Использование математических пакетов для построения оптимальных планов.[1]

Мелас В.Б., профессор кафедры статистического моделирования СПбГУ, v.melas@spbu.ru

Шпилев П.В., доцент кафедры статистического моделирования СПбГУ, p.shpilev@spbu.ru

Аннотация

Рассматривается задача построения оптимальных планов дискриминации двух тригонометрических моделей отличающихся наличием или отсутствием не более, чем трех старших членов. Ряд общих результатов был получен в работе [8], однако, некоторые частные случаи, представляющие самостоятельный интерес, остались за рамками данной статьи. В настоящей работе детально рассматривается один из таких случаев, а именно, случай дискриминации двух моделей, старшая из которых имеет порядок 2. Для этого случая оптимальные планы построены в явном виде с помощью математических пакетов. Полученные результаты могут быть использованы не только в задачах планирования, но и в теории приближений.

Введение

Предположим, исследователю необходимо из нескольких регрессионных моделей выбрать одну, наиболее адекватно соответствующую результатам эксперимента. Подобная задача часто возникает в регрессионном анализе(смотри, например, [3], [1], [2]). Ключевой вопрос заключается в том, как в этом случае следует проводить эксперимент. В литературе описываются два подхода. Первый состоит в рассмотрении класса вложенных моделей и построении плана, позволяющего не только выбрать адекватную модель, но и оценить ее параметры (см. [11], [10], [12]). Другой подход был предложен в 1975 году в работе Аткинсона и Федорова ([5]) и получил название Т-критерия. Задача

[1] *Данная работа была поддержана Санкт-Петербургским государственным университетом (проект "Актуальные проблемы планирования и анализа для регрессионных моделей", 6.38.435.2015).*

построения Т-оптимальных планов рассматривалась множеством авторов (смотри [6], [14], [9], [4], [13] или [15, 16]). Недавно появился ряд статей, посвященных исследованию этой проблемы для дискриминации двух полиномиальных (см. [4], [7]) и двух тригонометрических([8]) моделей. В данных работах исследовалась зависимость Т-оптимальных планов от параметров моделей; в ряде случаев планы были найдены в явном виде. В общем случае, проблема построения Т-оптимального плана является сложной минимаксной задачей и искомые планы, как правило, удается построить только численно. Аналитические решения данной проблемы имеют большое практическое значение и приложение в достаточно широком спектре задач: в частности, они могут использоваться как инструменты тестирования численных оптимизационных методов.

В настоящей работе исследуется задача дискриминации двух вложенных тригонометрических моделей. Детально рассматривается случай, когда старшая модель имеет порядок 2. Для этого случая исследована зависимость локально-оптимальных планов от параметров старшей модели и определено множество[значений этих параметров], для которого оптимальные планы строятся в явном виде с помощью математических пакетов (Maple и Matlab).

Постановка задачи

Пусть результаты эксперимента описываются стандартным уравнением регрессии

$$y = \eta(x) + \varepsilon \quad \text{и} \quad x \in \mathcal{X},$$

где $\mathcal{X}$ множество возможных значений x, причем ошибки различных наблюдений (ε) являются независимыми случайными величинами с нулевым математическим ожиданием и общей дисперсией.

Рассмотрим две регрессионные модели: $\eta_1(x, \theta_1)$ и $\eta_2(x, \theta_2)$. Под T-оптимальным планом будем понимать план, максимизирующий величину отклонения первой модели от второй(которая предполагается истинной):

$$\xi^* = \arg\max_{\xi} \int_{\mathcal{X}} \left(\eta_2(x, \theta_2) - \eta_1(x, \widehat{\theta}_1)\right)^2 \xi(dx)$$

где $\widehat{\theta}_1$ — оценка, доставляющая минимум выражению:

$$\widehat{\theta}_1 = \arg\min_{\theta_1} \int_{\mathcal{X}} \left(\eta_2(x, \theta_2) - \eta_1(x, \theta_1)\right)^2 \xi(dx)$$

В настоящей работе в качестве регрессионных функций $\eta_1(x,\theta_1)$ и $\eta_2(x,\theta_2)$ мы рассмотрим следующие функции:

$$\eta_1(x,\theta_1) = \overline{q}_0 + \sum_{i=1}^{k_1} \overline{q}_{2i-1} \sin(ix) + \sum_{i=1}^{k_2} \overline{q}_{2i} \cos(ix) \tag{1}$$

