hat{\theta}_{0j}) \right] * \frac{\partial \eta(\underline{x}_i, \underline{\theta})}{\partial \theta_\mu} \bigg|_{\hat{\underline{\theta}}_0} * \tilde{\sigma}_{il} = 0, \mu = 1, \dots, m \quad (8.7)$$

В системе (8.7) мы можем управлять выбором  $(\theta_j - \hat{\theta}_{0j})$ , т.е. найти невязку  $\Delta \underline{\theta}_0$  и затем уточнить  $\underline{\theta}$ .

Введем следующие обозначения:

$$\Delta Y_N^T = (y_1 - \eta(\underline{x}_1, \hat{\underline{\theta}}_0), \dots, y_N - \eta(\underline{x}_N, \hat{\underline{\theta}}_0)) \quad (8.8)$$

$$\Delta \underline{\theta}_0^T = (\theta_1 - \hat{\theta}_{01}, \dots, \theta_m - \hat{\theta}_{0m}). \quad (8.9)$$

Отсюда мы, оценив  $\Delta \underline{\theta}_0$ , можем оценить  $\underline{\theta}$ :  $\hat{\underline{\theta}} = \hat{\underline{\theta}}_0 + \Delta \underline{\theta}_0$ ,

$$F = \begin{bmatrix} \frac{\partial \eta(\underline{x}_1, \underline{\theta})}{\partial \theta_1} \bigg|_{\hat{\underline{\theta}}_0} & \frac{\partial \eta(\underline{x}_1, \underline{\theta})}{\partial \theta_2} \bigg|_{\hat{\underline{\theta}}_0} & \dots & \frac{\partial \eta(\underline{x}_1, \underline{\theta})}{\partial \theta_m} \bigg|_{\hat{\underline{\theta}}_0} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial \eta(\underline{x}_N, \underline{\theta})}{\partial \theta_1} \bigg|_{\hat{\underline{\theta}}_0} & \frac{\partial \eta(\underline{x}_N, \underline{\theta})}{\partial \theta_2} \bigg|_{\hat{\underline{\theta}}_0} & \dots & \frac{\partial \eta(\underline{x}_N, \underline{\theta})}{\partial \theta_m} \bigg|_{\hat{\underline{\theta}}_0} \end{bmatrix}. \quad (8.10)$$

В соответствии с введенными обозначениями перепишем (8.7) в матричной форме:

$$F^T \Sigma^{-1} \Delta Y_N = (F^T \Sigma^{-1} F) \Delta \underline{\theta}_0. \quad (8.11)$$

Откуда

$$\Delta \underline{\theta}_0 = (F^T \Sigma^{-1} F)^{-1} F^T \Sigma^{-1} \Delta Y_N. \quad (8.12)$$

Выражение (8.12) подобно выражению для оценок параметров линейной регрессии, однако здесь матрица  $F$  – это матрица первых частных производных функции  $\eta(\underline{x}, \underline{\theta})$  по параметрам  $\theta_j, j = 1, m$ ;  $\Delta Y_N^T$  – это вектор отклонений измеренных значений от значений функции  $\eta(\underline{x}_i, \underline{\theta})$  в точке разложения  $\hat{\underline{\theta}}_0$ , в линейном случае – это вектор измеренных значений отклика  $Y_N$ .

В силу приближенности (8.6) нахождение

$$\hat{\underline{\theta}}_{(1)} = \hat{\underline{\theta}}_0 + \Delta \underline{\theta}_0 \quad (8.13)$$

не дает решение задачи (8.3) в отличие от задачи линейного оценивания, решаемой за один шаг.

Приняв  $\hat{\underline{\theta}}_{(1)}$  в качестве нового начального приближения, повторим процедуру (8.12), (8.13). Процедуру следует повторять до тех пор, пока относительные изменения параметров на двух соседних итерациях не станут меньше некоторой заданной ранее константы. Это алгоритм уточнения Гаусса-Ньютона.

Однако процедура (8.12), (8.13) может разойтись, ибо значения  $\Delta \underline{\theta}_r$  на  $r$ -ой итерации, вычисляемые по (8.12), могут давать  $\hat{\underline{\theta}}_{r+1}$ , далеко выходящие за область справедливости линейного приближения (8.6), особенно в случае плохой обусловленности матрицы  $(F^T \Sigma^{-1} F)$ , что весьма типично для нелинейных задач.

Тогда  $S^2(\hat{\underline{\theta}}_{r+1})$  будет превышать  $S^2(\hat{\underline{\theta}}_r)$ , т.е. значение остаточной суммы квадратов будет увеличиваться от итерации к итерации.

Для обеспечения сходимости процедуры необходимо, чтобы условие

$$S^2(\hat{\underline{\theta}}_{r+1}) < S^2(\hat{\underline{\theta}}_r) \quad (8.14)$$

выполнялось на каждом шаге итерационного процесса. Этой цели служит модифицированный алгоритм Гаусса-Ньютона (алгоритм Хартли).

Согласно этому алгоритму выполнение условия (8.14) обеспечивается регулировкой размера шага  $V_r$  ( $0 < V_r \leq 1$ ).

$$\hat{\underline{\theta}}_{r+1} = \hat{\underline{\theta}}_r + V_r \Delta \underline{\theta}_r. \quad (8.15)$$

Величина  $V_r$  выбирается из условия

$$V_{r*} = \underset{V_r}{\operatorname{Arg\,min}} S^2(\hat{\underline{\theta}}_r + V_r \Delta \underline{\theta}_r) \quad (8.16)$$

Покажем, что существует значение  $V_r$ , которое, по крайней мере, обеспечивает выполнение условия (8.14).

Найдем производную от функции  $S^2(\hat{\underline{\theta}}_{r+1})$  по направлению  $\Delta \underline{\theta}_r$  в точке  $\hat{\underline{\theta}}_r$ .

$$\left. \frac{\partial S^2(\hat{\underline{\theta}}_r + V_r \Delta \underline{\theta}_r)}{\partial V_r} \right|_{V_r=0} = \left[ \left. \frac{\partial S^2(\hat{\underline{\theta}}_r + V_r \Delta \underline{\theta}_r)}{\partial \underline{\theta}} \right|_{V_r=0} \right]^T \Delta \underline{\theta}_r = g^T(\hat{\underline{\theta}}_r) \Delta \underline{\theta}_r, \quad (8.17)$$

где  $g^T(\underline{\theta}) = (g_1, \dots, g_m)$  – градиент остаточной суммы квадратов,  $g_i = \frac{\partial S^2(\underline{\theta})}{\partial \theta_i}, i = 1, \dots, m$ , вычисленный в точке  $\hat{\underline{\theta}}_r$ .

Подставив выражение для  $\Delta \underline{\theta}$  (8.12) в (8.17), получим

$$g^T(\hat{\underline{\theta}}_r) \Delta \underline{\theta}_r = g^T(\hat{\underline{\theta}}_r) (F^T \Sigma^{-1} F)^{-1} F^T \Sigma^{-1} \Delta Y_N = -\frac{1}{2} g^T(\hat{\underline{\theta}}_r) (F^T \Sigma^{-1} F)^{-1} g(\hat{\underline{\theta}}_r) \quad (8.18)$$

(см.(8.5),  $F^T \Sigma^{-1} \Delta Y_N$  – это есть вектор  $-\frac{1}{2} g(\hat{\underline{\theta}}_r)$ ).

В силу положительной определенности  $(F^T \Sigma^{-1} F)$  значения квадратичной формы всегда меньше нуля, что говорит об убывании  $S^2(\hat{\underline{\theta}}_r + V_r \Delta \underline{\theta}_r)$  в точке  $\hat{\underline{\theta}}_r$ . Значит, существует значение  $V_{r*}$ , обеспечивающее выполнение условия (8.14).

Оптимальное значение  $V_{r*}$  может быть найдено одним из методов одномерного поиска (в частности, методом Фибоначи, золотого сечения и т.д.). Однако при этом следует использовать методы, требующие меньшего числа обращений к вычислению значений функции  $S^2(\underline{\theta})$ , ибо эти вычисления требуют больших затрат машинного времени.

Мы уже упоминали о том, что в задачах нелинейного оценивания довольно типичным является случай плохой обусловленности матрицы  $(F^T \Sigma^{-1} F)$ . В этих условиях алгоритм, изложенный выше, может не сходиться, в силу неточного вычисления вектора коррекции  $\Delta \underline{\theta}_r$ . Условие (8.14) не будет при этом выполняться ни для одного значения  $V_r$ .

Поэтому для решения таких задач были разработаны специальные методы улучшения обусловленности матрицы.

Наиболее распространенным методом нахождения оценок МНК в таких задачах является метод Маркварда. Согласно этому методу вектор приращения параметров на каждом шаге определяется из соотношения

$$\Delta \underline{\theta}_r = (F^T \Sigma^{-1} F + \lambda_r D)^{-1} F^T \Sigma^{-1} \Delta Y_N, \quad (8.19)$$

где  $\lambda_r \geq 0$  – скаляр,  $D$  – диагональная матрица, элементами  $D_{jj}, j = 1, 2, \dots, m$  которой являются диагональные элементы матрицы  $F^T \Sigma^{-1} F$ . Из выражения (8.19) видно, что при

$\lambda_r = 0$  расчет  $\Delta\theta_r$  будет производиться в соответствии с методом Гаусса- Ньютона, а при достаточно больших  $\lambda_r$ :

$$\Delta\theta_{rj} \approx -\frac{1}{2} * \frac{g_{rj}}{\lambda_r D_{jj}}, j = 1, \dots, m, \quad (8.20)$$

$$g_r = -2F^T \Sigma^{-1} \Delta Y_N. \quad (8.21)$$

Последнее выражение есть градиент  $S^2(\theta)$  в точке  $\hat{\theta}_r$ , т.е.  $\Delta\theta_r$  совпадает с направлением отрицательного градиента остаточной суммы квадратов. Параметр  $\lambda_r$  на каждой итерации выбирается так, чтобы обеспечить выполнение условия (8.14).

В алгоритме Маркварда с изменением параметра  $\lambda_r$  меняется не только величина, но и направление шага  $\Delta\theta_r$ . Величина  $|\Delta\theta_r|^2$  является монотонно убывающей функцией параметра  $\lambda_r$ , кроме того, угол  $\gamma$  между направлениями  $\Delta\theta_r$  и  $-g_r$  тоже является монотонно убывающей функцией  $\lambda_r$ . Это значит, что с ростом  $\lambda_r$  направление шага приближается к направлению отрицательного градиента, это способствует выполнению (8.14).

В тоже время стратегия выбора  $\lambda_r$  должна быть построена так, чтобы обеспечить по возможности малое значение  $\lambda_r$ , ибо при этом (8.19) будет близко к (8.12), т.е.  $\Delta\theta_r$  будет определяться в соответствии с методом Гаусса-Ньютона, обладающего более высокой скоростью сходимости, чем градиентный. Большие значения  $\lambda_r$  должны использоваться лишь при нарушении (8.14), т.е. при отклонении  $\Delta\theta_r$  от  $-g_r$  более чем  $\frac{\pi}{2}$ .

Недостатком метода при реализации его на ЭВМ является то, что подбор  $\lambda_r$  требует многократного обращения к такой трудоемкой процедуре, как обращение матрицы.

Одним из способов устранения необходимости многократного обращения матрицы при подборе  $\lambda$  на каждой итерации является следующий.

В силу того, что матрица  $F^T \Sigma^{-1} F$  (обозначим ее как  $\Phi$ ) положительно определена и симметрична, она может быть приведена к диагональному виду:  $G\Phi G^T = \Lambda$ , где

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \tilde{\lambda}_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \tilde{\lambda}_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \tilde{\lambda}_m \end{pmatrix}$$

- диагональная матрица с собственными значениями на  $\tilde{\lambda}_i$  диагонали;

$G$  – матрица  $m \times m$  собственных векторов матрицы  $\Phi$ .

Тогда матрица  $\Phi^{-1}$  определяется выражением  $\Phi^{-1} = G^T \Lambda^{-1} G$ ,

а матрица  $(\Phi + \lambda D)^{-1}$  - выражением

$$(\Phi + \lambda D)^{-1} = G^T (\Lambda + \lambda D)^{-1} G = \sum_{j=1}^m (\tilde{\lambda}_j + \lambda D_{jj})^{-1} \tilde{g}_j \tilde{g}_j^T, \quad (8.22)$$

где  $\tilde{g}_i$  – собственные вектора матрицы  $\Phi$ , являющиеся строками матрицы  $G$ .

Таким образом, один раз на каждой итерации находятся матрицы собственных векторов  $G$  и собственных значений  $\Lambda$  матрицы  $\Phi$ , а матрица  $(\Phi + \lambda D)^{-1}$  при подборе  $\lambda$  рассчитывается по формуле (8.22), что существенно сокращает объем вычислений.

Численные процедуры МНК, основанные на аппроксимации остаточной суммы квадратов.

а) Метод наискорейшего спуска.

Рассмотрим вначале метод наискорейшего спуска, состоящий в линеаризации по параметрам остаточной суммы  $S^2(\underline{\theta})$ .