и

$$\begin{aligned}\eta_2(x,\theta_2) &= \tilde{q}_0 + \sum_{i=1}^{k_1} \tilde{q}_{2i-1} \sin(ix) + \sum_{i=1}^{k_2} \tilde{q}_{2i} \cos(ix) \\ &+ \sum_{i=k_1+1}^{m} b_{2(i-k_1)-1} \sin(ix) + \sum_{i=k_2+1}^{m} b_{2(i-k_2)} \cos(ix),\end{aligned} \tag{2}$$

где

$$\begin{aligned}\theta_1 &= (\overline{q}_0, \overline{q}_2, \ldots, \overline{q}_{2k_2}, \overline{q}_1, \ldots, \overline{q}_{2k_1-1}) \\ \theta_2 &= (\tilde{q}_0, \ldots, \tilde{q}_{2k_2}, \tilde{q}_1, \ldots, \tilde{q}_{2k-1}, b_2, \ldots, b_{2m}, b_1, \ldots, b_{2m-1})\end{aligned}$$

векторы параметров моделей η_1 и η_2, соответственно. В качестве множества планирования будем рассматривать интервал $\mathcal{X} = [0, 2\pi]$. Обозначим разность $\eta_2(x,\theta_2) - \eta_1(x,\theta_1)$ за $\overline{\eta}(x, q, \overline{b})$:

$$\begin{aligned}\overline{\eta}(x,q,\overline{b}) = q_0 + \sum_{i=1}^{k_1} q_{2i-1} \sin(ix) + \sum_{i=1}^{k_2} q_{2i} \cos(ix) + \\ + \sum_{i=k_1+1}^{m} b_{2(i-k_1)-1} \sin(ix) + \sum_{i=k_2+1}^{m} b_{2(i-k_2)} \cos(ix),\end{aligned} \tag{3}$$

где $q = (q_0, q_1, \ldots, q_{2k_1-1}, q_2, \ldots, q_{2k_2})^T$, $q_i = \tilde{q}_i - \overline{q}_i$ и $\overline{b} = (b_1, b_3, \ldots, b_{2(m-k_1)-1}, b_2, b_4, \ldots, b_{2(m-k_2)})^T$ определяет вектор "дополнительных" параметров модели (2). В этих обозначениях мы можем переписать Т-критерий следующим образом:

$$T(\xi, \overline{b}) = \min_q \int_{\mathcal{X}} \overline{\eta}(x,q,\overline{b})^2 \xi(dx), \ \mathcal{X} = [0, 2\pi],$$

$$\xi^* = \arg\max_{\xi} T(\xi, \overline{b})$$

Как было упомянуто во введении, построение Т-оптимальных планов в явном виде очень сложная задача. Ее сложность зависит, в частности, от размерности вектора $\overline{b}$. В следующем разделе мы детально исследуем эту задачу для m=2.

Т-оптимальные планы в явном виде. Случай m=2.

В этом разделе мы рассмотрим задачу построения Т-оптимального плана для $m = 2$. Мы рассмотрим два случая:

$$k_1 = 1,\ k_2 = 0, \tag{4}$$

$$k_1 = 0,\ k_2 = 1. \tag{5}$$

Случай $k_1 = k_2 = 1$ был рассмотрен в работе [8].

Если $m = 2$ и $k_1 = 1, k_2 = 0$ функция $\overline{\eta}$ in (3) имеет вид:

$$\overline{\eta}(x, q, \overline{b}) = q_0 + q_1 \sin(x) + \cos(x) + b_1 \sin(2x) + b_2 \cos(2x). \tag{6}$$

Число точек оптимального плана равно 2 или 3 и зависит от того какой области принадлежит точка (b_1, b_2). Следующая теорема определяет Т-оптимальный план в явном виде.