Разложим  $S^2(\underline{\theta})$  в ряд Тейлора по степеням  $\theta_j$  в окрестности некоторой текущей точки  $\hat{\theta}_r$  с учетом лишь членов первого порядка

$$S^2(\underline{\theta}) \approx S^2(\hat{\theta}_r) + \sum_{j=1}^m \left. \frac{\partial S^2(\underline{\theta})}{\partial \theta_j} \right|_{\hat{\theta}_r} * (\theta_j - \hat{\theta}_{rj}), \quad (8.23)$$

где  $\frac{\partial S^2(\underline{\theta})}{\partial \theta_j}, j = \overline{1, m}$  – компоненты градиента функции  $S^2(\underline{\theta})$ .

В методе наискорейшего спуска шаг  $\Delta \underline{\theta}_r$  делается в направлении отрицательного градиента

$$\hat{\theta}_{r+1} = \hat{\theta}_r - V_r \frac{\underline{g}_r}{\|\underline{g}_r\|}. \quad (8.24)$$

Размер шага определяется величиной  $V_r$  и должен быть таким, чтобы выполнялось условие (8.14). Поскольку направление  $-\underline{g}_r$  – направление наискорейшего убывания  $S^2(\underline{\theta})$ , то всегда найдется достаточно малый шаг, обеспечивающий выполнение условия (8.14).

б) Квадратичная аппроксимация

Рассмотрим группу методов, использующих локальную квадратичную аппроксимацию функции  $S^2(\underline{\theta})$  по  $\underline{\theta}$ . Разложим функцию  $S^2(\underline{\theta})$  в окрестности  $\hat{\theta}_r$  в ряд Тейлора по  $\underline{\theta}$ , включая члены до второго порядка.

$$S^2(\underline{\theta}) \approx S^2(\hat{\theta}_r) + \underline{g}^T (\underline{\theta} - \hat{\theta}_r) + \frac{1}{2} (\underline{\theta} - \hat{\theta}_r)^T H (\underline{\theta} - \hat{\theta}_r), \quad (8.25)$$

где  $\underline{g}$  – градиент функции  $S^2(\underline{\theta})$  в точке  $\hat{\theta}_r$ ,  $H$  – матрица вторых производных  $\frac{\partial^2 S^2(\underline{\theta})}{\partial \theta_j \partial \theta_t}$  в точке  $\hat{\theta}_r$  с элементами

$$\frac{\partial^2 S^2(\underline{\theta})}{\partial \theta_j \partial \theta_t} = -2 \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^N \left. \frac{\partial^2 \eta(x_l, \underline{\theta})}{\partial \theta_j \partial \theta_t} \right|_{\hat{\theta}_r} \left[ y_{li} \eta(x_l, \hat{\theta}_r) \right] \tilde{\sigma}_{il} + 2 \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^N \left. \frac{\partial \eta(x_l, \underline{\theta})}{\partial \theta_j} \right|_{\hat{\theta}_r} \left. \frac{\partial \eta(x_l, \underline{\theta})}{\partial \theta_t} \right|_{\hat{\theta}_r} \tilde{\sigma}_{il}. \quad (8.26)$$

Сравнивая (8.26) с выражением для элементов матрицы  $\Phi = F^T \Sigma^{-1} F$

$$\overline{\Phi}_{jl} = \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^N \left. \frac{\partial \eta(x_l, \underline{\theta})}{\partial \theta_j} \right|_{\hat{\theta}_r} \left. \frac{\partial \eta(x_l, \underline{\theta})}{\partial \theta_t} \right|_{\hat{\theta}_r} \tilde{\sigma}_{il}, \quad (8.27)$$

видим, что матрица  $\Phi$  системы нормальных уравнений является приближением матрицы  $H$ , причем тем лучшим, чем меньше величины остатков  $y_{li} \eta(x_l, \hat{\theta}_r)$ .

Необходимое условие минимума (8.25) – есть равенство нулю производных  $\frac{\partial S^2(\underline{\theta})}{\partial \theta_j}, j = \overline{1, m}$  (матрица  $H$  уже будет просто числовой матрицей и не зависит от  $\underline{\theta}$ ):

$$\underline{g} + H(\underline{\theta} - \hat{\theta}_r) = 0, \quad (8.28)$$

откуда при невырожденной матрице  $H$

$$\underline{\theta} - \hat{\theta}_r = -H^{-1} \underline{g}. \quad (8.29)$$

Выражение (8.29) определяет шаг итерационного процесса в методе Ньютона-Рафсона.

Если бы функция  $S^2(\underline{\theta})$  была квадратичная, (8.29) давало бы решение за одну итерацию. При не квадратичной функции  $S^2(\underline{\theta})$  процесс поиска  $\hat{\underline{\theta}}$  будет итерационным.

$$\hat{\underline{\theta}}_{r+1} = \hat{\underline{\theta}}_r - H_r^{-1} \underline{g}_r. \quad (8.30)$$

Если окажется, что  $S^2(\hat{\underline{\theta}}_{r+1}) > S^2(\hat{\underline{\theta}}_r)$ , то аналогично методу Хартли провести дополнительную оптимизацию  $S^2(\hat{\underline{\theta}}_{r+1})$  по величине шага  $V_r$ .

$$\hat{\underline{\theta}}_{r+1} = \hat{\underline{\theta}}_r - V_r^* H_r^{-1} \underline{g}_r,$$

где  $V_r^* = \underset{V_r}{\operatorname{Arg\,min}} S^2(\hat{\underline{\theta}}_r - V_r H_r^{-1} \underline{g}_r)$ .

Как было показано выше для выполнения условий (8.14) достаточно, чтобы

$$\left. \frac{\partial S^2(\hat{\underline{\theta}}_{r+1})}{\partial V_r} \right|_{V_r=0} < 0. \quad (8.31)$$

Но имеем (по аналогии с (8.17)):

$$\left. \frac{\partial S^2(\hat{\underline{\theta}}_{r+1})}{\partial V_r} \right|_{V_r=0} = -\underline{g}_r^T H_r^{-1} \underline{g}_r. \quad (8.32)$$

Следовательно, условие (8.31), а значит и (8.14) будут иметь место, если матрица  $H_r^{-1}$ , а значит и  $H_r$  – положительно определены. Иначе итерационный процесс может быть расходящимся.

Для обеспечения положительной определенности и невырожденности матрицы  $H_r$  существует группа методов (см. Бард П. Нелинейное оценивание параметров. – М.Статистика,1979).

Известные методы переменной метрики также можно отнести к методам, основанным на квадратичной аппроксимации  $S^2(\underline{\theta})$ .

Здесь оценки рассчитываются по схеме:

$$\hat{\underline{\theta}}_{r+1} = \hat{\underline{\theta}}_r - \tilde{H}_r \underline{g}_r,$$

а матрица  $\tilde{H}_r$  на каждом шаге корректируется так, чтобы она была приближением  $H_r^{-1}$ . Матрица  $\tilde{H}_r$  часто строится на основе векторов  $\underline{g}_r$ .