Теорема 1 *Рассмотрим функцию $\overline{\eta}(x, q, \overline{b})$ (6). Пусть $b_2^*(b_1) : [0, \infty) \to [0, \infty)$ такая функция, что для любой (b_1, b_2) выполняются следующие условия:*

$$\#supp(\xi^*) = \begin{cases} 2, & |b_2| \le b_2^*(|b_1|), \\ 3, & |b_2| > b_2^*(|b_1|), \end{cases} \tag{7}$$

где $\#supp(\xi^*)$ число точек носителя Т-оптимального плана ξ^* для $\overline{\eta}(x, q, \overline{b})$. Тогда, если $-b_2^*(b_1) < b_2 \le b_2^*(b_1)$ план

$$\xi^* = \begin{pmatrix} x^* & \pi - x^* \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix},\ x^* = \arcsin\left(\frac{-1 + \sqrt{32b_1^2 + 1}}{8b_1}\right),\ b_1 \in [0, \infty)$$

является Т-оптимальным для $\overline{\eta}(x, q, \overline{b})$.

Теорема 1 следует из теоремы эквивалентности для Т-оптимальных планов (см, напр., [8]). Доказательство проводится путем построения экстремальной функции плана с помощью пакета Maple.

Пример 1 *Предположим, что $m = 2$, $b_1 = 1/2$, $b_2 = 1/4$ и k_1=1, k_2=0, тогда из Теоремы 1 следует, что план*

$$\xi^* = \begin{pmatrix} 0.5236 & 2.618 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

является Т-оптимальным для разности (6). Поведение экстремальной функции ψ^* этого плана отображено на рисунке 1.

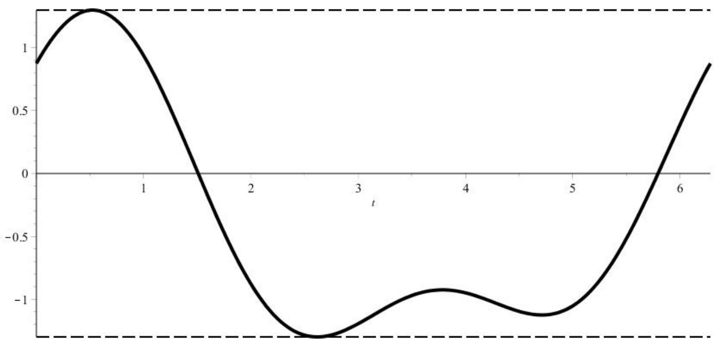

Рис. 1: *Поведение экстремальной функции ψ^* T-оптимального плана для модели (6) и случая $m = 2$, $k_1 = 1$, $k_2 = 0$ ($b_1 = 1/2$, $b_2 = 1/4$).*

Теорема 2 *Пусть $b_1 \in [0, \infty]$. Функция $b_2^*(b_1)$ определенная в предыдущей теореме может быть представлена в явном виде:*

$$b_2^*(b_1) = \frac{2b_1(-2b_1\cos(2t) + \sin(t))}{\cos(t)\sqrt{32b_1^2+1} - 4b_1\sin(2t) - \cos(t)},\ t = \arctan(z_0),$$

где

$$z_0 = \frac{64b_1^3\sqrt{z_1+z_2}}{z_3\left(\sqrt{(32b_1^2+1)^3} + 96b_1^2 + 3\sqrt{32b_1^2+1} + 4\right)},$$

$$z_1 = 8192b_1^6 + 12288b_1^4 + 576b_1^2,$$

$$z_2 = (96b_1^2 - 3)\sqrt{(32b_1^2+1)^3} + (576b_1^2 + 3)\sqrt{32b_1^2+1},$$

$$z_3 = \sqrt{16b_1^2 + \sqrt{32b_1^2+1} - 1}\left(-8b_1^2 + \sqrt{32b_1^2+1} - 1\right).$$

Утверждение теоремы может быть проверено прямыми вычислениями.

Следующие результаты являются прямыми следствиями Теоремы 1 и свойств тригонометрических функций.

Следствие 1 *Для $m = 2$, $k_1 = 1$, $k_2 = 0$ и $-b_2^*(b_1) < b_2 \le b_2^*(b_1)$ план*

$$\xi^* = \begin{pmatrix} \pi + x_1^* & 2\pi - x_1^* \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix},\ x_1^* = \arcsin\left(\frac{-1+\sqrt{32b_1^2+1}}{8|b_1|}\right),\ b_1 \in (-\infty, 0]$$

является T-оптимальным для функции $\overline{\eta}(x, q, \overline{b})$ (3).