### Интервальное оценивание параметров в моделях нелинейной регрессии.

Построение и анализ доверительных областей позволяет проверять статистические гипотезы о равенстве вектора параметров  $\underline{\theta}$  некоторому фиксированному вектору  $\underline{\theta}_0, H_0: \underline{\theta} = \underline{\theta}_0$ . Построение точных доверительных областей параметров  $\underline{\theta}$  для нелинейных моделей возможно лишь для некоторых частных видов функции  $\eta(\underline{x}, \underline{\theta})$ .

На практике распространение получили приближенные методы, использующие те или иные допущения.

1-ый способ. В предположении, что оценка  $\hat{\underline{\theta}}_N$  асимптотически нормальна асимптотическая доверительная область, накрывающая вектор истинных значений параметров  $\underline{\theta}_N$  с вероятностью  $1-\alpha$  может быть выражена(по аналогии со случаем линейной параметризации в виде неравенства).

$$(\underline{\theta} - \hat{\underline{\theta}}_N)^T C_N^{-1} (\underline{\theta} - \hat{\underline{\theta}}_N) \leq m F_\alpha(m, N - m), \quad (8.33)$$

где  $C_N = \hat{\sigma}_N^2 (F_N^T F_N)^{-1}$  – асимптотическая ковариационная матрица оценок;

$F_N^T$  – матрица частных производных  $\frac{\partial \eta(x_i, \theta)}{\partial \theta_j}$ ;

$\hat{\sigma}_N^2 = \frac{S^2(\hat{\theta}_N)}{N - m}$  – оценка остаточной дисперсии по выборке (в случае, когда модель  $\eta(\underline{x}, \underline{\theta})$  адекватна);

$F_\alpha(m, N - m)$  –  $\alpha$  – процентное критическое значение  $F$  – распределения с  $m$  и  $N - m$  степенями свободы.

Неравенство (8.33) можно записать также в виде:

$$(\underline{\theta} - \hat{\theta}_N)^T (F_N^T F_N) (\underline{\theta} - \hat{\theta}_N) \leq \frac{m}{N - m} S^2(\hat{\theta}_N) F_\alpha(m, N - m). \quad (8.34)$$

При небольших выборках эллипсоидная область (8.34) будет грубой оценкой доверительной области, если нелинейность  $\eta(\underline{x}, \underline{\theta})$  по  $\underline{\theta}$  существенна.

2-ый способ. Несколько более точную оценку доверительной области при конечных выборках можно получить, если функция  $S^2(\underline{\theta})$  локально квадратичная по  $\underline{\theta}$  в окрестности  $\hat{\theta}_N$ .

$$S^2(\underline{\theta}) \approx S^2(\hat{\theta}_N) + \frac{1}{2} (\underline{\theta} - \hat{\theta}_N)^T H (\underline{\theta} - \hat{\theta}_N), \quad (8.35)$$

где матрица  $H$  (матрица вторых частных производных, см. формулу (8.26)) вычисляется в точке  $\hat{\theta}_N$ .

## **9. Оптимальное планирование эксперимента при описании процессов моделями в виде систем обыкновенных дифференциальных уравнений**

Теория планирования эксперимента для динамических систем получила сейчас интенсивное развитие. Развиваются как теоретические, так и методологические её аспекты. Причем все больше внимание исследователей привлекают динамические модели в виде обыкновенных дифференциальных уравнений.

Принято рассматривать модели динамических систем, состоящие из двух частей – модели состояния и модели наблюдения. Модель состояния будем задавать в виде системы дифференциальных уравнений

$$\frac{d\eta}{dt} = g(\eta, t, u, \underline{\theta}) \quad (9.1)$$

с начальными условиями  $\eta(0) = \eta^0(t^0, \underline{\theta})$ , где  $\eta$  –  $r$ -мерный вектор переменных состояния;  $\underline{\theta}$  –  $m$ -мерный вектор параметров, подлежащих оцениванию из эксперимента,  $t$  – переменная времени,  $u$  –  $l$ -мерный вектор входных сигналов системы.

Модель наблюдения за динамической системой задается выражением

$$y = H^T \eta + v, \quad (9.2)$$

где  $y$  –  $q$ -мерный вектор экспериментальных измеряемых линейных комбинаций переменных состояния,  $H^T$  –  $(q \times r)$ -матрица наблюдений,  $v$  –  $q$ -мерный вектор случайных ошибок. Будем предполагать, что наблюдения за вектором  $y$  носят дискретный характер, а  $v$  обладает следующими свойствами:

$$E\{v\} = 0, E\{v(t_i), v(t_j)\} = R \delta_{ij},$$

где  $R$  – матрица ковариаций измеряемых откликов порядка  $q$ , которая является постоянной на области действия фактора времени  $t$ .

Модель системы (9.1), (9.2) относится к классу нелинейных по параметрам моделей. В отличие от (8.1) функциональная зависимость переменных состояния от параметров и входных переменных в (9.1) задана неявно. Это сказывается как на организации вычислительных процедур, так и на требованиях, предъявляемых к модели (9.1). Прежде всего необходимо, чтобы задача Коши (9.1) была корректно поставлена, то есть решение ее существовало и было единственным при заданных  $u, \theta$ . Эти условия выполняются при следующих предположениях:

а) функции  $g_i(\eta, t, u, \theta)$  ( $i = \overline{1, p}$ ) непрерывны на некотором открытом множестве  $G$  переменных  $(t, \eta)$ ;

б) частные производные  $\frac{\partial g_i(\eta, t, u, \theta)}{\partial \eta_i}$  ( $i, j = \overline{1, p}$ ) непрерывны на множестве  $G$ .

Условия существования и непрерывности частных производных  $\frac{\partial \eta_i}{\partial \theta_j}$  ( $i = \overline{1, p}, j = \overline{1, m}$ ) также определяются свойствами функций  $g(\eta, t, u, \theta)$  правых частей системы (9.1);

в) функции  $g_i(\eta, t, u, \theta)$ ,  $\frac{\partial g(\eta, t, u, \theta)}{\partial \eta_j}$  ( $j = \overline{1, p}$ ),  $\frac{\partial g(\eta, t, u, \theta)}{\partial \theta_j}$  ( $j = \overline{1, m}$ ) непрерывны

на множестве  $\tilde{G}$  переменных  $(t, \eta, \theta)$ . Для выполнения тех же предположения для производных от  $\eta$  по  $\theta$  более высокого порядка необходимо потребовать непрерывность смешанных производных того же порядка от  $g(\eta, t, u, \theta)$  по каким либо переменным  $\eta, \theta$ . В дальнейшем будем считать, что необходимые предположения выполняются, и задача Коши поставлена корректно.