Следствие 2 *Предположим, что* $m = 2$, $k_1 = 0$, $k_2 = 1$ *и* $b_1 \in (-\infty, \infty)$. *Тогда*

если

- $0 \le b_2 \le b_2^*(b_1)$ *план*

$$\xi_1^* = \begin{pmatrix} \pi/2 - x_1^* & 3\pi/2 + x_1^* \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \; x_1^* = \arcsin\left(\frac{-1+\sqrt{32b_1^2+1}}{8|b_1|}\right)$$

является T-оптимальным для функции $\overline{\eta}(x, q, \overline{b})$ *(3);*

если

- $-b_2^*(b_1) \le b_2 \le 0$ *план*

$$\xi_2^* = \begin{pmatrix} \pi/2 + x_1^* & 3\pi/2 - x_1^* \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \; x_1^* = \arcsin\left(\frac{-1+\sqrt{32b_1^2+1}}{8|b_1|}\right)$$

является T-оптимальным для функции $\overline{\eta}(x, q, \overline{b})$ *(3).*

Заключение

Для случая $m = 2$ Теорема 1 и Следствия 1, 2 дают аналитическое решение задачи построения 2-х точечного T-оптимального плана. Отметим, что 3-х точечные оптимальные планы также могут быть найдены в явном виде, но аналитические выражение получаются слишком громоздкими и мы не приводим их здесь. Для некоторых частных случаев $k_1 = 1,\ k_2 = 0,\ b_1 = 0,\ b_2 \neq 0$ and $k_1 = 0,\ k_2 = 1,\ b_1 = 0,\ b_2 \neq 0$ оптимальные планы найдены в явном виде в работе [8].

Литература

[1] Круг, Г. К. (1966). *Планирование эксприментов.* М.: Наука.

[2] Федоров, В. В. (1971). *Теория оптимального эксперимента.* М.: Наука.

[3] Под редакцией Ермакова, М. С. (1983). *Математическая теория планирования эксперимента.* М.: Наука.

[4] Atkinson, A. C. (2010). The non-uniqueness of some designs for discriminating between two polynomial models in one variablel. *MODA 9, Advances in Model-Oriented Design and Analysis*, pages 9–16.

[5] Atkinson, A. C. and Fedorov, V. V. (1975a). The designs of experiments for discriminating between two rival models. *Biometrika*, 62:57–70.

[6] Atkinson, A. C. and Fedorov, V. V. (1975b). Optimal design: Experiments for discriminating between several models. *Biometrika*, 62:289–303.

[7] Dette, H., Melas, V. B., and Shpilev, P. (2012). T-optimal designs for discrimination between two polynomial models. *Annals of Statistics*, 40(1):188–205.

[8] Dette, H., Melas, V. B. and Shpilev, P. (2015). T-optimal discriminating designs for fourier regression models. *Available at http://arxiv.org/pdf/1512.07441.pdf*, pages 1–17,

[9] Dette, H. and Titoff, S. (2009). Optimal discrimination designs. *Annals of Statistics*, 37(4):2056–2082.

[10] Hill, W. J. Hunter, W. G. and Wichern, W. D. (1968). A joint design criterion for the dual problem of model discrimination and parameter estimation. *Technometrics*, 10:145–160.

[11] Hunter, W. G. and Reiner, A. M. (1965). Designs for discriminating between two rival models. *Technometrics*, 7(3):307–323.

[12] Stigler, S. (1971). Optimal experimental design for polynomial regression. *Journal of the American Statistical Association*, 66:311–318.

[13] Tommasi, C. and López-Fidalgo, J. (2010). Bayesian optimum designs for discriminating between models with any distribution. *Computational Statistics & Data Analysis*, 54(1):143–150.

[14] Ucinski, D. and Bogacka, B. (2005). T-optimum designs for discrimination between two multiresponse dynamic models. *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 67:3–18.

[15] Wiens, D. P. (2009). Robust discrimination designs, with Matlab code. *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 71:805–829.

[16] Wiens, D. P. (2010). Robustness of design for the testing of lack of fit and for estimation in binary response models. *Computational Statistics and Data Analysis*, 54:3371–3378.