В отличие от задач статики планирование эксперимента при идентификации динамических моделей отличается значительно более широкими возможностями в отношении способов воздействия на точность оценок параметров. В самом простом варианте управление экспериментом может осуществляться путем выбора оптимальных моментов измерений. В более усложненном варианте это может быть планирование оптимальных дополнительных условий и планирование оптимальных идентифицирующих сигналов. Возможны также различные варианты смешанных схем.

Зависимость наблюдаемых величин от  $\theta$ , как мы уже отмечали, носит нелинейный характер, и оптимальные планы, как известно, в этом случае будут зависеть от неизвестных параметров  $\theta$ . Здесь в принципе возможно использование всех известных стратегий планирования, применяемых для нелинейных по параметрам моделей в статике, а именно: локально-оптимальное априорное и последовательное планирование, минимаксное или байесовское планирование.

**Планирование оптимальных измерений.** Пусть начальные условия  $\eta(0)$  известны и заданы, задан также вектор управляющих входных сигналов  $u$ . Под планом эксперимента при планировании измерений будем понимать совокупность точек  $t_j$  ( $j = \overline{1, n}$ ) - моментов наблюдения и соответствующих им весов наблюдений  $P_j$  ( $j = \overline{1, n}$ ):

$$\varepsilon = \left\{ \begin{matrix} t_1, t_2, \dots, t_n \\ P_1, P_2, \dots, P_n \end{matrix} \right\}; \quad \sum_{i=1}^n P_i = 1, \quad P_i \geq 0.$$

Информационная матрица нормированного плана  $\varepsilon$  записывается в виде

$$M(\theta, \varepsilon) = \sum_{i=1}^n P_i M(\theta, t_j),$$

где  $M(\underline{\theta}, t_j)$  - информационная матрица наблюдения в точке  $t_j$ .

В общем случае многооткликowej модели наблюдения (9.2)  
 $M(\theta, t) = F(t, \theta) R^{-1}(t) F^T(t, \theta)$ , где  $F^T(t, \theta)$  - матрица Якоби, определяемая по формуле  
 $F^T(t, \theta) = \frac{H^T \partial \eta}{\partial \theta}$ . Для нахождения частных производных  $\frac{\partial \eta}{\partial \theta}$  необходимо решить совместно

уравнения состояния с начальными условиями из (9.1) и дополнительные, так называемые, уравнения чувствительности

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \eta}{\partial \theta} \right) = \frac{\partial g(\eta, t, u, \theta)}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial \theta} + \frac{\partial g(\eta, t, u, \theta)}{\partial \theta} \quad (9.3)$$

$$\text{с начальными условиями } \left( \frac{\partial \eta}{\partial \theta} \right)_{t=0} = \frac{\partial \eta^0(t^0, \theta)}{\partial \theta}.$$

### Оптимальное планирование входных сигналов

При параметрической идентификации процессов различной природы используются некоторым образом выбранные входные воздействия (управляющие сигналы), которые позволяют возбуждать соответствующие этим процессам динамические объекты для получения необходимого экспериментального материала. Выбор оптимальных входных воздействий дает возможность значительно повысить эффективность исследования.

Рассмотрим постановку задачи планирования оптимальных входных воздействий в предположении, что управляющий сигнал является кусочно-постоянным на  $K$  фиксированных интервалах времени, а замеры откликов производятся дискретно на правых границах этих интервалов. Координаты  $U_j$  некоторой  $j$ -ой точки плана при этих условиях задаются значениями амплитуд сигнала на каждом из поддиапазонов разбиения. Информационная матрица однократных наблюдений в  $j$ -ой точке плана будет иметь вид:

$$M(\underline{u}_j, \underline{\theta}) = \sum F(t_r, \underline{u}_j, \underline{\theta}) R^{-1}(t_r) F^T(t_r, \underline{u}_j, \underline{\theta}).$$

Для вычисления элементов матрицы  $F(t, \underline{u}_j, \theta)$  систему уравнений (9.1), (9.3) вследствие кусочно-постоянного характера уравнения необходимо решать по участкам. Информационная матрица в целом вычисляется по формуле:

$$M(\underline{\theta}, \varepsilon) = \sum_{j=1}^n P_j M(\underline{u}_j, \underline{\theta}),$$

где  $n$  теперь будет определять число «запусков» системы.

Данная постановка допускает достаточно простую программную реализацию, однако кусочно-постоянный характер управляющего сигнала существенно ограничивает применимость данного подхода. Ситуация также усложняется, когда наблюдения за откликами производятся непрерывно. В последнем случае каждая точка плана теперь представляется векторной управляющей функцией  $\underline{u}(t)$  и информационная матрица наблюдения за  $i$ -м процессом выражается формулой

$$M(\underline{u}_j(t), \underline{\theta}) = \int_{\Omega_t} F(\underline{u}_j(t), \underline{\theta}) R^{-1}(t) F^T(\underline{u}_j(t), \underline{\theta}) dt,$$

где  $\Omega_t$  - интервал наблюдения. Задача построения оптимальных планов приобретает вариационный характер, и для ее решения необходимо привлекать методы теории оптимального управления – достаточно сложные с точки зрения их вычислительных реализаций, что вынуждает многих авторов ограничиваться построением одноточечных планов (то есть планов, реализующих один «запуск» системы).



Существует, вообще говоря, большое многообразие методов решения задачи построения оптимальных планов входных сигналов для моделей в пространстве состояний, но, пожалуй, ни один из них не может претендовать на исключительность своего применения.

### Оптимальное планирование модели наблюдения

В задачах планирования многооткликовых экспериментов зачастую имеется возможность выбирать, какие отклики будут измеряться в эксперименте. В то же время выбор той или иной модели наблюдения (другими словами – набора измеряемых откликов) непосредственно отражается на информационной матрице и на связанной с ней дисперсионной матрице оценок параметров. Сравнивать информативность целесообразно в условиях наиболее выгодных для каждой модели наблюдения, вычисляя меру информативности на основе, например, D-оптимального плана для каждой модели. Если идти по этому пути, то в сложных задачах с большим числом измеряемых откликов затраты на выделение наиболее информативных моделей наблюдения становятся недопустимо большими. Здесь мы рассмотрим случай, когда предварительный анализ моделей наблюдения безотносительно к плану экспериментов заставляет выбирать среди них наиболее информативные.

Пусть изучаемый процесс описывается  $p$ -мерной моделью с независимыми составляющими вида

$$\eta(\underline{x}, \underline{\theta}) = (\eta_1(\underline{x}, \underline{\theta}), \eta_2(\underline{x}, \underline{\theta}), \dots, \eta_p(\underline{x}, \underline{\theta}))^T,$$

где  $\eta()$  - вектор переменных состояния.

Предположим далее, что наблюдения за процессом осуществляются в соответствии с моделью

$$y_{vj} = H^T \eta(x_v, \theta) + \nu_{vj}, \quad (j = \overline{1, r_v}), \quad (v = \overline{1, N}), \quad (9.4)$$

где  $y_{vj}$  -  $j$ -ая реализация  $q$ -мерного случайного вектора наблюдаемых откликов  $y_v$  в точке  $x_v$ ;  $r_v$  - число повторных наблюдений в точке  $x_v$ ;  $N$  - число различных точек наблюдения;  $H^T$  - матрица наблюдения размерами  $q \times p$ ;  $\nu_{vj}$  - случайная составляющая. Примем обычные предположения: контролируемые переменные и параметры детерминированы, случайная составляющая удовлетворяет условиям

$$E\{\nu_v\} = 0_{q,1}; \quad E\{\nu_v \cdot \nu_w^T\} = R \sigma^2 \delta_{vw},$$

$R$  - известная положительно определенная симметричная матрица порядка  $q$ ;  $\sigma^2$  - неизвестный параметр, характеризующий ошибку эксперимента.

Оценивание неизвестных параметров  $\theta$  будем проводить по методу наименьших квадратов, минимизируя по  $\theta$  взвешенную сумму квадратов отклонений

$$S(\theta) = \sum_{v=1}^N \sum_{j=1}^{r_v} [y_{vj} - H^T \eta(x_v, \theta)]^T R^{-1} [y_{vj} - H^T \eta(x_v, \theta)].$$

Точность оценивания параметров  $\theta$ , которую мы будем характеризовать дисперсионной матрицей

$$D(\hat{\theta}) = \left( \sum_{v=1}^N F_v H r_v R^{-1} H^T F_v^T \right)^{-1} \sigma^2,$$

где  $F_v = \frac{\partial \eta(x_v, \theta)}{\partial \theta}$ , будет зависеть от выбранной матрицы наблюдения  $H^T$ .

Пусть имеется 2 модели наблюдения с соответствующими матрицами  $H_1^T$ ,  $R_1$  и  $H_2^T$ ,  $R_2$ , имеющими размеры  $H_1^T$  -  $q_1 \times p$ ,  $H_2^T$  -  $q_2 \times p$  и ранг  $rg H_1^T = rg H_2^T = p$ ,  $q_1 \geq p$ ,  $q_2 \geq p$ . Будем считать, что первая модель наблюдения более информативна, чем вторая,

$$\left( \frac{1}{q_1} H_1 R_1^{-1} r_v H_1^T \right)^{-1} \sigma^2 < \left( \frac{1}{q_2} H_2 R_2^{-1} r_v H_2^T \right)^{-1} \sigma^2 \quad (9.5)$$

$$\text{или } \frac{1}{q_1} H_1 R_1^{-1} r_v H_1^T > \frac{1}{q_2} H_2 R_2^{-1} r_v H_2^T.$$

Можно показать, что выполнение условия (9.5) влечет за собой выполнение условия  $\frac{1}{q_1} M_1(\varepsilon, \hat{\theta}) > \frac{1}{q_2} M_2(\varepsilon, \hat{\theta})$  где  $M_i(\varepsilon, \hat{\theta}) = \sum_{v=1}^N F_v H_i P_v R_i^{-1} H_i^T F_v^T$ ,  $i=1,2$ ,  $P_v = r_v/N$  - вес точки  $x_v$  в плане  $\varepsilon$ , которым обозначается совокупность точек наблюдения  $x_v$  с соответствующими весами  $P_v$ ,  $v = \overline{1, N}$ . Рассмотрим разницу матриц

$$\begin{aligned} \frac{1}{q_1} M_1(\varepsilon, \hat{\theta}) - \frac{1}{q_2} M_2(\varepsilon, \hat{\theta}) &= \sum_{v=1}^N F_v \left( \frac{1}{q_1} H_1 P_v R_1^{-1} H_1^T - \frac{1}{q_2} H_2 P_v R_2^{-1} H_2^T \right) F_v^T = \\ &= \sum_{v=1}^N F_v P_v \left( \frac{1}{q_1} H_1 R_1^{-1} H_1^T - \frac{1}{q_2} H_2 R_2^{-1} H_2^T \right) F_v^T. \end{aligned}$$

Разность матриц  $\frac{1}{q_1} H_1 P_v R_1^{-1} H_1^T - \frac{1}{q_2} H_2 P_v R_2^{-1} H_2^T$  является положительно определенной матрицей, из чего следует заключить, что и разность матриц будет положительно определенной матрицей, то есть неравенство справедливо.

Здесь интересно отметить, что матрица  $(H R^{-1} H^T)^{-1}$  будет дисперсионной матрицей для оценки вектора переменных состояния  $\eta$  в какой-либо точке наблюдения.

Полученные результаты дают возможность реализовать двухступенчатую процедуру выбора оптимальной пары: модели наблюдения и плана. Если обозначить все множество допустимых моделей наблюдения, удовлетворяющих отмеченным выше требованиям, через  $\Omega_H$ , то оптимальную модель наблюдения  $H^{*T}$  можно найти из условия

$H^{*T} = \text{Arg max}_H \Psi \left[ \frac{1}{q} H R^{-1} H^T \right]$ . После того, как оптимальная модель наблюдения выбрана, при необходимости решают задачу построения оптимального плана эксперимента, минимизируя (максимизируя) функционал от нормированной информационной матрицы  $\frac{1}{q} M(\varepsilon, \hat{\theta})$ .

Проиллюстрируем изложенный выше подход к выбору оптимальной модели наблюдения на примере планирования кинетического эксперимента. Пусть множество всех допустимых моделей наблюдения  $\Omega_H$  определяется различными сочетаниями строк следующей стехиометрической матрицы

$$\Omega_H \quad C = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ -1 & -1 \\ 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

В этом случае число переменных состояния  $p = 2$  и число откликов  $q$  (строк в матрице наблюдений  $H^T$ ) для всех возможных моделей наблюдения должно быть не меньше 2. Модели наблюдения будем обозначать номерами вошедших в матрицу  $H^T$  строк матрицы  $C$ . Например, модель (1, 2) имеет следующую матрицу наблюдения  $H_{12}^T$ :

$$H_{12}^T = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Всего различных моделей наблюдения ранга 2 будет 11. Для ранжировки их по информативности в качестве функционала  $\Psi$  будем использовать определитель  $\left| \frac{1}{q} H H^T \right|$  и

след  $tr\left(\frac{1}{q} H H^T\right)^{-1}$  считая, что отклики не коррелируют друг с другом.

Функционал $\Psi$	Модель наблюдения										
	(1,2)	(1,3)	(1,4)	(2,3)	(2,4)	(3,4)	(1,2,3)	(1,2,4)	(1,3,4)	(2,3,4)	(1,2,3,4)
$\left  \frac{1}{q} H H^T \right $	1/4	1/4	1/4	1	1/4	1/4	2/3	1/3	1/3	2/3	9/16
$tr\left(\frac{1}{q} H H^T\right)^{-1}$	6	6	4	2	6	6	5/2	4	4	5/2	8/3

Наиболее информативной следует признать модель (2, 3). Если отдельно рассмотреть трехоткликовые модели, то среди них наиболее информативными являются модели (1, 2, 3) и (2, 3, 4).

В заключение отметим, что полученные рекомендации по выбору оптимальной модели наблюдения справедливы как при линейной, так и при нелинейной параметризации модели процесса и не связаны с конкретными значениями параметров.

### Алгоритмические аспекты построения оптимальных планов

В предыдущих пунктах рассмотрены некоторые из возможных постановок задач планирования эксперимента для моделей динамических систем, заданных в пространстве состояний системой обыкновенных дифференциальных уравнений. Здесь мы определим круг используемых для решения этих задач алгоритмов и подходов.

**Планирование моментов наблюдений.** В случае планирования моментов измерений вектор входных переменных вырождается в скаляр и включает только время  $t$ . При вычислении элементов информационной матрицы решение систем (9.1), (9.3) ищется при зафиксированных начальных условиях и векторе управления  $U(t)$ .

Вектор-градиент функционала  $\nabla_t \Psi[M(\varepsilon)]$  по точкам плана выглядит следующим образом:

$$\nabla_t \Psi[M(\varepsilon)] = \left( P_i S_p \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial M(\varepsilon)} F(t_i, U, \theta) \cdot R^{-1}(t_i) d_t F^T(t_i, U, \theta) \right)_{i=1}^n, \quad (9.6)$$

где матрица производных  $d_t F^T(t_i, U, \theta)$  определяется формулой

$$d_t F^T(t_i, U, \theta) = H^T \frac{\partial^2 \eta}{t \partial \theta}.$$

Производные по  $t$  от  $\frac{\partial \eta}{\partial \theta}$  представляют собой значения правых частей системы дополнительных уравнений (9.3).

Градиент функционала  $\nabla_p \Psi[M(\varepsilon)]$  по всем точкам плана записывается аналогично (9.6) без взятия производных от  $F(t, U, \theta)$ :

$$\nabla_p \Psi[M(\varepsilon)] = \left( S_p \frac{\partial \Psi[M(\varepsilon)]}{\partial M(\varepsilon)} M(t_j, \theta) \right)_{j=1}^n.$$

Возможность вычисления векторов-градиентов функционала по весам и координатам точек плана позволяет в данном случае для построения оптимальных непрерывных и дискретных планов использовать любые из рассмотренных алгоритмов градиентного комбинированного типа. Если весь интервал наблюдения за процессом представить в виде множества возможных моментов дискретных наблюдений, то становится возможным для построения планов использование алгоритмов оптимальных планов на фиксированном множестве точек. В этом случае отпадает необходимость вычисления вектора-градиента по координатам точек плана (9.6).

**Планирование модели наблюдения.** В той постановке, как это было сделано ранее, задачу эту можно решить на этапе предпланирования эксперимента в рамках обычных линейных по параметрам моделей. Более всего подходит здесь использование метода перебора или какого-либо алгоритма построения дискретных планов на фиксированном множестве точек.

**Планирование входных сигналов.** Вычислительные трудности решения таких задач могут быть преодолены, если прибегнуть к параметризации управляющих сигналов. Параметризация управляющего сигнала является наиболее простым и широко распространенным подходом в частности к решению задач оптимального управления. В этом случае сигнал (управляющая функция) разлагается в ряд по системе базисных функций:

$$U(t) = \sum_{i=1}^K a_i \varphi_i(t). \quad (9.7)$$

В качестве базиса могут использоваться различные системы ортогональных функций (Лагерра, Лежандра, Чебышева, экспоненциальные и т.д.). В случае, когда требуется, чтобы входной сигнал являлся кусочно-постоянным, выгодно использовать ортогональные кусочно-постоянные функции Уолша или другие подобные им функции, применяемые в теории цифровой обработки сигналов.

При построении оптимальных планов по входному воздействию в качестве управляемых факторов будут выступать коэффициенты  $a_i, i = \overline{1, K}$  разложения (9.7). Говоря об оптимальности входного сигнала, следует учитывать справедливость этого утверждения только для рассматриваемого базиса функций  $\varphi_i(t), i = \overline{1, K}$ . В ряде случаев, когда выбор подходящей системы базисных функций априори затруднен, можно предложить другой подход, связанный со сплайн-аппроксимацией управляющей функции. Сущность его заключается в следующем.

На интервале наблюдения  $t \in [0 : T]$  задаются системой узлов  $0 \leq z_1 \leq z_2 \leq \dots \leq z_l \leq T$ . В узлах  $z_i, i = \overline{1, l}$  задают значение сигнала  $U(z_i)$  и проводят сплайн-аппроксимацию значений  $U(z_i), i = \overline{1, l}$  по всему интервалу наблюдения  $t \in [0 : T]$ . Тем самым мы получаем непрерывное описание процесса  $U(t)$  на всем интервале  $t \in [0 : T]$ .

При построении оптимальных планов по входному воздействию в качестве факторов-переменных будут выступать ординаты  $U(z_i)$  искомой функции  $U(t)$  в заданных точках  $z_i, i = \overline{1, l}$ .

Точность аппроксимации исходного непрерывного сигнала мы можем регулировать в широких пределах, меняя число узлов  $l$ , а также базис сплайн-функции. Минимальное число узлов  $z_i$  в зависимости от типа сплайна может быть от 1 до 4. Максимальное же число узлов в случае дискретно наблюдаемых процессов имеет смысл установить равным числу наблюдений на заданном интервале  $[0: T]$ , а узлы  $z_i$  расположить в точках наблюдения. Выбор типа сплайна, также влияет на точность и вид аппроксимирующей функции. Так, например, использование сплайнов нулевого порядка, дает возможность получать кусочно-постоянные сигналы с числом переключений, равному максимальному числу узлов без единицы; исследование сплайнов первого порядка дает кусочно-линейный характер изменения сигнала. Параболические и кубические сплайны можно использовать для описания широкого класса непрерывных гладких функций.

При использовании сплайн-аппроксимации несколько проще учитывать ограничения на входной сигнал, поскольку они непосредственно связаны со значениями факторов  $U(z_i)$ .

В подходе с параметризацией управляющей функции по базису (9.7) точность решения задачи во многом зависит от выбора системы базисных функций, определяемой как видом, так и их количеством. В случае полиномиального базиса точность аппроксимации определяется максимальной степенью полинома.

Если, например, базис содержит полиномы до первой, второй и третьей степени, то точность аппроксимации будет такой же, если использовать соответственно сплайн первого порядка с двумя узлами, сплайн второго порядка с тремя узлами и сплайн третьего порядка с числом узлов равным четырем. Здесь, как мы видим, число факторов-коэффициентов  $a_i, i = \overline{1, R}$  и число факторов ординат  $U(z_i), i = \overline{1, l}$  совпадают. Однако, если, например, при кубической сплайн-интерполяции мы добавим хотя бы один узел, то получим улучшение точности аппроксимации, которой в общем случае уже не удастся достичь, если в случае параметризации перейти к базису, имеющему полином четвертой степени.

Таким образом проблема поиска подходящей системы базисных функций при сплайн-аппроксимации практически сводится к более простой задаче подбора достаточного числа узловых точек.

Если решается совместная задача планирования, скажем, моментов наблюдения и входного сигнала, то особенность ее следующая. Обычно ситуация такова, что измерение откликов системы проводятся во все необходимые моменты времени при какой-то одной реализации входного сигнала. Тогда для решения задач совместного определения оптимальных входных сигналов, моментов измерений и начальных условий целесообразно использовать последовательный подход, выбирая вначале, скажем, оптимальный в некотором смысле входной сигнал, а затем уточняя моменты наблюдения.

Введем следующие обозначения  $\Omega_u$  - множество возможных управляющих сигналов,  $\Omega_{\eta^0}$  - множество возможных начальных условий,  $\Omega_t$  - множество возможных моментов наблюдений. Условия, в которых проводится исследование динамического процесса таковы, что экспериментатор ограничен в общем числе проводимых измерений за процессом, но может их выбирать из  $\Omega_t$ . Здесь возможны следующие смешанные схемы планирования.

1. Выбор сигнала и моментов наблюдения. Вначале на множестве  $\Omega_u$  выбирается оптимальный сигнал  $U^*(t)$ . При этом в качестве моментов наблюдений выступает все

множество  $\Omega_t$ . Далее при фиксированном  $U^*(t)$  выбирается необходимое число моментов измерений из  $\Omega_t$ .

2. Выбор начальных условий и моментов наблюдений. Вначале таким же способом выбирается оптимальный набор  $\eta^{*0}$  начальных условий, а затем на втором шаге – оптимальные моменты измерений.
3. Выбор начальных условий, управляющих сигналов и моментов наблюдения. Маловероятная ситуация. Однако здесь логично поступить таким же образом, выбирая вначале на множествах  $\Omega_u$ ,  $\Omega_{\eta^0}$  оптимальную пару  $U^*(t)$ ,  $\eta^{*0}$ , а затем оптимальный набор моментов измерений.

При программной реализации выбор входных сигналов и моментов наблюдения можно разделить во времени или проводить за время одного сеанса связи с ЭВМ. В рассматриваемой версии пакета программ, описанной в главе 3, принят первый вариант, когда задачи выбора оптимального входного сигнала и моментов измерений рассматриваются как отдельные независимые задачи.

Рассмотрим пример решения задачи синтеза оптимального входного сигнала для следующей модели.

$$\begin{aligned}\frac{d\eta_1}{dt} &= \theta_1\eta_1 + \theta_2\eta_2 + \theta_3u(t), \eta_1(0) = 0, \\ \frac{d\eta_2}{dt} &= \theta_4\eta_1 + \theta_5\eta_2 + \theta_6u(t), \eta_2(0) = 0,\end{aligned}$$

где  $\eta_1, \eta_2$  - переменные состояния;

$\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_6)^T$  - вектор оцениваемых параметров;

$u(t)$  - управляющее входное воздействие, которое может регулироваться в широких пределах по усмотрению экспериментатора;

$t$  - время.

На величину  $u(t)$  наложено технологическое ограничение вида:

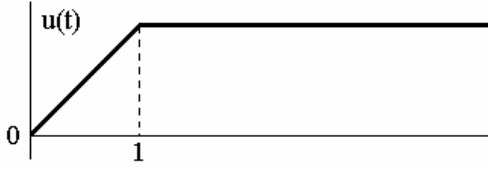

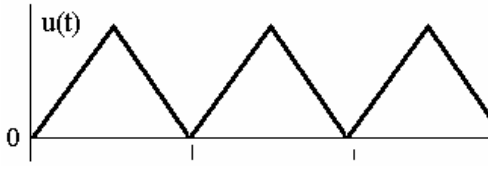
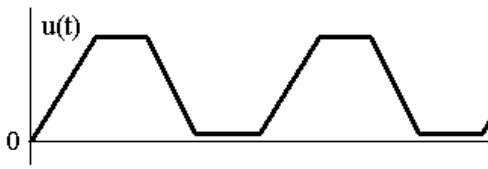
$$0 \leq u(t) \leq 1000.$$

Двухоткликовая модель наблюдений имеет вид:

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \end{pmatrix}.$$

Выбор оптимального управления проводился с позиций критерия D-оптимальности. С использованием параметрического подхода были построены планы управления для различных классов однопараметрических ( $K=1$  в разложении (1.3)) функций: линейно-возрастающие ограниченные сигналы, пилообразные сигналы, пилообразные сигналы с площадками постоянства. Единственной точкой D-оптимальных планов для всех указанных классов входных воздействий была крутизна  $U$  подъема (спуска) сигнала  $u(t)$ . Время подъема, период постоянства и время спуска периодических сигналов было одинаково. Измерения откликов проводились дискретно и равномерно на интервале  $t \in [0 : 5]$ . За базу для сравнения был взят линейно-возрастающий ограниченный сигнал с крутизной подъема  $U^0 = 1000$ , обычно используемый при проведении экспериментов.

### Характеристики сигналов

Вид сигнала	Оптимальный план $U^*$	$\ln M(\varepsilon) $ для $U^*$	$\ln M(\varepsilon) $ при $U^0 = 1000$
	$U^* = U_{\max} = 20000$	51.83	51.79
	$U^* = 910$	51.54	51.25
	$U^* = 6900$	73.0	55.16
	$U^* = 13470$	74.5	52.8

В приведенной таблице представлены виды исследуемых управляющих сигналов, локально D-оптимальные планы по входному воздействию (значение крутизны -  $U^*$ ), критерий оптимальности построенных планов (логарифм определителя информационной матрицы  $\ln|M(\varepsilon)|$ ). Лучшими здесь являются пилообразный сигнал и пилообразный с площадками постоянства.